



УНИВЕРЗИТЕТ У НИШУ
ПРИРОДНО-МАТЕМАТИЧКИ ФАКУЛТЕТ
ДЕПАРТМАН ЗА ФИЗИКУ



Данило Делибашић

**ЈЕДНОСТРУКИ ЕЛЕКТРОНСКИ
ЗАХВАТ У СУДАРИМА БРЗИХ
ПРОЈЕКТИЛА СА ВОДОНИКУ И
ХЕЛИЈУМУ СЛИЧНИМ МЕТАМА**

ДОКТОРСКА ДИСЕРТАЦИЈА

Ниш, 2021.



UNIVERSITY OF NIŠ
FACULTY OF SCIENCES AND MATHEMATICS
DEPARTMENT OF PHYSICS



Danilo Delibašić

**SINGLE-ELECTRON CAPTURE IN
COLLISIONS OF FAST PROJECTILES
WITH HYDROGEN- AND HELIUM-LIKE
TARGETS**

DOCTORAL DISSERTATION

Niš, 2021.

Подаци о докторској дисертацији

Ментор:	др Ненад Милојевић, ванредни професор, Природно-математички факултет, Универзитет у Нишу
Наслов:	Једноструки електронски захват у сударима брзих пројектила са водонику и хелијуму сличним метама
Резиме:	<p>Електронски захват је процес који из више разлога привлачи велико интересовање истраживача, почев од чисто теоријског аспекта атомске физике, па до практичне примене у интердисциплинарним областима, као што су фузиона истраживања и медицинска физика. У овој дисертацији, једноструки електронски захват у сударима брзих пројектила са водонику и хелијуму сличним метама се проучава у оквиру гранично коректног метода са континуумским интермедијарним стањима (BCIS), како у његовој трочестичној (BCIS-3B), тако и у његовој четворочестичној (BCIS-4B) формулацији. У оквиру дисертације ова два метода развијена су за једноструки електронски захват из основног стања мете у произвољно стање пројектила. Општи компјутерски програми написани су за израчунавање тоталних ефикасних пресека за произвољне парове пројектила и мета, као и за израчунавање диференцијалних ефикасних пресека у појединим случајевима. Велики број парова пројектил-мета је изучаван, а добијени теоријски резултати су представљени графички. За готово све разматране процесе постоје доступни експериментални подаци за поређење са теоријским резултатима. Слагање између новодобијених теоријских резултата и мерења је, зависно од конкретног процеса, добро до готово перфектно.</p>
Научна област:	Физика / Теоријска физика
Научна дисциплина:	Атомска физика
Кључне речи:	Квантна теорија расејања, јон-атомски судари, електронски захват
УДК:	539.1:546.11:539.128.55(043.3)
CERIF класификација:	P230 Атомска и молекуларна физика
Тип лиценце Креативне заједнице:	CC BY-NC-SA

Data on Doctoral Dissertation

Doctoral Supervisor:	Dr. Nenad Milojević, Associate Professor, Faculty of Sciences and Mathematics, University of Niš
Title:	Single-electron capture in collisions of fast projectiles with hydrogen- and helium-like targets
Abstract:	Electron capture is a process which garners scientific interest for a number of reasons, ranging from a purely fundamental atomic physics standpoint to more practically oriented interdisciplinary applications, such as in fusion energy research and medical physics. In the present work, single-electron capture by fast projectiles from hydrogen- and helium-like targets is studied by means of the boundary-corrected continuum intermediate states method (BCIS), both in its three-body (BCIS-3B) and four-body (BCIS-4B) formulation. In this thesis, these two methods are developed for single-electron capture from the ground state of the target into arbitrary states of the projectile. General programs are constructed for the calculation of total cross sections for arbitrary projectile-target pairs, as well as differential cross sections for certain special cases. A large number of projectile-target pairs are explored, with the obtained theoretical results being graphically represented. For almost all the considered processes, experimental data points are available for comparison. The agreement between the newly obtained theoretical results and the measurements ranges from good to nearly perfect.
Scientific Field:	Physics / Theoretical Physics
Scientific Discipline:	Atomic physics
Key Words:	Quantum scattering theory, ion-atom collisions, electron capture
UDC:	539.1:546.11:539.128.55(043.3)
CERIF Classification:	P230 Atomic and molecular physics
Creative Commons License Type:	CC BY-NC-SA



**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:	Данило Делибашић
Ментор, МН:	Ненад Милојевић
Наслов рада, НР:	ЈЕДНОСТРУКИ ЕЛЕКТРОНСКИ ЗАХВАТ У СУДАРИМА БРЗИХ ПРОЈЕКТИЛА СА ВОДОНИКУ И ХЕЛИЈУМУ СЛИЧНИМ МЕТАМА
Језик публикације, ЈП:	српски
Језик извода, ЈИ:	енглески
Земља публикавања, ЗП:	Србија
Уже географско подручје, УГП:	Србија
Година, ГО:	2021.
Издавач, ИЗ:	ауторски репринт
Место и адреса, МА:	Ниш, Вишеградска 33.
Физички опис рада, ФО: (поглавља/страна/ цитата/табела/слика/графика/прилога)	5 поглавља, 262 стране, 261 цитат, 4 табеле, 60 слика, 4 прилога
Научна област, НО:	Физика / Теоријска физика
Научна дисциплина, НД:	Атомска физика
Предметна одредница/Кључне речи, ПО:	Квантна теорија расејања, јон-атомски судари, електронски захват
УДК	539.1:546.11:539.128.55(043.3)
Чува се, ЧУ:	библиотека
Важна напомена, ВН:	/

Извод, ИЗ:	<p>Електронски захват је процес који из више разлога привлачи велико интересовање истраживача, почев од чисто теоријског аспекта атомске физике, па до практичне примене у интердисциплинарним областима, као што су фузиона истраживања и медицинска физика. У овој дисертацији, једноструки електронски захват у сударима брзих пројектила са водонику и хелијуму сличним метама се проучава у оквиру гранично коректног метода са континуумским интермедијарним стањима (BCIS), како у његовој трочестичној (BCIS-3B), тако и у његовој четворочестичној (BCIS-4B) формулацији. У оквиру дисертације ова два метода развијена су за једноструки електронски захват из основног стања мете у произвољно стање пројектила. Општи компјутерски програми написани су за израчунавање тоталних ефикасних пресека за произвољне парове пројектила и мета, као и за израчунавање диференцијалних ефикасних пресека у појединим случајевима. Велики број парова пројектил-мета је изучаван, а добијени теоријски резултати су представљени графички. За готово све разматране процесе постоје доступни експериментални подаци за поређење са теоријским резултатима. Слагање између новодобијених теоријских резултата и мерења је, зависно од конкретног процеса, добро до готово перфектно.</p>
Датум прихватања теме, ДП:	18. јануар 2021.
Датум одбране, ДО:	
Чланови комисије, КО: Председник:	
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 :	Danilo Delibašić
Mentor, MN :	Nenad Milojević
Title, TI :	SINGLE-ELECTRON CAPTURE IN COLLISIONS OF FAST PROJECTILES WITH HYDROGEN- AND HELIUM-LIKE TARGETS
Language of text, LT :	Serbian
Language of abstract, LA :	English
Country of publication, CP :	Serbia
Locality of publication, LP :	Serbia
Publication year, PY :	2021
Publisher, PB :	author's reprint
Publication place, PP :	Niš, Višegradska 33.
Physical description, PD : (chapters/pages/ref./tables/pictures/graphs/appendixes)	5 chapters, 262 pages, 261 references, 4 tables, 60 pictures, 4 appendixes
Scientific field, SF :	Physics / Theoretical physics
Scientific discipline, SD :	Atomic physics
Subject/Key words, S/KW :	Quantum scattering theory, ion-atom collisions, electron capture
UC	539.1:546.11:539.128.55(043.3)
Holding data, HD :	library
Note, N :	/

Abstract, AB :	<p>Electron capture is a process which garners scientific interest for a number of reasons, ranging from a purely fundamental atomic physics standpoint to more practically oriented interdisciplinary applications, such as in fusion energy research and medical physics. In the present work, single-electron capture by fast projectiles from hydrogen- and helium-like targets is studied by means of the boundary-corrected continuum intermediate states method (BCIS), both in its three-body (BCIS-3B) and four-body (BCIS-4B) formulation. In this thesis, these two methods are developed for single-electron capture from the ground state of the target into arbitrary states of the projectile. General programs are constructed for the calculation of total cross sections for arbitrary projectile-target pairs, as well as differential cross sections for certain special cases. A large number of projectile-target pairs are explored, with the obtained theoretical results being graphically represented. For almost all the considered processes, experimental data points are available for comparison. The agreement between the newly obtained theoretical results and the measurements ranges from good to nearly perfect.</p>
Accepted by the Scientific Board on, ASB :	January 18, 2021.
Defended on, DE :	
Defended Board, DB : President:	
Member:	
Member, Mentor:	

ЗАХВАЛНИЦА

Тему за ову докторску дисертацију предложио је и њеном израдом непосредно руководио др Ненад Милојевић, ванредни професор на Природно-математичком факултету Универзитета у Нишу. Најискреније се захваљујем ментору на усмеравању у истраживачком раду, пренесеном знању и свесрдној помоћи у изради ове докторске дисертације.

Др Ивану Манчеву, редовном професору Природно-математичког факултета Универзитета у Нишу, захваљујем се на бројним корисним саветима током научног рада и докторских студија, као и на пажљивом читању и сугестијама везаним за финалну форму дисертације.

Др Цеваду Белкићу, редовном професору на Каролинска институту у Стокхолму, Шведска, захваљујем се на прилици за сарадњу у истраживачком раду, као и веома корисним смерницама у изради научних радова који су постали део ове докторске дисертације.

Нарочиту и највећу захвалност дугујем својој породици, на неизмерној подршци, стрпљењу и разумевању током свих ових година.

Садржај

1	Увод	1
2	Теоријске основе брзих јон-атомских судара	9
2.1	Основни појмови и концепти у теорији судара	9
2.1.1	Трочестични проблеми	11
	Улазни канал	13
	Излазни канал	17
2.1.2	Четворочестични проблеми	22
	Улазни канал	23
	Излазни канал	27
2.2	Борнов пертурбациони развој	32
2.2.1	Липман-Швингерове једначине	33
2.2.2	Борнов развој са коректним граничним условима	35
2.3	Основе теорије изобличених таласа	37
2.3.1	Трочестични проблеми	42
	Улазни канал	42
	Излазни канал	44
2.3.2	Четворочестични проблеми	47
	Улазни канал	47
	Излазни канал	50
2.4	Гранично коректан метод са континуумским интермедијарним стањима	53
2.4.1	Трочестични проблеми	55
2.4.2	Четворочестични проблеми	56
3	Аналитичко израчунавање амплитуде прелаза	59
3.1	Трочестична формулација	59
3.1.1	Аналитичко израчунавање	61
3.1.2	Скалирање и припрема за нумеричку интеграцију	68
3.2	Трочестична формулација са Рутан-Хартри-Фоковим моделом	73

3.2.1	Аналитичко израчунавање	75
3.2.2	Скалирање и припрема за нумеричку интеграцију	81
3.3	Четворочестична формулација	84
3.3.1	Аналитичко израчунавање	86
3.3.2	Скалирање и припрема за нумеричку интеграцију	92
4	Резултати и дискусија	96
4.1	Конвергенција ефикасних пресека	99
4.2	Водонику сличне мете	102
4.2.1	Водонична мета	102
	Захват електрона у судару H^+ са $H(1s)$	105
	Захват електрона у судару He^{2+} са $H(1s)$	118
	Захват електрона у судару Li^{3+} са $H(1s)$	121
	Захват електрона у судару Be^{4+} са $H(1s)$	125
	Захват електрона у судару B^{5+} са $H(1s)$	126
	Захват електрона у судару C^{6+} са $H(1s)$	127
	Захват електрона у судару N^{7+} са $H(1s)$	130
	Захват електрона у судару O^{8+} са $H(1s)$	132
	Захват електрона у судару F^{9+} са $H(1s)$	133
4.2.2	Јонске мете	135
	Захват електрона у судару H^+ са $He^+(1s)$	135
	Захват електрона у судару He^{2+} са $He^+(1s)$	136
	Захват електрона у судару He^{2+} са $Li^{2+}(1s)$	138
	Захват електрона у судару Li^{3+} са $Li^{2+}(1s)$	139
4.3	Хелијуму сличне мете	139
4.3.1	Хелијумска мета	140
	Захват електрона у судару H^+ са $He(1s^2)$	141
	Захват електрона у судару He^{2+} са $He(1s^2)$	155
	Захват електрона у судару Li^{3+} са $He(1s^2)$	156
	Захват електрона у судару Be^{4+} са $He(1s^2)$	157
	Захват електрона у судару B^{5+} са $He(1s^2)$	158
	Захват електрона у судару C^{6+} са $He(1s^2)$	159
	Захват електрона у судару N^{7+} са $He(1s^2)$	161
	Захват електрона у судару O^{8+} са $He(1s^2)$	162
	Захват електрона у судару F^{9+} са $He(1s^2)$	163
4.3.2	Јонске мете	166
	Захват електрона у судару H^+ са $Li^+(1s^2)$	166

4.4	Вишеелектронске мете	167
	Захват електрона у судару H^+ са $Li(1s^2 2s^1)$	168
	Захват електрона у судару He^{2+} са $Li(1s^2 2s^1)$	169
	Захват електрона у судару H^+ са $C(1s^2 2s^2 2p^2)$	170
	Захват електрона у судару H^+ са $N(1s^2 2s^2 2p^3)$	172
	Захват електрона у судару H^+ са $O(1s^2 2s^2 2p^4)$	174
	Захват електрона у судару H^+ са $Ne(1s^2 2s^2 2p^6)$	175
	Захват електрона у судару He^{2+} са $C(1s^2 2s^2 2p^2)$	176
	Захват електрона у судару He^{2+} са $Ne(1s^2 2s^2 2p^6)$	177
5	Закључак	183
Прилози		
A	Оператор кинетичке енергије у релативним координатама	189
A.1	Трочестични проблеми	189
	A.1.1 Улазни канал	189
	A.1.2 Излазни канал	192
A.2	Четворочестични проблеми	193
	A.2.1 Улазни канал	193
	A.2.2 Излазни канал	195
B	Таласне функције у Кулоновом потенцијалу	197
B	Решавање диференцијалних једначина за изобличене таласе	199
B.1	Трочестични проблеми	199
	B.1.1 Улазни канал	199
	B.1.2 Излазни канал	202
B.2	Четворочестични проблеми	203
	B.2.1 Улазни канал	203
	B.2.2 Излазни канал	206
Г	Ефикасни пресеци за једноструки електронски захват	209
G.1	Ефикасни пресеци за једноструки електронски захват из атома $H(1s)$ од стране огољених јона	210
G.2	Ефикасни пресеци за једноструки електронски захват из атома $He(1s^2)$ од стране огољених јона	243
	Литература	247

Биографија	259
Библиографија	261
Изјаве аутора	263

Глава 1

Увод

Судар, синониман са расејањем, представља један од најмоћнијих метода истраживања структуре материје [1]. Стога, није изненађујуће што је већина најважнијих открића у физици начињена управо разматрањем судара. Када се довољно загребе испод површине, увиђа се да у већини области физике судари одређених типова честица играју круцијалну улогу у диктирању динамике физичких система, почев од најфундаменталнијих нивоа, па до примена у другим научним областима. Набројаћемо неколико најилустративнијих примера у којима је проучавање судара било повезано са важним открићима у досадашњем развоју физике, као и науке уопште, од којих су многа завредила и доделу Нобелове награде.

Пре свега, бројни феномени у микросвету су директна последица сударних процеса масивних и/или безмасених (у мировању) честица датог физичког система. На пример, енглески ботаничар Роберт Браун је још 1827. године запазио следећи феномен: када се честице полена унесу у воду и посматрају под микроскопом, уочава се да се оне крећу наизглед насумично - са честим изненадним флуктуацијама правца, смера и брзине кретања. Брауново кретање, како је овај феномен насловљен, је чекало готово 80 година на објашњење, које је Алберт Ајнштајн изложио у свом раду [2] из 1905. године. Наиме, у једном од својих првих значајних доприноса, Ајнштајн је кретање честица полена моделовао као узроковано сударима са индивидуалним молекулима воде. Успех Ајнштајновог објашњења је представљао убедљив аргумент у прилог хипотезе о дискретној структури материје. Даља експериментална потврда Ајнштајновог објашњења, а самим тим и тезе да се материја састоји од дискретних атома (молекула) је Жану Перину, француском физичару, донела Нобелову награду за физику 1926. године.

Друга група примера, која додатно илуструје значај проучавања сударних

процеса, подразумева њихову примену у изучавању непознате структуре одређених објеката. Наиме, у ситуацијама у којима је позната динамика расејања основних конституената неке материје, били они честичне или таласне природе, постоји потенцијал за њено искоришћавање у проучавању комплекснијих система, које је најчешће неизводљиво директно посматрати. Један од најсветлијих примера, који истовремено представља и једно од најзначајнијих научних открића уопште, је анализа дифракције X-зрака на молекулу ДНК. Ова анализа је довела до утврђивања до тада непознате структуре молекула ДНК. Ток утврђивања структуре овог молекула, једног од биолошки најзначајнијих, је био дуг, укључивао је бројна открића и научнике који су радили на овој проблематици. Коначан искорак је, међутим, био дифрактограм „Фотографија 51“, коју је начинио Рејмонд Гослинг, британски физичар, под супервизијом Розалинд Френклин, енглеске хемичарке. Наведено откриће су Френсис Крик, Џејмс Вотсон и Маурис Вилкинс искористили за коначно и потпуно одређивање структуре молекула ДНК, открића за које им је додељена Нобелова награда за физиологију или медицину 1962. године. Без превише залажења у ову проблематику, која очигледно није тема ове дисертације, напоменимо само да и дан данас постоји спорење око тога ко је тачно од наведених научника највише заслужан за ово откриће, као и саме Нобелове награде. Пре него што пређемо на наредну, истакнимо још један пример из ове групе примене сударних процеса, а то је употреба ултразвука ради утврђивања положаја, облика и димензија одређених (директним методима) недоступних објеката (ехо кардиограм у медицини, проучавање подводних објеката, итд).

Коначно, сударни процеси представљају кључни метод истраживања закона физике на најбазичнијем нивоу - фундаменталних/елементарних честица. Наиме, закони интеракције у физици елементарних честица су најчешће непознати, те се најпре постулирају, а затим се валидност постулираних интеракција проверава поређењем предвиђања теорије са резултатима колизионих експеримената. Ови експерименти се спроводе у великим сударачима честица, попут оних у лабораторији CERN у Швајцарској, затим DESY у Немачкој, Fermilab у Сједињеним Америчким државама, као и другим. Ови експерименти испитују саме границе сазнања на најосновнијим нивоима структуре материје, а судари су у самој сржи ових истраживања. Резултати истраживања овог типа су, природно, такође завредили бројне Нобелове награде, од којих је најскорија додељена 2012. године Франсоа Енглерту и Питеру Хигсу. Енглерт и Хигс су Нобелову награду добили за предвиђање постојања Хигсовог бозона, честице која је експериментално детектована у LHC сударачу у CERN-у.

На основу свега до сад изложеног, читалац се вероватно уверио у важност сударних процеса, као и потребе за њиховим истраживањем, у циљу бољег разумевања света око нас. Сада ћемо се полако ограничити на саму тему која је у фокусу ове дисертације, образложивши најпре важност јон-атомских сударних процеса. Прво значајно откриће у овој области био је експеримент Ернеста Радерфорда, Ханса Гајгера и Ернеста Марсдена из 1909. године, у склопу кога је посматрано расејање алфа честица (језгра хелијума) на танкој златној фолији. Резултати овог експеримента су довели до дефинитивног одбацивања Томсоновог модела атома, тзв. „пудинга са шљивама“, и до Радерфордовог формулисања планетарног модела атома 1911. године. Овим се по први пут у историји завирило у саму структуру атома и стекао увид у то како ови основни конституенти материје заправо изгледају. Ово је био само почетак лавине јако важних открића, настављених Боровим моделом атома са стационарним стањима 1913. године, праћеним потоњим формулисањем и развојем квантне механике, као једном од основних стубова модерне физике.

Упркос томе што су квантномеханички закони који управљају јон-атомским сударима данас готово у потпуности познати, интерес за проучавање ових процеса није ни мало умањен. Иако је прошло готово стотину година од формулисања квантне механике, треба имати у виду да су бројна важна открића везана за саме јон-атомске сударе дошла знатно касније. Један од фундаменталних проблема у овој области, проблем асимптотске конвергенције таласних функција [3–5], нашао је задовољавајуће решење тек на самом крају седамдесетих година прошлог века [5]. Проучавање јон-атомских судара и даље доноси фундаменталне увиде у динамику ових процеса, као и велики практични значај. Коначни резултат ових истраживања је израчунавање ефикасних пресека за одређене процесе до којих долази у сударима, као што су једноелектронски процеси (једнострука јонизација, једнострука експитација и једноструки електронски захват), као и вишеелектронски процеси, који представљају разне комбинације претходно наведених. С обзиром на то да је ове ефикасне пресеке немогуће егзактно израчунати, развијени су бројни апроксимативни методи, који дају мање или више добро слагање са експерименталним резултатима. Циљ теоријског аспекта изучавања јон-атомских сударних процеса је развијање што моћнијих и комплетнијих метода за израчунавање ефикасних пресека, који дају што боље слагање са експерименталним резултатима. Поређењем добијених теоријских резултата са мерењима могуће је извршити критичку евалуацију развијених метода, као и стећи бољи квалитативни увид у саме процесе до којих долази у јон-атомским сударима. Развијени теоријски методи омогућују

формирање база података ефикасних пресека за једноелектронске и вишеелектронске процесе, које су веома значајне како у разним областима физике, тако и у многим интердисциплинарним областима. На пример, поменуте базе података су неопходне у физици елементарних честица при планирању експеримента [1], где је нужно знати вероватноће за формирање одређених везаних атомских система (што дају управо базе података ефикасних пресека, и то за захват честица). Затим, у истраживањима у области нових извора енергије, конкретно контролисане термонуклеарне фузије, област јон-атомских сударних процеса је круцијална [6–9]. Својства и понашање магнетно конфиниране, високотемпературне плазме ниске густине су одређени управо сударима честица плазме. На стабилност, која представља једну од есенцијалних карактеристика фузионе плазме у токамацима, значајно утичу процеси неутрализације, тј. измене наелектрисања (електронског захвата), као и судари у којима долази до загревања плазме (на пример, при јонизацији). Од нарочите важности су судари вишеструко наелектрисаних јона са атомима водоника и хелијума. Наведене базе података налазе примене чак и у наизглед врло удаљеној области астрофизике, где су бројне вредности ефикасних пресека важне за изучавање феномена синтезе јона у хладним међузвезданим гасовима, затим радијативне асоцијације [10], која представља процес при коме код супстанце у гасовитом агрегатном стању долази до спајања два мања у један већи молекул (уз емисију фотона), итд. Такође, неки методи оригинално развијени у оквиру атомске физике данас налазе директну примену у астрофизици [11–14]. Коначно, вероватно најплеменитија примена база ефикасних пресека за јон-атомске сударне процесе је у медицинској физици [15–24]. Наиме, ове базе података су неопходне за процену губитака енергије при проласку високоенергијских јона кроз ткива, ради ефикасније радиотерапије пацијената оболелих од тумора.

Као што је већ поменуто у претходном пасусу, у јон-атомским сударима може доћи до бројних једноелектронских (једнострука јонизација, једнострука ексцитација, једноструки електронски захват), двоелектронских (двострука јонизација, двострука ексцитација, двоструки електронски захват, јонизација и ексцитација, јонизација и електронски захват, ексцитација и електронски захват) и вишеелектронских процеса (разне комбинације претходно наведених). Акцент ове дисертације је на једноструком електронском захвату, који спада у нешто ширу класу процеса измене наелектрисања. Феномен електронског захвата, као и измене наелектрисања уопште, у брзим јон-атомским сударним процесима се готово читав век налази у жижи научног интересовања. Први кораци у овим истраживањима су начињени још у пионирским радовима Опенхајмера 1928.

године [25], и Бринкмана и Крамерса 1930. године [26]. Од тада је измена наелектрисања била тема бројних теоријских и експерименталних истраживања [1, 4, 5, 27–69], како за захват из једноелектронских и двоелектронских, тако и за захват из вишелектронских мета. Актуелност ове теме не јењава до данас. Као што смо већ напоменули, немогуће је егзактно израчунати ефикасне пресеке за захват електрона, те се прибегава разним апроксимативним методима. Ови методи могу бити пертурбативни [1, 4, 5, 27, 32, 34, 69–78] и непертурбативни [79–89]. Зависно од уведених апроксимација, дати метод може имати различит успех у описивању процеса електронског захвата за различите вредности инцидентних енергија пројектила. Генерално говорећи, непертурбативни методи дају боље резултате на ниским енергијама, док пертурбативни методи имају више успеха на високим енергијама. У овој дисертацији, од интереса је једноструки електронски захват у брзим јон-атомским сударима, другим речима на високим инцидентним енергијама пројектила. Под високим инцидентним енергијама подразумева се да (релативна) брзина пројектила премашује Борову брзину електрона мете на орбити са које се врши захват. Стога, за граничну енергију у овим процесима често се узима 25 keV/amu , с обзиром на то да енергија од 25 keV одговара брзини електрона у основном стању атома водоника (у атомским јединицама, $v = 1 \text{ a.u.}$). Имајући то у виду, обично се интервал $25 - 400 \text{ keV/amu}$ узима за интервал средњих енергија, а енергије веће од 400 keV/amu сматрају се високим. Иако су методи примењени у овој дисертацији високоенергијски, од интереса ће бити и средње енергије, с обзиром на то да се код пертурбативних метода неретко добија добро слагање са експерименталним резултатима и на средњим вредностима енергије. Дакле, биће разматран једноструки електронски захват на средњим и високим, али нерелативистичким енергијама, тако да ће израчунавања бити вршена у оквиру формализма нерелативистичке квантне механике. Такође, процес електронског захвата ће бити посматран у сударима потпуно огољених пројектила (јона) са водонику и хелијуму сличним метама. Под овим метама подразумевамо једноелектронске и двоелектронске мете, тј. саме атоме водоника и хелијума, као и јоне који садрже само један или два електрона. Уз то, биће анализиран и електронски захват из појединих вишелектронских мета, које ће бити моделоване као једноелектронске, тј. водонику сличне, коришћењем модела независних честица [90, 91], као и апроксимације смрзнутог језгра [68]. Сви сударни процеси ће бити размотрени у оквиру гранично коректног метода са континуумским интермедијарним стањима (на енглеском *boundary-corrected continuum intermediate states method*, скраћено BCIS). Код водонику сличних мета биће примењена њена

трочестична формулација (на енглеском *three-body boundary-corrected continuum intermediate states method*, скраћено BCIS-3B), а код хелијуму сличних мета њена четворочестична формулација (на енглеском *four-body boundary-corrected continuum intermediate states method*, скраћено BCIS-4B).

У наставку ће бити дат кратак преглед садржине сваког од поглавља ове дисертације.

Након већ изложеног уводног дела, у другој глави дисертације ће бити објашњени основни појмови и дата општа разматрања везана за трочестичне (са водонику сличним метама) и четворочестичне (са хелијуму сличним метама) јон-атомске сударне процесе. Биће излистани сви могући једноелектронски процеси у трочестичним сударима, као и сви могући једноелектронски и двоелектронски процеси у четворочестичним сударима. Биће истакнути кључни проблеми квантне теорије расејања, као што су проблем асимптотске конвергенције таласних функција, као и њему спрегнут проблем коректног избора пертурбационих потенцијала. Такође, биће анализирани улазни и излазни канали код једноструког електронског захвата у трочестичним и четворочестичним сударима, уведене кратकोдеметне пертурбације, као и гранично коректне таласне функције у овим каналима. Биће формулисана прва Борнова апроксимација са коректним граничним условима (на енглеском *boundary-corrected first Born approximation*, скраћено CB1), а затим и изложене основе теорије изобличених таласа. У оквиру ње ће бити представљена и једна од најуспешнијих пертурбативних апроксимација, тзв. континуумски метод изобличених таласа (на енглеском *continuum distorted-wave method*, скраћено CDW). Ова разматрања су неопходна да би коначно био формулисан гранично коректан метод са континуумским интермедијарним стањима, како за случај једноструког електронског захвата код трочестичних (BCIS-3B), тако и код четворочестичних (BCIS-4B) сударних процеса. На крају ће бити дати изрази за амплитуду прелаза за једноструки електронски захват из основног стања мете у произвољно стање пројектила. Изрази ће бити дати у облику шестодимензионих (BCIS-3B), односно деветодимензионих (BCIS-4B) интеграла. Њима одговарајући изрази за тоталне ефикасне пресеке ће бити седмодименциони и десетодименциони интегрални, респективно у BCIS-3B и BCIS-4B случају.

У трећем делу дисертације, поменути изрази за тоталне ефикасне пресеке за једноструки електронски захват из основног стања мете у произвољно стање пројектила ће бити аналитички израчунати докле год је то могуће, коришћењем Фуријеове трансформације, Диракове делта функције, као и разних специјалних функција, уз употребу посебних израза који важе за интеграле ових специјалних

функција. И у случају BCIS-3B и у случају BCIS-4B метода, крајњи резултат ће бити тродимензиони интегрални, који се даље аналитички не могу решити (колико је познато). Даље израчунавање ових интеграла врши се нумерички, употребом Гаус-Лежандрових квадратурних формула. За ове потребе су развијени генерални компјутерски програми, који могу израчунати парцијалне тоталне ефикасне пресеке за једноструки електронски захват из основног стања водонику и хелијуму сличне мете у произвољно стање пројектила, употребом BCIS-3B и BCIS-4B метода. Ови генерални програми се, за одређене парове пројектила и мета, могу директно применити на израчунавање парцијалних диференцијалних ефикасних пресека, што је погодност која је искоришћена у овом раду. Напоменимо да је у случају примене BCIS-3B метода за једноструки електронски захват из вишеелектронских мета развијен програм за захват из основног стања мете у основно стање пројектила. У свим наведеним случајевима, при рачунању сумираног ефикасног пресека се допринос од побуђених стања, односно виших побуђених стања, може урачунати применом Опенхајмеровог закона скалирања [25, 92].

Четврто поглавље дисертације биће посвећено приказивању добијених резултата за конкретне процесе једноструког електронског захвата код одабраних парова мета и пројектила, као и поређењу добијених теоријских резултата са доступним експерименталним подацима, уз извлачење одговарајућих закључака. Напомињемо да за готово све процесе разматране у овој дисертацији (укупно 30 парова пројектила и мета) постоје расположиви експериментални подаци, што омогућује темељну критичку евалуацију новоразвијених теоријских метода. Новодобијени резултати ће бити дискутовани и стављени у шири контекст, поређењем са резултатима неких других теоријских приступа. Разматран је једноструки електронски захват у сударима H^+ , He^{2+} , Li^{3+} , Be^{4+} , B^{5+} , C^{6+} , N^{7+} , O^{8+} и F^{9+} јона са атомима водоника $H(1s)$ и хелијума $He(1s^2)$ у основном стању, као и у јон-јонским сударним процесима $H^+ + He^+(1s)$, $He^{2+} + He^+(1s)$, $He^{2+} + Li^{2+}(1s)$, $Li^{3+} + Li^{2+}(1s)$ и $H^+ + Li^+(1s^2)$. Такође, код вишеелектронских мета разматран је једноструки електронски захват из K и L љуске атома литијума при сударима са H^+ и He^{2+} јонима, захват из K љуске у сударима H^+ јона са атомима угљеника, азота, кисеоника и неона, као и захват у сударима He^{2+} јона са атомима угљеника и неона. За све набројане сударе приказани су резултати за сумиране тоталне ефикасне пресеке, док су за сударе $H^+ + H(1s)$, $He^{2+} + H(1s)$ и $H^+ + He(1s^2)$ дати и резултати за парцијалне тоталне ефикасне пресеке за поједина финална стања пројектила. Такође, за процесе $H^+ + H(1s)$ и $H^+ + He(1s^2)$ приказани су и резултати за сумиране диференцијалне ефикасне пресеке.

Коначно, у последњој глави дисертације биће сажето сумирани главни резултати ових истраживања, уз истицање кључних закључака. На крају, биће размотрени неки отворени проблеми у области јон-атомских сударних процеса, као и наведено неколико могућих праваца за даљи наставак истраживања.

Напоменимо још да се у оквиру дисертације могу наћи и четири прилога. Први од њих везан је за изражавање оператора кинетичке енергије у релативним координатама, понаособ за трочестични и четворочестични случај. У другом су дати изрази за таласне функције честица (које нису у везаном стању) у Кулоновом потенцијалу. У трећем је приказано решавање диференцијалних једначина за изобличене таласе у трочестичном и четворочестичном случају. У четвртном додатку су табеларно приказани резултати за тоталне ефикасне пресеке за једноструки електронски захват на различитим инцидентним енергијама, за велики број парова мета и пројектила.

Глава 2

Теоријске основе брзих јон-атомских судара

У овој глави ће бити изложени основни појмови и теоријска разматрања у квантној теорији расејања, са циљем да се у коначном формулише гранично коректан метод са континуумским интермедијарним стањима, како у трочестичном, тако и у четворочестичном случају. Излагања из ове главе су у великој мери преузета из или базирана на референцама [27, 93, 94].

2.1 Основни појмови и концепти у теорији судара

Појам судара подразумева интеракцију између (најмање) два подсистема (елементарних честица, атома/јона, молекула, итд), који нису у међусобно везаном стању (али су саставни делови укупног система). Од ова два подсистема један представља пројектил, а други мету. Једни од основних појмова у теорији судара су и *улазни* и *излазни канал*, који се односе на стање система пре и после судара, респективно. На пример, један могући улазни канал би представљао судар потпуно огољеног јона (пројектила) са једноелектронским атомом (метом). Овакав тип судара може имати више излазних канала. На пример, један излазни канал би био јонизација мете, други излазни канал би био ексцитација мете, а трећи би био електронски захват. Зависно од тога да ли постоји један могући излазни канал (нпр. у случају судара две честице без унутрашње структуре) или више (нпр. судар два атома), разликујемо *једноканалне* и *вишеканалне* проблеме, респективно. Напоменимо да се, на основу ове поделе, некада правила термилошка разлика између појма расејања и појма судара. Под расејањем су се некада подразумевали искључиво једноканални проблеми, док је термин судар био резервисан за вишеканалне проблеме. Данас се искључиво формална

разлика између расејања и судара потпуно изгубила, тако да се ова два појма сматрају синонимима.

У оквиру пертурбативних приступа, постоји веома богата литература у којој су изложене како основе брзих јон-атомских судара, тако и напреднија разматрања [1, 27, 93, 94]. Овдашње излагање репродукује управо разматрања из референце [94] и допуњује их аналогном дискусијом везаном за трочестичне проблеме.

С обзиром на то да су нам предмет интереса *нерелативистички* јон-атомски судари, ови процеси су описани нерелативистичком Шредингеровом једначином, као основном једначином нерелативистичке квантне механике:

$$i \frac{\partial \Psi_{i,f}^{\pm}(t)}{\partial t} = H \Psi_{i,f}^{\pm}(t), \quad (2.1)$$

где је H хамилтонијан система, док $\Psi_i^+(t)$ и $\Psi_f^-(t)$ представљају укупне таласне функције система у улазном (пре судара) и излазном (после судара) каналу, респективно. Пре него што наставимо са даљим разматрањем, напоменимо да је у теорији судара природно користити тзв. атомски систем јединица, у којем је $m_e = e = \hbar = 4\pi\epsilon_0 = 1$. Сем уколико није другачије наглашено, ову конвенцију ћемо усвојити и у овој дисертацији.

Један од круцијалних проблема у квантној теорији расејања представља проблем *асимптотске конвергенције*. Таласне функције у улазном и излазном каналу морају да задовољавају *коректне граничне услове* (тј. да имају коректна асимптотска понашања), који се састоје у следећим захтевима:

$$\lim_{t \rightarrow -\infty} \Psi_i^+(t) = \Phi_i^+(t), \quad (2.2)$$

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} \Psi_f^-(t) = \Phi_f^-(t). \quad (2.3)$$

Смисао ових захтева се огледа у следећем: укупна таласна функција читавог система пре судара $\Psi_i^+(t)$ у „давној прошлости“ ($t \rightarrow -\infty$) мора тежити стању у коме пројектил и мета не интерагују $\Phi_i^+(t)$. Аналогно, укупна таласна функција читавог система после судара за конкретан разматрани процес (излазни канал) $\Psi_f^-(t)$ у „далекој будућности“ ($t \rightarrow +\infty$) мора тежити стању у коме пројектил и мета не интерагују $\Phi_f^-(t)$, а које такође одговара конкретном процесу (излазном каналу) који разматрамо (нпр. једноструки електронски захват, јонизација, итд). Не треба губити из вида да, уколико током судара долази до прерасподелних процеса, пројектил и мета након судара више нису исти по својој структури. Временски гранични услови $t \rightarrow \pm\infty$ повлаче и просторну импликацију

$r \rightarrow \infty$, где r треба схватити као растојање између (центара маса) пројектила и мете. Ови захтеви су, строго математички гледано, неопходни да би се могло тврдити да су се таласне функције које описују стање система заиста свеле на своје асимптотске форме. Са практичног становишта, наравно, они не морају бити строго испуњени, већ само приближно. Атомски судари се одвијају изузетно брзо, при чему је време трајања судара реда величине не већег од $T_0 = 10^{-10}$ s (ово време одговара судару јако спорих, термалних неутрона са великим молекулима [1]). Такође, атомски судари се одвијају у врло малим областима, реда величине првог Боровог радијуса $a_0 = 0.529 \cdot 10^{-10}$ m. На основу свега изложеног, јасно је да услове $t \rightarrow \pm\infty$ и $r \rightarrow \infty$ у практичном смислу не треба схватати превише строго. У свим реализацијама, експеримент у коме је растојање између мете и детектора реда величине 10 cm је сасвим довољан да услови $t \rightarrow \pm\infty$ и $r \rightarrow \infty$ ефективно буду испуњени, тако да је конвергенција таласних функција система ка својим асимптотским стањима заиста и обезбеђена. Поменимо још само да је у Радерфордовом експерименту са α -честицама и танком златном фолијом, о којем је већ било речи раније, растојање између мете и детектора износило управо 8 cm.

2.1.1 Трочестични проблеми

Размотримо сада кинематику судара потпуно огољеног пројектила са једно-електронском метом (водонику сличном). Ово представља основ трочестичне (на енглеском *three-body*, скраћено 3B) квантномеханичке теорије расејања. При оваквим сударима, могући излазни канали су:

$$Z_P + (Z_T; e)_i \longrightarrow (Z_P; e)_f + Z_T, \quad (2.4)$$

$$Z_P + (Z_T; e)_i \longrightarrow Z_P + Z_T + e, \quad (2.5)$$

$$Z_P + (Z_T; e)_i \longrightarrow Z_P + (Z_T; e)_f, \quad (2.6)$$

који представљају електронски захват, јонизацију и екситацију, респективно. Заграде означавају везана стања, док индекси i и f означавају скупове квантних бројева (главни, орбитални и магнетни квантни број) који одговарају иницијалном и финалном везаном стању, респективно.

Означимо са \vec{r}_1 , \vec{r}_2 и \vec{r}_3 векторе положаја пројектила P масе M_P , језгра мете T масе M_T и електрона e јединичне масе, респективно, у односу на лабораторијски систем референце. У овом систему ће укупни хамилтонијан H бити дат

следећим изразом:

$$H = H_0 + V, \quad (2.7)$$

где је:

$$H_0 = -\frac{1}{2M_P} \vec{\nabla}_{r_1}^2 - \frac{1}{2M_T} \vec{\nabla}_{r_2}^2 - \frac{1}{2} \vec{\nabla}_{r_3}^2, \quad (2.8)$$

оператор кинетичке енергије, а:

$$V = \frac{Z_P Z_T}{R} - \frac{Z_P}{s} - \frac{Z_T}{x}, \quad (2.9)$$

оператор укупне потенцијалне енергије система. Вектор релативног положаја електрона у односу на пројектил је означен са \vec{s} , а у односу на језгро мете са \vec{x} . Они су дати следећим изразима:

$$\vec{s} = \vec{r}_3 - \vec{r}_1, \quad \vec{x} = \vec{r}_3 - \vec{r}_2. \quad (2.10)$$

Такође, вектор релативног положаја пројектила у односу на мету означен је са \vec{R} и може се записати следећим еквивалентним изразима:

$$\vec{R} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2 = \vec{x} - \vec{s}. \quad (2.11)$$

С обзиром на то да потенцијална енергија није временски зависна, једначина (2.1) се своди на временски независну Шредингерову једначину:

$$H\Psi_{i,f}^{\pm} = E\Psi_{i,f}^{\pm}, \quad (2.12)$$

при чему је:

$$\Psi_i^+(t) = e^{-iEt} \Psi_i^+, \quad (2.13)$$

$$\Psi_f^-(t) = e^{-iEt} \Psi_f^-. \quad (2.14)$$

Када растојање између пројектила и мете у улазном и излазном каналу тежи бесконачности, на основу израза (2.2) и (2.3), као и (2.13) и (2.14), једноставно се може показати да важи:

$$\Psi_i^+ \longrightarrow \Phi_i^+, \quad (2.15)$$

$$\Psi_f^- \longrightarrow \Phi_f^-, \quad (2.16)$$

при чему је:

$$\Phi_i^+(t) = e^{-iEt}\Phi_i^+, \quad (2.17)$$

$$\Phi_f^-(t) = e^{-iEt}\Phi_f^-. \quad (2.18)$$

Даље разматрање проблема ћемо, ради једноставности, вршити у систему центра маса.

Улазни канал

Уведимо најпре независне Јакобијеве координате, помоћу којих ћемо проблем разматрати у систему центра маса. Избор ових координата није једнозначан, али је најпогодније узети скуп релативних координата $\{\vec{x}, \vec{r}_i, \vec{r}_{CM}\}$, где је:

$$\vec{r}_i = \vec{r}_1 - \vec{r}_{CM,T}, \quad (2.19)$$

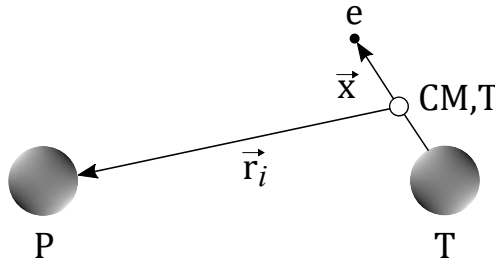
вектор релативног положаја пројектила у односу на центар масе мете ($Z_T; e$) (слика 1), при чему је:

$$\vec{r}_{CM,T} = \frac{M_T \vec{r}_2 + \vec{r}_3}{M_T + 1}, \quad (2.20)$$

вектор положаја центра масе мете (CM,T) у односу на лабораторијски систем референце, док:

$$\vec{r}_{CM} = \frac{M_P \vec{r}_1 + M_T \vec{r}_2 + \vec{r}_3}{M_P + M_T + 1}. \quad (2.21)$$

представља вектор положаја центра масе целокупног система пројектил-мета.



Слика 1: Јакобијеве координате код трочестичних проблема са водонику сличним метама у улазном каналу.

Оператор кинетичке енергије H_0 се у новим координатама може записати у следећем облику (видети Прилог А за детаље):

$$H_0 = -\frac{1}{2\mu_i} \vec{\nabla}_{r_i}^2 - \frac{1}{2b} \vec{\nabla}_x^2 - \frac{1}{2M} \vec{\nabla}_{r_{CM}}^2, \quad (2.22)$$

где су:

$$\mu_i = \frac{M_P(M_T + 1)}{M_P + M_T + 1}, \quad b = \frac{M_T}{M_T + 1}, \quad M = M_P + M_T + 1. \quad (2.23)$$

Анализирајући последњи израз (2.22) за оператор кинетичке енергије H_0 , можемо приметити да у њему вектор положаја центра масе целокупног система \vec{r}_{CM} фигурише искључиво у чисто кинетичком члану $-\frac{1}{2M} \vec{\nabla}_{r_{CM}}^2$. Како оператор укупне потенцијалне енергије система (2.9) не зависи од вектора положаја центра масе система, овај кинетички члан једноставно описује кретање центра масе целокупног система пројектил-мета константном брзином. Таласна функција која описује центар масе система стога неће утицати на тоталне пресеке, те закључујемо да поменути кинетички члан можемо искључити из даљег разматрања. Следи да ће укупни хамилтонијан у систему центра масе целокупног система пројектил-мета имати облик:

$$H = H_0 + V, \quad (2.24)$$

где је $H_0 = -\frac{1}{2\mu_i} \vec{\nabla}_{r_i}^2 - \frac{1}{2b} \vec{\nabla}_x^2$, док је V дато изразом (2.9).

Ради одређивања коректних граничних услова, згодно је хамилтонијан (2.24) написати у сепарабилном облику:

$$H = H_i + V_i, \quad (2.25)$$

где је H_i канални хамилтонијан, а V_i канална пертурбација у улазном каналу:

$$H_i = -\frac{1}{2\mu_i} \vec{\nabla}_{r_i}^2 - \frac{1}{2b} \vec{\nabla}_x^2 - \frac{Z_T}{x}, \quad (2.26)$$

$$V_i = \frac{Z_P Z_T}{R} - \frac{Z_P}{s}. \quad (2.27)$$

Својствени проблем непертурбованог хамилтонијана (2.26):

$$H_i \Phi_i = E \Phi_i, \quad (2.28)$$

може се једноставно решити методом раздвајања променљивих, тако да се за непертурбовану таласну функцију Φ_i добија:

$$\Phi_i = \varphi_i(\vec{x}) e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_i}, \quad (2.29)$$

при чему је $e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_i}$ решење једначине:

$$-\frac{1}{2\mu_i} \vec{\nabla}_{r_i}^2 e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_i} = \frac{k_i^2}{2\mu_i} e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_i}. \quad (2.30)$$

Својствена вредност $\frac{k_i^2}{2\mu_i}$ представља кинетичку енергију виртуелне честице масе μ_i , са иницијалним таласним вектором \vec{k}_i . Таласна функција $\varphi_i(\vec{x})$ описује везано стање мете, те представља решење својственог проблема:

$$h_i \varphi_i(\vec{x}) = E_i \varphi_i(\vec{x}), \quad (2.31)$$

$$h_i = -\frac{1}{2b} \vec{\nabla}_x^2 - \frac{Z_T}{x}. \quad (2.32)$$

Величина E_i представља везивну енергију мете, те је укупна енергија E трочестичног система у улазном каналу:

$$E = \frac{k_i^2}{2\mu_i} + E_i, \quad (2.33)$$

и она се одржава све време током судара. Таласна функција $\varphi_i(\vec{x})$ се може егзактно наћи, с обзиром на то да представља решење својственог проблема за водонику сличан систем (2.31) (који је аналитички решив).

Сада ћемо потражити асимптотску форму пертурбације V_i , имајући у виду да $r_i \rightarrow R$ и $s \rightarrow R$ када $r_i \rightarrow \infty$:

$$V_i = \frac{Z_P Z_T}{R} - \frac{Z_P}{s} \xrightarrow{r_i \rightarrow \infty} \frac{Z_P (Z_T - 1)}{R} = V_i^\infty. \quad (2.34)$$

Из последњег израза види се да је асимптотска форма пертурбације V_i^∞ , која представља интеракцију између пројектила и екранираног језгра мете, Кулоновог типа. Другим речима, пертурбација има облик дугодометног¹ Кулоновог

¹Под краткодометним потенцијалима $V(\vec{r})$ подразумевамо оне који су квадратно интегралбилни $\int d\vec{r} |V(\vec{r})|^2 < \infty$ или локално квадратно интегралбилни $\int_{r \leq R} d\vec{r} |V(\vec{r})|^2 < \infty$, и који се понашају као $\mathcal{O}(r^{-\alpha})$, $\alpha > 1$ када $r \rightarrow \infty$. Ако не задовољава ове услове, потенцијал је дугодометан. То је управо и случај код Кулоновог потенцијала, који не задовољава ниједан од претходних услова.

потенцијала. Иницијално стање Φ_i је стога изобличено чак и у бесконачности, с обзиром на то да пертурбација, како је претходно дефинисана, не ишчезава у бесконачности. Да бисмо нашли коректно иницијално стање, које ћемо означити са Φ_i^c , мораћемо да одаберемо пертурбацију која ишчезава у бесконачности. То можемо постићи на једноставан начин, тако што операторима H_i и V_i респективно додамо и одузмемо члан облика $Z_P(Z_T - 1)/r_i$, тако да добијемо следеће изразе за непетурбовани хамилтонијан H_i^c и пертурбацију V_i^c :

$$H_i^c = -\frac{1}{2\mu_i} \vec{\nabla}_{r_i}^2 + \frac{Z_P(Z_T - 1)}{r_i} - \frac{1}{2b} \vec{\nabla}_x^2 - \frac{Z_T}{x}, \quad (2.35)$$

$$V_i^c = \frac{Z_P Z_T}{R} - \frac{Z_P(Z_T - 1)}{r_i} - \frac{Z_P}{s}, \quad (2.36)$$

при чему је укупни хамилтонијан једнак:

$$H = H_i^c + V_i^c. \quad (2.37)$$

Како је $\delta \vec{x}$ вектор положаја центра масе мете у односу на језгро мете, где је $\delta = 1/(M_T + 1)$, следи да је:

$$\vec{r}_i = \vec{R} - \delta \vec{x}. \quad (2.38)$$

Уколико сада $1/r_i$ развијемо у Маклоренов ред по δ , користећи израз (2.38), добијемо:

$$\frac{1}{r_i} = \frac{1}{|\vec{R} - \delta \vec{x}|} = \frac{1}{R} + \frac{\vec{R} \cdot \vec{x}}{R^3} \delta + \mathcal{O}(\delta^2). \quad (2.39)$$

С обзиром на то да је $\delta \ll 1$ (јер је $M_T \gg 1$), можемо занемарити све сабирке који садрже δ , те добијемо да је $\vec{r}_i \approx \vec{R}$. Апроксимација у којој се занемарују сабирци реда односа масе електрона и масе пројектила, односно масе електрона и масе мете, као и сматра да се расејање одвија доминантно под малим угловима (услед много веће масе пројектила и мете у односу на масу електрона), назива се *ексонална апроксимација*. Овакав тип расејања назива се *расејање унапред* (на енглеском *forward scattering*). Пертурбација V_i^c се сада, на основу израза (2.36), може апроксимирати са:

$$V_i^c = \frac{Z_P}{R} - \frac{Z_P}{s}. \quad (2.40)$$

Овим смо добили краткодеметни потенцијал, јер важи:

$$V_i^c \xrightarrow{r_i \rightarrow \infty} \mathcal{O}(1/R^2). \quad (2.41)$$

Решавањем својственог проблема непертурбованог хамилтонијана H_i^c (видети Прилог Б за детаље):

$$H_i^c \Phi_i^c = E \Phi_i^c, \quad (2.42)$$

добитимо коректан израз за таласну функцију иницијалног стања:

$$\Phi_i^c = \varphi_i(\vec{x}) e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_i} \mathcal{N}^+(\nu_i) {}_1F_1(-i\nu_i, 1, ik_i r_i - i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_i), \quad (2.43)$$

где је:

$$\mathcal{N}^+(\nu_i) = e^{-\pi\nu_i/2} \Gamma(1 + i\nu_i), \quad \nu_i = \frac{Z_P(Z_T - 1)}{v}, \quad (2.44)$$

док функција ${}_1F_1(a, c, z)$ представља Кумерову конфлуентну (дегенерисану) хипергеометријску функцију, док је $\Gamma(z)$ гама функција. Кулонова таласна функција $\mathcal{N}^+(\nu_i) e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_i} {}_1F_1(-i\nu_i, 1, ik_i r_i - i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_i)$ описује расејање пројектила масе μ_i на одбојном потенцијалу $Z_P(Z_T - 1)/r_i$ (екранирани потенцијал мете). Таласне функције овог типа називају се *Кулоновим таласима* и јављају се као решења својственог проблема расејања честице на потенцијалу Кулоновог типа. На овај начин постигнуто је да таласна функција Φ_i^c задовољава коректне Кулонове граничне услове, при чему је њено асимптотско понашање дато следећим изразом (видети Прилог Б):

$$\Phi_i^c(r_i \rightarrow \infty) = \varphi_i(\vec{x}) e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_i + i\nu_i \ln(k_i r_i - \vec{k}_i \cdot \vec{r}_i)} \equiv \Phi_i^+. \quad (2.45)$$

Излазни канал

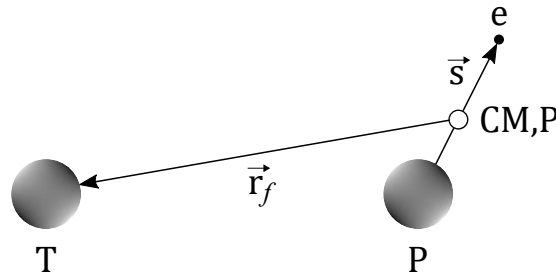
Размотримо сада ситуацију у излазном каналу, када је дошло до електронског захвата. Аналогно случају улазног канала, проблем је згодно разматрати у систему центра маса. Најпогоднији избор Јакобијевих координата у овом случају је скуп $\{\vec{s}, \vec{r}_f, \vec{r}_{\text{CM},P}\}$, где је:

$$\vec{r}_f = \vec{r}_2 - \vec{r}_{\text{CM},P}, \quad (2.46)$$

вектор релативног положаја мете у односу на центар масе пројектила ($Z_P; e$) након електронског захвата (слика 2), при чему је:

$$\vec{r}_{CM,P} = \frac{M_P \vec{r}_1 + \vec{r}_3}{M_P + 1}, \quad (2.47)$$

вектор положаја центра масе пројектила (CM,P) у односу на лабораторијски систем референце. Вектор положаја центра масе укупног система је већ претходно дефинисан изразом (2.21).



Слика 2: Јакобијеве координате код трочестичних проблема при електронском захвату из водонику сличних мета у излазном каналу.

У овом случају оператор кинетичке енергије H_0 добија облик (видети Прилог А за детаље):

$$H_0 = -\frac{1}{2\mu_f} \vec{\nabla}_{r_f}^2 - \frac{1}{2a} \vec{\nabla}_s^2 - \frac{1}{2M} \vec{\nabla}_{r_{CM}}^2, \quad (2.48)$$

где су:

$$\mu_f = \frac{(M_P + 1)M_T}{M_P + M_T + 1}, \quad a = \frac{M_P}{M_P + 1}. \quad (2.49)$$

Као и у случају улазног канала, у изразу (2.48) ћемо изоставити члан $-\frac{1}{2M} \vec{\nabla}_{r_{CM}}^2$, који описује кретање центра масе целокупног система, јер не утиче на тоталне пресеке.

Укупан хамилтонијан у излазном каналу ћемо поново написати у сепарабилном облику:

$$H = H_f + V_f, \quad (2.50)$$

где је H_f канални хамилтонијан, а V_f канална пертурбација у излазном каналу:

$$H_f = -\frac{1}{2\mu_f} \vec{\nabla}_{r_f}^2 - \frac{1}{2a} \vec{\nabla}_s^2 - \frac{Z_P}{s}, \quad (2.51)$$

$$V_f = \frac{Z_P Z_T}{R} - \frac{Z_T}{x}. \quad (2.52)$$

Решење својственог проблема непетурбованог хамилтонијана:

$$H_f \Phi_f = E \Phi_f, \quad (2.53)$$

се једноставно добија методом раздвајања променљивих:

$$\Phi_f = \varphi_f(\vec{s}) e^{-i\vec{k}_f \cdot \vec{r}_f}, \quad (2.54)$$

где је $e^{-i\vec{k}_f \cdot \vec{r}_f}$ решење једначине:

$$-\frac{1}{2\mu_f} \vec{\nabla}_{r_f}^2 e^{-i\vec{k}_f \cdot \vec{r}_f} = \frac{k_f^2}{2\mu_f} e^{-i\vec{k}_f \cdot \vec{r}_f}. \quad (2.55)$$

Својствена вредност $\frac{k_f^2}{2\mu_f}$ представља кинетичку енергију виртуелне честице масе μ_f , са финалним таласним вектором \vec{k}_f . Таласна функција $\varphi_f(\vec{s})$ описује везано стање пројектила након захвата електрона, те представља решење својственог проблема:

$$h_f \varphi_f(\vec{s}) = E_f \varphi_f(\vec{s}), \quad (2.56)$$

$$h_f = -\frac{1}{2a} \vec{\nabla}_s^2 - \frac{Z_P}{s}. \quad (2.57)$$

Величина E_f представља везивну енергију пројектила, те је укупна енергија E трочестичног система у излазном каналу:

$$E = \frac{k_f^2}{2\mu_i} + E_f, \quad (2.58)$$

и она је једнака укупној енергији (2.33) трочестичног система у улазном каналу (јер се енергија одржава све време током судара - зато је и употребљена иста ознака E и у улазном и у излазном каналу). Таласна функција $\varphi_f(\vec{s})$ може се егзактно наћи, с обзиром на то да представља решење својственог проблема за

водонику сличан систем (2.56).

Непертурбовано стање Φ_f поново ће бити изобличено и на бесконачности, због дугодометног Кулоновог потенцијала:

$$V_f = \frac{Z_P Z_T}{R} - \frac{Z_T}{x} \xrightarrow{r_f \rightarrow \infty} \frac{(Z_P - 1)Z_T}{R} = V_f^\infty, \quad (2.59)$$

који представља интеракцију између екранираног језгра пројектила и мете. На сличан начин као и у случају улазног каналног хамилтонијана, операторима H_f и V_f ћемо, респективно, додати и одузети члан $(Z_P - 1)Z_T/r_f$, чиме укупни хамилтонијан система можемо записати као:

$$H = H_f^c + V_f^c, \quad (2.60)$$

где су:

$$H_f^c = -\frac{1}{2\mu_f} \vec{\nabla}_{r_f}^2 + \frac{(Z_P - 1)Z_T}{r_f} - \frac{1}{2a} \vec{\nabla}_s^2 - \frac{Z_P}{s}, \quad (2.61)$$

$$V_f^c = \frac{Z_P Z_T}{R} - \frac{(Z_P - 1)Z_T}{r_f} - \frac{Z_T}{x}. \quad (2.62)$$

Као и у случају улазног канала, коришћењем еиконалне апроксимације добија се $\vec{r}_f \approx -\vec{R}$, те апроксимативан израз за каналну пертурбацију (2.62) добија облик:

$$V_f^c = \frac{Z_T}{R} - \frac{Z_T}{x}. \quad (2.63)$$

Овим смо добили краткодометни потенцијал, јер важи:

$$V_f^c \xrightarrow{r_f \rightarrow \infty} \mathcal{O}(1/R^2). \quad (2.64)$$

Решавањем својственог проблема непертурбованог хамилтонијана H_f^c :

$$H_f^c \Phi_f^c = E \Phi_f^c, \quad (2.65)$$

добићемо коректан израз за таласну функцију финалног стања (видети Прилог Б за детаље):

$$\Phi_f^c = \varphi_f(\vec{s}) e^{-i\vec{k}_f \cdot \vec{r}_f} \mathcal{N}^-(\nu_f) {}_1F_1(i\nu_f, 1, -ik_f r_f + i\vec{k}_f \cdot \vec{r}_f), \quad (2.66)$$

где је:

$$\mathcal{N}^-(\nu_f) = e^{-\pi\nu_f/2}\Gamma(1 - i\nu_f), \quad \nu_f = \frac{(Z_P - 1)Z_T}{v}. \quad (2.67)$$

На изложени начин постигнуто је да таласна функција Φ_f^c задовољава ко-ректне Кулонове граничне услове, при чему је њено асимптотско понашање дато следећим изразом (видети Прилог Б):

$$\Phi_f^c(r_f \rightarrow \infty) = \varphi_f(\vec{s})e^{-i\vec{k}_f \cdot \vec{r}_f - i\nu_f \ln(k_f r_f - \vec{k}_f \cdot \vec{r}_f)} \equiv \Phi_f^-. \quad (2.68)$$

Код брзих јон-атомских судара, тј. на високим енергијама, важи:

$$\frac{k_i^2}{2\mu_i} \gg |E_f - E_i|. \quad (2.69)$$

С обзиром на ово, као и на чињеницу да се ради о масивним честицама, где су масе пројектила и мете много веће од масе електрона, доминираће расејање уна-пред. Тада важи $\hat{v}_i \approx \hat{v}_f \equiv \hat{v}$, при чему је $\mu_i \vec{v}_i = \vec{k}_i$, $\mu_f \vec{v}_f = \vec{k}_f$, као и $\hat{v}_{i,f} = \vec{v}_{i,f}/v_{i,f}$. Може се показати, на сличан начин као што је за једноструки електронски за-хват у четворочестичном случају урађено у референци [32], да код електронског захвата у случају трочестичних проблема важи релација:

$$\vec{k}_i \cdot \vec{r}_i + \vec{k}_f \cdot \vec{r}_f = \vec{\beta} \cdot \vec{R} - \vec{v} \cdot \vec{s} = \vec{\alpha} \cdot \vec{s} + \vec{\beta} \cdot \vec{x}, \quad (2.70)$$

при чему важи:

$$\vec{\alpha} = \vec{\eta} - v^- \hat{v}, \quad \vec{\beta} = -\vec{\eta} - v^+ \hat{v}, \quad \vec{\alpha} + \vec{\beta} = -\vec{v}, \quad (2.71)$$

$$v^+ = \frac{v}{2} + \frac{\Delta E}{v}, \quad v^- = \frac{v}{2} - \frac{\Delta E}{v}, \quad \Delta E = E_i - E_f. \quad (2.72)$$

Ради погодности, z -оса (квантизациона оса) постављена је у смеру вектора ин-цидентне брзине, тако да важи $\hat{v} = (0, 0, 1)$, док је вектор трансверзалног момента трансфера у XOY равни $\vec{\eta}$ тада дат следећим изразом:

$$\vec{\eta} = (\eta \cos \phi_\eta, \eta \sin \phi_\eta, 0), \quad \vec{\eta} \cdot \vec{v} = 0. \quad (2.73)$$

Величине $\vec{\alpha}$ и $\vec{\beta}$ називају се моменти трансфера, а ΔE представља разлику везивних енергија иницијалног и финалног стања.

2.1.2 Четворочестични проблеми

Размотримо сада кинематику судара потпуно огољеног пројектила са двоелектронском метом (хелијуму сличном). Ово представља основ четворочестичне (на енглеском *four-body*, скраћено 4В) квантномеханичке теорије расејања. При оваквим сударима, могући излазни канали су следећи једноелектронски процеси:

$$Z_P + (Z_T; e_1, e_2)_i \longrightarrow (Z_P; e_1)_{f_1} + (Z_T; e_2)_{f_2}, \quad (2.74)$$

$$Z_P + (Z_T; e_1, e_2)_i \longrightarrow Z_P + (Z_T; e_2)_f + e_1, \quad (2.75)$$

$$Z_P + (Z_T; e_1, e_2)_i \longrightarrow Z_P + (Z_T; e_1, e_2)_f^*, \quad (2.76)$$

који представљају једноструки електронски захват, једноструку јонизацију и једноструку ексцитацију, респективно. Могући излазни канали су и следећи двоелектронски процеси:

$$Z_P + (Z_T; e_1, e_2)_i \longrightarrow (Z_P; e_1)_f + Z_T + e_2, \quad (2.77)$$

$$Z_P + (Z_T; e_1, e_2)_i \longrightarrow (Z_P; e_1)_{f_1} + (Z_T; e_2)_{f_2}^*, \quad (2.78)$$

$$Z_P + (Z_T; e_1, e_2)_i \longrightarrow Z_P + (Z_T; e_2)_f^* + e_1, \quad (2.79)$$

$$Z_P + (Z_T; e_1, e_2)_i \longrightarrow (Z_P; e_1, e_2)_f + Z_T, \quad (2.80)$$

$$Z_P + (Z_T; e_1, e_2)_i \longrightarrow Z_P + Z_T + e_1 + e_2, \quad (2.81)$$

$$Z_P + (Z_T; e_1, e_2)_i \longrightarrow Z_P + (Z_T; e_1, e_2)_f^{**}, \quad (2.82)$$

који представљају једноструки електронски захват и јонизацију, једноструки електронски захват и ексцитацију, једноструку јонизацију и ексцитацију, дво-струки електронски захват, двоструку јонизацију и двоструку ексцитацију, респективно. Заграде означавају везана стања, док индекси i , f , f_1 и f_2 означавају скупове квантних бројева (главни, орбитални и магнетни квантни број) који одговарају иницијалном и финалним везаним стањима, респективно. Једнострука и двострука звездаца означавају једноструко и двоструко ексцитовано стање, респективно.

Означимо са \vec{r}_1 , \vec{r}_2 , \vec{r}_3 и \vec{r}_4 векторе положаја пројектила Р масе M_P , језгра мете Т масе M_T и електрона e_1 и e_2 јединичне масе, респективно, у односу на лабораторијски систем референце. У овом систему ће укупни хамилтонијан H бити дат следећим изразом:

$$H = H_0 + V, \quad (2.83)$$

где је:

$$H_0 = -\frac{1}{2M_P} \vec{\nabla}_{r_1}^2 - \frac{1}{2M_T} \vec{\nabla}_{r_2}^2 - \frac{1}{2} \vec{\nabla}_{r_3}^2 - \frac{1}{2} \vec{\nabla}_{r_4}^2, \quad (2.84)$$

оператор кинетичке енергије, док је:

$$V = \frac{Z_P Z_T}{R} - \frac{Z_P}{s_1} - \frac{Z_P}{s_2} - \frac{Z_T}{x_1} - \frac{Z_T}{x_2} + \frac{1}{r_{12}}, \quad (2.85)$$

оператор укупне потенцијалне енергије система. Вектори релативног положаја електрона e_1 и e_2 у односу на пројектил су означени са \vec{s}_1 и \vec{s}_2 , а у односу на мету са \vec{x}_1 и \vec{x}_2 , респективно. Дати су следећим изразима:

$$\vec{s}_1 = \vec{r}_3 - \vec{r}_1, \quad \vec{s}_2 = \vec{r}_4 - \vec{r}_1, \quad (2.86)$$

$$\vec{x}_1 = \vec{r}_3 - \vec{r}_2, \quad \vec{x}_2 = \vec{r}_4 - \vec{r}_2. \quad (2.87)$$

И у овом случају је вектор релативног положаја пројектила у односу на мету означен са \vec{R} и може се записати следећим еквивалентним изразима:

$$\vec{R} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2 = \vec{x}_1 - \vec{s}_1 = \vec{x}_2 - \vec{s}_2. \quad (2.88)$$

Вектор међуелектронског растојања \vec{r}_{12} дат је следећим еквивалентним изразима:

$$\vec{r}_{12} = \vec{r}_3 - \vec{r}_4 = \vec{s}_1 - \vec{s}_2 = \vec{x}_1 - \vec{x}_2. \quad (2.89)$$

Излагање везано за једначине (2.12)-(2.18) је опште (у њему није експлицитно узето у обзир да ли је проблем трочестични или четворочестични), те важи и у овом случају. Као и у трочестичном формализму, даље разматрање ћемо вршити у систему центра маса. Случај четворочестичног проблема биће у великој мери аналоган трочестичном, мада наравно нешто сложенији.

Улазни канал

Уведимо најпре независне Јакобијеве координате, помоћу којих ћемо проблем разматрати у систему центра маса. Избор ових координата није једнозначан, али је најпогодније узети скуп релативних координата $\{\vec{x}_1, \vec{x}_2, \vec{r}_i, \vec{r}_{CM}\}$, где је:

$$\vec{r}_i = \vec{r}_1 - \vec{r}_{CM,T}, \quad (2.90)$$

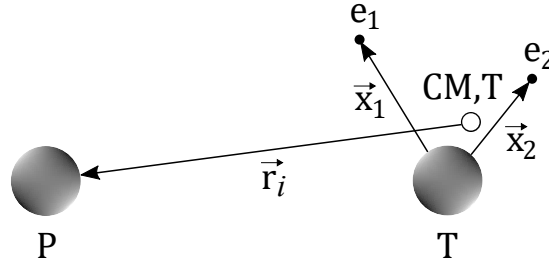
вектор релативног положаја пројектила у односу на центар масе мете ($Z_T; e_1, e_2$) (слика 3), при чему је:

$$\vec{r}_{\text{CM},T} = \frac{M_T \vec{r}_2 + \vec{r}_3 + \vec{r}_4}{M_T + 2}, \quad (2.91)$$

вектор положаја центра масе мете (CM,T) у односу на лабораторијски систем референце, док:

$$\vec{r}_{\text{CM}} = \frac{M_P \vec{r}_1 + M_T \vec{r}_2 + \vec{r}_3 + \vec{r}_4}{M_P + M_T + 2}. \quad (2.92)$$

представља вектор положаја центра масе целокупног система пројектил-мета.



Слика 3: Јакобијеве координате код четворочестиичних проблема са хелијуму сличним метама у улазном каналу.

Оператор кинетичке енергије H_0 се у новим координатама може записати у следећем облику (видети Прилог А за детаље):

$$H_0 = -\frac{1}{2\mu_i} \vec{\nabla}_{r_i}^2 - \frac{1}{2b} \vec{\nabla}_{x_1}^2 - \frac{1}{2b} \vec{\nabla}_{x_2}^2 - \frac{1}{M_T} \vec{\nabla}_{x_1} \cdot \vec{\nabla}_{x_2} - \frac{1}{2M} \vec{\nabla}_{r_{\text{CM}}}^2, \quad (2.93)$$

где су:

$$\mu_i = \frac{M_P(M_T + 2)}{M_P + M_T + 2}, \quad b = \frac{M_T}{M_T + 1}, \quad M = M_P + M_T + 2. \quad (2.94)$$

Као и у трочестиичном случају, у изразу (2.93) ћемо изоставити члан који описује кретање центра масе целокупног система $-\frac{1}{2M} \vec{\nabla}_{r_{\text{CM}}}^2$, јер не утиче на тоталне пресеке. У изразу за оператор кинетичке енергије (2.93) фигурише и тзв. члан *масене поларизације* $-\frac{1}{M_T} \vec{\nabla}_{x_1} \cdot \vec{\nabla}_{x_2}$. Овај члан ћемо изоставити у даљем разматрању, с обзиром на то да важи $M_T \gg 1$, те је његов допринос занемарљив. Следи да ће укупни хамилтонијан у систему центра масе целокупног система

пројектил-мета имати облик:

$$H = H_0 + V, \quad (2.95)$$

где је H_0 дато изразом:

$$H_0 = -\frac{1}{2\mu_i} \vec{\nabla}_{r_i}^2 - \frac{1}{2b} \vec{\nabla}_{x_1}^2 - \frac{1}{2b} \vec{\nabla}_{x_2}^2, \quad (2.96)$$

а V изразом (2.85).

Ради одређивања коректних граничних услова, згодно је хамилтонијан (2.95) написати у сепарабилном облику:

$$H = H_i + V_i, \quad (2.97)$$

где је H_i канални хамилтонијан, а V_i канална пертурбација у улазном каналу:

$$H_i = -\frac{1}{2\mu_i} \vec{\nabla}_{r_i}^2 - \frac{1}{2b} \vec{\nabla}_{x_1}^2 - \frac{1}{2b} \vec{\nabla}_{x_2}^2 - \frac{Z_{\Gamma}}{x_1} - \frac{Z_{\Gamma}}{x_2} + \frac{1}{r_{12}}, \quad (2.98)$$

$$V_i = \frac{Z_{\text{P}} Z_{\Gamma}}{R} - \frac{Z_{\text{P}}}{s_1} - \frac{Z_{\text{P}}}{s_2}. \quad (2.99)$$

Својствени проблем непетурбованог хамилтонијана (2.98):

$$H_i \Phi_i = E \Phi_i, \quad (2.100)$$

може се једноставно решити методом раздвајања променљивих, што за непетурбовану таласну функцију Φ_i даје:

$$\Phi_i = \varphi_i(\vec{x}_1, \vec{x}_2) e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_i}, \quad (2.101)$$

при чему је $e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_i}$ решење једначине:

$$-\frac{1}{2\mu_i} \vec{\nabla}_{r_i}^2 e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_i} = \frac{k_i^2}{2\mu_i} e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_i}. \quad (2.102)$$

Својствена вредност $\frac{k_i^2}{2\mu_i}$ представља кинетичку енергију виртуелне честице масе μ_i , са иницијалним таласним вектором \vec{k}_i . Таласна функција $\varphi_i(\vec{x}_1, \vec{x}_2)$ описује

везано стање мете, тако да представља решење својственог проблема:

$$h_i \varphi_i(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = E_i \varphi_i(\vec{x}_1, \vec{x}_2), \quad (2.103)$$

$$h_i = -\frac{1}{2b} \vec{\nabla}_{x_1}^2 - \frac{1}{2b} \vec{\nabla}_{x_2}^2 - \frac{Z_T}{x_1} - \frac{Z_T}{x_2} + \frac{1}{r_{12}}. \quad (2.104)$$

Величина E_i представља везивну енергију мете, те је укупна енергија E четворочестичног система у улазном каналу:

$$E = \frac{k_i^2}{2\mu_i} + E_i, \quad (2.105)$$

и она се одржава све време током судара. Таласне функције двоелектронских (хелијуму сличних) система $\varphi_i(\vec{x}_1, \vec{x}_2)$ се не могу егзактно наћи, с обзиром на то да својствени проблем хелијуму сличног система није аналитички решив. Међутим, овај проблем је интензивно проучаван дуги низ година [95–121], тако да су доступна бројна апроксимативна решења, најчешће добијена варијационим приступом. Дрејк [120] је помоћу потпуно корелисане Хилерасове таласне функције, са експлицитним урачунавањем међуелектронске координате r_{12} са приближно 600 сабирака добио за вредност енергије основног стања хелијума $E_i = -2.903724377034105$. Ова вредност се готово са правом може сматрати егзактном вредношћу.

Сада ћемо потражити асимптотску форму пертурбације V_i :

$$V_i = \frac{Z_P Z_T}{R} - \frac{Z_P}{s_1} - \frac{Z_P}{s_2} \xrightarrow{r_i \rightarrow \infty} \frac{Z_P(Z_T - 2)}{R} = V_i^\infty. \quad (2.106)$$

Из последњег израза види се да је асимптотска форма пертурбације V_i^∞ , која представља интеракцију између пројектила и екранираног језгра мете, дугодометног Кулоновог типа. Иницијално стање Φ_i изобличено је чак и у бесконачности. Да бисмо нашли коректно иницијално стање Φ_i^c , потражићемо пертурбацију која ишчезава у бесконачности, што постижемо тако што операторима H_i и V_i респективно додамо и одузmemo члан облика $Z_P(Z_T - 2)/r_i$, тако да добијемо следеће изразе за непертурбовани хамилтонијан H_i^c и пертурбацију V_i^c :

$$H_i^c = -\frac{1}{2\mu_i} \vec{\nabla}_{r_i}^2 + \frac{Z_P(Z_T - 2)}{r_i} - \frac{1}{2b} \vec{\nabla}_{x_1}^2 - \frac{1}{2b} \vec{\nabla}_{x_2}^2 - \frac{Z_T}{x_1} - \frac{Z_T}{x_2} + \frac{1}{r_{12}}, \quad (2.107)$$

$$V_i^c = \frac{Z_P Z_T}{R} - \frac{Z_P(Z_T - 2)}{r_i} - \frac{Z_P}{s_1} - \frac{Z_P}{s_2}, \quad (2.108)$$

при чему је укупни хамилтонијан једнак:

$$H = H_i^c + V_i^c. \quad (2.109)$$

Као и у случају трочестичних проблема, и овде ћемо искористити еиконалну апроксимацију и узети да важи $\vec{r}_i \approx \vec{R}$. Пертурбација V_i^c се сада, на основу израза (2.108), може апроксимирати са:

$$V_i^c = \frac{2Z_P}{R} - \frac{Z_P}{s_1} - \frac{Z_P}{s_2}. \quad (2.110)$$

Овим смо добили краткодејетни потенцијал, јер важи:

$$V_i^c \xrightarrow{r_i \rightarrow \infty} \mathcal{O}(1/R^2). \quad (2.111)$$

Решавањем својственог проблема непертурбованог хамилтонијана H_i^c :

$$H_i^c \Phi_i^c = E \Phi_i^c, \quad (2.112)$$

добићемо коректан израз за таласну функцију иницијалног стања (видети Прилог Б):

$$\Phi_i^c = \varphi_i(\vec{x}_1, \vec{x}_2) e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_i} \mathcal{N}^+(\nu_i) {}_1F_1(-i\nu_i, 1, ik_i r_i - i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_i), \quad (2.113)$$

где је:

$$\mathcal{N}^+(\nu_i) = e^{-\pi\nu_i/2} \Gamma(1 + i\nu_i), \quad \nu_i = \frac{Z_P(Z_T - 2)}{v}. \quad (2.114)$$

Кулонова таласна функција $\mathcal{N}^+(\nu_i) e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_i} {}_1F_1(-i\nu_i, 1, ik_i r_i - i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_i)$ описује расејање пројектила масе μ_i на одбојном потенцијалу $Z_P(Z_T - 2)/r_i$ (екранирани потенцијал мете). На овај начин постигнуто је да таласна функција Φ_i^c задовољава коректне Кулонове граничне услове, при чему је њено асимптотско понашање дато следећим изразом (видети Прилог Б):

$$\Phi_i^c(r_i \rightarrow \infty) = \varphi_i(\vec{x}_1, \vec{x}_2) e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_i + i\nu_i \ln(k_i r_i - \vec{k}_i \cdot \vec{r}_i)} \equiv \Phi_i^+. \quad (2.115)$$

Излазни канал

Размотримо сада ситуацију у излазном каналу, када је дошло до једноструког електронског захвата. Аналогно претходним разматрањима, проблем је згодно

посматрати у систему центра маса. Најпогоднији избор Јакобијевих координата у овом случају је скуп $\{\vec{s}_1, \vec{x}_2, \vec{r}_f, \vec{r}_{\text{CM}}\}$, где је:

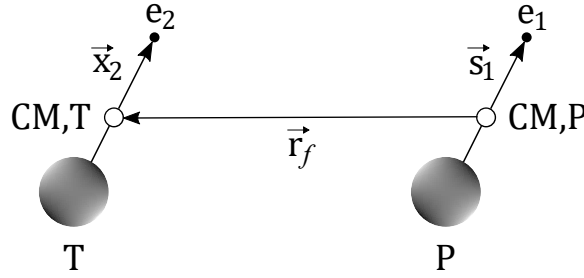
$$\vec{r}_f = \vec{r}_{\text{CM},\text{T}} - \vec{r}_{\text{CM},\text{P}}, \quad (2.116)$$

вектор релативног положаја центра масе мете ($Z_{\text{T}}; e_2$) у односу на центар масе пројектила ($Z_{\text{P}}; e_1$) након електронског захвата (слика 4), при чему су:

$$\vec{r}_{\text{CM},\text{P}} = \frac{M_{\text{P}}\vec{r}_1 + \vec{r}_3}{M_{\text{P}} + 1}, \quad (2.117)$$

$$\vec{r}_{\text{CM},\text{T}} = \frac{M_{\text{T}}\vec{r}_2 + \vec{r}_4}{M_{\text{T}} + 1}, \quad (2.118)$$

вектори положаја центра масе пројектила (CM,P) и мете (CM,T), респективно, у односу на лабораторијски систем референце. Вектор положаја центра масе укупног система је већ претходно дефинисан изразом (2.92).



Слика 4: Јакобијеве координате код четворочестичних проблема при једноструком електронском захвату из хелијуму сличних мета у излазном каналу.

У овом случају, оператор кинетичке енергије H_0 добија облик (видети Прилог А за детаље):

$$H_0 = -\frac{1}{2\mu_f} \vec{\nabla}_{r_f}^2 - \frac{1}{2a} \vec{\nabla}_{s_1} - \frac{1}{2b} \vec{\nabla}_{x_2} - \frac{1}{2M} \vec{\nabla}_{r_{\text{CM}}}^2, \quad (2.119)$$

где су:

$$\mu_f = \frac{(M_{\text{P}} + 1)(M_{\text{T}} + 1)}{M_{\text{P}} + M_{\text{T}} + 2}, \quad a = \frac{M_{\text{P}}}{M_{\text{P}} + 1}. \quad (2.120)$$

Као и у свим претходним случајевима, у изразу (2.119) ћемо изоставити члан који описује кретање центра масе целокупног система $-\frac{1}{2M} \vec{\nabla}_{r_{\text{CM}}}^2$, јер не утиче на

тоталне пресеке. Такође, у односу на случај улазног канала код четворочести-
чних проблема, у излазном каналу се сабирак масене поларизације не појављује
(због другачијег избора Јакобијевих координата).

Укупан хамилтонијан у излазном каналу ћемо поново написати у сепарабил-
ном облику:

$$H = H_f + V_f, \quad (2.121)$$

где је H_f канални хамилтонијан, а V_f канална пертурбација у излазном каналу:

$$H_f = -\frac{1}{2\mu_f} \vec{\nabla}_{r_f}^2 - \frac{1}{2a} \vec{\nabla}_{s_1}^2 - \frac{1}{2b} \vec{\nabla}_{x_2}^2 - \frac{Z_P}{s_1} - \frac{Z_T}{x_2}, \quad (2.122)$$

$$V_f = \frac{Z_P Z_T}{R} - \frac{Z_T}{x_1} - \frac{Z_P}{s_2} + \frac{1}{r_{12}}. \quad (2.123)$$

Решење својственог проблема непертурбованог хамилтонијана:

$$H_f \Phi_f = E \Phi_f, \quad (2.124)$$

једноставно се добија методом раздвајања променљивих:

$$\Phi_f = \varphi_f(\vec{s}_1, \vec{x}_2) e^{-i\vec{k}_f \cdot \vec{r}_f} = \varphi_P(\vec{s}_1) \varphi_T(\vec{x}_2) e^{-i\vec{k}_f \cdot \vec{r}_f}, \quad (2.125)$$

где је $e^{-i\vec{k}_f \cdot \vec{r}_f}$ решење једначине:

$$-\frac{1}{2\mu_f} \vec{\nabla}_{r_f}^2 e^{-i\vec{k}_f \cdot \vec{r}_f} = \frac{k_f^2}{2\mu_f} e^{-i\vec{k}_f \cdot \vec{r}_f}. \quad (2.126)$$

Својствена вредност $\frac{k_f^2}{2\mu_f}$ представља кинетичку енергију виртуелне честице масе
 μ_f , са финалним таласним вектором \vec{k}_f . Таласне функције $\varphi_P(\vec{s}_1)$ и $\varphi_T(\vec{x}_2)$ описују
везано стање пројектила ($Z_P; e_1$) и мете ($Z_T; e_2$) након једноструког електронског
захвата, респективно. Дакле, оне представљају решења својствених проблема:

$$h_P \varphi_P(\vec{s}_1) = E_{f_1} \varphi_P(\vec{s}_1), \quad (2.127)$$

$$h_P = -\frac{1}{2a} \vec{\nabla}_{s_1}^2 - \frac{Z_P}{s_1}, \quad (2.128)$$

$$h_{\text{T}}\varphi_{\text{T}}(\vec{x}_2) = E_{f_2}\varphi_{\text{T}}(\vec{x}_2), \quad (2.129)$$

$$h_{\text{T}} = -\frac{1}{2b}\vec{\nabla}_{x_2}^2 - \frac{Z_{\text{T}}}{x_2}. \quad (2.130)$$

Величине E_{f_1} и E_{f_2} представљају везивну енергију пројектила и мете након електронског захвата, респективно. Укупна енергија E четворочестичног система у излазном каналу дата је изразом:

$$E = \frac{k_f^2}{2\mu_f} + E_f, \quad (2.131)$$

где је:

$$E_f = E_{f_1} + E_{f_2}, \quad E_{f_1} = -\frac{Z_{\text{P}}^2}{2n_{f_1}^2}, \quad E_{f_2} = -\frac{Z_{\text{T}}^2}{2n_{f_2}^2}. \quad (2.132)$$

Укупна енергија E четворочестичног система у излазном каналу једнака је укупној енергији (2.105) четворочестичног система у улазном каналу (јер се енергија одржава све време током судара). Таласне функције $\varphi_{\text{P}}(\vec{s}_1)$ и $\varphi_{\text{T}}(\vec{x}_2)$ се могу егзактно наћи, с обзиром на то да представљају решења својствених проблема (2.127) и (2.129) за водонику сличне системе (који су аналитички решиви).

Непертурбовано стање Φ_f ће поново бити изобличено и у бесконачности, због дугодометног Кулоновог потенцијала:

$$V_f = \frac{Z_{\text{P}}Z_{\text{T}}}{R} - \frac{Z_{\text{T}}}{x_1} - \frac{Z_{\text{P}}}{s_2} + \frac{1}{r_{12}} \xrightarrow{r_f \rightarrow \infty} \frac{(Z_{\text{P}} - 1)(Z_{\text{T}} - 1)}{R} = V_f^{\infty}, \quad (2.133)$$

који представља интеракцију између екранираног језгра пројектила и екранираног језгра мете. На сличан начин као и у случају улазног каналног хамилтонијана, операторима H_f и V_f ћемо, респективно, додати и одузети исти члан $(Z_{\text{P}} - 1)(Z_{\text{T}} - 1)/r_f$, чиме укупни хамилтонијан система можемо записати као:

$$H = H_f^c + V_f^c, \quad (2.134)$$

где су:

$$H_f^c = -\frac{1}{2\mu_f}\vec{\nabla}_{r_f}^2 + \frac{(Z_{\text{P}} - 1)(Z_{\text{T}} - 1)}{r_f} - \frac{1}{2a}\vec{\nabla}_{s_1}^2 - \frac{1}{2b}\vec{\nabla}_{x_2}^2 - \frac{Z_{\text{P}}}{s_1} - \frac{Z_{\text{T}}}{x_2}, \quad (2.135)$$

$$V_f^c = \frac{Z_P Z_T}{R} - \frac{(Z_P - 1)(Z_T - 1)}{r_f} - \frac{Z_T}{x_1} - \frac{Z_P}{s_2} + \frac{1}{r_{12}}. \quad (2.136)$$

Коришћењем еиконалне апроксимације добија се $\vec{r}_f \approx -\vec{R}$, те апроксимативан израз за каналну пертурбацију (2.136) добија облик:

$$V_f^c = Z_P \left(\frac{1}{R} - \frac{1}{s_2} \right) + (Z_T - 1) \left(\frac{1}{R} - \frac{1}{x_1} \right) + \left(\frac{1}{r_{12}} - \frac{1}{x_1} \right). \quad (2.137)$$

Овим смо добили краткокометни потенцијал, јер важи:

$$V_f^c \xrightarrow{r_f \rightarrow \infty} \mathcal{O}(1/R^2). \quad (2.138)$$

Решавањем својственог проблема непетурбованог хамилтонијана H_f^c :

$$H_f^c \Phi_f^c = E \Phi_f^c, \quad (2.139)$$

добићемо коректан израз за таласну функцију иницијалног стања (видети Прилог Б):

$$\Phi_f^c = \varphi_P(\vec{s}_1) \varphi_T(\vec{x}_2) e^{-i\vec{k}_f \cdot \vec{r}_f} \mathcal{N}^-(\nu_f) {}_1F_1(i\nu_f, 1, -ik_f r_f + i\vec{k}_f \cdot \vec{r}_f), \quad (2.140)$$

где је:

$$\mathcal{N}^-(\nu_f) = e^{-\pi\nu_f/2} \Gamma(1 - i\nu_f), \quad \nu_f = \frac{(Z_P - 1)(Z_T - 1)}{v}. \quad (2.141)$$

На овај начин постигнуто је да таласна функција Φ_f^c задовољава коректне Кулонове граничне услове, при чему је њено асимптотско понашање дато следећим изразом (видети Прилог Б):

$$\Phi_f^c(r_f \rightarrow \infty) = \varphi_P(\vec{s}_1) \varphi_T(\vec{x}_2) e^{-i\vec{k}_f \cdot \vec{r}_f - i\nu_f \ln(k_f r_f - \vec{k}_f \cdot \vec{r}_f)} \equiv \Phi_f^-. \quad (2.142)$$

На основу идентичног разматрања као код трочестичних проблема, с обзиром на то да се ради о брзим јон-атомским сударима, можемо записати да је $\hat{v}_i \approx \hat{v}_f \equiv \hat{v}$, при чему је $\mu_i \vec{v}_i = \vec{k}_i$, $\mu_f \vec{v}_f = \vec{k}_f$, као и $\hat{v}_{i,f} = \vec{v}_{i,f}/v_{i,f}$. Може се показати да код једноструког електронског захвата у случају четворочестичних проблема тада важи релација [32]:

$$\vec{k}_i \cdot \vec{r}_i + \vec{k}_f \cdot \vec{r}_f = -\vec{\alpha} \cdot \vec{R} - \vec{v} \cdot \vec{x}_1 = \vec{\alpha} \cdot \vec{s}_1 + \vec{\beta} \cdot \vec{x}_1 = \vec{\beta} \cdot \vec{R} - \vec{v} \cdot \vec{s}_1, \quad (2.143)$$

при чему важи:

$$\vec{\alpha} = \vec{\eta} - v^- \hat{v}, \quad \vec{\beta} = -\vec{\eta} - v^+ \hat{v}, \quad \vec{\alpha} + \vec{\beta} = -\vec{v}, \quad (2.144)$$

$$v^+ = \frac{v}{2} + \frac{\Delta E}{v}, \quad v^- = \frac{v}{2} - \frac{\Delta E}{v}, \quad \Delta E = E_i - E_f. \quad (2.145)$$

Ради погодности, z -оса (квантизациона оса) постављена је у смеру вектора инцидентне брзине, тако да важи $\hat{v} = (0, 0, 1)$, док је вектор трансверзалног момента трансфера у XOY равни $\vec{\eta}$ тада дат следећим изразом:

$$\vec{\eta} = (\eta \cos \phi_\eta, \eta \sin \phi_\eta, 0), \quad \vec{\eta} \cdot \vec{v} = 0. \quad (2.146)$$

Као и у трочестичном случају, вектори $\vec{\alpha}$ и $\vec{\beta}$ називају се моменти трансфера, док је ΔE разлика у везивним енергијама иницијалних и финалних стања. Треба имати у виду да, иако су изрази (2.144)-(2.146) формално идентични изразима (2.71)-(2.73), вредности иницијалне E_i и финалне везивне енергије E_f се очигледно разликују код трочестичних и четворочестичних проблема.

2.2 Борнов пертурбациони развој

У овом одељку ћемо размотрити Борнов пертурбациони развој, који нам је неопходан да бисмо написали израз за амплитуду прелаза. Излагање које следи преузето је из референци [27, 93].

Динамика колизионих система које разматрамо описана је Шредингеровом једначином:

$$(H - E)\Psi_{i,f}^\pm = 0, \quad (2.147)$$

где је $\Psi_{i,f}^\pm$ представља комплетну таласну функцију у улазном, односно излазном каналу. Решења једначине (2.147) морају задовољавати коректне граничне услове:

$$\Psi_i^+ \xrightarrow{r_i \rightarrow \infty} \Phi_i^+, \quad (2.148)$$

$$\Psi_f^- \xrightarrow{r_f \rightarrow \infty} \Phi_f^-. \quad (2.149)$$

Егзактна амплитуда прелаза са коректним граничним условима може да се запише у *пост* или *приор* форми, респективно:

$$T_{if}^+ = \langle \Phi_f^- | V_f^c | \Psi_i^+ \rangle, \quad (2.150)$$

$$T_{if}^- = \langle \Psi_f^- | V_i^c | \Phi_i^+ \rangle. \quad (2.151)$$

Приор и пост форма су међусобно једнаке за прелазе за које важи закон одржања енергије, тј. на енергијској љусци (на енглеском *on-shell*).

Решавање колизионих проблема у којима учествују три или четири тела је изузетно комплексно. На средњим и високим енергијама најчешће се примењују пертурбативни приступи. Иако је ове приступе могуће дискутовати и на нивоу сукцесивних итеративних решења Шредингерове једначине, знатно је погодније употребити метод решавања преко интегралних једначина. Детаљно размотрени принципи нерелативистичке квантномеханичке теорије судара могу се наћи у монографији [1].

2.2.1 Липман-Швингерове једначине

Укупна Гринова функција у временски независној теорији расејања дата је са [1, 93, 94]:

$$G^\pm = (E - H \pm i\epsilon)^{-1}, \quad (2.152)$$

где је ϵ позитивна инфинитезимално мала величина. Може се показати да ће тада важити [94]:

$$\Psi_i^+ \equiv i\epsilon G^+ \Phi_i^+, \quad (2.153)$$

где Φ_i^+ задовољава коректне граничне услове.

Такође, Гринове функције придружене операторима H_i^c , H_f^c и H_0 , респективно, можемо увести на следећи начин:

$$G_i^\pm = (E - H_i^c \pm i\epsilon)^{-1}, \quad (2.154)$$

$$G_f^\pm = (E - H_f^c \pm i\epsilon)^{-1}, \quad (2.155)$$

$$G_0^\pm = (E - H_0 \pm i\epsilon)^{-1}. \quad (2.156)$$

Везе између ових Гринових функција дате су интегралним једначинама²:

$$G^\pm = G_i^\pm + G_i^\pm V_i^c G^\pm, \quad (2.157)$$

$$G^\pm = G_f^\pm + G_f^\pm V_f^c G^\pm, \quad (2.158)$$

$$G^\pm = G_0^\pm + G_0^\pm V G^\pm. \quad (2.159)$$

Сукцесивним изражавањем G^\pm у изразима (2.157), (2.158) и (2.159) употребом управо израза (2.157), (2.158) и (2.159), респективно, добијамо:

$$G^\pm = G_i^\pm + G_i^\pm V_i^c G_i^\pm + G_i^\pm V_i^c G_i^\pm V_i^c G_i^\pm + G_i^\pm V_i^c G_i^\pm V_i^c G_i^\pm V_i^c G_i^\pm + \dots, \quad (2.160)$$

$$G^\pm = G_f^\pm + G_f^\pm V_f^c G_f^\pm + G_f^\pm V_f^c G_f^\pm V_f^c G_f^\pm + G_f^\pm V_f^c G_f^\pm V_f^c G_f^\pm V_f^c G_f^\pm + \dots, \quad (2.161)$$

$$G^\pm = G_0^\pm + G_0^\pm V G_0^\pm + G_0^\pm V G_0^\pm V G_0^\pm + G_0^\pm V G_0^\pm V G_0^\pm V G_0^\pm + \dots \quad (2.162)$$

Заменом једначине (2.157) у једначину (2.153), уз поновно коришћење једначине (2.153), добијамо:

$$\Psi_i^+ = i\epsilon G_i^+ \Phi_i^+ + G_i^+ V_i^c i\epsilon G_i^+ \Phi_i^+ = i\epsilon G_i^+ \Phi_i^+ + G_i^+ V_i^c \Psi_i^+. \quad (2.163)$$

Имајући у виду да важи³:

$$\Phi_i^+ = i\epsilon G_i^+ \Phi_i^+, \quad (2.164)$$

коначно долазимо до *Липман-Швингерове једначине*:

$$\Psi_i^+ = \Phi_i^+ + G_i^+ V_i^c \Psi_i^+. \quad (2.165)$$

Липман-Швингерова једначина (2.165) је нехомогена интегрална једначина, са нехомогеношћу Φ_i^+ . Ова једначина се може формално решити коришћењем Гринове функције G^+ , тако што најпре једначину (2.160) са десне стране помножимо са V_i^c , на основу чега добијамо:

$$G^+ V_i^c = \sum_{n=1}^{\infty} (G_i^+ V_i^c)^n. \quad (2.166)$$

²Исправност ових једначина се лако проверава. На пример, уколико операторску једначину (2.157) напишемо у експлицитном облику коришћењем једначина (2.152) и (2.154), те је истовремено са леве стране помножимо са $E - H_i^c \pm i\epsilon$, а са десне са $E - H \pm i\epsilon$, добићемо релацију $H = H_i^c + V_i^c$.

³Да је ова једначина исправна, можемо се уверити једноставним свођењем на идентитет: $\Phi_i^+ = i\epsilon G_i^+ \Phi_i^+ = \frac{i\epsilon}{E - H_i^c + i\epsilon} \Phi_i^+ = \frac{i\epsilon}{E - E + i\epsilon} \Phi_i^+ = \Phi_i^+$.

Сада примењујемо процедуру сличну оној при добијању израза (2.160)-(2.162), сукцесивно замењујући израз (2.165) у самог себе, те уз коришћење израза (2.166) добијамо:

$$\begin{aligned}\Psi_i^+ &= (1 + G_i^+ V_i^c + G_i^+ V_i^c G_i^+ V_i^c + G_i^+ V_i^c G_i^+ V_i^c G_i^+ V_i^c + \dots) \Phi_i \\ &= \left[1 + \sum_{n=1}^{\infty} (G_i^+ V_i^c)^n \right] \Phi_i^+ = (1 + G^+ V_i^c) \Phi_i^+, \end{aligned} \quad (2.167)$$

што представља формално решење Липман-Швингерове једначине.

Аналогним приступом може се добити и временски независна таласна функција читавог система у излазном каналу:

$$\Psi_f^- = (1 + G^- V_f^c) \Phi_f^-. \quad (2.168)$$

2.2.2 Борнов развој са коректним граничним условима

Замењујући формално решење (2.167) у израз за пост форму амплитуде прелаза (2.150) добијамо:

$$T_{if}^+ = \langle \Phi_f^- | V_f^c (1 + G^+ V_i^c) | \Phi_i^+ \rangle. \quad (2.169)$$

Заменом Гринове функције G^+ из релација (2.160), (2.161) и (2.162) у израз за пост форму амплитуде прелаза (2.169) можемо добити различите верзије Борновог развоја са коректним граничним условима:

$$T_{if}^+ = \langle \Phi_f^- | V_f^c | \Phi_i^+ \rangle + \langle \Phi_f^- | V_f^c G_i^+ V_i^c | \Phi_i^+ \rangle + \langle \Phi_f^- | V_f^c G_i^+ V_i^c G_i^+ V_i^c | \Phi_i^+ \rangle + \dots, \quad (2.170)$$

$$T_{if}^+ = \langle \Phi_f^- | V_f^c | \Phi_i^+ \rangle + \langle \Phi_f^- | V_f^c G_f^+ V_i^c | \Phi_i^+ \rangle + \langle \Phi_f^- | V_f^c G_f^+ V_f^c G_f^+ V_i^c | \Phi_i^+ \rangle + \dots, \quad (2.171)$$

$$T_{if}^+ = \langle \Phi_f^- | V_f^c | \Phi_i^+ \rangle + \langle \Phi_f^- | V_f^c G_0^+ V_i^c | \Phi_i^+ \rangle + \langle \Phi_f^- | V_f^c G_0^+ V G_0^+ V_i^c | \Phi_i^+ \rangle + \dots \quad (2.172)$$

Први члан у свим верзијама пост форме Борновог пертурбационог развоја са коректним граничним условима је исти и представља пост форму прве Борнове апроксимације са коректним граничним условима (која се, као што смо већ поменули у уводу, скраћено означава са CB1):

$$T_{if}^{CB1+} = \langle \Phi_f^- | V_f^c | \Phi_i^+ \rangle. \quad (2.173)$$

Пост форма *друге* Борнове апроксимације подразумева задржавање и другог члана у развојима (2.170)-(2.172). Као што можемо приметити, други чланови

у различитим верзијама пост фoрме Борновог пертурбациoног развоја (2.170)-(2.172) *нису идентични*, тако да закључујемо да постоје различите верзије израза за амплитуду прелаза у другој Борновој апроксимацији. На основу израза (2.170)-(2.172) се, респективно, могу добити следећи изрази за амплитуду прелаза у другој Борновој апроксимацији:

$$T_{if}^{CB2+} = T_{if}^{CB1+} + \langle \Phi_f^- | V_f^c G_i^+ V_i^c | \Phi_i^+ \rangle , \quad (2.174)$$

$$T_{if}^{CB2+} = T_{if}^{CB1+} + \langle \Phi_f^- | V_f^c G_f^+ V_i^c | \Phi_i^+ \rangle , \quad (2.175)$$

$$T_{if}^{CB2+} = T_{if}^{CB1+} + \langle \Phi_f^- | V_f^c G_0^+ V_i^c | \Phi_i^+ \rangle . \quad (2.176)$$

С обзиром на то да за Гринову функцију G^+ постоје и друга итеративна решења, могуће је на основу њих добити и другачије изразе за амплитуду прелаза у другој Борновој апроксимацији. Другим речима, Борнов пертурбациони развој амплитуде прелаза *није јединствен*.

Амплитуда прелаза у приор форми се, на основу израза (2.151) и (2.168), може записати у облику:

$$T_{if}^- = \langle \Phi_f^- | (1 + G^- V_f^c)^\dagger V_i^c | \Phi_i^+ \rangle . \quad (2.177)$$

Поново се могу добити различите верзије Борновог пертурбациoног развоја са коректним граничним условима у приор форми, при чему ће и овде први члан у свакој верзији развоја бити идентичан. Овај члан представља приор форму прве Борнове апроксимације са коректним граничним условима:

$$T_{if}^{CB1-} = \langle \Phi_f^- | V_i^c | \Phi_i^+ \rangle . \quad (2.178)$$

Конкретна примена СВ1 апроксимације подразумева замену израза (2.45) и (2.68) у трочестичном случају, односно (2.115) и (2.142) у четворочестичном случају, за таласне функције Φ_i^+ и Φ_f^- у изразе за пост (2.173) и приор форму (2.178) прве Борнове апроксимације са коректним граничним условима. Тиме бисмо, респективно, добили њену трочестичну (СВ1-3В) и четворочестичну (СВ1-4В) формулацију, примењену на једноструки захват електрона из водонику, односно хелијуму сличних мета. СВ1-3В апроксимацију за једноструки електронски захват из произвољног стања водонику сличне мете у произвољно стање пројектила развили су и имплементирали Белкић и Taylor [36], док су СВ1-4В апроксимацију за једноструки електронски захват из основног стања хелијуму сличне мете у произвољно стање пројектила развили и имплементирали

Манчев, Милојевић и Белкић [67].

2.3 Основе теорије изобличених таласа

У овом одељку приказаћемо основе теорије изобличених таласа. Ова теорија нам је, заједно са претходним разматрањима и СВ1 апроксимацијом, неопходна да бисмо формулисали гранично коректну апроксимацију са континуумским интермедијарним стањима. Детаљи везани за теорију изобличених таласа могу се наћи у референцама [4, 5, 122–127]. Овде приказано излагање је преузето из референци [27, 93] и допуњено експлицитним извођењима појединих израза.

Идеја метода изобличених таласа је да се, уместо оригиналног, разматра моделни проблем, у коме су стварне каналске интеракције V_i и V_f замењене помоћним, тзв. *изобличеним* или *дисторзионим потенцијалима* W_i и W_f . Грине функције које одговарају новим потенцијалима W_i и W_f су, респективно, дате изразима:

$$g_i^+ = (E - H_i - W_i + i\epsilon)^{-1}, \quad (2.179)$$

$$g_f^- = (E - H_f - W_f - i\epsilon)^{-1}. \quad (2.180)$$

Последње две релације могу да се запишу и у следећем облику⁴:

$$g_i^+ = (1 + g_i^+ W_i) \mathcal{G}_i^+ \equiv \omega^+ \mathcal{G}_i^+, \quad (2.181)$$

$$g_f^- = (1 + g_f^- W_f) \mathcal{G}_f^- \equiv \omega^- \mathcal{G}_f^-, \quad (2.182)$$

где су:

$$\omega^\pm = 1 + g_{i,f}^\pm W_{i,f}, \quad (2.183)$$

Мелерови таласни оператори, а \mathcal{G}_i^+ и \mathcal{G}_f^- Грине функције дефинисане следећим релацијама:

$$\mathcal{G}_i^\pm = (E - H_i \pm i\epsilon)^{-1}, \quad (2.184)$$

$$\mathcal{G}_f^\pm = (E - H_f \pm i\epsilon)^{-1}. \quad (2.185)$$

⁴Исправност ових релација се лако проверава множењем нпр. релације (2.181) са леве стране са $(E - H_i - W_i + i\epsilon)$, а са десне са $(E - H_i + i\epsilon)$.

Уместо таласних функција $\Psi_{i,f}^{\pm} = (1 + G^{\pm}V_{i,f}^c)\Phi_{i,f}^{\pm}$, које представљају формална решења Липман-Швингерових једначина (2.165) и (2.168), сада уводимо тзв. *изобличене таласе*⁵:

$$\chi_{i,f}^{\pm} = (1 + g_{i,f}^{\pm}W_{i,f})\Phi_{i,f} = \omega^{\pm}\Phi_{i,f}. \quad (2.186)$$

Када $\epsilon \rightarrow 0^+$, изобличени таласи χ_i^+ и χ_f^- задовољавају следеће моделне једначине:

$$(E - H_i - W_i)\chi_i^+ = 0, \quad (2.187)$$

$$(E - H_f - W_f)\chi_f^- = 0. \quad (2.188)$$

С обзиром на већ дискутовану важност коректних граничних услова, од изобличених таласа захтевамо да имају коректно асимптотско понашање:

$$\chi_i^+ \xrightarrow{r_i \rightarrow \infty} \Phi_i^+, \quad (2.189)$$

$$\chi_f^- \xrightarrow{r_f \rightarrow \infty} \Phi_f^-. \quad (2.190)$$

Сада амплитуда прелаза у нпр. приор форми има следећи облик:

$$T_{if}^- = \langle \Psi_f^- | V_i | \Phi_i \rangle = \langle \Phi_f | (1 + G^- V_f)^\dagger V_i | \Phi_i \rangle \equiv \langle \Phi_f | (\Omega^-)^\dagger V_i | \Phi_i \rangle, \quad (2.191)$$

где је:

$$\Omega^- = 1 + G^- V_f. \quad (2.192)$$

Како, уз употребу израза (2.183), важи следеће:

$$\begin{aligned} V_i &= V_i - W_i + W_i = (V_i - W_i)(1 + g_i^+ W_i) + W_i - (V_i - W_i)g_i^+ W_i \\ &= (V_i - W_i)\omega^+ + [1 - (V_i - W_i)g_i^+] W_i, \end{aligned} \quad (2.193)$$

слиди да амплитуду прелаза (2.191) можемо записати на следећи начин:

$$\begin{aligned} T_{if}^- &= \langle \Phi_f | (\Omega^-)^\dagger (V_i - W_i)\omega^+ | \Phi_i \rangle + \langle \Phi_f | (\Omega^-)^\dagger [1 - (V_i - W_i)g_i^+] W_i | \Phi_i \rangle \\ &= \langle \Phi_f | (\Omega^-)^\dagger (V_i - W_i)\omega^+ | \Phi_i \rangle + T_{if}^D, \end{aligned} \quad (2.194)$$

⁵Често се користи и термин *дисторзиони таласи*.

где је:

$$T_{if}^D = \langle \Phi_f | (\Omega^-)^\dagger [1 - (V_i - W_i)g_i^+] W_i | \Phi_i \rangle \equiv \langle \Phi_f | D | \Phi_i \rangle, \quad (2.195)$$

при чему је:

$$D \equiv (\Omega^-)^\dagger [1 - (V_i - W_i)g_i^+] W_i. \quad (2.196)$$

Сада ћемо детаљније размотрити члан T_{if}^D . Уколико искористимо операторски идентитет:

$$\frac{1}{A} - \frac{1}{B} = \frac{1}{A}(B - A)\frac{1}{B}, \quad (2.197)$$

при чему ћемо узети да је $1/A = G^+$ и $1/B = g_i^+$, уз употребу дефинишућих израза (2.152) и (2.179) за операторе G^+ и g_i^+ , добијамо:

$$\begin{aligned} G^+ - g_i^+ &= G^+(\cancel{E} - H_i - W_i + i\epsilon - \cancel{E} + H - i\epsilon)g_i^+ = G^+(H - H_i - W_i)g_i^+ \\ &= G^+(V_i - W_i)g_i^+. \end{aligned} \quad (2.198)$$

Коришћењем чињенице да је потенцијал реалан (те му се придружује ермитски оператор $V_f^\dagger = V_f$), као и да је $(G^-)^\dagger = G^+$ (што се види из израза (2.152)), добијамо:

$$(\Omega^-)^\dagger = (1 + G^- V_f)^\dagger = 1 + V_f^\dagger (G^-)^\dagger = 1 + V_f G^+. \quad (2.199)$$

Уз употребу релација (2.198) и (2.199), можемо увидети да важи:

$$\begin{aligned} D &= (\Omega^-)^\dagger [1 - (V_i - W_i)g_i^+] W_i = (1 + V_f G^+) [1 - (V_i - W_i)g_i^+] W_i \\ &= [1 - (V_i - W_i)g_i^+ + V_f G^+ - V_f G^+ (V_i - W_i)g_i^+] W_i \\ &= [1 - (V_i - W_i)g_i^+ + \cancel{V_f} G^+ - V_f (G^+ - g_i^+)] W_i = [1 - (V_i - V_f - W_i)g_i^+] W_i \\ &= [(g_i^+)^{-1} - V_i + V_f + W_i] g_i^+ W_i = [E - H_i - \cancel{W_i} + i\epsilon - V_i + V_f + \cancel{W_i}] g_i^+ W_i \\ &= [E - (H_i + V_i - V_f) + i\epsilon] g_i^+ W_i = [E - (H - V_f) + i\epsilon] g_i^+ W_i \\ &= [E - H_f + i\epsilon] g_i^+ W_i, \end{aligned} \quad (2.200)$$

што даје:

$$\langle \Phi_f | D = \langle \Phi_f | [E - H_f + i\epsilon] g_i^+ W_i = \langle \Phi_f | [\cancel{E} - \cancel{E} + i\epsilon] g_i^+ W_i = i\epsilon \langle \Phi_f | g_i^+ W_i. \quad (2.201)$$

Коначно, за T_{if}^D добијамо:

$$T_{if}^D = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} i\epsilon \langle \Phi_f | g_i^+ W_i | \Phi_i \rangle . \quad (2.202)$$

Сабирак T_{if}^D представља прерасподелни прелаз изазван изобличењем (дисторзијом) у иницијалном каналу. Допринос овог сабирка је у граничном случају $\epsilon \rightarrow 0^+$ једнак нули. Услов:

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} i\epsilon \langle \Phi_f | g_i^+ W_i | \Phi_i \rangle = 0 , \quad (2.203)$$

задовољен је избором дисторзионог потенцијала који доводи искључиво до еластичног расејања у каналу који нас интересује и као такав не може да доведе до прерасподелног прелаза. Ово се једноставно постиже тако што се дисторзиони потенцијал одабере тако да зависи једино од релативних координата између пројектила и мете.

Сада ћемо извршити трансформацију таласног оператора Ω^- , дефинисаног релацијом (2.192), уз употребу израза⁶ $(G^- - g_f^-) = G^-(V_f - W_f)g_f^-$, на следећи начин:

$$\begin{aligned} \Omega^- &= (1 + G^- V_f) = 1 + g_f^- W_f + G^- V_f - G^- W_f + G^- W_f - g_f^- W_f \\ &= 1 + g_f^- W_f + G^-(V_f - W_f) + (G^- - g_f^-)W_f \\ &= 1 + g_f^- W_f + G^-(V_f - W_f) + G^-(V_f - W_f)g_f^- W_f \\ &= [1 + G^-(V_f - W_f)] (1 + g_f^- W_f) = [1 + G^-(V_f - W_f)] \omega^- . \end{aligned} \quad (2.204)$$

Коришћењем ермитски коњугованог израза (2.204), уз услов (2.203), за амплитуду прелаза добијамо следећи израз:

$$\begin{aligned} T_{if}^- &= \langle \Phi_f | (\Omega^-)^\dagger (V_i - W_i) \omega^+ | \Phi_i \rangle = \langle \Phi_f | (\omega^-)^\dagger [1 + (V_f - W_f)^\dagger G^+] (V_i - W_i) \omega^+ | \Phi_i \rangle \\ &= \langle \chi_f^- | (V_i - W_i) + (V_f - W_f)^\dagger G^+ (V_i - W_i) | \chi_i^+ \rangle . \end{aligned} \quad (2.205)$$

Израз (2.205) представља *егзактну* амплитуду прелаза у приор форми у теорији изобличених таласа. Функција W_f је потпуно произвољна. Израз (2.205) може се записати и у следећем облику:

$$T_{if}^- = \langle \Phi_f | U_{if}^- | \Phi_i \rangle , \quad (2.206)$$

⁶Исправност овог израза се доказује аналогно изразу (2.198).

где је оператор прелаза U_{if}^- (у приор форми) дефинисан следећим релацијама:

$$U_{if}^- \equiv (\Omega^-)^\dagger (V_i - W_i) \omega^+ = (\omega^-)^\dagger \left[1 + (V_f - W_f^\dagger) G^+ \right] (V_i - W_i) \omega^+. \quad (2.207)$$

На сличан начин се, уз избор моделног потенцијала у излазном каналу који задовољава следећи услов:

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} i\epsilon \langle \Phi_f | W_f^\dagger (g_f^-)^\dagger | \Phi_i \rangle = 0, \quad (2.208)$$

може добити егзактна пост форми амплитуде прелаза у теорији изобличених таласа:

$$T_{if}^+ = \langle \chi_f^- | (V_f - W_f^\dagger) + (V_f - W_f^\dagger) G^+ (V_i - W_i) | \chi_i^+ \rangle. \quad (2.209)$$

На основу егзактних израза (2.205) и (2.209) за амплитуду прелаза у приор и пост форми, респективно, могу се добити следећи апроксимативни изрази (први сабирци) за егзактне амплитуде прелаза у теорији изобличених таласа [27, 93]:

$$T_{if}^- = \langle \xi_f^- | (V_i - W_i) | \chi_i^+ \rangle. \quad (2.210)$$

$$T_{if}^+ = \langle \chi_f^- | (V_f - W_f^\dagger) | \xi_i^+ \rangle. \quad (2.211)$$

Израз (2.210) представља приор, а израз (2.211) пост форму апроксимативне амплитуде прелаза. Таласне функције:

$$\langle \xi_f^- | = \langle \chi_f^- | \left[1 + g_x^- (V_f - W_f) \right]^\dagger, \quad (2.212)$$

$$| \xi_i^+ \rangle = \left[1 + g_x^+ (V_i - W_i) \right] | \chi_i^+ \rangle, \quad (2.213)$$

представљају помоћне изобличене таласе, док су Гринове функције:

$$g_x^\pm = (E - H + V_x \pm i\epsilon)^{-1}, \quad (2.214)$$

са одговарајућим (погодно одабраним) каналним потенцијалом V_x уведене ради избегавања појављивања неповезаних дијаграма [27, 93, 123].

Сада ћемо изложити начин на који се у теорији изобличених таласа налазе експлицитни изрази за саме изобличене таласе, који су неопходни ради конкретних израчунавања амплитуде прелаза. Иако је принцип идентичан, детаљи се разликују у трочестичним и четворочестичним проблемима, те ће ове две ситуације бити изложене понаособ.

2.3.1 Трочестични проблеми

У овом одељку ће, у случају трочестичних проблема, бити изведени изрази за изобличене таласе, како за иницијално, тако и за финално стање. Први корак је захтев да изобличени таласи задовољавају коректне граничне услове (2.189) и (2.190), са таласним функцијама Φ_i^+ и Φ_f^- датим изразима (2.45) и (2.68).

Улазни канал

Како иницијално стање има асимптотско понашање дато изразом (2.45), закључујемо да изобличени талас χ_i^+ треба бити представљен у сепарабилном облику:

$$\chi_i^+ = \varphi_i(\vec{x})\psi_i^+, \quad (2.215)$$

где је ψ_i^+ непозната функција коју треба одредити.

Уколико сада заменимо таласну функцију χ_i^+ из једначине (2.215) у једначину (2.187), добијамо:

$$\begin{aligned} (E - H_i - W_i)(\varphi_i\psi_i^+) &= (E - H_0 - V_T - W_i)(\varphi_i\psi_i^+) \\ &= \varphi_i(E - E_i - V_i)\psi_i^+ + \psi_i^+ E_i \varphi_i + V_i \varphi_i \psi_i^+ - W_i(\varphi_i\psi_i^+) \\ &\quad - H_0(\varphi_i\psi_i^+) - V_T \varphi_i \psi_i^+ \\ &= \varphi_i(E - E_i - V_i)\psi_i^+ + \psi_i^+ E_i \varphi_i + U_i(\varphi_i\psi_i^+) \\ &\quad - H_0(\varphi_i\psi_i^+) - V_T \varphi_i \psi_i^+ = 0, \end{aligned} \quad (2.216)$$

где је $H_0 = -\frac{1}{2\mu_i} \vec{\nabla}_{r_i}^2 - \frac{1}{2b} \vec{\nabla}_x^2$ раније уведен оператор кинетичке енергије, док је:

$$V_T = -\frac{Z_T}{x}. \quad (2.217)$$

На основу израза (2.26) видимо да важи:

$$H_i = H_0 + V_T. \quad (2.218)$$

Такође, уведена је ознака:

$$U_i = V_i - W_i. \quad (2.219)$$

Сада је:

$$\begin{aligned}
 H_0(\varphi_i\psi_i^+) &= \left(-\frac{1}{2\mu_i}\vec{\nabla}_{r_i}^2 - \frac{1}{2b}\vec{\nabla}_x^2\right)(\varphi_i\psi_i^+) \\
 &= -\frac{1}{2\mu_i}\cancel{\psi_i^+\vec{\nabla}_{r_i}^2\varphi_i}^0 - \frac{1}{2b}\psi_i^+\vec{\nabla}_x^2\varphi_i + \varphi_i\left(-\frac{1}{2\mu_i}\vec{\nabla}_{r_i}^2 - \frac{1}{2b}\vec{\nabla}_x^2\right)\psi_i^+ \\
 &\quad - \frac{1}{\mu_i}\cancel{\vec{\nabla}_{r_i}\varphi_i\cdot\vec{\nabla}_{r_i}\psi_i^+}^0 - \frac{1}{b}\vec{\nabla}_x\varphi_i\cdot\vec{\nabla}_x\psi_i^+ \\
 &= \psi_i^+\left(-\frac{1}{2b}\vec{\nabla}_x^2\right)\varphi_i + \varphi_i H_0\psi_i^+ - \frac{1}{b}\vec{\nabla}_x\varphi_i\cdot\vec{\nabla}_x\psi_i^+, \tag{2.220}
 \end{aligned}$$

при чему смо искористили чињеницу да таласна функција $\varphi_i \equiv \varphi_i(\vec{x})$ не зависи од вектора положаја \vec{r}_i .

Уколико сада заменимо израз (2.220) у израз (2.216), уз коришћење израза (2.32), добијамо:

$$\begin{aligned}
 (E - H_i - W_i)(\varphi_i\psi_i^+) &= \varphi_i(E - E_i - H_0 - V_i)\psi_i^+ + \frac{1}{b}\vec{\nabla}_x\varphi_i\cdot\vec{\nabla}_x\psi_i^+ + U_i(\varphi_i\psi_i^+) \\
 &\quad + \psi_i^+(E_i - h_i)\varphi_i = 0. \tag{2.221}
 \end{aligned}$$

На основу Шредингерове једначине (2.31), закључујемо да је задњи члан у изразу (2.221) идентички једнак нули, тако да следи да је:

$$\begin{aligned}
 (E - H_i - W_i)(\varphi_i\psi_i^+) &= \varphi_i(E - E_i - H_0 - V_i)\psi_i^+ + \frac{1}{b}\vec{\nabla}_x\varphi_i\cdot\vec{\nabla}_x\psi_i^+ \\
 &\quad + U_i(\varphi_i\psi_i^+) = 0. \tag{2.222}
 \end{aligned}$$

Сада смо у могућности да вршимо избор дисторзионих потенцијала. Најједноставнији избор био би:

$$U_i(\varphi_i\psi_i^+) \equiv U_i\chi_i^+ = -\frac{1}{b}\vec{\nabla}_x\varphi_i\cdot\vec{\nabla}_x\psi_i^+, \tag{2.223}$$

с обзиром на то да овај дисторзиони потенцијал своди једначину (2.222) на:

$$(E - H_i - W_i)(\varphi_i\psi_i^+) = \varphi_i(E - E_i - H_0 - V_i)\psi_i^+ = 0. \tag{2.224}$$

Одавде је:

$$(E - E_i - H_0 - V_i)\psi_i^+ = 0. \tag{2.225}$$

Уз употребу еиконалне апроксимације $\vec{r}_f \approx -\vec{R}$, једначина (2.225) се може екзактно решити (за детаље видети Прилог В), тако да се за функцију ψ_i^+ добија:

$$\begin{aligned} \psi_i^+ &= \mu_i^{-i\nu_P} \mathcal{N}^+(\nu) N^+(\nu_P) e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_i} {}_1F_1(-i\nu, 1, ik_i r_i - i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_i) \\ &\times {}_1F_1(i\nu_P, 1, i\nu s + i\vec{v} \cdot \vec{s}). \end{aligned} \quad (2.226)$$

односно за целокупан изобличени талас χ_i^+ :

$$\begin{aligned} \chi_i^+ &= \varphi_i(\vec{x}) \mu_i^{-i\nu_P} \mathcal{N}^+(\nu) N^+(\nu_P) e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_i} {}_1F_1(-i\nu, 1, ik_i r_i - i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_i) \\ &\times {}_1F_1(i\nu_P, 1, i\nu s + i\vec{v} \cdot \vec{s}). \end{aligned} \quad (2.227)$$

Величине ν и ν_P дате су следећим изразима:

$$\nu = \frac{Z_P Z_T}{v}, \quad \nu_P = \frac{Z_P}{v}. \quad (2.228)$$

С обзиром на то да, као што ће даље у тексту бити приказано, ефикасни пресеци зависе од квадрата модула амплитуде прелаза, јасно је да фактор $\mu_i^{-i\nu_P}$ неће утицати на ефикасне пресеке, те се у том контексту може изоставити и из самих израза за таласне функције. Такође, за потребе израчунавања амплитуде прелаза, „остатак“ Кулоновог таласа⁷ који описује интеракцију пројектила са језгром мете $\mathcal{N}^+(\nu) {}_1F_1(-i\nu, 1, ik_i r_i - i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_i)$ написаћемо у асимптотском облику (видети Прилог Б). Тада израз за изобличени талас χ_i^+ добија коначан облик:

$$\chi_i^+ = \varphi_i(\vec{x}) N^+(\nu_P) e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_i + i\nu \ln(k_i r_i - \vec{k}_i \cdot \vec{r}_i)} {}_1F_1(i\nu_P, 1, i\nu s + i\vec{v} \cdot \vec{s}). \quad (2.229)$$

Преостали остатак Кулоновог таласа $N^+(\nu_P) {}_1F_1(i\nu_P, 1, i\nu s + i\vec{v} \cdot \vec{s})$ потиче од интеракције електрона са језгром пројектила. Често се стога каже да је то *електронски Кулонов талас центриран на језгру пројектила*.

Излазни канал

У случају излазног канала, процедура је у великој мери аналогна случају улазног канала, изузев што овде, по једначини за амплитуду прелаза (2.210), морамо најпре да искористимо помоћни потенцијал V_x и нађемо помоћни изобличени талас ξ_f^- , да бисмо избегли појављивање неповезаних дијаграма. На

⁷Термин „остатак“ односи се на то да разматрамо само део датог Кулоновог таласа.

основу релација (2.214) и (2.212), уз $\epsilon \rightarrow 0^+$, добијамо:

$$(E - H + V_x)\xi_f^- = (E - H + V_f - W_f + V_x)\chi_f^- = (E - H_f - W_f + V_x)\chi_f^-, \quad (2.230)$$

при чему смо искористили релацију (2.50). Једначина (2.230) се, на основу једначине (2.188), редукује на:

$$(E - H + V_x)\xi_f^- = V_x\chi_f^-. \quad (2.231)$$

Ако сада помоћни потенцијал V_x одаберемо тако да важи:

$$V_x\chi_f^- = 0, \quad (2.232)$$

једначина (2.231) добиће облик:

$$(E - H + V_x)\xi_f^- = 0, \quad (2.233)$$

тако да постаје аналитички решива.

На основу коректног асимптотског понашања (2.68) таласне функције у излазном каналу, закључујемо да изобличени талас ξ_f^- можемо записати у сепарабилном облику:

$$\xi_f^- = \varphi_f(\vec{s})\psi_f^-, \quad (2.234)$$

одакле заменом у једначину (2.233) добијамо:

$$(E - H + V_x)(\varphi_f\psi_f^-) = (E - H_0 - V_P - V_f + V_x)(\varphi_f\psi_f^-) = 0, \quad (2.235)$$

где је $V_P = -Z_P/s$. Једначина (2.235) решава се аналогно случају улазног канала, тако да се добија:

$$\begin{aligned} (E - H + V_x)(\varphi_f\psi_f^-) &= \varphi_f(E - E_f - H_0 - V_f)\psi_f^- + \frac{1}{a}\vec{\nabla}_s\varphi_f \cdot \vec{\nabla}_s\psi_f^- + V_x(\varphi_f\psi_f^-) \\ &+ \psi_f^-(E_f - \hbar_f)\varphi_f = 0, \end{aligned} \quad (2.236)$$

што даје:

$$\begin{aligned} (E - H + V_x)(\varphi_f\psi_f^-) &= \varphi_f(E - E_f - H_0 - V_f)\psi_f^- + \frac{1}{a}\vec{\nabla}_s\varphi_f \cdot \vec{\nabla}_s\psi_f^- \\ &+ V_x(\varphi_f\psi_f^-) = 0. \end{aligned} \quad (2.237)$$

Уколико потенцијал V_x одаберемо на следећи начин:

$$V_x(\varphi_f \psi_f^-) = -\frac{1}{a} \vec{\nabla}_s \varphi_f \cdot \vec{\nabla}_s \psi_f^-, \quad (2.238)$$

једначина (2.237) своди се на једначину:

$$(E - E_f - H_0 - V_f) \psi_f^- = 0, \quad (2.239)$$

која је, као и претходне једначине, аналитички решива уз употребу еиконалне апроксимације $\vec{r}_i \approx \vec{R}$.

На основу Прилога В, за функцију ψ_f^- се добија:

$$\begin{aligned} \psi_f^- &= \mu_f^{i\nu_T} \mathcal{N}^-(\nu) N^-(\nu_T) e^{-i\vec{k}_f \cdot \vec{r}_f} {}_1F_1(i\nu, 1, -ik_f r_f + i\vec{k}_f \cdot \vec{r}_f) \\ &\times {}_1F_1(-i\nu_T, 1, -i\nu x - i\vec{v} \cdot \vec{x}), \end{aligned} \quad (2.240)$$

односно за изобличени талас ξ_f^- :

$$\begin{aligned} \xi_f^- &= \varphi_f(\vec{s}) \mu_f^{i\nu_T} \mathcal{N}^-(\nu) N^-(\nu_T) e^{-i\vec{k}_f \cdot \vec{r}_f} {}_1F_1(i\nu, 1, -ik_f r_f + i\vec{k}_f \cdot \vec{r}_f) \\ &\times {}_1F_1(-i\nu_T, 1, -i\nu x - i\vec{v} \cdot \vec{x}), \end{aligned} \quad (2.241)$$

где је:

$$\nu_T = \frac{Z_T}{v}. \quad (2.242)$$

На основу таласне функције (2.241), процес електронског захвата се интерпретира као двостепени механизам, и то на следећи начин: најпре се врши јонизација мете, при чему електрон напушта мету и бива описан електронским Кулоновим таласом центрираним на језгру мете. Након тога, пројектил врши захват електрона из овог интермедијарног стања. Овај процес се назива *захват из континуума*, а интермедијарно стање електрона назива се *континуумско јонизационо стање*, или *континуумско интермедијарно стање*. Управо по овим стањима је метод који је главна тема ове дисертације и добио своје име.

Вратимо се сада на разматрање изобличеног таласа датог изразом (2.241). Као и у случају улазног канала, фактор $\mu_f^{i\nu_T}$ не утиче на ефикасне пресеке, те ће бити изостављен. Такође, остатак Кулоновог таласа који описује интеракцију језгра пројектила са метом $\mathcal{N}^-(\nu) {}_1F_1(i\nu, 1, -ik_f r_f + i\vec{k}_f \cdot \vec{r}_f)$ ће и овде бити узет у свом асимптотском облику (видети Прилог Б). Када се све ово узме у обзир, за

изобличени талас ξ_f^- коначно добијамо:

$$\xi_f^- = \varphi_f(\vec{s}) N^-(\nu_T) e^{-i\vec{k}_f \cdot \vec{r}_f - i\nu \ln(k_f r_f - \vec{k}_f \cdot \vec{r}_f)} {}_1F_1(-i\nu_T, 1, -i\nu x - i\vec{v} \cdot \vec{x}). \quad (2.243)$$

Остатак Кулоновог таласа $N^-(\nu_T) {}_1F_1(-i\nu_T, 1, -i\nu x - i\vec{v} \cdot \vec{x})$ потиче од интеракције електрона са језгром мете и због тога се назива *електронски Кулонов талас центриран на језгру мете*.

Конкретна примена *метода са континуумским изобличеним таласима* (на енглеском *continuum distorted-wave method*, скраћено CDW) за електронски захват из водонику сличних мета подразумевала би замену израза (2.229) и (2.243) за таласне функције χ_i^+ и ξ_f^- у израз за приор формулу⁸ амплитуде прелаза (2.210). Тиме бисмо добили њену трочестичну формулацију (CDW-3B) [4, 5]. Нагласимо још једном да CDW-3B метод, као и CB1-3B, задовољава коректне граничне услове у оба канала.

Напоменимо још и да се CDW метод, упркос томе што (као и CB1 метод) подразумева укључивање само првог члана у развоју одговарајуће егзактне амплитуде прелаза, ипак сматра методом *другог реда*. Ово је стога што CDW метод укључује постојање интермедијарних јонизационих стања, за разлику од CB1 апроксимације (која је метод првог реда). Ово разматрање наравно важи и у четворочестичном случају.

2.3.2 Четворочестични проблеми

У овом одељку ће, у случају четворочестичних проблема, бити изведени изрази за изобличене таласе, како за иницијално, тако и за финално стање. Први корак је захтев да изобличени таласи задовољавају коректне граничне услове (2.189) и (2.190), са таласним функцијама Φ_i^+ и Φ_f^- датим изразима (2.115) и (2.142). Процедура је у великој мери аналогна трочестичном случају.

Улазни канал

Како иницијално стање има асимптотско понашање дато изразом (2.115), закључујемо да изобличени талас χ_i^+ треба бити представљен у виду производа:

$$\chi_i^+ = \varphi_i(\vec{x}_1, \vec{x}_2) \psi_i^+, \quad (2.244)$$

где је ψ_i^+ непозната функција коју треба одредити.

⁸Процедура са пост формом била би потпуно аналогна оној приказаној за приор формулу.

Заменом једначине (2.244) у једначину (2.187), уз приступ потпуно аналоган случају трочестичних проблема, добијамо:

$$(E - H_i - W_i)(\varphi_i \psi_i^+) = \varphi_i(E - E_i - H_0 - V_i)\psi_i^+ + \frac{1}{b} \sum_{k=1}^2 \vec{\nabla}_{x_k} \varphi_i \cdot \vec{\nabla}_{x_k} \psi_i^+ + U_i(\varphi_i \psi_i^+) + \psi_i^+(E_i - h_i)\varphi_i = 0, \quad (2.245)$$

при чему треба водити рачуна да се све величине које се јављају у изразу (2.245) сада односе на четворочестични случај.

За разлику од трочестичног случаја, код четворочестичног се јавља нетривијална ситуација са последњим чланом у изразу (2.245). Код трочестичног случаја су својствене вредности енергије, као и својствене таласне функције водонику сличног система познате егзактно. Међутим, овде то није случај. Наиме, E_i сада представља својствене вредности енергије, док φ_i представља својствене таласне функције хелијуму сличног система, које су познате само апроксимативно. Ово значи да последњи члан у изразу (2.245) није идентички једнак нули. Међутим, у раду [39] испитиван је управо допринос овог члана. Показано је да, код СВ1-4В апроксимације, корекција износи 10 – 15%. Ову корекцију ћемо занемарити у овом раду. Дакле, сматраћемо да важи:

$$(E - H_i - W_i)(\varphi_i \psi_i^+) = \varphi_i(E - E_i - H_0 - V_i)\psi_i^+ + \frac{1}{b} \sum_{k=1}^2 \vec{\nabla}_{x_k} \varphi_i \cdot \vec{\nabla}_{x_k} \psi_i^+ + U_i(\varphi_i \psi_i^+) = 0. \quad (2.246)$$

Најједноставнији избор потенцијала U_i био би онај начињен у радовима [128, 129]:

$$U_i \chi_i^+ = -\frac{1}{b} \sum_{k=1}^2 \vec{\nabla}_{x_k} \varphi_i \cdot \vec{\nabla}_{x_k} \psi_i^+. \quad (2.247)$$

Овим се једначина (2.246) своди на:

$$(E - E_i - H_0 - V_i)\psi_i^+ = 0, \quad (2.248)$$

која се, уз употребу еиконалне апроксимације $\vec{r}_f \approx -\vec{R}$, може егзактно решити (за детаље видети Прилог В, односно референцу [93]), тако да се за функцију

ψ_i^+ добија:

$$\begin{aligned} \psi_i^+ &= \mu_i^{-2i\nu_P} \mathcal{N}^+(\nu) [N^+(\nu_P)]^2 e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_i} {}_1F_1(-i\nu, 1, ik_i r_i - i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_i) \\ &\times {}_1F_1(i\nu_P, 1, i\nu s_1 + i\vec{v} \cdot \vec{s}_1) {}_1F_1(i\nu_P, 1, i\nu s_2 + i\vec{v} \cdot \vec{s}_2), \end{aligned} \quad (2.249)$$

односно за целокупан изобличени талас χ_i^+ :

$$\begin{aligned} \chi_i^+ &= \varphi_i(\vec{x}_1, \vec{x}_2) \mu_i^{-2i\nu_P} \mathcal{N}^+(\nu) [N^+(\nu_P)]^2 e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_i} {}_1F_1(-i\nu, 1, ik_i r_i - i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_i) \\ &\times {}_1F_1(i\nu_P, 1, i\nu s_1 + i\vec{v} \cdot \vec{s}_1) {}_1F_1(i\nu_P, 1, i\nu s_2 + i\vec{v} \cdot \vec{s}_2). \end{aligned} \quad (2.250)$$

Водити рачуна да μ_i сада одговара четворочестичном случају и дато је изразом (2.94). Величине ν и ν_P дате су следећим изразима:

$$\nu = \frac{Z_P Z_T}{v}, \quad \nu_P = \frac{Z_P}{v}. \quad (2.251)$$

Фактор $\mu_i^{-2i\nu_P}$ не утиче на ефикасне пресеке, те ће бити изостављен. Остатак Кулоновог таласа који описује интеракцију пројектила и језгра мете, тј. члан $\mathcal{N}^+(\nu) {}_1F_1(-i\nu, 1, ik_i r_i - i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_i)$, узећемо у асимптотском облику (видети Прилог Б). Тада за изобличени талас χ_i^+ коначно добијамо:

$$\begin{aligned} \chi_i^+ &= \varphi_i(\vec{x}_1, \vec{x}_2) [N^+(\nu_P)]^2 e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_i + i\nu \ln(k_i r_i - \vec{k}_i \cdot \vec{r}_i)} {}_1F_1(i\nu_P, 1, i\nu s_1 + i\vec{v} \cdot \vec{s}_1) \\ &\times {}_1F_1(i\nu_P, 1, i\nu s_2 + i\vec{v} \cdot \vec{s}_2). \end{aligned} \quad (2.252)$$

Приметимо међутим да у изразу (2.252) сада фигуришу два остатка Кулонових таласа $N^+(\nu_P) {}_1F_1(i\nu_P, 1, i\nu s_1 + i\vec{v} \cdot \vec{s}_1)$ и $N^+(\nu_P) {}_1F_1(i\nu_P, 1, i\nu s_2 + i\vec{v} \cdot \vec{s}_2)$, који описују интеракцију електрона e_1 и e_2 са пројектилом, респективно. Ово је природно, с обзиром на то да код четворочестичних проблема постоје два електрона. Међутим, две Кумерове конфлуентне хипергеометријске функције могу представљати потешкоћу при израчунавању амплитуде прелаза. Стога се понекад врши другачији избор дисторзионог потенцијала U_i , нпр. као онај начињен у радовима [130, 131]:

$$U_i \chi_i^+ = -\frac{1}{b} \sum_{k=1}^2 \vec{\nabla}_{x_k} \varphi_i \cdot \vec{\nabla}_{x_k} \psi_i^+ + Z_P \left(\frac{1}{R} - \frac{1}{s_2} \right) \chi_i^+. \quad (2.253)$$

Оваквим избором дисторзионог потенцијала добија се следећи израз за изобличени талас у улазном каналу⁹:

$$\begin{aligned} \chi_i^+ &= \varphi_i(\vec{x}_1, \vec{x}_2) \mu_i^{i\nu_P} \mathcal{N}^+(\nu') N^+(\nu_P) e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_i} {}_1F_1(-i\nu', 1, ik_i r_i - i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_i) \\ &\times {}_1F_1(i\nu_P, 1, i\nu s_1 + i\vec{v} \cdot \vec{s}_1), \end{aligned} \quad (2.254)$$

где је:

$$\nu' = \frac{Z_P(Z_T - 1)}{v}. \quad (2.255)$$

Сада $\mathcal{N}^+(\nu') {}_1F_1(-i\nu', 1, ik_i r_i - i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_i)$ представља остатак Кулоновог таласа који описује интеракцију између пројектила и језгра мете екраниране само једним електроном e_2 , док остатак Кулоновог таласа $N^+(\nu_P) {}_1F_1(i\nu_P, 1, i\nu s_1 + i\vec{v} \cdot \vec{s}_1)$ описује интеракцију пројектила са преосталим електроном e_1 . Коначно, уз разматрање идентично свођењу изобличеног таласа (2.250) на облик (2.252), у овом случају добијамо:

$$\chi_i^+ = \varphi_i(\vec{x}_1, \vec{x}_2) N^+(\nu_P) e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_i + i\nu' \ln(k_i r_i - \vec{k}_i \cdot \vec{r}_i)} {}_1F_1(i\nu_P, 1, i\nu s_1 + i\vec{v} \cdot \vec{s}_1). \quad (2.256)$$

Као што можемо закључити из израза (2.250) и (2.252) са једне стране, и израза (2.254) и (2.256) са друге, предност избора дисторзионог потенцијала (2.253) над потенцијалом (2.247) је у томе што се у изразима (2.250) и (2.252) појављују два остатка, а у изразима (2.254) и (2.256) један остатак електронског Кулоновог таласа (а самим тим и Кумерове конфлуентне хипергеометријске функције). Ово може представљати изузетно олакшавајућу околност при рачунању амплитуде прелаза.

Излазни канал

Ситуација је у случају излазног канала код четворочестичних проблема у великој мери аналогна оној код трочестичних, мада наравно постоје разлике. Помоћни дисторзиони талас ξ_f^- је, с обзиром на то да након једноструког електронског захвата сада имамо два водонику слична система (пројектил $(Z_P; e_1)$ и мету $(Z_T; e_2)$), дат изразом:

$$\xi_f^- = \varphi_P(\vec{s}_1) \varphi_T(\vec{x}_2) \psi_f^-. \quad (2.257)$$

⁹Процедура је у великој мери аналогна случају са дисторзионим потенцијалом (2.247) приказаним у Прилогу В.

На начин потпуно аналоган оном у претходним разматрањима, заменом израза (2.257) у израз (2.233), који важи и у случају четворочестичних проблема, добијамо:

$$\begin{aligned}
 (E - H + V_x)(\varphi_P \varphi_T \psi_f^-) &= (\varphi_P \varphi_T)(E - E_f - H_0 - V_f)\psi_f^- \\
 &+ \frac{1}{a}\varphi_T \vec{\nabla}_{s_1} \varphi_P \cdot \vec{\nabla}_{s_1} \psi_f^- + \frac{1}{b}\varphi_P \vec{\nabla}_{x_2} \varphi_T \cdot \vec{\nabla}_{x_2} \psi_f^- + V_x(\varphi_P \varphi_T \psi_f^-) \\
 &+ \varphi_T \psi_f^-(E_{f_1} - h_P)\varphi_P + \varphi_P \psi_f^-(E_{f_2} - h_T)\varphi_T = 0, \quad (2.258)
 \end{aligned}$$

при чему су искоришћени изрази (2.83), (2.85), (2.119), (2.121)-(2.123), (2.127)-(2.130) и (2.132). Последња два сабирка у изразу (2.258) су, с обзиром на то да садрже својствене проблеме водонику сличних система (који су егзактно решиви), идентички једнаки нули, те добијамо:

$$\begin{aligned}
 (E - H + V_x)(\varphi_P \varphi_T \psi_f^-) &= (\varphi_P \varphi_T)(E - E_f - H_0 - V_f)\psi_f^- + V_x(\varphi_P \varphi_T \psi_f^-) \\
 &+ \frac{1}{a}\varphi_T \vec{\nabla}_{s_1} \varphi_P \cdot \vec{\nabla}_{s_1} \psi_f^- + \frac{1}{b}\varphi_P \vec{\nabla}_{x_2} \varphi_T \cdot \vec{\nabla}_{x_2} \psi_f^- = 0. \quad (2.259)
 \end{aligned}$$

На основу искуства са улазним каналом у четворочестичном случају, потенцијал V_x ћемо одмах одабрати тако да решење садржи само два остатка Кулонових таласа, односно само две Кумерове конфлуентне хипергеометријске функције, и то на следећи начин:

$$\begin{aligned}
 V_x(\varphi_P \varphi_T \psi_f^-) &= -\frac{1}{a}\varphi_T \vec{\nabla}_{s_1} \varphi_P \cdot \vec{\nabla}_{s_1} \psi_f^- - \frac{1}{b}\varphi_P \vec{\nabla}_{x_2} \varphi_T \cdot \vec{\nabla}_{x_2} \psi_f^- \\
 &+ \left[Z_P \left(\frac{1}{R} - \frac{1}{s_2} \right) - \frac{1}{x_1} + \frac{1}{r_{12}} \right] (\varphi_P \varphi_T \psi_f^-). \quad (2.260)
 \end{aligned}$$

Приметимо да потенцијал (2.260) садржи и члан $1/r_{12}$, који служи да елиминише овај сабирак из потенцијала V_f . Једначина (2.259) сада се своди на:

$$\left(E - E_f - H_0 - \frac{Z_P(Z_T - 1)}{R} + \frac{Z_T - 1}{x_1} \right) \psi_f^- = 0, \quad (2.261)$$

која је, уз употребу еиконалне апроксимације $\vec{r}_i \approx \vec{R}$, аналитички решива. За функцију ψ_f^- се добија (за детаље видети Прилог В):

$$\begin{aligned}
 \psi_f^- &= \mu_f^{i\nu_T} \mathcal{N}^-(\nu) N^-(\nu_T) e^{-i\vec{k}_f \cdot \vec{r}_f} {}_1F_1(i\nu, 1, -ik_f r_f + i\vec{k}_f \cdot \vec{r}_f) \\
 &\times {}_1F_1(-i\nu_T, 1, -i\nu x_1 - i\vec{v} \cdot \vec{x}_1), \quad (2.262)
 \end{aligned}$$

односно за целокупан изобличени талас ξ_f^- :

$$\begin{aligned} \xi_f^- &= \varphi_P(\vec{s}_1)\varphi_T(\vec{x}_2)\mu_f^{i\nu_T}\mathcal{N}^-(\nu)N^-(\nu_T)e^{-i\vec{k}_f\cdot\vec{r}_f}{}_1F_1(i\nu, 1, -ik_f r_f + i\vec{k}_f \cdot \vec{r}_f) \\ &\times {}_1F_1(-i\nu_T, 1, -i\nu x_1 - i\vec{v} \cdot \vec{x}_1), \end{aligned} \quad (2.263)$$

при чему је μ_f дато изразом (2.120), док су:

$$\nu = \frac{Z_P(Z_T - 1)}{v}, \quad \nu_T = \frac{Z_T - 1}{v}. \quad (2.264)$$

Сада остатак Кулоновог таласа $\mathcal{N}^-(\nu){}_1F_1(i\nu, 1, -ik_f r_f + i\vec{k}_f \cdot \vec{r}_f)$ описује интеракцију између језгра пројектила и екранираног језгра мете ($Z_T; e_2$), док остатак Кулоновог таласа $N^-(\nu_T){}_1F_1(-i\nu_T, 1, -i\nu x_1 - i\vec{v} \cdot \vec{x}_1)$ описује интеракцију између електрона e_1 и екранираног језгра мете. Аналогно трочестичном случају, процес једноструког електронског захвата сада интерпретирамо као двостепени механизам: најпре се врши једнострука јонизација мете, при чему електрон e_1 постаје слободан (описан Кулоновим таласом центрираним на екранираном језгру мете ($Z_T; e_2$)), а затим пројектил врши захват електрона e_1 из овог континуумског интермедијарног стања.

Као и у претходним случајевима, изостављањем фактора $\mu_f^{i\nu_T}$, као и записивањем остатка Кулоновог таласа $\mathcal{N}^-(\nu){}_1F_1(i\nu, 1, -ik_f r_f + i\vec{k}_f \cdot \vec{r}_f)$ у асимптотском облику (на основу Прилога Б), изобличени талас можемо редуковати на коначан облик:

$$\xi_f^- = \varphi_P(\vec{s}_1)\varphi_T(\vec{x}_2)N^-(\nu_T)e^{-i\vec{k}_f\cdot\vec{r}_f - i\nu \ln(k_f r_f - \vec{k}_f \cdot \vec{r}_f)}{}_1F_1(-i\nu_T, 1, -i\nu x_1 - i\vec{v} \cdot \vec{x}_1). \quad (2.265)$$

Израчунавање амплитуде прелаза помоћу таласне функције (2.265) је олакшано, с обзиром на то да она садржи само једну Кумерову конфлуентну хипергеометријску функцију.

Конкретна примена CDW апроксимације на једноструки електронски захват из хелијуму сличних мета би подразумевала замену нпр. израза (2.256) и (2.265) за таласне функције χ_i^+ и ξ_f^- у израз за приор форму¹⁰ амплитуде прелаза (2.210). Тиме бисмо добили њену четворочестичну формулацију (CDW-4В). Нагласимо још једном да CDW-4В метод, као и СВ1-4В, задовољава коректне граничне услове у оба канала.

¹⁰Процедура са пост формом била би потпуно аналогна оној приказаној за приор форму.

2.4 Гранично коректан метод са континуумским интермедијарним стањима

Сада поседујемо све што нам је неопходно да бисмо формулисали и саму гранично коректну апроксимацију са континуумским интермедијарним стањима (BCIS), која је и главна тема ове дисертације.

BCIS метод спада у класу метода другог реда, као и CDW апроксимација, на основу идентичног критеријума - јер укључује интермедијарна јонизациона стања. Међутим, за разлику од CDW метода, који укључује интермедијарна јонизациона стања и у улазном и у излазном каналу, BCIS их укључује само у једном од ова два канала. Услед овога, за CDW метод се често каже да је *двоцентричан*, с обзиром на то да се у изразу за амплитуду прелаза јављају електронски Кулонови таласи (у овом случају) центрирани и на (екранираном) језгру мете и на језгру пројектила. BCIS метод је, с друге стране, у том погледу *једноцентричан*, с обзиром на то да се у изразу за амплитуду прелаза јављају електронски Кулонови таласи центрирани само на једном од ова два језгра (екранираном, када се ради о мети). Уколико су интермедијарна јонизациона стања укључена у улазном каналу, ради се о пост верзији, а уколико су укључена у излазном каналу, ради се о приор верзији BCIS метода. У овом погледу, BCIS је заправо *хибридан* метод, с обзиром на то да подразумева комбинацију CB1 и CDW апроксимације. Стога ћемо, пре него што запишемо изразе за матричне елементе амплитуде прелаза у BCIS апроксимацији, најпре рекапитулирати како они изгледају у CB1 и CDW апроксимацији. Ови изрази су већ изведени у претходном разматрању, али их овде поново наводимо на једном месту ради прегледности.

Са једне стране, у CB1 апроксимацији, пост T_{if}^{CB1+} и приор форма T_{if}^{CB1-} амплитуде прелаза су, респективно, дате следећим изразима:

$$T_{if}^{CB1+} = \langle \Phi_f^- | V_f^c | \Phi_i^+ \rangle, \quad (2.266)$$

$$T_{if}^{CB1-} = \langle \Phi_f^- | V_i^c | \Phi_i^+ \rangle, \quad (2.267)$$

где таласне функције $\Phi_{i,f}^\pm$ представљају производ таласних функција $\Phi_{i,f}$ и логаритамских дисторзионих фактора (у експоненцијалним функцијама). Таласне функције $\Phi_{i,f}$ представљају производ везаних стања $\varphi_{i,f}$ и одговарајућих равних таласа, који описују кретање пројектила/мете, док логаритамски дисторзиони фактори потичу од тога што су непертурбована стања $\Phi_{i,f}^\pm$ изобличена чак и у

бесконачности. Потенцијали $V_{i,f}^c$ представљају коректно одабране пертурбације у улазном и излазном каналу, које ишчежавају у бесконачности (краткодометни потенцијали).

Са друге стране, у CDW апроксимацији, пост T_{if}^{CDW+} и приор форма T_{if}^{CDW-} амплитуде прелаза су, респективно, дате следећим изразима¹¹:

$$T_{if}^{CDW+} = \langle \chi_f^- | (V_f - W_f^\dagger) | \chi_i^+ \rangle, \quad (2.268)$$

$$T_{if}^{CDW-} = \langle \chi_f^- | (V_i - W_i) | \chi_i^+ \rangle, \quad (2.269)$$

где таласне функције $\chi_{i,f}^\pm$ представљају производе везаних стања $\varphi_{i,f}$ и два Кулонова таласа, од којих један потиче од интернуклеарне (пројектил-мета¹²) интеракције, а други од интеракције електрона са пројектилом/метом¹³. Потенцијали $V_{i,f}$ представљају пертурбације у улазном и излазном каналу (које не ишчежавају у бесконачности, тј. ради се о дугодометним потенцијалима), док су $W_{i,f}$ дисторзиони потенцијали.

Коначно долазимо до израза за пост T_{if}^{BCIS+} и приор форму T_{if}^{BCIS-} амплитуде прелаза у BCIS апроксимацији:

$$T_{if}^{BCIS+} = \langle \Phi_f^- | V_f^c | \chi_i^+ \rangle, \quad (2.270)$$

$$T_{if}^{BCIS-} = \langle \chi_f^- | V_i^c | \Phi_i^+ \rangle. \quad (2.271)$$

Као што можемо видети из израза (2.270), пост форма BCIS апроксимације користи пертурбацију и финално стање из излазног канала CB1 апроксимације, док у улазном каналу користи иницијално стање из CDW апроксимације. На супрот томе, приор форма BCIS апроксимације користи пертурбацију и иницијално стање из улазног канала CB1 апроксимације, док у излазном каналу користи финално стање из CDW апроксимације.

Конкретни изрази за матричне елементе амплитуде прелаза у пост (2.270) и приор форми (2.271) у BCIS апроксимацији зависе од проблема од интереса. У фокусу ове дисертације је примена приор форме BCIS метода на једноструки електронски захват у трочестичним (са водонику сличним метама) и четворочестичним (са хелијуму сличним метама) сударима. Стога, у наставку ће бити дати експлицитни изрази за матричне елементе амплитуде прелаза у BCIS-3В и BCIS-4В формулацији.

¹¹Ради униформног означавања, извршена је редефиниција помоћних таласних функција $\xi_{i,f}^\pm \rightarrow \chi_{i,f}^\pm$.

¹²Од којих једно језгро може бити екранирано.

¹³Исто језгро би и овде било екранирано.

2.4.1 Трочестични проблеми

У BCIS-3В апроксимацији, неопходно је да у израз за амплитуду прелаза (2.271) заменимо експлицитне изразе за таласне функције Φ_i^+ и χ_f^- , као и за потенцијал V_i^c у трочестичном случају. Коришћењем израза (2.40), (2.45) и (2.243), за амплитуду прелаза добијамо следећи израз:

$$\begin{aligned} T_{if}^{BCIS-} &= N^+(\nu_T) \int \int d\vec{R} d\vec{s} \varphi_f^*(\vec{s}) \left(\frac{Z_P}{R} - \frac{Z_P}{s} \right) \varphi_i(\vec{x}) \\ &\times e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_i + i\vec{k}_f \cdot \vec{r}_f} {}_1F_1(i\nu_T, 1, i\nu x + i\vec{v} \cdot \vec{x}) \mathcal{L}(R), \end{aligned} \quad (2.272)$$

где је функција $\mathcal{L}(R)$ дата следећим еквивалентним изразима:

$$\mathcal{L}(R) = (\rho v)^{2i \frac{Z_P Z_T}{v}} (vR - \vec{v} \cdot \vec{R})^{-i \frac{Z_P}{v}} = (\rho v)^{2i \frac{Z_P(Z_T-1)}{v}} (vR + \vec{v} \cdot \vec{R})^{i \frac{Z_P}{v}}, \quad (2.273)$$

при чему смо вектор \vec{R} записали на следећи начин:

$$\vec{R} = \vec{Z} + \vec{\rho}, \quad (2.274)$$

где је \vec{Z} компонента вектора \vec{R} у смеру брзине \vec{v} , а $\vec{\rho}$ компонента нормална на вектор \vec{Z} :

$$\vec{Z} = Z \hat{v}, \quad \vec{\rho} \cdot \vec{v} = 0. \quad (2.275)$$

У раду [5] показано је да фактори $(\rho v)^{2i \frac{Z_P Z_T}{v}}$, односно $(\rho v)^{2i \frac{Z_P(Z_T-1)}{v}}$ не утичу на вредности тоталног ефикасног пресека, те ће у даљем разматрању они бити изостављени. Управо овде увиђамо могућност једноставне примене програма за рачунање тоталних ефикасних пресека и на израчунавање диференцијалних ефикасних пресека, уз једноставне модификације. Наиме, у општем случају, фактор $(\rho v)^{2i \frac{Z_P Z_T}{v}}$, односно $(\rho v)^{2i \frac{Z_P(Z_T-1)}{v}}$ утиче на вредности диференцијалних ефикасних пресека. Међутим, у случају водоничне мете $Z_T = 1$, други од ових фактора постаје идентички једнак јединици и ишчезава из израза за диференцијални ефикасни пресек. Тада диференцијални ефикасни пресеци постају директно пропорционални квадрату модула амплитуде прелаза. Ова могућност је у овом раду искоришћена, те су израчунати и диференцијални ефикасни пресеци за случај водоничне мете (и H^+ јона као пројектила). Напоменимо да исту предност међу методима првог реда нуди и СВ1-3В апроксимација, али да код CDW-3В апроксимације, метода другог реда, сличан члан који се јавља није идентички

једнак јединици ни за један пар пројектила и мета [5]. Тада је неопходно вршити додатну интеграцију високо осцилаторног Фурије-Беселовог интеграла у границама $\rho \in [0, \infty]$, што представља нумерички веома захтеван проблем.

Стога, узимајући други облик функције $\mathcal{L}(R)$ из израза (2.273), с обзиром на то да нам тај облик нуди могућност израчунавања и диференцијалних ефикасних пресека за $Z_T = 1$, израз за амплитуду прелаза (2.272) добија облик:

$$T_{if}^{BCIS-} = Z_P N^+(\nu_T) \int \int d\vec{R} d\vec{s} \varphi_f^*(\vec{s}) \left(\frac{1}{R} - \frac{1}{s} \right) \varphi_i(\vec{x}) \times e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_i + i\vec{k}_f \cdot \vec{r}_f} {}_1F_1(i\nu_T, 1, ivx + i\vec{v} \cdot \vec{x}) (vR + \vec{v} \cdot \vec{R})^{i\xi}, \quad (2.276)$$

где је уведена ознака:

$$\xi = \frac{Z_P}{v}. \quad (2.277)$$

Израз (2.276) даје амплитуду прелаза у BCIS-3В апроксимацији у приор форми, за електронски захват из произвољног иницијалног стања мете $\varphi_i(\vec{x})$ у произвољно финално стање пројектила $\varphi_f(\vec{s})$. Аналитичко израчунавање овог израза (докле год је то изводљиво), за захват из основног стања водонику сличне мете у произвољно стање пројектила, као и за захват из К и L љуске вишеелектронских мета у основно стање пројектила, биће приказано у наредној глави.

2.4.2 Четворочестични проблеми

У BCIS-4В апроксимацији, неопходно је да у израз за амплитуду прелаза (2.271) заменимо експлицитне изразе за таласне функције Φ_i^+ и χ_f^- , као и за потенцијал V_i^c у четворочестичном случају. Коришћењем израза (2.110), (2.115) и (2.265), за амплитуду прелаза добијамо следећи израз:

$$T_{if}^{BCIS-} = N^+(\nu_T) \int \int \int d\vec{R} d\vec{s}_1 d\vec{s}_2 \varphi_P^*(\vec{s}_1) \varphi_T^*(\vec{x}_2) \left(\frac{2Z_P}{R} - \frac{Z_P}{s_1} - \frac{Z_P}{s_2} \right) \varphi_i(\vec{x}_1, \vec{x}_2) \times e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_i + i\vec{k}_f \cdot \vec{r}_f} {}_1F_1(i\nu_T, 1, ivx_1 + i\vec{v} \cdot \vec{x}_1) \mathcal{L}(R), \quad (2.278)$$

где је функција $\mathcal{L}(R)$ дата еквивалентним изразима:

$$\mathcal{L}(R) = (\rho v)^{2i \frac{Z_P(Z_T-1)}{v}} (vR - \vec{v} \cdot \vec{R})^{-i \frac{Z_P}{v}} = (\rho v)^{2i \frac{Z_P(Z_T-2)}{v}} (vR + \vec{v} \cdot \vec{R})^{i \frac{Z_P}{v}}. \quad (2.279)$$

Видимо да у овом случају одабир првог облика функције $\mathcal{L}(R)$ из израза (2.279) нуди могућност једноставног израчунавања диференцијалних ефикасних пресека

са јоном водоника H^- као метом, а другог облика са атомским хелијумом He као метом. Међутим, како је у случају H^- мете $\nu_T = (Z_T - 1)/v \equiv 0$, Кумерова конфлуентна хипергеометријска функција ${}_1F_1(i\nu_T, 1, ivx_1 + i\vec{v} \cdot \vec{x}_1)$ тада постаје идентички једнака јединици. Стога, код H^- мете се BCIS-4В апроксимација идентички своди на СВ1-4В апроксимацију, те ова мета неће ни бити разматрана.

Стога, узимајући други облик функције $\mathcal{L}(R)$ из израза (2.279), израз за амплитуду прелаза (2.278) добија облик:

$$T_{if}^{BCIS-} = Z_P N^+(\nu_T) \int \int \int d\vec{R} d\vec{s}_1 d\vec{s}_2 \varphi_P^*(\vec{s}_1) \varphi_T^*(\vec{x}_2) \left(\frac{2}{R} - \frac{1}{s_1} - \frac{1}{s_2} \right) \varphi_i(\vec{x}_1, \vec{x}_2) \times e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_i + i\vec{k}_f \cdot \vec{r}_f} {}_1F_1(i\nu_T, 1, ivx_1 + i\vec{v} \cdot \vec{x}_1) (vR + \vec{v} \cdot \vec{R})^{i\xi}, \quad (2.280)$$

где је уведена ознака:

$$\xi = \frac{Z_P}{v}. \quad (2.281)$$

Израз (2.280) даје амплитуду прелаза у BCIS-4В апроксимацији у приор форми, за једноструки електронски захват из произвољног иницијалног стања мете, описаног функцијом $\varphi_i(\vec{x}_1, \vec{x}_2)$, у произвољно финално стање пројектила, описано функцијом $\varphi_P(\vec{s}_1)$ (при чему мета остаје у произвољном финалном стању $\varphi_T(\vec{x}_2)$). Аналитичко израчунавање овог израза (докле год је то изводљиво), за захват из основног стања хелијуму сличне мете у произвољно стање пројектила (без ексцитације преосталог електрона у мети), биће приказано у наредној глави.

Пре него што пређемо на аналитичко израчунавање амплитуде прелаза, дате шестодимензионим интегралом (2.276) у BCIS-3В, односно деветодимензионим интегралом (2.280) у BCIS-4В апроксимацији, напишимо најпре изразе за ефикасне пресеке које је потребно израчунати.

Диференцијални ефикасни пресек у јединицама a_0^2/sr дат је следећим изразом:

$$\frac{dQ}{d\Omega} \left(\frac{a_0^2}{sr} \right) = \frac{\mu^2}{4\pi^2} |T_{if}(\vec{\eta})|^2, \quad (2.282)$$

где је:

$$\mu = \frac{M_P M_T}{M_P + M_T}, \quad (2.283)$$

редукована маса система који чине језгро пројектила и језгро мете, а $\vec{\eta}$ вектор трансверзалног момента трансфера, за који важи:

$$\eta \approx 2\mu v \sin \frac{\theta}{2}, \quad (2.284)$$

где је θ угао између вектора \vec{k}_i и \vec{k}_f . Тотални ефикасни пресек у јединицама a_0^2 дат је изразом:

$$Q(a_0^2) = \frac{1}{2\pi v^2} \int_0^\infty d\eta \eta |T_{if}(\vec{\eta})|^2, \quad (2.285)$$

односно у јединицама πa_0^2 :

$$Q(\pi a_0^2) = \frac{1}{2\pi^2 v^2} \int_0^\infty d\eta \eta |T_{if}(\vec{\eta})|^2. \quad (2.286)$$

Израз за тотални ефикасни пресек (2.286) у BCIS-3В случају представља седмодимензиони, а у BCIS-4В случају десетодимензиони интеграл.

Глава 3

Аналитичко израчунавање амплитуде прелаза

У овом поглављу ће бити приказано аналитичко израчунавање амплитуде прелаза за једноструки електронски захват, у оквиру гранично коректне апроксимације (метода) са континуумским интермедијарним стањима у приор форми. Израчунавања ће бити засебно приказана за случај трочестичних проблема (са водонику сличним метама), затим за случај трочестичних проблема уз употребу Рутан-Хартри-Фоковог модела (са вишеелектронским метама, које се моделују као водонику сличне) и коначно за случај четворочестичних проблема (са хелијуму сличним метама). На крају сваког од ових потпоглавља биће приказан начин на који се врши скалирање величина у изразима за амплитуде прелаза, а које је неопходно ради нумеричке интеграције.

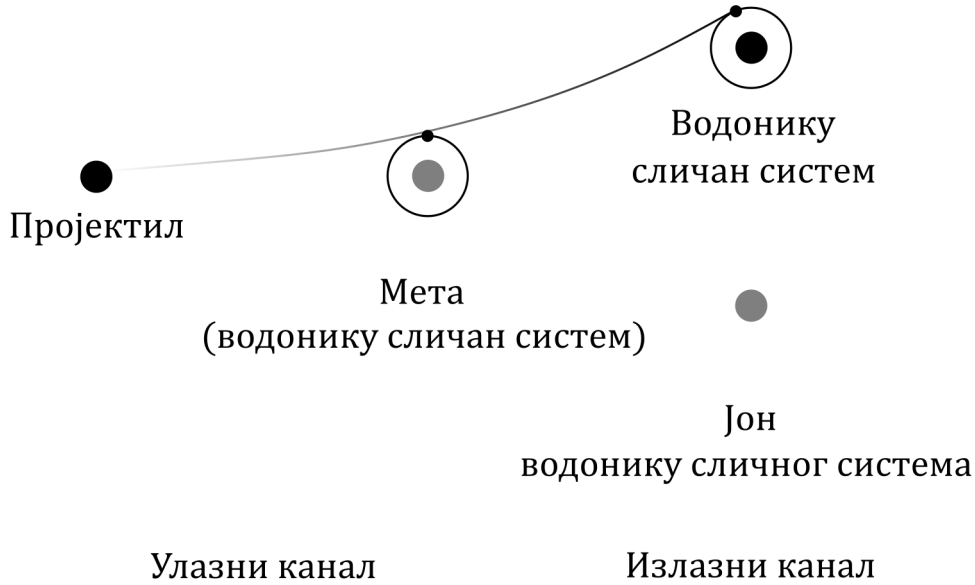
Сва три аналитичка израчунавања амплитуда прелаза садрже одређене сличности. Стога ће најпре бити детаљно изложен аналитички рачун за BCIS-3В метод примењен на водонику сличне мете. Затим ће излагања за BCIS-3В метод примењен на вишеелектронске мете, као и BCIS-4В метод бити нешто концизнија, да би се избегла понављања.

3.1 Трочестична формулација

У овом одељку размотрићемо електронски захват од стране потпуно огољених пројектила из водонику сличних мета које се налазе у основном стању, при чему се захват врши у произвољно финално стање. Овај процес је шематски приказан на слици 5 и дат следећом релацијом:

$$Z_P + (Z_T; e)_{1s} \longrightarrow (Z_P; e)_{n^f l^f m^f} + Z_T, \quad (3.1)$$

при чему је финално стање $f = n^f l^f m^f$, где $\{n^f, l^f, m^f\}$ представљају главни, орбитални и магнетни квантни број, респективно, водоничне функције новонастало водонику сличног система $(Z_P; e)_{n^f l^f m^f}$ у излазном каналу (што је и наглашено експонентом f). У улазном каналу, водонику сличан систем $(Z_T; e)_{1s}$ налази се у основном $1s$ стању.



Слика 5: Шематски приказ процеса једноструког електронског захвата у судару потпуно огољеног пројектила са водонику сличном метом.

У претходном поглављу дат је израз за приор форму амплитуде прелаза (2.276) у BCIS-3В апроксимацији, за захват из произвољног иницијалног стања мете $i = n^i l^i m^i$. Како нам је од интереса искључиво захват из основног стања, следи да је сада $i = 100 \equiv 1s$, тако да је таласна функција мете пре захвата водонична функција која одговара основном стању:

$$\varphi_i(\vec{x}) = \sqrt{\frac{Z_T^3}{\pi}} e^{-Z_T x}, \quad (3.2)$$

док иницијална везивна енергија износи $E_i = -Z_T^2/2$. С обзиром на то да је иницијално стање увек основно, ради концизности убудуће ћемо изоставити експонент f из квантних бројева финалног стања и писати $n^f l^f m^f \equiv nlm$, јер не може доћи до забуне. Финална везивна енергија је стога $E_f = -Z_P^2/2n^2$, а израз (2.276) за матричне елементе амплитуде прелаза се, уз употребу израза

(2.70) из претходне главе, као и (3.2), своди на:

$$T_{if}(\vec{\eta}) = \frac{Z_P Z_T^{3/2}}{\sqrt{\pi}} N^+(\nu_T) \int \int d\vec{R} d\vec{s} \varphi_{nlm}^*(\vec{s}) \left(\frac{1}{R} - \frac{1}{s} \right) \times e^{i\vec{\beta} \cdot \vec{R} - i\vec{v} \cdot \vec{s} - Z_T x} {}_1F_1(i\nu_T, 1, ivx + i\vec{v} \cdot \vec{x})(vR + \vec{v} \cdot \vec{R})^{i\xi}, \quad (3.3)$$

при чему је, ради концизности, ознака „BCIS–“ изостављена из експонента амплитуде прелаза.

3.1.1 Аналитичко израчунавање

Сада ћемо приступити аналитичком решавању шестоструког интеграла (3.3), докле год је то изводљиво. Израчунавање амплитуде прелаза (3.3), које је у наставку приказано, по први пут је урађено и публиковано у раду [132], који је написан у оквиру ове докторске дисертације.

Кумерову конфлуентну хипергеометријску функцију ${}_1F_1(a, c, z)$ представићемо у својој интегралној репрезентацији [133]:

$${}_1F_1(a, c, z) = \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(a)\Gamma(c-a)} \int_0^1 d\tau \tau^{a-1} (1-\tau)^{c-a-1} e^{z\tau}, \quad \text{Re}(c) > \text{Re}(a) > 0, \quad (3.4)$$

где је τ реална променљива. Услов за конвергенцију интеграла (3.4) гласи $\text{Re}(c) > \text{Re}(a) > 0$, а аутоматски је испуњен редефинисањем Зомерфелдовога параметра $\nu_T \rightarrow \nu_T - i\epsilon$. Овде је $\epsilon > 0$ инфинитезимално мали позитиван број, који бива изједначен са нулом након што се обави аналитичко израчунавање. На овај начин амплитуда прелаза (3.3) може се записати помоћу следећих израза:

$$T_{if}(\vec{\eta}) = \mathcal{M} \int_0^1 d\tau f(\tau) \mathcal{S}_{if}(\tau), \quad (3.5)$$

$$f(\tau) = \tau^{i\nu_T-1} (1-\tau)^{-i\nu_T}, \quad \mathcal{M} = \frac{N^+(\nu_T)}{\Gamma(i\nu_T)\Gamma(1-i\nu_T)} = \frac{e^{\pi\nu_T/2}}{\Gamma(i\nu_T)}, \quad (3.6)$$

$$\mathcal{S}_{if}(\tau) = \int d\vec{R} e^{i\vec{\beta} \cdot \vec{R}} (vR + \vec{v} \cdot \vec{R})^{i\xi} \mathcal{T}(\vec{R}), \quad (3.7)$$

$$\mathcal{T}(\vec{R}) = \frac{Z_P Z_T^{3/2}}{\sqrt{\pi}} \int d\vec{s} \varphi_{nlm}^*(\vec{s}) e^{-i\vec{v}\cdot\vec{s}} \left(\frac{1}{R} - \frac{1}{s} \right) e^{-Z_T x + i(vx + \vec{v}\cdot\vec{x})\tau}. \quad (3.8)$$

Као што је већ речено, израчунавања која следе приказана су у раду [132], при чему су искоришћени резултати из радова [36, 67, 94].

Уз помоћ Фуријеовог трансформа:

$$e^{-Z_T x + i(vx + \vec{v}\cdot\vec{x})\tau} = \frac{\mu_\tau}{\pi^2} \int d\vec{q} \frac{e^{-i\vec{q}\cdot\vec{x}}}{(q_1^2 + \mu_\tau^2)^2}, \quad (3.9)$$

где су:

$$\mu_\tau = Z_T - i\nu\tau, \quad \vec{q}_1 = \vec{q} + \vec{v}\tau, \quad (3.10)$$

добијамо следеће изразе:

$$\mathcal{T}(\vec{R}) = Z_P \left[\frac{1}{R} W_R(\vec{R}) - W_s(\vec{R}) \right], \quad (3.11)$$

$$W_R(\vec{R}) = \mu_\tau \sqrt{\frac{Z_T^3}{\pi^5}} \int d\vec{q} \frac{e^{-i\vec{q}\cdot\vec{R}}}{(q_1^2 + \mu_\tau^2)^2} \mathcal{B}, \quad W_s(\vec{R}) = \mu_\tau \sqrt{\frac{Z_T^3}{\pi^5}} \int d\vec{q} \frac{e^{-i\vec{q}\cdot\vec{R}}}{(q_1^2 + \mu_\tau^2)^2} \mathcal{C}, \quad (3.12)$$

$$\mathcal{B} = \int d\vec{s} e^{-i(\vec{v}+\vec{q})\cdot\vec{s}} \varphi_{nlm}^*(\vec{s}) = \int d\vec{s} e^{-i(\vec{v}+\vec{q})\cdot\vec{s}} \int d\vec{q}_2 e^{i\vec{q}_2\cdot\vec{s}} \tilde{\varphi}_{nlm}^*(\vec{q}_2), \quad (3.13)$$

$$\mathcal{C} = \int d\vec{s} e^{-i(\vec{v}+\vec{q})\cdot\vec{s}} \frac{\varphi_{nlm}^*(\vec{s})}{s} = \int d\vec{s} e^{-i(\vec{v}+\vec{q})\cdot\vec{s}} \int d\vec{q}_2 e^{i\vec{q}_2\cdot\vec{s}} \tilde{\chi}_{nlm}^*(\vec{q}_2). \quad (3.14)$$

Таласне функције у импулсном простору $\tilde{\varphi}_{nlm}(\vec{q}_2)$ и $\tilde{\chi}_{nlm}(\vec{q}_2)$ представљају Фуријеове трансформе таласних функција $\varphi_{nlm}(\vec{s})$ и $\chi_{nlm}(\vec{s}) = \varphi_{nlm}(\vec{s})/s$, тј. важи $\tilde{\varphi}_{nlm}(\vec{q}_2) = (2\pi)^{-3} \int d\vec{s} e^{i\vec{q}_2\cdot\vec{s}} \varphi_{nlm}(\vec{s})$ и $\tilde{\chi}_{nlm}(\vec{q}_2) = (2\pi)^{-3} \int d\vec{s} e^{i\vec{q}_2\cdot\vec{s}} \chi_{nlm}(\vec{s})$. За садашње потребе нарочито погодан облик таласне функције $\tilde{\varphi}_{nlm}(\vec{q}_2)$ је онај из референци [36, 38]:

$$\tilde{\varphi}_{nlm}(\vec{q}_2) = (2\pi)^{-3} N_f^{Z_P} i^l \sum_{p=0}^{n_r} C_p \frac{\mathcal{Y}_{lm}(\vec{q}_2)}{(q_2^2 + a_f^2)^{p+l+2}}, \quad (3.15)$$

$$\tilde{\chi}_{nlm}(\vec{q}_2) = (2\pi)^{-3} \frac{N_f^{Z_P}}{2Z_P} i^l \sum_{p=0}^{n_r} C_p \frac{\mathcal{Y}_{lm}(\vec{q}_2)}{(q_2^2 + a_f^2)^{p+l+1}}, \quad (3.16)$$

$$N_f^{Z_P} = 16\pi Z_P \left[\frac{a_f^3 (n+l)!}{n n_r!} \right]^{1/2} \frac{l!(4a_f)^l}{(2l+1)!}, \quad (3.17)$$

$$C_p = \frac{(-n_r)_p (n+l+1)_p}{(l+3/2)_p p!} a_f^{2p}, \quad n_r = n-l-1, \quad a_f = \frac{Z_P}{n}, \quad (3.18)$$

при чему су регуларни крути хармоници означени са \mathcal{Y}_{lm} и дефинисани су као $\mathcal{Y}_{lm}(\vec{q}_2) = q_2^l Y_{lm}(\hat{q}_2)$, где су $Y_{lm}(\hat{q}_2)$ стандардни сферни хармоници. Величина $(a)_k$ представља Почамеров симбол $(a)_k = a(a+1)(a+2)\cdots(a+k-1)$, при чему је $(a)_0 = 1$. Сада интегрални \mathcal{B} и \mathcal{C} узимају следеће облике:

$$\mathcal{B} = (2\pi)^{-3} N_f^{Z_P} (-i)^l \sum_{p=0}^{n_r} C_p \int d\vec{q}_2 \frac{\mathcal{Y}_{lm}^*(\vec{q}_2)}{(q_2^2 + a_f^2)^{p+l+2}} \int d\vec{s} e^{-i(\vec{v} + \vec{q} - \vec{q}_2) \cdot \vec{s}}, \quad (3.19)$$

$$\mathcal{C} = (2\pi)^{-3} \frac{N_f^{Z_P}}{2Z_P} (-i)^l \sum_{p=0}^{n_r} C_p \int d\vec{q}_2 \frac{\mathcal{Y}_{lm}^*(\vec{q}_2)}{(q_2^2 + a_f^2)^{p+l+1}} \int d\vec{s} e^{-i(\vec{v} + \vec{q} - \vec{q}_2) \cdot \vec{s}}. \quad (3.20)$$

Коришћењем Диракове делта функције, уз смену $\vec{q} \rightarrow \vec{q} + \vec{\beta}$, интегрални $W_R(\vec{R})$ и $W_s(\vec{R})$ свODE се на:

$$W_R(\vec{R}) = \mu_\tau \sqrt{\frac{Z_T^3}{\pi^5}} N_f^{Z_P} (-i)^l \sum_{p=0}^{n_r} C_p \mathcal{G}_p^{(2)}(\vec{R}), \quad (3.21)$$

$$W_s(\vec{R}) = \mu_\tau \sqrt{\frac{Z_T^3}{\pi^5}} \frac{N_f^{Z_P}}{2Z_P} (-i)^l \sum_{p=0}^{n_r} C_p \mathcal{G}_p^{(1)}(\vec{R}), \quad (3.22)$$

при чему су функције $\mathcal{G}_p^{(j)}(\vec{R})$ дефинисане на следећи начин:

$$\mathcal{G}_p^{(j)}(\vec{R}) = e^{-i\vec{\beta} \cdot \vec{R}} \int d\vec{q} e^{-i\vec{q} \cdot \vec{R}} \frac{\mathcal{Y}_{lm}^*(\vec{q} - \vec{\alpha})}{(|\vec{q} - \vec{\alpha}|^2 + a_f^2)^{p+l+j} (|\vec{q} + \vec{\beta}_1|^2 + \mu_\tau^2)^2}, \quad j = 1, 2, \quad (3.23)$$

где је $\vec{\beta}_1 = \vec{\beta} + \vec{v}\tau$, $\vec{\alpha} + \vec{\beta}_1 = -\vec{v}_1$ и $\vec{v}_1 = \vec{v}(1-\tau)$. Два имениоца у интегралу (3.23) се могу свести на један заједнички именилац помоћу Фејнмановог параметарског интеграла [36]:

$$\frac{1}{A^u B^r} = \frac{(u+r-1)!}{(u-1)!(r-1)!} \int_0^1 dt \frac{t^{u-1} (1-t)^{r-1}}{[At + B(1-t)]^{u+r}}, \quad u, r \geq 1, \quad (3.24)$$

тако да се за функције $\mathcal{G}_p^{(j)}(\vec{R})$ добија:

$$\mathcal{G}_p^{(j)}(\vec{R}) = (p+l+j+1)(p+l+j) \int_0^1 dt t^{p+l+j-1} (1-t) \mathcal{U}_p^{(j)}(\vec{R}), \quad (3.25)$$

где је:

$$\begin{aligned} \mathcal{U}_p^{(j)}(\vec{R}) &= e^{-i\vec{\beta}\cdot\vec{R}} \int d\vec{q} e^{-i\vec{q}\cdot\vec{R}} \frac{\mathcal{Y}_{lm}^*(\vec{q}-\vec{\alpha})}{\left[(|\vec{q}-\vec{\alpha}|^2 + a_f^2)t + (|\vec{q}+\vec{\beta}_1|^2 + \mu_\tau^2)(1-t) \right]^{p+l+j+2}} \\ &= e^{-i\vec{Q}_\beta\cdot\vec{R}} \int d\vec{q} e^{-i\vec{q}\cdot\vec{R}} \frac{\mathcal{Y}_{lm}^*(\vec{q}+\vec{Q}_\alpha)}{(q^2 + \Delta^2)^{p+l+j+2}}, \end{aligned} \quad (3.26)$$

при чему смо у задњем кораку извршили редефиницију вектора \vec{q} као $\vec{q} \rightarrow \vec{q} + \vec{Q}$, где су:

$$\vec{Q} = \vec{\alpha}t - \vec{\beta}_1(1-t), \quad \vec{Q}_\alpha = \vec{Q} - \vec{\alpha} = (1-t)\vec{v}_1, \quad (3.27)$$

$$\vec{Q}_\beta = \vec{Q} + \vec{\beta} = [(\tau-1)t - \tau] \vec{v}, \quad \Delta^2 = v_1^2 t(1-t) + a_f^2 t + \mu_\tau^2 (1-t). \quad (3.28)$$

На основу резултата приказаних у радовима [36, 67, 94], долазимо до следећих израза:

$$\mathcal{U}_p^{(j)}(\vec{R}) = \frac{\pi^{5/2}}{2^{n_j-2} n_j!} e^{-i\vec{Q}_\beta\cdot\vec{R}} \sum_{\lambda_1=|m|}^l (-i)^{\lambda_1} (1-t)^{\lambda_2} \Omega(\lambda_1, v) \frac{B_{\nu_j \lambda_1, -m}^{(\Delta)}(\vec{R})}{\Delta^{2n_j-2\lambda_1-1}}, \quad (3.29)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_p^{(j)}(\vec{R}) &= \frac{\pi^{5/2}}{2^{n_j-2} (n_j-2)!} \sum_{\lambda_1=|m|}^l (-i)^{\lambda_1} \Omega(\lambda_1, v) \int_0^1 dt t^{n_j-2} (1-t)^{\lambda_2+1} \\ &\times e^{-i\vec{Q}_\beta\cdot\vec{R}} \frac{B_{\nu_j \lambda_1, -m}^{(\Delta)}(\vec{R})}{\Delta^{2n_j-2\lambda_1-1}}, \end{aligned} \quad (3.30)$$

$$\lambda_1 + \lambda_2 = l, \quad \nu_j = n_j - \lambda_1, \quad n_j = n + j - 2, \quad n = p + l + 3, \quad (3.31)$$

$$\Omega(\lambda_1, v) = \frac{(-1)^m}{\sqrt{4\pi}} (\lambda_1 |lm) v^{\lambda_2} (1 - \tau)^{\lambda_2}, \quad (3.32)$$

$$(\lambda_1 |lm) = \left[\frac{(2l+1)}{(2\lambda_1+1)} \frac{(l+m)!}{(\lambda_1+m)!} \frac{(l-m)!}{(\lambda_1-m)! (\lambda_2!)^2} \right]^{1/2}. \quad (3.33)$$

Функција $B_{\nu_j \lambda_1, -m}^{(\Delta)}(\vec{R}) = \hat{k}_{\nu_j - 1/2}(R\Delta) \mathcal{Y}_{\lambda_1, -m}(\vec{R})$ представља тзв. B -функцију [134], где је $\hat{k}_{\nu_j - 1/2}(R\Delta) = \sqrt{2/\pi} (R\Delta)^{\nu_j - 1/2} K_{\nu_j - 1/2}(R\Delta)$ редукована Беселова функција, док $K_{\nu_j - 1/2}(R\Delta)$ представља Мекдоналдову функцију [135]. Величине $\hat{k}_{n \pm 1/2}(z)$ и $K_{n \pm 1/2}(z)$ представљају полиноме развијене по степенима $(1/z)^n$, где је $n = 0, 1, 2, \dots$. Заменом израза (3.30) у изразе (3.21) и (3.22), уз употребу једначине (3.11), израз (3.7) за $\mathcal{S}_{if}(\tau)$ трансформише се у следећи:

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_{if}(\tau) &= \mu_\tau Z_P Z_T^{3/2} (-i)^l N_f^{Z_P} \sum_{p=0}^{n_r} \frac{C_p}{2^{n-2} (n-2)!} \sum_{\lambda_1=|m|}^l (-i)^{\lambda_1} \Omega(\lambda_1, v) \\ &\times \int_0^1 dt \frac{t^{p+l} (1-t)^{\lambda_2+1}}{\Delta^{2n-2\lambda_1-3}} \left[\frac{t}{\Delta^2} I_0^{(p, \lambda_1)} - \frac{n-2}{Z_P} I_1^{(p, \lambda_1)} \right], \end{aligned} \quad (3.34)$$

где је:

$$I_\delta^{(p, \lambda_1)} = \int d\vec{R} (vR + \vec{v} \cdot \vec{R})^{i\xi} e^{-i\vec{Q} \cdot \vec{R}} B_{\nu_2 - \delta \lambda_1, -m}^{(\Delta)}(\vec{R}) R^{\delta-1}, \quad \delta = 0, 1. \quad (3.35)$$

Напокон, након позамашног рачунања интеграла $I_\delta^{(p, \lambda_1)}$, пратећи референце [36, 67], долазимо до коначног резултата:

$$\begin{aligned} I_\delta^{(p, \lambda_1)} &= 4\pi (-1)^{\lambda_1} (2i)^{\lambda_1} \frac{(2\{n_p - \delta\})!}{(n_p - \delta)!} \sum_{p_r=0}^{n_p - \delta} \frac{(\delta - n_p)_{p_r}}{(2\{\delta - n_p\})_{p_r}} \\ &\times \frac{2^{\delta + p_r - n_p}}{p_r!} \Delta^{p_r} G_{p_r \lambda_1, -m}^{(\delta, \Delta)}(\vec{Q}), \end{aligned} \quad (3.36)$$

$$G_{p_r \lambda_1, -m}^{(\delta, \Delta)}(\vec{Q}) = \sum_{k=0}^{p_\delta} \sum_{l_1=|m|}^{\lambda_1} \Phi_{kl_1}(\delta) \mathcal{D}_{l_1, -m}(\vec{Q} \cdot \vec{v}), \quad (3.37)$$

$$n_p = n - \lambda_1 - 1, \quad p_\delta = p_r + \delta. \quad (3.38)$$

Новоуведене величине у (3.37) дате су следећим изразима:

$$\mathcal{D}_{l_1, -m}(\vec{Q} \cdot \vec{v}) = (l_1 | \lambda_1 m) (-iv)^{l_2} \mathcal{Y}_{l_1, -m}(\vec{Q}), \quad (3.39)$$

$$(l_1 | \lambda_1 m) = \left[\frac{(2\lambda_1 + 1) (\lambda_1 + m)! (\lambda_1 - m)!}{(2l_1 + 1) (l_1 + m)! (l_1 - m)! (l_2!)^2} \right]^{1/2}, \quad (3.40)$$

$$\Phi_{kl_1}(\delta) = (a_\delta b_\delta) {}_3F_2 \left(-\frac{k_\delta}{2}, -\frac{k_\delta - 1}{2}, 1 - i\gamma_1; k + \lambda_1 + 1, -p_\delta - \lambda_1; \frac{1}{A} \right), \quad (3.41)$$

$$a_\delta = \Gamma(1 + i\xi) (\lambda_1 + 1)_{p_\delta} \frac{(2D)^{p_\delta}}{(\Delta^2 + Q^2)^{\lambda_1}} \mathcal{F}, \quad (3.42)$$

$$b_\delta = \frac{(1 + i\xi)_{l_1} (-i\xi)_{l_2} (-p_\delta)_k (i\gamma_2)_k (-1)^k C^k}{B^{l_2} (\lambda_1 + 1)_k k!}, \quad (3.43)$$

$$\begin{aligned} & {}_3F_2 \left(-\frac{k_\delta}{2}, -\frac{k_\delta - 1}{2}, 1 - i\gamma_1; k + \lambda_1 + 1, -p_\delta - \lambda_1; \frac{1}{A} \right) \\ &= \sum_{u=0}^{[k_\delta/2]} \frac{(-k_\delta/2)_u (-k_\delta/2 + 1/2)_u (1 - i\gamma_1)_u}{(k + \lambda_1 + 1)_u (-p_\delta - \lambda_1)_u u!} \left(\frac{1}{A} \right)^u, \end{aligned} \quad (3.44)$$

$$A = \frac{\Delta^2}{\Delta^2 + Q^2}, \quad B = \frac{2(v\Delta - i\vec{Q} \cdot \vec{v})}{\Delta^2 + Q^2}, \quad C = \frac{v}{B\Delta} - 1, \quad (3.45)$$

$$D = \frac{A}{\Delta}, \quad \mathcal{F} = \frac{B^{i\xi}}{\Delta^2 + Q^2}, \quad (3.46)$$

$$k_\delta = p_\delta - k, \quad l_1 + l_2 = \lambda_1, \quad \gamma_1 = -\xi + il_1, \quad \gamma_2 = -\xi - il_2. \quad (3.47)$$

Величина $[k_\delta/2]$ представља највећи цео број садржан у разломку $k_\delta/2$. Символ ${}_3F_2$ означава Клаусенову генерализану хипергеометријску функцију [136], ${}_3F_2(a_1, a_2, a_3; b_1, b_2; z) = \sum_{k=0}^{\infty} \{[(a_1)_k (a_2)_k (a_3)_k] / [(b_1)_k (b_2)_k]\} z^k / k!$ за $|z| < 1$, чији је далеко једноставнији, полиномијални облик (3.44) изведен у референци [36].

Помоћу свих наведених међукорака, амплитуда прелаза T_{if} , која је у оригиналној формулацији (3.3) представљала шестодимензиони интеграл, своди се на дводимензиони интеграл по реалним променљивима τ и t :

$$T_{if}(\vec{\eta}) = \mathcal{N} \int_0^1 d\tau f(\tau) \mu_\tau \sum_{p=0}^{n_r} \sum_{\lambda_1=|m|}^l (-2)^{\lambda_1} C_p \Omega(\lambda_1, v) \left[J_0^{(\lambda_1, p_r)} - J_1^{(\lambda_1, p_r)} \right], \quad (3.48)$$

$$\mathcal{N} = 16\pi Z_P Z_T^{3/2} (-i)^l \frac{e^{\pi\nu_T/2}}{\Gamma(i\nu_T)}, \quad (3.49)$$

где је $J_\delta^{(\lambda_1, p_r)}$ једнодимензиони интеграл по t :

$$J_\delta^{(\lambda_1, p_r)} = \frac{(2\{n_p - \delta\})! N_f^{Z_P}}{2^n Z_P^\delta (n - 2 - \delta)! (n_p - \delta)!} \sum_{p_r=0}^{n_p - \delta} \frac{(\delta - n_p)_{p_r}}{(2\{\delta - n_p\})_{p_r}} \frac{2^{p_r + \delta - n_p}}{p_r!} \times \int_0^1 dt \frac{t^{n-\delta-2} (1-t)^{\lambda_2+1}}{\Delta^{2n-2\lambda_1-p_r-2\delta-1}} G_{p_r, \lambda_1, -m}^{(\delta, \Delta)}(\vec{Q}). \quad (3.50)$$

На основу до сада наведених формула за амплитуду прелаза T_{if} , можемо приметити да у оквиру BCIS-3В метода ни диференцијални ни тотални ефикасни пресеци не зависе од знака магнетног квантног броја m .

Сада се тотални ефикасни пресек, уз коришћење израза (3.48), може наћи по формули (2.286), коју овде поново наводимо ради комплетности:

$$Q(\pi a_0^2) = \frac{1}{2\pi^2 v^2} \int_0^\infty d\eta \eta |T_{if}(\vec{\eta})|^2. \quad (3.51)$$

Израз (3.51) представља тродимензиони интеграл по реалним променљивима η , τ и t . Трострука интеграција се мора извршити нумерички, за шта су у овом раду употребљене Гаус-Лежандрове квадратуре. Међутим, пре интеграције по η биће спроведена одређена смена променљивих, која има за циљ да сконцентрише тачке интеграције у уски конус око правца инцидентог вектора брзине пројектила \vec{v} (тј. око $\theta \approx 0$), с обзиром на то да, у сударима са тешким пројектилима, управо из овог региона долази главни допринос тоталним ефикасним пресецима [37].

3.1.2 Скалирање и припрема за нумеричку интеграцију

Гаус-Лежандрове квадратуре дате су следећом формулом:

$$\int_{-1}^{+1} f(x) dx = \sum_{k=1}^N \omega_k f(x_k), \quad (3.52)$$

где x_k представљају нуле Лежандрових полинома, док су ω_k тежински коефицијенти. Ове вредности се могу узети из приручника [137, 138], као и генерисати уз помоћ специјализованих програма [139]. Приручници обично нуде врло ограничене скупове, док се наведени програм може искористити за генерисање практично произвољног броја нула и тежинских коефицијената.

Интеграција по променљивој η иде у границама $[0, \infty]$, за шта се могу користити Гаус-Лагерове квадратуре. Међутим, могуће је увести и следећу смену променљивих:

$$\eta = \sqrt{\left(\frac{2+2z}{1-z}\right)}, \quad \eta \in [0, \infty] \implies z \in [-1, +1]. \quad (3.53)$$

Овом сменом границе интеграције своде се на $[-1, +1]$, што омогућује да се и ова интеграција изврши коришћењем Гаус-Лежандрових квадратура. Значај смене (3.53) се не састоји само у овоме, већ пре свега у томе што се на овај начин интеграционе тачке концентришу у уском конусу унапред, као што је већ напоменуто. Ово је у складу са еиконалном природом расејања тешких пројектила. Да се интеграционе тачке заиста концентришу у уском конусу унапред најлакше се уочава коришћењем релације (2.284) и израза (3.53), на основу којих се добија:

$$\cos \theta = 1 - \left(\frac{1}{\mu\nu}\right)^2 \frac{1+z}{1-z}. \quad (3.54)$$

Привидни сингуларитет за $z = 1$, који се јавља према релацији (3.53), може се уклонити аналитичким скалирањем, тј. увођењем величине $\tilde{\eta}$ помоћу релације:

$$\eta^2 = z_0 \tilde{\eta}^2, \quad \tilde{\eta}^2 = 2(1+z), \quad \eta d\eta = 2z_0^2 dz, \quad (3.55)$$

где је:

$$z_0 = 1/z_1, \quad z_1 = 1 - z. \quad (3.56)$$

Након скалирања добијамо следећи израз за тотални ефикасни пресек:

$$Q(\pi a_0^2) = \mathcal{M}_0 \int_{-1}^{+1} dz |\mathcal{Y}^-|^2, \quad (3.57)$$

где су:

$$\mathcal{M}_0 = \frac{2^8 Z_P^2 Z_T^3}{v^2} \frac{\pi \xi}{\sinh \pi \xi} \frac{\pi \nu_T e^{\pi \nu_T}}{\sinh \pi \nu_T}, \quad (3.58)$$

$$\mathcal{Y}^- = \frac{1}{\text{B}(i\nu_T, 1 - i\nu_T)} \int_0^1 \frac{d\tau}{\tau} w(\tau) W(\tau), \quad (3.59)$$

$$w(\tau) = \left(\frac{\tau}{1 - \tau} \right)^{i\nu_T}, \quad (3.60)$$

$$W(\tau) = \mu_\tau \sum_{p=0}^{n_r} \sum_{\lambda_1=|m|}^l (-2)^{\lambda_1} C_p \Omega(\lambda_1, \nu) \left[\dot{J}_0^{(\lambda_1, p_r)} - \dot{J}_1^{(\lambda_1, p_r)} \right], \quad (3.61)$$

при чему је бета функција $\text{B}(x, y)$ дата следећим изразом:

$$\text{B}(x, y) = \int_0^1 du u^{x-1} (1-u)^{y-1}, \quad (3.62)$$

за коју важи:

$$\text{B}(x, y) = \frac{\Gamma(x)\Gamma(y)}{\Gamma(x+y)}, \quad (3.63)$$

где је $\Gamma(z)$ гама функција. Тачка изнад симбола $\dot{J}_\delta^{(\lambda_1, p_r)}$ означава да је дошло до редефинисања ове величине, претходно дате изразом (3.50). Наиме, као што ће даље у тексту бити приказано, редефинисана је величина $a_\delta \rightarrow \dot{a}_\delta$ из израза (3.42), и то тако што је фактор $\Gamma(1 + i\xi)$ из ње урачунат у \mathcal{M}_0 из (3.58). Тилда симбол означава да су одговарајуће величине скалиране:

$$j_\delta^{(\lambda_1, p_r)} = z_1^{i\xi+1} \dot{j}_\delta^{(\lambda_1, p_r)}, \quad \dot{G}_{p_r \lambda_1, -m}^{(\delta, \Delta)}(\vec{Q}) = z_1^{i\xi+1} \dot{G}_{p_r \lambda_1, -m}^{(\delta, \tilde{\Delta})}(\vec{\tilde{Q}}), \quad (\delta = 0, 1), \quad (3.64)$$

$$\mathcal{D}_{l_1, -m}(\vec{Q} \cdot \vec{v}) = z_0^{l_1/2} \tilde{\mathcal{D}}_{l_1, -m}(\tilde{\vec{Q}} \cdot \vec{v}), \quad \dot{\Phi}_{kl_1}(\delta) = z_1^{\lambda_1 + i\xi + 1 - l_2} \dot{\tilde{\Phi}}_{kl_1}(\delta), \quad (3.65)$$

$$\vec{Q} \cdot \vec{v} = \tilde{\vec{Q}} \cdot \vec{v}, \quad Q^2 = z_0 \tilde{Q}^2, \quad (3.66)$$

$$\mathcal{Y}_{l_1, -m}(\vec{Q}) = z_0^{l_1/2} \tilde{\mathcal{Y}}_{l_1, -m}(\tilde{\vec{Q}}), \quad (3.67)$$

$$\begin{aligned} & {}_3F_2 \left(-\frac{k_\delta}{2}, -\frac{k_\delta - 1}{2}, 1 - i\gamma_1; k + \lambda_1 + 1, -p_\delta - \lambda_1; \frac{1}{z_1 \tilde{A}} \right) \\ &= z_0^{k_\delta} {}_3\tilde{F}_2 \left(-\frac{k_\delta}{2}, -\frac{k_\delta - 1}{2}, 1 - i\gamma_1; k + \lambda_1 + 1, -p_\delta - \lambda_1; \frac{z_1^{(k_\delta - u)/u}}{\tilde{A}} \right), \end{aligned} \quad (3.68)$$

$$\dot{a}_\delta = z_1^{p_\delta + \lambda_1 + i\xi + 1} \dot{\tilde{a}}_\delta, \quad b_\delta = z_0^{k+l_2} \tilde{b}_\delta, \quad (3.69)$$

$$A = z_1 \tilde{A}, \quad B = z_1 \tilde{B}, \quad C = z_0 \tilde{C}, \quad D = z_1 \tilde{D}, \quad \mathcal{F} = z_1^{i\xi + 1} \tilde{\mathcal{F}}, \quad (3.70)$$

$$\alpha^2 = z_0 \tilde{\alpha}^2, \quad \beta^2 = z_0 \tilde{\beta}^2, \quad \vec{\alpha} \cdot \vec{\beta} = z_0 \tilde{\alpha} \cdot \tilde{\beta}, \quad \vec{\alpha} \cdot \vec{v} = \tilde{\alpha} \cdot \vec{v}, \quad \vec{\beta} \cdot \vec{v} = \tilde{\beta} \cdot \vec{v}. \quad (3.71)$$

Скалиране величине које се јављају у изразу за тотални ефикасни пресек (3.57) дате су следећим изразима:

$$\begin{aligned} \dot{J}_\delta^{(\lambda_1, p_r)} &= \frac{(2\{n_p - \delta\})! N_f^{Z_P}}{2^n Z_P^\delta (n - 2 - \delta)! (n_p - \delta)!} \sum_{p_r=0}^{n_p - \delta} \frac{(\delta - n_p)_{p_r}}{(2\{\delta - n_p\})_{p_r}} \frac{2^{p_r + \delta - n_p}}{p_r!} \\ &\times \int_0^1 dt \frac{t^{n-\delta-2} (1-t)^{\lambda_2+1}}{\tilde{\Delta}^{2n-2\lambda_1-p_r-2\delta-1}} \dot{G}_{p_r, \lambda_1, -m}^{(\delta, \tilde{\Delta})}(\tilde{\vec{Q}}), \end{aligned} \quad (3.72)$$

$$\dot{G}_{p_r, \lambda_1, -m}^{(\delta, \tilde{\Delta})}(\tilde{\vec{Q}}) = \sum_{k=0}^{p_\delta} \sum_{l_1=|m|}^{\lambda_1} \dot{\Phi}_{kl_1}(\delta) \tilde{\mathcal{D}}_{l_1, -m}(\tilde{\vec{Q}} \cdot \vec{v}), \quad (3.73)$$

$$\tilde{\mathcal{D}}_{l_1, -m}(\tilde{\vec{Q}} \cdot \vec{v}) = (l_1 |\lambda_1 m|) (-iv)^{l_2} \tilde{\mathcal{Y}}_{l_1, -m}(\tilde{\vec{Q}}), \quad (3.74)$$

$$\dot{\Phi}_{kl_1}(\delta) = (\dot{\tilde{a}}_\delta \tilde{b}_\delta)_3 \tilde{F}_2 \left(-\frac{k_\delta}{2}, -\frac{k_\delta - 1}{2}, 1 - i\gamma_1; k + \lambda_1 + 1, -p_\delta - \lambda_1; \frac{z_1^{(k_\delta - u)/u}}{\tilde{A}} \right), \quad (3.75)$$

$$\tilde{Q} \cdot \vec{v} = \tilde{\alpha} \cdot \vec{v}t - (\tilde{\beta} \cdot \vec{v} + v^2\tau)(1 - t), \quad (3.76)$$

$$\begin{aligned} \tilde{Q}^2 &= \tilde{\alpha}^2 t^2 - 2\tilde{\alpha} \cdot \tilde{\beta} t(1 - t) - 2z_1 \tilde{\alpha} \cdot \vec{v} \tau t(1 - t) \\ &+ (\tilde{\beta}^2 + 2z_1 \tilde{\beta} \cdot \vec{v} \tau + z_1 v^2 \tau^2)(1 - t)^2, \end{aligned} \quad (3.77)$$

$$\tilde{\mathcal{Y}}_{l_1, -m}(\tilde{Q}) = \tilde{Q}^{l_1} \tilde{Y}_{l_1, -m}(\hat{\tilde{Q}}). \quad (3.78)$$

Скалирани сферни хармоници $\tilde{Y}_{l_1, -m}(\hat{\tilde{Q}})$ могу имати две различите форме, у зависности од знака магнетног квантног броја m . Ове форме су дате следећим изразима:

$$\begin{aligned} \tilde{Y}_{l_1, -m}(\hat{\tilde{Q}}) &= \sqrt{\frac{2l_1 + 1}{4\pi} \frac{(l_1 - m)!}{(l_1 + m)!}} (1 - z_1 \tilde{C}_z^2)^{m/2} \\ &\times \left[\left(\frac{d}{d(z_1^{1/2} \tilde{C}_z)} \right)^{l_1 + m} \frac{(z_1 \tilde{C}_z^2 - 1)^{l_1}}{2^{l_1} l_1!} \right] e^{-im\varphi_\eta}, \quad m \geq 0, \end{aligned} \quad (3.79)$$

$$\begin{aligned} \tilde{Y}_{l_1, -m}(\hat{\tilde{Q}}) &= (-1)^{|m|} \sqrt{\frac{2l_1 + 1}{4\pi} \frac{(l_1 - |m|)!}{(l_1 + |m|)!}} (1 - z_1 \tilde{C}_z^2)^{|m|/2} \\ &\times \left[\left(\frac{d}{d(z_1^{1/2} \tilde{C}_z)} \right)^{l_1 + |m|} \frac{(z_1 \tilde{C}_z^2 - 1)^{l_1}}{2^{l_1} l_1!} \right] e^{i|m|\varphi_\eta}, \quad m^f < 0, \end{aligned} \quad (3.80)$$

где је $\tilde{C}_z = \hat{\tilde{Q}} \cdot \vec{v} / \tilde{Q}$, што се једноставно може показати [94]. Примећујемо да из израза (3.79) и (3.80) можемо, респективно, изоставити факторе $e^{-im\varphi_\eta}$ и $e^{i|m|\varphi_\eta}$, с обзиром на то да они не утичу на вредности ефикасних пресека. Настављамо

са излиставањем израза за преостале скалиране величине:

$$\begin{aligned} & {}_3\tilde{F}_2\left(-\frac{k_\delta}{2}, -\frac{k_\delta-1}{2}, 1-i\gamma_1; k+\lambda_1+1, -p_\delta-\lambda_1; \frac{z_1^{(k_\delta-u)/u}}{\tilde{A}}\right), \\ &= \sum_{u=0}^{[k_\delta/2]} \frac{(-k_\delta/2)_u (-k_\delta/2+1/2)_u (1-i\gamma_1)_u}{(k+\lambda_1+1)_u (-p_\delta-\lambda_1)_u u!} \left(\frac{z_1^{(k_\delta-u)/u}}{\tilde{A}}\right)^u, \end{aligned} \quad (3.81)$$

$$\dot{\tilde{a}}_\delta = (\lambda_1+1)_{p_\delta} \frac{(2\tilde{D})^{p_\delta}}{(\tilde{\Delta}^2 + \tilde{Q}^2)^{\lambda_1}} \tilde{\mathcal{F}}, \quad (3.82)$$

$$\tilde{b}_\delta = \frac{(1+i\xi)_{l_1} (-i\xi)_{l_2} (-p_\delta)_k (i\gamma_2)_k (-1)^k \tilde{C}^k}{\tilde{B}^{l_2} (\lambda_1+1)_k k!}, \quad (3.83)$$

$$\tilde{A} = \frac{\tilde{\Delta}^2}{\tilde{\Delta}^2 + \tilde{Q}^2}, \quad \tilde{B} = \frac{2(v\tilde{\Delta} - i\tilde{Q} \cdot \vec{v})}{\tilde{\Delta}^2 + \tilde{Q}^2}, \quad \tilde{C} = \frac{v}{\tilde{B}\tilde{\Delta}} - 1, \quad (3.84)$$

$$\tilde{D} = \frac{\tilde{A}}{\tilde{\Delta}}, \quad \tilde{\mathcal{F}} = \frac{\tilde{B}^{i\xi}}{\tilde{\Delta}^2 + \tilde{Q}^2}, \quad \tilde{\Delta} = \Delta, \quad (3.85)$$

$$\tilde{\alpha}^2 = \tilde{\eta}^2 + z_1(v^-)^2, \quad \tilde{\beta}^2 = \tilde{\eta}^2 + z_1(v^+)^2, \quad \tilde{\alpha} \cdot \tilde{\beta} = -\tilde{\eta}^2 + z_1 v^+ v^-, \quad (3.86)$$

$$\tilde{\alpha} \cdot \vec{v} = -v^- v, \quad \tilde{\beta} \cdot \vec{v} = -v^+ v. \quad (3.87)$$

Границе интеграције $[0, 1]$ у релацијама (3.59) и (2.72) се једноставно свODE на интервал $[-1, +1]$ сменом $\tau \rightarrow u_1$, односно $t \rightarrow u_2$:

$$\tau = \frac{1}{2}(1+u_1), \quad t = \frac{1}{2}(1+u_2), \quad (3.88)$$

те се и овде примењују Гаус-Лежандрове квадратуре (3.52). Ове две смене не уводе никакве привидне сингуларитете, те нису засебно дискутоване у овом тексту, већ само имплементиране у оквиру самог програма за рачунање ефикасних пресека.

Напоменимо још да је, ради убрзавања конвергенције нумеричких интеграла,

примењена и Кошијева регуларизација [40], тако да је величина \mathcal{Y}^- из израза (3.59) записана на следећи начин:

$$\mathcal{Y}^- = \frac{i}{\pi} \sinh \pi \nu_T \int_0^1 d\tau w(\tau) \left[\frac{W(\tau) - \tau L - W(0)}{\tau} \right] + i\nu_T L + W(0), \quad (3.89)$$

где је $L = W(1) - W(0)$. Да би се дошло до израза (3.89), искоришћени су изрази (3.62) и (3.63) за бета функцију, као и познат израз за гама функцију:

$$\Gamma(z)\Gamma(1-z) = \frac{\pi}{\sin \pi z}. \quad (3.90)$$

Овим је израз за израчунавање тоталних ефикасних пресека (3.57) у потпуности дефинисан, а све неопходне припреме за ефикасну нумеричку интеграцију су обављене.

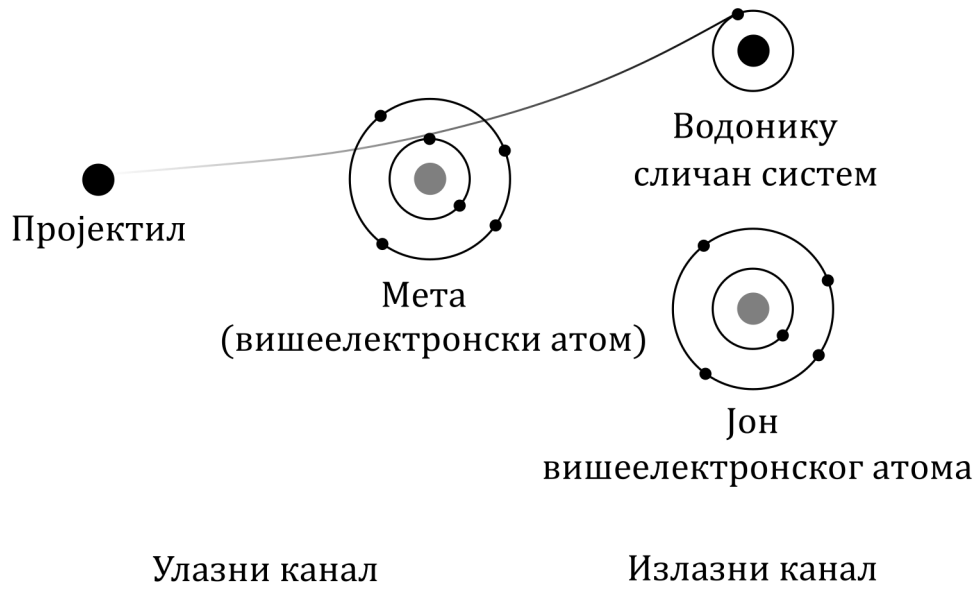
3.2 Трочестична формулација са Рутан-Хартри-Фоквим моделом

У овом одељку ћемо размотрити једноструки електронски захват од стране потпуно огољених пројектила из вишеелектронских атома, при чему се захват врши у основно финално стање. У општем случају ово је комплексан процес, шематски приказан на слици 6 и дат следећом релацијом:

$$Z_P + (Z_T; e_1, e_2, \dots, e_n)_i \longrightarrow (Z_P; e_1)_{1s} + (Z_T; e_2, \dots, e_n)_f, \quad (3.91)$$

при чему је узето да мета $(Z_T; e_1, e_2, \dots, e_n)$ има n електрона. Њено иницијално стање означено је ознаком i , а финално f , док је финално стање пројектила $(Z_P; e_1)_{1s}$ основно стање $1s$ водонику сличног система.

С обзиром на сложеност процеса (3.91), биће неопходна одређена поједностављења. Тако ћемо најпре применити *модел независних честица* (на енглеском *independent particle model*), којим се само електрон који бива захваћен третира као активан, а сви остали као пасивни. Штавише, активни електрон ће бити једини који ће се експлицитно појављивати у теоријском формализму који следи. Такође, сматраћемо да пасивни електрони, након једноструког електронског захвата, окупирају исте орбитале на којима су се налазили и пре захвата - ово је тзв. *апроксимација смрзнутог језгра* (на енглеском *frozen core approximation*). На овај начин, реални вишечестични процес (3.91) своди се на моделни трочестични



Слика 6: Шематски приказ процеса једноструког електронског захвата у судару потпуно огољеног пројектила са вишеелектронском метом.

проблем дат следећим изразом:

$$Z_P + (Z_T^{\text{eff}}; e)_i \rightarrow (Z_P; e)_{1s} + Z_T^{\text{eff}}, \quad (3.92)$$

где смо са Z_T^{eff} означили ефикасно наелектрисање језгра мете, док i означава иницијално стање мете $(Z_T^{\text{eff}}; e)_i$. На основу израза (3.92), за израчунавање амплитуде прелаза за једноструки електронски захват из вишеелектронских мета можемо применити исти BCIS-3В метод који смо искористили и код електронског захвата из водонику сличних мета, чија је амплитуда прелаза дата изразом (2.276). Како у овом случају разматрамо захват искључиво у основно стање, финална таласна функција пројектила $(Z_P; e)_{1s}$ је водонична таласна функција која одговара основном стању:

$$\varphi_f(\vec{s}) = \sqrt{\frac{Z_P^3}{\pi}} e^{-Z_P s}, \quad (3.93)$$

док финална везивна енергија износи $E_f = -Z_P^2/2$. Израз (2.276) за амплитуду прелаза, уз употребу израза (2.70) из претходне главе, као и (3.93), сада се

своди на:

$$\begin{aligned}
 T_{if}(\vec{\eta}) &= \frac{Z_P^{5/2}}{\sqrt{\pi}} N^+(\nu_T) \int \int d\vec{R} d\vec{s} \varphi_i(\vec{x}) \left(\frac{1}{R} - \frac{1}{s} \right) \\
 &\times e^{i\vec{\beta} \cdot \vec{R} - i\vec{v} \cdot \vec{s} - Z_P s} {}_1F_1(i\nu_T, 1, i\nu x + i\vec{v} \cdot \vec{x}) (vR + \vec{v} \cdot \vec{R})^{i\xi}, \quad (3.94)
 \end{aligned}$$

при чему је и овде, ради концизности, ознака „BCIS–“ изостављена из експонента амплитуде прелаза (с обзиром на то да је јасно да се све време ради о приор форми BCIS апроксимације).

3.2.1 Аналитичко израчунавање

Сада ћемо приступити аналитичком сређивању шестоструког интеграла датог изразом (3.94), докле год је то изводљиво. Израчунавање амплитуде прелаза (3.94), које је у наставку приказано, по први пут је урађено и публиковано у раду [140], који је написан у оквиру ове докторске дисертације.

Представљајући Кумерову хипергеометријску функцију у интегралној репрезентацији, на идентичан начин као и у претходном одељку, амплитуда прелаза (3.94) може се записати на следећи начин:

$$T_{if}(\vec{\eta}) = \mathcal{M} \int_0^1 d\tau f(\tau) \mathcal{S}_{if}(\tau), \quad (3.95)$$

$$f(\tau) = \tau^{i\nu_T-1} (1-\tau)^{-i\nu_T}, \quad \mathcal{M} = \frac{N^+(\nu_T)}{\Gamma(i\nu_T)\Gamma(1-i\nu_T)} = \frac{e^{\pi\nu_T/2}}{\Gamma(i\nu_T)}, \quad (3.96)$$

$$\mathcal{S}_{if}(\tau) = \int d\vec{R} e^{i\vec{\beta} \cdot \vec{R}} (vR + \vec{v} \cdot \vec{R})^{i\xi} \mathcal{T}(\vec{R}), \quad (3.97)$$

$$\mathcal{T}(\vec{R}) = \frac{Z_P^{5/2}}{\sqrt{\pi}} \int d\vec{s} \varphi_i(\vec{x}) e^{-i\vec{v} \cdot \vec{s} - Z_P s} \left(\frac{1}{R} - \frac{1}{s} \right) e^{i(vx + \vec{v} \cdot \vec{x})\tau}. \quad (3.98)$$

Сада се поставља питање избора таласне функције $\varphi_i(\vec{x})$ за описивање иницијалног стања вишеелектронског атома. Најједноставнији избор би био сматрати $\varphi_i(\vec{x})$ водоничном функцијом, при чему би за наелектрисање језгра Z_T^{eff} једноставно узели одговарајућу екранирану вредност. Међутим, са физичке стране би

више задовољавајући избор био коришћење Хартри-Фокових таласних функција за вишеелектронске атоме, при чему су најпогодније оне које су представљене у затвореним аналитичким облицима. Овакве су нпр. Рутан-Хартри-Фокове (скраћено RHF), дате у радовима [111, 112]. Најчешће коришћене су, међутим, RHF таласне функције представљене као линеарне комбинације орбитала Слејтеровог типа (Слејтерових орбитала), дате у раду [107]. Сви неопходни коефицијенти у овим линеарним комбинацијама су излистани у раду [107] за велики број хемијских елемената.

Одабиром таласне функције $\varphi_i(\vec{x})$ као линеарне комбинације Слејтерових орбитала, рачунање амплитуде прелаза постаје упоредиво комплексан подухват као када се употребе водоничне таласне функције. Ово је стога што се водоничне таласне функције могу представити као линеарна комбинација Слејтерових орбитала (самим тим се и Слејтерове орбитале могу представити као линеарна комбинација функција водоничног типа [38]). На овај начин, коришћењем RHF модела, у изразу за амплитуду прелаза јавља се више интеграла него када се користе водоничне функције. Међутим, сви ови интегрални су истог облика као и они са водоничним функцијама, тако да решавање овог проблема готово да није ништа аналитички захтевније.

На основу референци [107, 141–143] направићемо два избора иницијалног стања RHF таласне функције $\varphi_i(\vec{x})$, представивши је као линеарну комбинацију нормализованих Слејтерових орбитала. Израчунавања тоталних ефикасних пресека за једноструки електронски захват урађена су за захват из K и L љуске атома литијума од стране протона (H^+) и алфа честица (He^{2+}). За остале атомске мете од интереса (угљеник, азот, кисеоник и неон), једино захват из K љуске ће бити узет у обзир. За све ове мете таласне функције иницијалног стања дате су следећим изразом [107]:

$$\varphi_i(\vec{x}) \equiv \varphi_i^{\text{RHF}}(\vec{x}) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sum_{i=1}^{i_{\max}} c_i e^{-\zeta_i x} + \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sum_{j=1}^{j_{\max}} N_j x e^{-\lambda_j x}, \quad (3.99)$$

при чему величине i_{\max} и j_{\max} представљају бројеве 1s и 2s Слејтерових орбитала, респективно, укључених у одговарајућим RHF таласним функцијама $\varphi_i^{\text{RHF}}(\vec{x})$. Вредности параметара c_i , N_j , ζ_i , λ_j и E_i^{RHF} (као и величина i_{\max} и j_{\max}) нису једнозначне и зависе од конкретног избора RHF таласне функције. Ми ћемо искористити две различите таласне функције, које ћемо означити са RHF1 [107] и RHF2 [141–143]. Два различита избора начињена су да бисмо испитали осетљивост ефикасних пресека на избор базе по којој се развија таласна

функција мете. Изузев код ове провере осетљивости, у дисертацији је углавном коришћена RHF1 таласна функција [107]. Код ове функције је $i_{\max} = 2$ и $j_{\max} = 4$. Вредности параметара c_i , N_j , ζ_i , λ_j и E_i^{RHF1} за RHF1 таласну функцију преузете су из референце [107] и представљене у табелама 1 и 2. У овим табелама је у заградама означено у којим стањима се атомске мете налазе пре судара.

Табела 1: Коефицијенти у развоју орбитала c_i и N_j за RHF1 таласну функцију и орбиталне енергије E_i^{RHF1} атома мета.

	Li(2S), φ_{1s}	Li(2S), φ_{2s}	C(3P), φ_{1s}	N(4S), φ_{1s}	O(3P), φ_{1s}	Ne(1S), φ_{1s}
c_1	3.49967	-0.57021	11.82014	15.38848	19.85801	27.37567
c_2	1.13372	-0.15441	2.02388	2.18413	1.73034	3.00863
N_1	-4.20671E-6	1.98241E-4	5.51072E-4	1.16680E-3	-7.37761E-4	1.80520E-3
N_2	2.29309E-4	2.00754	-2.91479E-3	-4.86689E-3	1.34798E-2	-5.13026E-3
N_3	-1.47690E-3	7.50145E-2	3.81021E-2	6.32458E-2	-1.08333E-1	1.62705E-1
N_4	1.73657E-2	-2.16501	7.97763E-2	3.21750	1.77114	1.95629
E_i^{RHF1}	-2.47773	-0.19632	-11.32554	-15.62909	-20.66866	-32.77248

Табела 2: Експоненцијални фактори ζ_i и λ_j у експонентима орбитала атома мета за RHF1 таласну функцију.

	Li(2S), φ_{1s}	Li(2S), φ_{2s}	C(3P), φ_{1s}	N(4S), φ_{1s}	O(3P), φ_{1s}	Ne(1S), φ_{1s}
ζ_1	2.47673	2.47673	5.43599	6.45739	7.61413	9.48486
ζ_2	4.69873	4.69873	9.48256	11.17200	13.75740	15.56590
λ_1	0.38350	0.38350	1.05749	1.36405	1.69824	1.96184
λ_2	0.66055	0.66055	1.52427	1.89734	2.48022	2.86423
λ_3	1.07000	1.07000	2.68435	3.25291	4.31196	4.82530
λ_4	1.63200	1.63200	4.20096	5.08238	5.86596	7.79242

Вредности иницијалне енергије E_i даје сам RHF модел $E_i \equiv E_i^{\text{RHF}}$. Вредност ефективног наелектрисања мете $Z_{\text{T}}^{\text{eff}}$ узећемо како је предложено у референци [5]:

$$Z_{\text{T}}^{\text{eff}} = n\sqrt{-2E_i^{\text{RHF}}}, \quad (3.100)$$

где је n главни квантни број иницијалне орбитале мете из које се електрон захвата.

Коришћењем једначине (3.99) за иницијалне таласне функције, функција $\mathcal{T}(\vec{R})$ из једначине (3.98) добија следећи облик:

$$\mathcal{T}(\vec{R}) = \frac{Z_P^{5/2}}{\sqrt{\pi}} \left[\frac{1}{R} (W_{R1} + W_{R2}) - (W_{s1} + W_{s2}) \right], \quad (3.101)$$

где су:

$$W_{R1} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sum_{i=1}^{i_{\max}} c_i \int d\vec{s} e^{-i\vec{v}\cdot\vec{s} - Z_P s} [e^{-\zeta_i x + i(vx + \vec{v}\cdot\vec{x})\tau}], \quad (3.102)$$

$$W_{R2} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sum_{j=1}^{j_{\max}} N_j \int d\vec{s} e^{-i\vec{v}\cdot\vec{s} - Z_P s} [x e^{-\lambda_j x + i(vx + \vec{v}\cdot\vec{x})\tau}], \quad (3.103)$$

$$W_{s1} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sum_{i=1}^{i_{\max}} c_i \int d\vec{s} \frac{e^{-i\vec{v}\cdot\vec{s} - Z_P s}}{s} [e^{-\zeta_i x + i(vx + \vec{v}\cdot\vec{x})\tau}], \quad (3.104)$$

$$W_{s2} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sum_{j=1}^{j_{\max}} N_j \int d\vec{s} \frac{e^{-i\vec{v}\cdot\vec{s} - Z_P s}}{s} [x e^{-\lambda_j x + i(vx + \vec{v}\cdot\vec{x})\tau}]. \quad (3.105)$$

За даље израчунавање искористићемо следеће Фуријеове трансформе:

$$e^{-\zeta_i x + i(vx + \vec{v}\cdot\vec{x})\tau} = \frac{\mu_i}{\pi^2} \int d\vec{q} \frac{e^{-i\vec{q}\cdot\vec{x}}}{(q_1^2 + \mu_i^2)^2}, \quad (3.106)$$

$$x e^{-\lambda_j x + i(vx + \vec{v}\cdot\vec{x})\tau} = \frac{1}{\pi^2} \int d\vec{q} e^{-i\vec{q}\cdot\vec{x}} \left[\frac{4\mu_j^2}{(q_1^2 + \mu_j^2)^3} - \frac{1}{(q_1^2 + \mu_j^2)^2} \right], \quad (3.107)$$

где је $\vec{q}_1 = \vec{q} + \vec{v}\tau$, $\mu_i = \zeta_i - i v \tau$ и $\mu_j = \lambda_j - i v \tau$. И овде ћемо такође искористити Фејнманов параметарски интеграл (3.24).

На основу претходних израза, величине W_{R1} , W_{R2} , W_{s1} и W_{s2} можемо редуковати на следеће једнодимензионе интеграле по реалној променљивој t :

$$W_{R1} = 2Z_P \sqrt{\pi} e^{-i\vec{\beta}\cdot\vec{R}} \int_0^1 dt t(1-t) \sum_{i=1}^{i_{\max}} \frac{c_i \mu_i}{\Delta_i^5} (3 + 3\Delta_i R + \Delta_i^2 R^2) e^{-i\vec{Q}\cdot\vec{R} - \Delta_i R}, \quad (3.108)$$

$$\begin{aligned}
 W_{R2} = & 2Z_P \sqrt{\pi} e^{-i\vec{\beta} \cdot \vec{R}} \int_0^1 dt t(1-t) \sum_{j=1}^{j_{\max}} \frac{N_j}{\Delta_j^5} [3(5p_j - 1) \\
 & + 3\Delta_j(5p_j - 1)R + \Delta_j^2(6p_j - 1)R^2 + \Delta_j^3 p_j R^3] e^{-i\vec{Q} \cdot \vec{R} - \Delta_j R}, \quad (3.109)
 \end{aligned}$$

$$W_{s1} = 2\sqrt{\pi} e^{-i\vec{\beta} \cdot \vec{R}} \int_0^1 dt (1-t) \sum_{i=1}^{i_{\max}} \frac{C_i \mu_i}{\Delta_i^3} (1 + \Delta_i R) e^{-i\vec{Q} \cdot \vec{R} - \Delta_i R}, \quad (3.110)$$

$$\begin{aligned}
 W_{s2} = & 2\sqrt{\pi} e^{-i\vec{\beta} \cdot \vec{R}} \int_0^1 dt (1-t) \sum_{j=1}^{j_{\max}} \frac{N_j}{\Delta_j^3} [(3p_j - 1) \\
 & + \Delta_j(3p_j - 1)R + \Delta_j^2 p_j R^2] e^{-i\vec{Q} \cdot \vec{R} - \Delta_j R}, \quad (3.111)
 \end{aligned}$$

где су:

$$\Delta_k^2 = v_1^2 t(1-t) + Z_P^2 t + \mu_k^2 (1-t), \quad (k = i, j), \quad (3.112)$$

$$\vec{v}_1 = \vec{v}(1-\tau), \quad p_j = \frac{\mu_j^2 (1-t)}{\Delta_j^2}. \quad (3.113)$$

Заменом релација (3.108)-(3.111) у израз (3.101), величина $\mathcal{S}_{ij}(\tau)$ из израза (3.97) може се изразити помоћу интеграла:

$$I_n = \int d\vec{R} R^{n-1} e^{-i\vec{Q} \cdot \vec{R} - \Delta_k R} (vR + \vec{v} \cdot \vec{R})^{i\xi}. \quad (3.114)$$

Коришћењем аналитичких резултата интеграла I_n за $n = 0, 1, 2, 3$ из рада [41], долазимо до коначног израза за амплитуду прелаза, у облику дводимензионог интеграла по τ и t :

$$T_{if}(\vec{\eta}) = \mathcal{N} \int_0^1 d\tau f(\tau) \int_0^1 dt (1-t) \left[\sum_{i=1}^{i_{\max}} \frac{C_i \mu_i}{\Delta_i^3} (\nu_i - i\xi \delta_i) + \sum_{j=1}^{j_{\max}} \frac{N_j}{\Delta_j^3} (\nu_j - i\xi \delta_j) \right], \quad (3.115)$$

$$\mathcal{N} = 8\pi Z_P^{5/2} \Gamma(1+i\xi) \frac{e^{\pi\nu_T/2}}{\Gamma(i\nu_T)}, \quad (3.116)$$

где су величине ν_i , ν_j , δ_i и δ_j дате следећим изразима:

$$\nu_i = b_{-1}\mathcal{F}_i + 2b_0D_i\mathcal{F}_i - \frac{2b_1D_i\mathcal{F}_iA_{\alpha_i}}{\Delta_i}, \quad (3.117)$$

$$\nu_j = a_{-1}\mathcal{F}_j + 2a_0D_j\mathcal{F}_j - \frac{2a_1D_j\mathcal{F}_jA_{\alpha_j} + 4a_2D_j^2\mathcal{F}_jA_{\beta_j}}{\Delta_j}, \quad (3.118)$$

$$\delta_i = 2b_0D_i\mathcal{F}_iC_i + \frac{2b_1D_i\mathcal{F}_iB_{\alpha_i}}{\Delta_i}, \quad (3.119)$$

$$\delta_j = 2a_0D_j\mathcal{F}_jC_j + \frac{2a_1D_j\mathcal{F}_jB_{\alpha_j} + 4a_2D_j^2\mathcal{F}_jB_{\beta_j}}{\Delta_j}, \quad (3.120)$$

$$a_{-1} = \frac{3Z_{\text{Pt}}(5p_j - 1)}{\Delta_j^2}, \quad a_0 = \frac{3Z_{\text{Pt}}(5p_j - 1)}{\Delta_j} - 3p_j + 1, \quad (3.121)$$

$$a_1 = Z_{\text{Pt}}(6p_j - 1) - \Delta_j(3p_j - 1), \quad a_2 = (Z_{\text{Pt}} - \Delta_j)\Delta_jp_j, \quad (3.122)$$

$$b_{-1} = \frac{3Z_{\text{Pt}}}{\Delta_i^2}, \quad b_0 = \frac{3Z_{\text{Pt}}}{\Delta_i} - 1, \quad b_1 = Z_{\text{Pt}} - \Delta_i, \quad (3.123)$$

$$\mathcal{F}_k = \frac{B_k^{i\xi}}{Q^2 + \Delta_k^2}, \quad B_k = \frac{2(v\Delta_k - i\vec{Q} \cdot \vec{v})}{Q^2 + \Delta_k^2}, \quad (k = i, j), \quad (3.124)$$

$$C_k = \frac{v}{\Delta_k B_k} - 1, \quad A_k = \frac{\Delta_k^2}{Q^2 + \Delta_k^2}, \quad D_k = \frac{A_k}{\Delta_k}, \quad (3.125)$$

$$A_{\alpha_k} = 1 - 4A_k, \quad B_{\alpha_k} = 1 + 2A_kC_{\alpha_k}, \quad C_{\alpha_k} = C_k[4 + (1 - i\xi)C_k], \quad (3.126)$$

$$A_{\beta_k} = 6[1 - 2A_k], \quad B_{\beta_k} = 2A_kC_{\beta_k} + 3D_{\beta_k}, \quad D_{\beta_k} = 2 - (1 + i\xi)C_k, \quad (3.127)$$

$$C_{\beta_k} = C_k \{18 + 9(1 - i\xi)C_k + (1 - i\xi)(2 - i\xi)C_k^2\}. \quad (3.128)$$

Сада се тотални ефикасни пресек, уз коришћење израза (3.115), може наћи по формули (2.286), коју овде поново наводимо ради комплетности:

$$Q(\pi a_0^2) = \frac{1}{2\pi^2 v^2} \int_0^\infty d\eta \eta |T_{if}(\vec{\eta})|^2. \quad (3.129)$$

Израз (3.129) представља тродимензиони интеграл по реалним променљивима η , τ и t . Трострука интеграција се врши нумерички, помоћу Гаус-Лежандрових квадратура.

Наравно, да бисмо добили коначну вредност тоталног ефикасног пресека за једноструки електронски захват из дате љуске вишеелектронске мете, неопходно је израз (3.129) помножити бројем електрона у тој љусци n_0 . У случају захвата из К љуске вишеелектронских мета које се налазе у основном стању је $n_0 = 2$.

3.2.2 Скалирање и припрема за нумеричку интеграцију

У погледу смене променљивих, скалирања и припреме за нумеричку интеграцију у оквиру BCIS-3В метода примењеног на једноструки електронски захват из вишеелектронских мета, уз употребу модела независних честица и апроксимације смрзнутог језгра, важе потпуно идентична разматрања као и код BCIS-3В метода примењеног на електронски захват из водонику сличних мета. Ова разматрања изложена су у претходном одељку, а односе се на употребу Гаус-Лежандрових квадратура (3.52), уз смене променљивих (3.53) и (3.88), као и примену Кошијеве регуларизације, по формули (3.89). Стога, садашње излагање ћемо ограничити на излиставање израза за тотални ефикасни пресек који се добија након скалирања, имајући на уму да се сви детаљи из претходног одељка односе и на овај случај.

Након скалирања, добијамо следећи израз за тотални ефикасни пресек:

$$Q(\pi a_0^2) = \mathcal{M}_0 \int_{-1}^{+1} dz |\mathcal{Y}^-|^2, \quad (3.130)$$

где су:

$$\mathcal{M}_0 = \frac{2^6 Z_P^5}{v^2} \frac{\pi \xi}{\sinh \pi \xi} \frac{\pi \nu_T e^{\pi \nu_T}}{\sinh \pi \nu_T}, \quad (3.131)$$

$$\mathcal{Y}^- = \frac{1}{\mathbb{B}(i\nu_{\text{T}}, 1 - i\nu_{\text{T}})} \int_0^1 \frac{d\tau}{\tau} w(\tau) W(\tau), \quad (3.132)$$

$$w(\tau) = \left(\frac{\tau}{1 - \tau} \right)^{i\nu_{\text{T}}}, \quad (3.133)$$

$$W(\tau) = \int_0^1 dt (1 - t) \left[\sum_{i=1}^{i_{\max}} \frac{c_i \mu_i}{\tilde{\Delta}_i^3} (\tilde{\nu}_i - i\xi \tilde{\delta}_i) + \sum_{j=1}^{j_{\max}} \frac{N_j}{\tilde{\Delta}_j^3} (\tilde{\nu}_j - i\xi \tilde{\delta}_j) \right]. \quad (3.134)$$

Величине приказане у изразима (3.66), (3.71), (3.76), (3.77), (3.86) и (3.87) из претходног одељка су и овде дате на исти начин. Преостале величине које се јављају у изразу за тотални ефикасни пресек (3.130) кроз (3.132) и (3.134) скалирају се на следећи начин:

$$\nu_k = z_1^{i\xi+1} \tilde{\nu}_k, \quad \delta_k = z_1^{i\xi+1} \tilde{\delta}_k, \quad (k = i, j), \quad (3.135)$$

$$a_{-1} = \tilde{a}_{-1}, \quad a_0 = \tilde{a}_0, \quad a_1 = \tilde{a}_1, \quad a_2 = \tilde{a}_2, \quad (3.136)$$

$$b_{-1} = \tilde{b}_{-1}, \quad b_0 = \tilde{b}_0, \quad b_1 = \tilde{b}_1, \quad (3.137)$$

$$\Delta_k^2 = \tilde{\Delta}_k^2, \quad p_j = \tilde{p}_j, \quad (k = i, j), \quad (3.138)$$

$$\mathcal{F}_k = z_1^{i\xi+1} \tilde{\mathcal{F}}_k, \quad B_k = z_1 \tilde{B}_k, \quad (k = i, j), \quad (3.139)$$

$$C_k = z_0 \tilde{C}_k, \quad A_k = z_1 \tilde{A}_k, \quad D_k = z_1 \tilde{D}_k, \quad (3.140)$$

$$A_{\alpha_k} = \tilde{A}_{\alpha_k}, \quad B_{\alpha_k} = z_0 \tilde{B}_{\alpha_k}, \quad C_{\alpha_k} = z_0^2 \tilde{C}_{\alpha_k}, \quad (3.141)$$

$$A_{\beta_k} = \tilde{A}_{\beta_k}, \quad B_{\beta_k} = z_0^2 \tilde{B}_{\beta_k}, \quad C_{\beta_k} = z_0^3 \tilde{C}_{\beta_k}, \quad D_{\beta_k} = z_0 \tilde{D}_{\beta_k}. \quad (3.142)$$

Саме скалиране величине које се јављају у изразу за тотални ефикасни пресек (3.130) дате су следећим изразима:

$$\tilde{\nu}_i = \tilde{b}_{-1}\tilde{\mathcal{F}}_i + 2z_1\tilde{b}_0\tilde{D}_i\tilde{\mathcal{F}}_i - \frac{2z_1\tilde{b}_1\tilde{D}_i\tilde{\mathcal{F}}_i\tilde{A}_{\alpha_i}}{\tilde{\Delta}_i}, \quad (3.143)$$

$$\tilde{\nu}_j = \tilde{a}_{-1}\tilde{\mathcal{F}}_j + 2z_1\tilde{a}_0\tilde{D}_j\tilde{\mathcal{F}}_j - \frac{2z_1\tilde{a}_1\tilde{D}_j\tilde{\mathcal{F}}_j\tilde{A}_{\alpha_j} + 4z_1^2\tilde{a}_2\tilde{D}_j^2\tilde{\mathcal{F}}_j\tilde{A}_{\beta_j}}{\tilde{\Delta}_j}, \quad (3.144)$$

$$\tilde{\delta}_i = 2\tilde{b}_0\tilde{D}_i\tilde{\mathcal{F}}_i\tilde{C}_i + \frac{2\tilde{b}_1\tilde{D}_i\tilde{\mathcal{F}}_i\tilde{B}_{\alpha_i}}{\tilde{\Delta}_i}, \quad (3.145)$$

$$\tilde{\delta}_j = 2\tilde{a}_0\tilde{D}_j\tilde{\mathcal{F}}_j\tilde{C}_j + \frac{2\tilde{a}_1\tilde{D}_j\tilde{\mathcal{F}}_j\tilde{B}_{\alpha_j} + 4\tilde{a}_2\tilde{D}_j^2\tilde{\mathcal{F}}_j\tilde{B}_{\beta_j}}{\tilde{\Delta}_j}, \quad (3.146)$$

$$\tilde{\mathcal{F}}_k = \frac{\tilde{B}_k^{i\xi}}{\tilde{Q}^2 + \tilde{\Delta}_k^2}, \quad \tilde{B}_k = \frac{2(v\tilde{\Delta}_k - i\tilde{Q} \cdot \vec{v})}{\tilde{Q}^2 + \tilde{\Delta}_k^2}, \quad (k = i, j), \quad (3.147)$$

$$\tilde{C}_k = \frac{v}{\tilde{\Delta}_k\tilde{B}_k} - z_1, \quad \tilde{A}_k = \frac{\tilde{\Delta}_k^2}{\tilde{Q}^2 + \tilde{\Delta}_k^2}, \quad \tilde{D}_k = \frac{\tilde{A}_k}{\tilde{\Delta}_k}, \quad (3.148)$$

$$\tilde{B}_{\alpha_k} = z_1 + 2\tilde{A}_k\tilde{C}_{\alpha_k}, \quad \tilde{C}_{\alpha_k} = \tilde{C}_k[4z_1 + (1 - i\xi)\tilde{C}_k], \quad (3.149)$$

$$\tilde{B}_{\beta_k} = 2\tilde{A}_k\tilde{C}_{\beta_k} + 3z_1\tilde{D}_{\beta_k}, \quad \tilde{D}_{\beta_k} = 2z_1 - (1 + i\xi)\tilde{C}_k, \quad (3.150)$$

$$\tilde{C}_{\beta_k} = \tilde{C}_k \left\{ 18z_1^2 + 9z_1(1 - i\xi)\tilde{C}_k + (1 - i\xi)(2 - i\xi)\tilde{C}_k^2 \right\}, \quad (3.151)$$

при чему нису експлицитно навођене скалиране величине за које се из релација (3.135)-(3.142) јасно види да су непромењене.

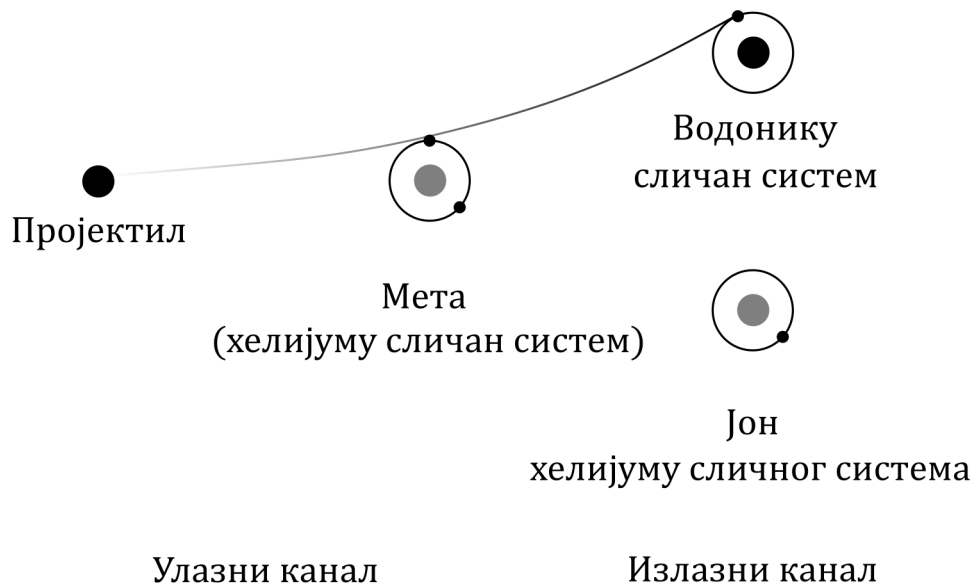
Овим је израз за израчунавање тоталних ефикасних пресека (3.130) у потпуности дефинисан, а све неопходне припреме за ефикасну нумеричку интеграцију су обављене.

3.3 Четворочестична формулација

У овом одељку ћемо размотрити једноструки електронски захват од стране потпуно огољених пројектила из хелијуму сличних мета које се налазе у основном стању, при чему се захват врши у произвољно финално стање. Овај процес је шематски приказан на слици 7 и дат следећом релацијом:

$$Z_P + (Z_T; e_1, e_2)_{1s^2} \longrightarrow (Z_P; e_1)_{n^f l^f m^f} + (Z_T; e_2)_{1s}, \quad (3.152)$$

при чему је финално стање $f = n^f l^f m^f$, где $\{n^f, l^f, m^f\}$ представљају главни, орбитални и магнетни квантни број, респективно, водоничне функције новонасталиг водонику сличног система $(Z_P; e_1)_{n^f l^f m^f}$ у излазном каналу (што је и наглашено експонентом f). У улазном каналу, хелијуму сличан систем $(Z_T; e_1, e_2)_{1s^2}$ се налази у основном синглетном стању $1s^2 \equiv {}^1S$. У излазном каналу, водонику сличан систем $(Z_T; e_2)_{1s}$ се налази у основном $1s$ стању.



Слика 7: Шематски приказ процеса једноструког електронског захвата у судару потпуно огољеног пројектила са хелијуму сличном метом.

У претходном поглављу дат је израз за приор форму амплитуде прелаза (2.280) у BCIS-4В апроксимацији, за захват из произвољног иницијалног стања мете i . Међутим, пошто нам је од интереса био искључиво захват из основног стања хелијуму сличних мета, таласна функција $\varphi_i(\vec{x}_1, \vec{x}_2)$ у нашем случају то и представља. Као што је већ напоменуто у претходном поглављу, својствени

проблем хелијуму сличног система није аналитички решив. Међутим, доступна су бројна апроксимативна решења, најчешће добијена варијационим методима. За основно стање хелијуму сличног система таласна функција најчешће се може приказати следећим генералним факторизованим обликом:

$$\varphi_i(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = \sum_{k,l} \varphi_{\alpha_k}(\vec{x}_1) \varphi_{\alpha_l}(\vec{x}_2), \quad (3.153)$$

где је $\varphi_{\alpha_j}(\vec{r}) = N_{\alpha_j} e^{-\alpha_j r}$, $N_{\alpha_j} = a_j \sqrt{N}$ ($j = k, l$), а N је нормализациона константа. Вредности сумационих индекса k и l , варијационих параметара α_j и a_j , као и нормализационе константе N зависе од конкретног избора таласне функције (3.153). Иницијална везивна енергија мете $(Z_T; e_1, e_2)_{1s^2}$ у основном стању E_i такође се одређује варијационим методом. Генералним изразом (3.153) може се представити неколико таласних функција различитих аутора. Неке од таласних функција које се често користе за описивање основног стања хелијуму сличних система су:

1. Једнопараметарска таласна функција Hylleraas-а [99]:

$$\varphi_i(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = \frac{\alpha^3}{\pi} e^{-\alpha(x_1+x_2)}, \quad (3.154)$$

2. Двопараметарска таласна функција Eckart-а [97] или Silverman *et al.* [96]:

$$\varphi_i(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = N (e^{-\alpha_1 x_1 - \alpha_2 x_2} + e^{-\alpha_2 x_1 - \alpha_1 x_2}), \quad (3.155)$$

3. Тропараметарска таласна функција Green *et al.* [108]:

$$\varphi_i(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = N (e^{-\alpha_1 x_1} + a e^{-\alpha_2 x_1}) (e^{-\alpha_1 x_2} + a e^{-\alpha_2 x_2}), \quad (3.156)$$

4. Четворопараметарска таласна функција Löwdin-а [95]:

$$\varphi_i(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = N (a_1 e^{-\alpha_1 x_1} + a_2 e^{-\alpha_2 x_1}) (a_1 e^{-\alpha_1 x_2} + a_2 e^{-\alpha_2 x_2}), \quad (3.157)$$

У оквиру ове дисертације основно стање хелијуму сличних мета описиваћемо двопараметарском таласном функцијом Silverman *et al.* [96], с обзиром на то да она урачунава око 95% радијалних корелација. Нормализациона константа за Silverman *et al.* [96] таласну функцију дата је изразом $N = [(\alpha_1 \alpha_2)^{-3} + (\alpha_1/2 + \alpha_2/2)^{-6}]^{-1/2} / (\sqrt{2}\pi)$. Вредности параметара који се јављају у изразу (3.155) за

$\text{He}(1s^2)$ као мету износе $\alpha_1 = 2.183171$ и $\alpha_2 = 1.18853$, са иницијалном везивном енергијом $E_i = -2.8756614$. За $\text{Li}^+(1s^2)$ као мету, вредности параметара износе $\alpha_1 = 3.294909$ и $\alpha_2 = 2.078981$, са иницијалном везивном енергијом $E_i = -7.248748$.

Таласне функције пројектила $(Z_P; e_1)_{n^f l^f m^f}$ и мете $(Z_T; e_2)_{1s}$ означене су са $\varphi_P(\vec{s}_1)$ и $\varphi_T(\vec{x}_2)$, респективно и представљају водоничне функције. Мета се након захвата налази у основном стању:

$$\varphi_T(\vec{x}_2) = \sqrt{\frac{Z_T^3}{\pi}} e^{-Z_T x_2}, \quad (3.158)$$

при чему њена финална везивна енергија износи $E_{f_2} = -Z_T^2/2$. Таласна функција $\varphi_P(\vec{s}_1)$ описује произвољно финално стање пројектила. С обзиром да не постоји могућност забуне, увешћемо ознаку $n^f l^f m^f \equiv nlm$, као и следећу ознаку за финалну таласну функцију пројектила:

$$\varphi_P(\vec{s}_1) = \varphi_{nlm}(\vec{s}_1), \quad (3.159)$$

при чему финална везивна енергија пројектила износи $E_{f_1} = -Z_P^2/2n^2$. Укупна финална везивна енергија целокупног система стога износи $E_f = -Z_P^2/2n^2 - Z_T^2/2$.

Имајући све ово у виду, израз (2.280) за амплитуду прелаза се, уз употребу израза (2.143) из претходног поглавља, као и (3.153), (3.158) и (3.159), своди на:

$$\begin{aligned} T_{if}(\vec{\eta}) &= \frac{Z_P Z_T^{3/2}}{\sqrt{\pi}} N^+(\nu_T) \sum_{k,l} \int \int \int d\vec{R} d\vec{s}_1 d\vec{s}_2 \varphi_{nlm}^*(\vec{s}_1) \left(\frac{2}{R} - \frac{1}{s_1} - \frac{1}{s_2} \right) \varphi_{\alpha_k}(\vec{x}_1) \varphi_{\alpha_l}(\vec{x}_2) \\ &\times e^{i\vec{\beta} \cdot \vec{R} - i\vec{v} \cdot \vec{s}_1 - Z_T x_2} {}_1F_1(i\nu_T, 1, i\nu x_1 + i\vec{v} \cdot \vec{x}_1) (vR + \vec{v} \cdot \vec{R})^{i\xi}, \end{aligned} \quad (3.160)$$

при чему је и овде ознака „BCIS–“ изостављена из експонента амплитуде прелаза, ради концизности.

3.3.1 Аналитичко израчунавање

Сада ћемо приступити аналитичком решавању деветоструког интеграла да-тог изразом (3.160), докле год је то изводљиво. Израчунавање амплитуде прелаза (3.160), које је у наставку приказано, по први пут је урађено у оквиру ове докторске дисертације. С обзиром на то да у погледу аналитичког израчунавања за захват у произвољна финална стања постоје бројне сличности између BCIS-3В и BCIS-4В случаја, где год је прикладно повући ћемо одговарајуће паралеле и учинити излагање концизнијим.

Кумерову конфлуентну хипергеометријску функцију у (3.160) представићемо у интегралној репрезентацији (3.4), као и у претходним случајевима. На овај начин се амплитуда прелаза дата изразом (3.160) може записати на следећи начин:

$$T_{if}(\vec{\eta}) = \mathcal{M} \int_0^1 d\tau f(\tau) \mathcal{S}_{if}(\tau), \quad (3.161)$$

$$f(\tau) = \tau^{i\nu_T-1}(1-\tau)^{-i\nu_T}, \quad \mathcal{M} = \frac{N^+(\nu_T)}{\Gamma(i\nu_T)\Gamma(1-i\nu_T)} = \frac{e^{\pi\nu_T/2}}{\Gamma(i\nu_T)}, \quad (3.162)$$

$$\mathcal{S}_{if}(\tau) = \sum_{k,l} N_{\alpha_k} N_{\alpha_l} \int d\vec{R} e^{i\vec{\beta}\cdot\vec{R}} (vR + \vec{v}\cdot\vec{R})^{i\xi} \mathcal{T}(\vec{R}), \quad (3.163)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{T}(\vec{R}) &= \frac{Z_P Z_\Gamma^{3/2}}{\sqrt{\pi}} \int \int d\vec{s}_1 d\vec{s}_2 \varphi_{nlm}^*(\vec{s}_1) e^{-i\vec{v}\cdot\vec{s}_1} \left(\frac{2}{R} - \frac{1}{s_1} - \frac{1}{s_2} \right) \\ &\times e^{-(Z_\Gamma + \alpha_l)x_2} \psi_k(\vec{x}_1), \end{aligned} \quad (3.164)$$

$$\psi_k(\vec{x}_1) = e^{-\alpha_k x_1 + i(vx_1 + \vec{v}\cdot\vec{x}_1)\tau}. \quad (3.165)$$

У израчунавањима која следе у великој мери су искоришћени резултати приказани у радовима [36, 67, 94, 132].

Величину $\mathcal{T}(\vec{R})$ сада можемо записати на следећи начин:

$$\mathcal{T}(\vec{R}) = Z_P \left[\frac{2}{R} W_R(\vec{R}) - W_{s_1}(\vec{R}) - W_{s_2}(\vec{R}) \right], \quad (3.166)$$

где су:

$$W_R(\vec{R}) = \mathcal{A}_k \mathcal{C}_l, \quad W_{s_1}(\vec{R}) = \mathcal{B}_k \mathcal{C}_l, \quad W_{s_2}(\vec{R}) = \mathcal{A}_k \mathcal{D}_l, \quad (3.167)$$

$$\mathcal{A}_k = \int d\vec{s}_1 \varphi_{nlm}^*(\vec{s}_1) e^{-i\vec{v}\cdot\vec{s}_1} \psi_k(\vec{x}_1), \quad (3.168)$$

$$\mathcal{B}_k = \int d\vec{s}_1 \varphi_{nlm}^*(\vec{s}_1) \frac{1}{s_1} e^{-i\vec{v}\cdot\vec{s}_1} \psi_k(\vec{x}_1), \quad (3.169)$$

$$\mathcal{C}_l = \frac{Z_T^{3/2}}{\sqrt{\pi}} \int d\vec{s}_2 e^{-(Z_T+\alpha_l)x_2}, \quad (3.170)$$

$$\mathcal{D}_l = \frac{Z_T^{3/2}}{\sqrt{\pi}} \int d\vec{s}_2 \frac{1}{s_2} e^{-(Z_T+\alpha_l)x_2}. \quad (3.171)$$

Интеграли (3.170) и (3.171) се лако решавају:

$$\mathcal{C}_l = 8\sqrt{\pi} Z_T^{3/2} (Z_T + \alpha_l)^{-3}, \quad (3.172)$$

$$\mathcal{D}_l = 4\sqrt{\pi} Z_T^{3/2} (Z_T + \alpha_l)^{-2} \left[\frac{2}{(Z_T + \alpha_l)R} - \left(1 + \frac{2}{(Z_T + \alpha_l)R} \right) e^{-(Z_T+\alpha_l)R} \right], \quad (3.173)$$

док се интеграли дати изразима (3.168) и (3.169), уз употребу Фејнмановог параметарског интеграла (3.24), решавају на начин потпуно аналоган BCIS-3B случају:

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_k &= \mu_k \sqrt{\pi} N_f^{Z_P} (-i)^l \sum_{p=0}^{n_r} \frac{C_p}{2^n n!} \sum_{\lambda_1=|m|}^l (-i)^{\lambda_1} \Omega(\lambda_1, v) \\ &\times \int_0^1 dt \frac{t^n (1-t)^{\lambda_2+1}}{\Delta^{2n-2\lambda_1-1}} e^{-i\vec{Q}_\beta \cdot \vec{R}} B_{\nu_2 \lambda_1, -m}^{(\Delta)}(\vec{R}), \end{aligned} \quad (3.174)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{B}_k &= \mu_k \sqrt{\pi} \frac{N_f^{Z_P}}{2Z_P} (-i)^l \sum_{p=0}^{n_r} \frac{C_p}{2^{n-1} (n-1)!} \sum_{\lambda_1=|m|}^l (-i)^{\lambda_1} \Omega(\lambda_1, v) \\ &\times \int_0^1 dt \frac{t^{n-1} (1-t)^{\lambda_2+1}}{\Delta^{2n-2\lambda_1-3}} e^{-i\vec{Q}_\beta \cdot \vec{R}} B_{\nu_1 \lambda_1, -m}^{(\Delta)}(\vec{R}), \end{aligned} \quad (3.175)$$

где су:

$$\mu_k = \alpha_k - iv\tau, \quad \Delta^2 = v_1^2 t(1-t) + a_f^2 t + \mu_k^2 (1-t), \quad (3.176)$$

док су све остале новоуведене величине у изразима (3.174) и (3.175) дефинисане на исти начин као и у BCIS-3B случају, у првом одељку ове главе. Истакнимо на овом месту следећу битну околност: амплитуда прелаза (3.160) у BCIS-4B

случају у односу на ону (3.3) у BCIS-3В случају садржи троструку интеграцију више (због два активна електрона). Међутим, као што видимо из израза (3.170) и (3.171), интеграл по $d\vec{s}_2$ су потпуно аналитички решиви. Ово ће омогућити да се и BCIS-4В амплитуда прелаза у коначном изрази као двоструки интеграл по реалним променљивима, баш као и BCIS-3В амплитуда прелаза (3.48).

Заменом израза (3.172)-(3.175) у изразе (3.167), уз једначину (3.166), израз (3.163) за $\mathcal{S}_{if}(\tau)$ трансформише се у следећи:

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_{if}(\tau) &= 4\pi Z_P Z_T^{3/2} (-i)^l N_f^{Z_P} \sum_{k,l} N_{\alpha_k} N_{\alpha_l} \mu_k (Z_T + \alpha_l)^{-3} \\ &\times \sum_{p=0}^{n_r} \frac{C_p}{2^n n!} \sum_{\lambda_1=|m|}^l (-i)^{\lambda_1} \Omega(\lambda_1, v) \int_0^1 dt \frac{t^{p+l} (1-t)^{\lambda_2+1}}{\Delta^{2n-2\lambda_1-3}} \\ &\times \left[\frac{2t}{\Delta^2} I_0^{(p,\lambda_1)} - \frac{2n}{Z_P} I_1^{(p,\lambda_1)} + \frac{2t}{\Delta^2} I_0'^{(p,\lambda_1)} + \frac{t}{\Delta^2} (Z_T + \alpha_l) I_1'^{(p,\lambda_1)} \right], \end{aligned} \quad (3.177)$$

при чему су интегрални $I_\delta^{(p,\lambda_1)}$ дати изразом (3.35), односно, након решавања, изразом (3.36). Преостали нови интегрални $I_\delta'^{(p,\lambda_1)}$ који се појављују у изразу (3.177) дати су следећом релацијом:

$$I_\delta'^{(p,\lambda_1)} = \int d\vec{R} (vR + \vec{v} \cdot \vec{R})^{i\xi} e^{-i\vec{Q} \cdot \vec{R}} e^{-(Z_T + \alpha_l)R} B_{\nu_2 \lambda_1, -m}^{(\Delta)}(\vec{R}) R^{\delta-1}, \quad \delta = 0, 1. \quad (3.178)$$

Налик BCIS-3В случају, након позамашног рачунања интеграла $I_\delta'^{(p,\lambda_1)}$, пратећи референце [36, 67, 132], долазимо до коначног резултата:

$$I_\delta'^{(p,\lambda_1)} = 4\pi (-1)^{\lambda_1} (2i)^{\lambda_1} \frac{(2n_p)!}{n_p!} \sum_{p_r=0}^{n_p} \frac{(-n_p)_{p_r}}{(-2n_p)_{p_r}} \frac{2^{p_r-n_p}}{p_r!} \Delta^{p_r} G_{p_r \lambda_1, -m}^{(\delta, \Delta')}(\vec{Q}), \quad (3.179)$$

где је:

$$\Delta' = \Delta + (Z_T + \alpha_l). \quad (3.180)$$

Све величине које се појављују у интегралима $I_\delta^{(p,\lambda_1)}$ већ су дефинисане у одељку везаном за трочестичну формулацију BCIS метода, при чему је једина разлика у дефиницији величине Δ . У трочестичном случају она је дата изразом (3.28), а у четворочестичном изразом (3.176). Наравно, постоји и разлика у везивним енергијама E_i и E_f у овим случајевима. Сем тога, изрази су формално идентични, те ове величине неће овде бити поново понаособ навођене.

Што се тиче нових величина $G_{pr\lambda_1,-m}^{(\delta,\Delta')}(\vec{Q})$, које се јављају у изразу (3.180) за интеграле $I_{\delta}^{(p,\lambda_1)}$, њихови изрази су такође потпуно аналогни онима из трочестичног случаја, изузев што треба извршити замену $\Delta \rightarrow \Delta'$ где год се ова величина појављује. Без обзира на то, ради комплетности, навешћемо све нове величине које се у овим интегралима јављају (али без понављања израза и величина које су потпуно идентичне):

$$G_{pr\lambda_1,-m}^{(\delta,\Delta')}(\vec{Q}) = \sum_{k=0}^{p_{\delta}} \sum_{l_1=|m|}^{\lambda_1} \Phi'_{kl_1}(\delta) \mathcal{D}_{l_1,-m}(\vec{Q} \cdot \vec{v}), \quad (3.181)$$

$$\Phi'_{kl_1}(\delta) = (a'_{\delta} b'_{\delta}) {}_3F_2 \left(-\frac{k_{\delta}}{2}, -\frac{k_{\delta}-1}{2}, 1 - i\gamma_1; k + \lambda_1 + 1, -p_{\delta} - \lambda_1; \frac{1}{A'} \right), \quad (3.182)$$

$$a'_{\delta} = \Gamma(1 + i\xi)(\lambda_1 + 1)_{p_{\delta}} \frac{(2D')^{p_{\delta}}}{((\Delta')^2 + Q^2)^{\lambda_1}} \mathcal{F}', \quad (3.183)$$

$$b'_{\delta} = \frac{(1 + i\xi)_{l_1} (-i\xi)_{l_2} (-p_{\delta})_k (i\gamma_2)_k (-1)^k (C')^k}{(B')^{l_2} (\lambda_1 + 1)_k k!}, \quad (3.184)$$

$$\begin{aligned} & {}_3F_2 \left(-\frac{k_{\delta}}{2}, -\frac{k_{\delta}-1}{2}, 1 - i\gamma_1; k + \lambda_1 + 1, -p_{\delta} - \lambda_1; \frac{1}{A'} \right) \\ &= \sum_{u=0}^{[k_{\delta}/2]} \frac{(-k_{\delta}/2)_u (-k_{\delta}/2 + 1/2)_u (1 - i\gamma_1)_u}{(k + \lambda_1 + 1)_u (-p_{\delta} - \lambda_1)_u u!} \left(\frac{1}{A'} \right)^u, \end{aligned} \quad (3.185)$$

$$A' = \frac{(\Delta')^2}{(\Delta')^2 + Q^2}, \quad B' = \frac{2(v\Delta' - i\vec{Q} \cdot \vec{v})}{(\Delta')^2 + Q^2}, \quad C' = \frac{v}{B'\Delta'} - 1, \quad (3.186)$$

$$D' = \frac{A'}{\Delta'}, \quad \mathcal{F}' = \frac{(B')^{i\xi}}{(\Delta')^2 + Q^2}. \quad (3.187)$$

Помоћу свих наведених међукорак, амплитуда прелаза T_{if} , која у оригиналној формулацији (3.160) представља деветодимензиони интеграл, своди се на дводимензиони интеграл по реалним променљивима τ и t (као и у BCIS-3B

случају):

$$\begin{aligned}
 T_{if}(\vec{\eta}) &= \mathcal{N} \sum_{k,l} \frac{N_{\alpha_k} N_{\alpha_l}}{(Z_T + \alpha_l)^3} \int_0^1 d\tau f(\tau) \mu_k \sum_{p=0}^{n_r} \sum_{\lambda_1=|m|}^l (-2)^{\lambda_1} C_p \Omega(\lambda_1, v) \\
 &\times [X^{(\lambda_1, p_r)} - Z^{(\lambda_1, p_r)}], \tag{3.188}
 \end{aligned}$$

при чему је сада:

$$\mathcal{N} = 16\pi^2 Z_P Z_T^{3/2} (-i)^l \frac{e^{\pi\nu_T/2}}{\Gamma(i\nu_T)}. \tag{3.189}$$

Величине $X^{(\lambda_1, p_r)}$ и $Z^{(\lambda_1, p_r)}$ дате су следећим изразима:

$$\begin{aligned}
 X^{(\lambda_1, p_r)} &= \frac{(2n_p)! N_f^{Z_P}}{2^{n-2} (n-2)! n_p!} \sum_{p_r=0}^{n_p} \frac{(-n_p)_{p_r}}{(-2n_p)_{p_r}} \frac{2^{p_r-n_p}}{p_r!} \int_0^1 dt \frac{t^{n-2} (1-t)^{\lambda_2+1}}{\Delta^{2n-2\lambda_1-p_r-1}} \\
 &\times \left[2 \left(G_{p_r, \lambda_1, -m}^{(0, \Delta)}(\vec{Q}) + G_{p_r, \lambda_1, -m}^{(0, \Delta')}(\vec{Q}) \right) + (Z_T + \alpha_l) G_{p_r, \lambda_1, -m}^{(1, \Delta')}(\vec{Q}) \right], \tag{3.190}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 Z^{(\lambda_1, p_r)} &= \frac{(2\{n_p - 1\})! N_f^{Z_P}}{2^{n-3} Z_P (n-3)! (n_p - 1)!} \sum_{p_r=0}^{n_p-1} \frac{(1-n_p)_{p_r}}{(2\{1-n_p\})_{p_r}} \frac{2^{p_r-n_p+1}}{p_r!} \\
 &\times \int_0^1 dt \frac{t^{n-3} (1-t)^{\lambda_2+1}}{\Delta^{2n-2\lambda_1-p_r-3}} G_{p_r, \lambda_1, -m}^{(1, \Delta)}(\vec{Q}), \tag{3.191}
 \end{aligned}$$

и представљају једнодимензионе интеграле по променљивој t . На основу до сада наведених формула за амплитуду прелаза T_{if} , можемо приметити да у оквиру BCIS-4В метода (као и код BCIS-3В метода), ни диференцијални ни тотални ефикасни пресеци не зависе од знака магнетног квантног броја m .

Сада се тотални ефикасни пресек, уз коришћење израза (3.188), може наћи по формули (2.286), коју овде поново наводимо ради комплетности:

$$Q(\pi a_0^2) = \frac{1}{2\pi^2 v^2} \int_0^\infty d\eta \eta |T_{if}(\vec{\eta})|^2. \tag{3.192}$$

Израз (3.192) представља тродимензиони интеграл по реалним променљивима

η , τ и t , идентичним као и у трочестичном случају. Даље разматрање је стога потпуно аналогно.

Наравно, овде важи слично разматрање као и у случају вишеелектронских мета. Наиме, да бисмо добили коначну вредност ефикасног пресека за једноструки електронски захват из основног стања хелијуму сличних мета, неопходно је израз (3.192) помножити са 2 (с обзиром на то да се у К љусци хелијуму сличних мета налазе два електрона).

3.3.2 Скалирање и припрема за нумеричку интеграцију

У погледу смене променљивих, скалирања и припреме за нумеричку интеграцију у оквиру BCIS-4В метода примењеног на једноструки електронски захват из хелијуму сличних мета, важе потпуно идентична разматрања као и код BCIS-3В метода примењеног на електронски захват из водонику сличних мета. Ова разматрања изложена су у првом одељку ове главе, а односе се на употребу Гаус-Лежандрових квадратура (3.52), уз смене променљивих (3.53) и (3.88), као и примену Кошијеве регуларизације, по формули (3.89). Стога, садашње излагање ћемо ограничити на излиставање израза за тотални ефикасни пресек који се добија након скалирања, имајући на уму да се бројни детаљи из претходног одељка односе и на овај случај.

Након скалирања, добијамо следећи израз за тотални ефикасни пресек:

$$Q(\pi a_0^2) = \mathcal{M}_0 \int_{-1}^{+1} dz \left| \sum_{k,l} \frac{N_{\alpha_k} N_{\alpha_l}}{(Z_T + \alpha_l)^3} \mathcal{Y}_{kl}^- \right|^2, \quad (3.193)$$

где су:

$$\mathcal{M}_0 = \frac{2^8 \pi^2 Z_p^2 Z_T^3}{v^2} \frac{\pi \xi}{\sinh \pi \xi} \frac{\pi \nu_T e^{\pi \nu_T}}{\sinh \pi \nu_T}, \quad (3.194)$$

$$\mathcal{Y}_{kl}^- = \frac{1}{B(i\nu_T, 1 - i\nu_T)} \int_0^1 \frac{d\tau}{\tau} w(\tau) W_{kl}(\tau), \quad (3.195)$$

$$w(\tau) = \left(\frac{\tau}{1 - \tau} \right)^{i\nu_T}, \quad (3.196)$$

$$W_{kl}(\tau) = \mu_k \sum_{p=0}^{n_r} \sum_{\lambda_1=|m|}^l (-2)^{\lambda_1} C_p \Omega(\lambda_1, \nu) \left[\dot{X}^{(\lambda_1, p_r)} - \dot{Z}^{(\lambda_1, p_r)} \right]. \quad (3.197)$$

Примећујемо да су и овде изрази (3.193)-(3.197) по форми у великој мери слични изразима (3.57)-(3.61).

Величине које су се јављале и у BCIS-3В случају се и код BCIS-4В метода скалирају на идентичан начин, те неће бити поново навођене. Да бисмо избегли понављање и додатно оптерећивање текста, навешћемо само скалирање величина које су карактеристичне искључиво за BCIS-4В случај:

$$\dot{X}^{(\lambda_1, p_r)} = z_1^{i\xi+1} \dot{\tilde{X}}^{(\lambda_1, p_r)}, \quad \dot{Z}^{(\lambda_1, p_r)} = z_1^{i\xi+1} \dot{\tilde{Z}}^{(\lambda_1, p_r)}, \quad (3.198)$$

$$\dot{G}_{p_r, \lambda_1, -m}^{(\delta, \Delta')}(\vec{Q}) = z_1^{i\xi+1} \dot{\tilde{G}}_{p_r, \lambda_1, -m}^{(\delta, \tilde{\Delta}')}(\vec{\tilde{Q}}), \quad (3.199)$$

$$\dot{\Phi}'_{kl_1}(\delta) = z_1^{\lambda_1+i\xi+1-l_2} \dot{\tilde{\Phi}}'_{kl_1}(\delta), \quad (3.200)$$

$$\begin{aligned} & {}_3F_2' \left(-\frac{k_\delta}{2}, -\frac{k_\delta-1}{2}, 1-i\gamma_1; k+\lambda_1+1, -p_\delta-\lambda_1; \frac{1}{z_1 \tilde{A}'} \right) \\ &= z_0^{k_\delta} {}_3\tilde{F}_2' \left(-\frac{k_\delta}{2}, -\frac{k_\delta-1}{2}, 1-i\gamma_1; k+\lambda_1+1, -p_\delta-\lambda_1; \frac{z_1^{(k_\delta-u)/u}}{\tilde{A}'} \right), \end{aligned} \quad (3.201)$$

$$\dot{a}'_\delta = z_1^{p_\delta+\lambda_1+i\xi+1} \dot{\tilde{a}}'_\delta, \quad \dot{b}'_\delta = z_0^{k+l_2} \dot{\tilde{b}}'_\delta, \quad (3.202)$$

$$A' = z_1 \tilde{A}', \quad B' = z_1 \tilde{B}', \quad C' = z_0 \tilde{C}', \quad D' = z_1 \tilde{D}', \quad \mathcal{F}' = z_1^{i\xi+1} \tilde{\mathcal{F}}', \quad (3.203)$$

при чему је смисао тачкице изнад величина датих изразима (3.198)-(3.200) и изразом (3.202) идентичан као и у трочестичном случају (код водонику сличних мета), а односи се на величину $\Gamma(1+i\xi)$, која је већ урачуната унутар величине \mathcal{M}_0 дате изразом (3.194).

Саме скалиране величине које се јављају у изразу за тотални ефикасни пресек (3.193) дате су следећим изразима:

$$\begin{aligned} \dot{X}^{(\lambda_1, p_r)} &= \frac{(2n_p)! N_f^{Z_P}}{2^{n-2} (n-2)! n_p!} \sum_{p_r=0}^{n_p} \frac{(-n_p)_{p_r}}{(-2n_p)_{p_r}} \frac{2^{p_r-n_p}}{p_r!} \int_0^1 dt \frac{t^{n-2} (1-t)^{\lambda_2+1}}{\tilde{\Delta}^{2n-2\lambda_1-p_r-1}} \\ &\times \left[2 \left(\dot{G}_{p_r, \lambda_1, -m}^{(0, \tilde{\Delta})}(\tilde{Q}) + \dot{G}_{p_r, \lambda_1, -m}^{(0, \tilde{\Delta}')}(\tilde{Q}) \right) + (Z_T + \alpha_l) \dot{G}_{p_r, \lambda_1, -m}^{(1, \tilde{\Delta}')}(\tilde{Q}) \right], \end{aligned} \quad (3.204)$$

$$\begin{aligned} \dot{Z}^{(\lambda_1, p_r)} &= \frac{(2\{n_p - 1\})! N_f^{Z_P}}{2^{n-3} Z_P (n-3)! (n_p - 1)!} \sum_{p_r=0}^{n_p-1} \frac{(1-n_p)_{p_r}}{(2\{1-n_p\})_{p_r}} \frac{2^{p_r-n_p+1}}{p_r!} \\ &\times \int_0^1 dt \frac{t^{n-3} (1-t)^{\lambda_2+1}}{\tilde{\Delta}^{2n-2\lambda_1-p_r-3}} \dot{G}_{p_r, \lambda_1, -m}^{(1, \tilde{\Delta})}(\tilde{Q}), \end{aligned} \quad (3.205)$$

$$\dot{G}_{p_r, \lambda_1, -m}^{(\delta, \tilde{\Delta}')}(\tilde{Q}) = \sum_{k=0}^{p_\delta} \sum_{l_1=|m|}^{\lambda_1} \dot{\Phi}'_{kl_1}(\delta) \tilde{D}_{l_1, -m}(\tilde{Q} \cdot \vec{v}), \quad (3.206)$$

$$\dot{\Phi}'_{kl_1}(\delta) = (\tilde{a}'_\delta \tilde{b}'_\delta) {}_3\tilde{F}'_2 \left(-\frac{k_\delta}{2}, -\frac{k_\delta - 1}{2}, 1 - i\gamma_1; k + \lambda_1 + 1, -p_\delta - \lambda_1; \frac{z_1^{(k_\delta-u)/u}}{\tilde{A}'} \right), \quad (3.207)$$

$$\begin{aligned} &{}_3\tilde{F}'_2 \left(-\frac{k_\delta}{2}, -\frac{k_\delta - 1}{2}, 1 - i\gamma_1; k + \lambda_1 + 1, -p_\delta - \lambda_1; \frac{z_1^{(k_\delta-u)/u}}{\tilde{A}'} \right) \\ &= \sum_{u=0}^{[k_\delta/2]} \frac{(-k_\delta/2)_u (-k_\delta/2 + 1/2)_u (1 - i\gamma_1)_u}{(k + \lambda_1 + 1)_u (-p_\delta - \lambda_1)_u u!} \left(\frac{z_1^{(k_\delta-u)/u}}{\tilde{A}'} \right)^u, \end{aligned} \quad (3.208)$$

$$\tilde{a}'_\delta = (\lambda_1 + 1)_{p_\delta} \frac{(2\tilde{D}')^{p_\delta}}{((\tilde{\Delta}')^2 + \tilde{Q}^2)^{\lambda_1}} \tilde{F}', \quad (3.209)$$

$$\tilde{b}'_\delta = \frac{(1 + i\xi)_{l_1} (-i\xi)_{l_2} (-p_\delta)_k (i\gamma_2)_k (-1)^k (\tilde{C}')^k}{(\tilde{B}')^{l_2} (\lambda_1 + 1)_k k!}, \quad (3.210)$$

$$\tilde{A}' = \frac{(\tilde{\Delta}')^2}{(\tilde{\Delta}')^2 + \tilde{Q}^2}, \quad \tilde{B}' = \frac{2(v\tilde{\Delta}' - i\tilde{Q} \cdot \vec{v})}{(\tilde{\Delta}')^2 + \tilde{Q}^2}, \quad \tilde{C}' = \frac{v}{\tilde{B}'\tilde{\Delta}'} - 1, \quad (3.211)$$

$$\tilde{D}' = \frac{\tilde{A}'}{\tilde{\Delta}'}, \quad \tilde{\mathcal{F}}' = \frac{(\tilde{B}')^{i\xi}}{(\tilde{\Delta}')^2 + \tilde{Q}^2}, \quad \tilde{\Delta}' = \Delta'. \quad (3.212)$$

Овим је израз за израчунавање тоталних ефикасних пресека (3.193) у потпуности дефинисан, а све неопходне припреме за ефикасну нумеричку интеграцију су обављене.

Глава 4

Резултати и дискусија

У овој глави ће теоријски резултати добијени у оквиру приор форме BCIS метода бити представљени у графичком облику. Где год су доступни, на графицима су приказани и резултати одговарајућих мерења. Ово омогућава ефикасније поређење са теоријским резултатима, као и њихову критичку евалуацију. У појединим случајевима на графицима ће бити приказани и резултати других теоријских приступа, ради процене успешности BCIS метода, као и сагледавања различитих теоријских приступа у ширем контексту. Поред графичких приказа, новодобијени теоријски резултати су за поједине сударне процесе представљени и у табеларној форми у Прилогу Г.

Графички резултати ће најпре бити приказани у оквиру BCIS-3В метода за електронски захват из водонику сличних мета у произвољно стање nlm пројектила:

$$Z_P + (Z_T; e)_{1s} \longrightarrow (Z_P; e)_{nlm} + Z_T. \quad (4.1)$$

Након тога, биће приказани резултати у оквиру BCIS-4В метода за једноструки електронски захват из хелијуму сличних мета у произвољно стање пројектила:

$$Z_P + (Z_T; e_1, e_2)_{1s^2} \longrightarrow (Z_P; e_1)_{nlm} + (Z_T; e_2)_{1s}. \quad (4.2)$$

На тим графицима ће истовремено бити приказани и резултати добијени применом BCIS-3В метода, при чему се четворочестични процес дат изразом (4.2) моделира као трочестични:

$$Z_P + (Z_T^{\text{eff}}; e)_{1s} \longrightarrow (Z_P; e)_{nlm} + Z_T^{\text{eff}}. \quad (4.3)$$

У овом приступу, хелијуму слична мета моделује се као водонику слична, уз

употребу модела независних честица, као и апроксимације смрзнутог језгра (аналогно случају примене BCIS-3B метода на вишеелектронске мете). Сматра се да је само један електрон активан (тј. да учествује у прелазу), док се утицај преосталог пасивног електрона огледа (готово) искључиво у Слејтеровом екранирању мете, тако да њено ефикасно наелектрисање износи $Z_T^{\text{eff}} = Z_T - \lambda_S$. Коефицијент екранирања износи $\lambda_S = 5/16$, тако да је $Z_T^{\text{eff}} = Z_T - 5/16$. Једини преостали утицај постојања пасивног електрона састоји се у томе што је ефикасне пресеке, на овај начин добијене у оквиру BCIS-3B метода, неопходно помножити фактором 2, с обзиром на то да се из мете може захватити било који од два електрона (ово је већ напоменуто у претходном поглављу).

Коначно, биће приказани резултати у оквиру BCIS-3B метода за једноструки електронски захват из вишеелектронских мета у основно стање пројектила, по процесу:

$$Z_P + (Z_T^{\text{eff}}; e)_i \longrightarrow (Z_P; e)_{1s} + Z_T^{\text{eff}}, \quad (4.4)$$

при чему ће у овом случају бити употребљен RHF модел за изражавање таласних функција основног стања вишеелектронских мета. Насупрот претходној глави, где је излагање текло у складу са сличностима у самом аналитичком рачуну неопходном за израчунавање амплитуде прелаза, у овој је усвојен приступ излагања резултата по растућем броју електрона мете (најпре за једноелектронске, затим за двоелектронске и на крају за вишеелектронске).

Неопходно је сада увести одговарајућу номенклатуру везану за ефикасне пресеке. Тотални и диференцијални ефикасни пресеци за захват у конкретно финално водонично стање nlm биће означени са Q_{nlm} и $(dQ/d\Omega)_{nlm}$, респективно. Одговарајући ефикасни пресеци Q_{nl} и $(dQ/d\Omega)_{nl}$ за захват у дату подљуску nl се затим добијају сумирањем по магнетном квантном броју $-l \leq m \leq l$:

$$Q_{nl} = \sum_{m=-l}^l Q_{nlm}, \quad \left(\frac{dQ}{d\Omega}\right)_{nl} = \sum_{m=-l}^l \left(\frac{dQ}{d\Omega}\right)_{nlm}, \quad (4.5)$$

док се ефикасни пресеци Q_n и $(dQ/d\Omega)_n$ за захват у дату љуску n добијају додатним сумирањем по орбиталном квантном броју $0 \leq l \leq n - 1$:

$$Q_n = \sum_{l=0}^{n-1} Q_{nl}, \quad \left(\frac{dQ}{d\Omega}\right)_n = \sum_{l=0}^{n-1} \left(\frac{dQ}{d\Omega}\right)_{nl}. \quad (4.6)$$

За процесе (4.1) и (4.2), односно (4.3), биће израчунати сви парцијални тотални ефикасни пресеци Q_{nlm} , Q_{nl} и Q_n , закључно са неком максималном вредношћу главног квантног броја n_{max} . Сумирани тотални ефикасни пресеци Q_Σ се потом рачунају на основу Опенхајмеровог закона скалирања [25, 92]:

$$Q_\Sigma \simeq \sum_{n=1}^{n_{max}-1} Q_n + \gamma(n_{max})Q_{n_{max}}, \quad (4.7)$$

при чему се помоћу фактора $\gamma(n_{max})$ урачунава допринос од свих виших побуђењих стања са $n > n_{max}$. Вредности функције $\gamma(n_{max})$ дате су следећим изразом:

$$\gamma(n_{max}) = 1 + 1.202n_{max}^3 - \sum_{n=1}^{n_{max}} \left(\frac{n_{max}}{n}\right)^3. \quad (4.8)$$

Вредности $\gamma(n_{max})$ за конкретне n_{max} ће бити приказане у наставку. Критеријум за одабир максималне вредности главног квантног броја n_{max} је конвергенција израза (4.7) стварној вредности:

$$Q_\Sigma = \sum_{n=1}^{\infty} Q_n, \quad (4.9)$$

која се, очигледно, не може израчунати из практичних разлога. Често се за граничну вредност узима један ниво више у односу на вредност наелектрисања пројектила, тј. $n_{max} = Z_P + 1$, за коју се може показати (за сваки конкретан процес понаособ) да је сасвим довољна да се обезбеди конвергенција израза (4.7) стварној вредности (4.9). Најчешће се, међутим, могу узети и мање вредности n_{max} , као што ће бити показано у наставку.

Све наведено за тоталне ефикасне пресеке важи и за диференцијалне ефикасне пресеке, тако да је сумирани диференцијални пресек $(dQ/d\Omega)_\Sigma$ дат изразом:

$$\left(\frac{dQ}{d\Omega}\right)_\Sigma \simeq \sum_{n=1}^{n_{max}-1} \left(\frac{dQ}{d\Omega}\right)_n + \gamma(n_{max}) \left(\frac{dQ}{d\Omega}\right)_{n_{max}}, \quad (4.10)$$

а његова стварна вредност изразом:

$$\left(\frac{dQ}{d\Omega}\right)_\Sigma = \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{dQ}{d\Omega}\right)_n. \quad (4.11)$$

Парцијални и сумирани диференцијални ефикасни пресеци биће израчунати за процесе (4.1) и (4.2), са H^+ јоном као пројектилом, на водоничној (у оквиру

BCIS-3B метода) и хелијумској (у оквиру BCIS-4B метода) мети, респективно.

За процес (4.4) биће израчунат тотални ефикасни пресек за захват у основно стање $n_{lm} = 100 \equiv 1s$. Сумирани тотални ефикасни пресек тада се израчунава по изразу (4.10), уз $n_{max} = 1$ и $\gamma(1) = 1.202$.

4.1 Конвергенција ефикасних пресека

Пре него што пређемо на приказ графичких резултата, продискутоваћемо укратко питање конвергенције нумерички израчунатих интеграла, односно самих ефикасних пресека. Поставили смо критеријум да све вредности ефикасних пресека, парцијалних тоталних Q_{nlm} , Q_{nl} и Q_n , односно диференцијалних $(dQ/d\Omega)_{nlm}$, $(dQ/d\Omega)_{nl}$ и $(dQ/d\Omega)_n$, као и сумираних тоталних Q_Σ , односно диференцијалних $(dQ/d\Omega)_\Sigma$, конвергирају на минимум два децимална места (три цифре). Једино одступање од овог захтева начињено је код јонских мета, где смо поставили захтев да ефикасни пресеци конвергирају минимум на нивоу од 1%. Питању конвергенције ефикасних пресека посвећена је посебна пажња током израде дисертације. Резултат ових истраживања су одређена емпиријски утврђена правила, која омогућују да се проблему конвергенције приступи систематично, уз максимално ефикасан утрошак рачунарских ресурса. Истакнимо да је ово питање значајно услед тога што сви тотални ефикасни пресеци представљају тродимензионе интеграле, док диференцијални ефикасни пресеци представљају дводимензионе интеграле. Интегрални су у нашем приступу решени помоћу Гаус-Лежандрових квадратура (тродимензионих за тоталне и дводимензионих за диференцијалне ефикасне пресеке). Број интеграционих тачака узетих у Гаус-Лежандровим квадратурним формулама ћемо убудуће означавати са NGL. Како је број сабирака у Гаус-Лежандровим квадратурама степена функција броја интеграционих тачака NGL (код тоталних $(NGL)^3$, а код диференцијалних $(NGL)^2$), очигледно је да превелико повећање NGL врло брзо може изазвати велике рачунске потешкоће (велико време израчунавања ради постизања жељене конвергенције). Стога је ово питање врло значајно за практичну примену развијених метода.

С обзиром на то да су сви методи развијени у оквиру ове дисертације BCIS типа, природно је претпоставити да ће исте/сличне правилности бити уочене код свих њих. Спроведени „нумерички експерименти“ су показали да то заиста и јесте случај, те закључке наводимо обједињено за сва три метода (BCIS-3B,

BCIS-4B и BCIS-3B у оквиру RHF модела). Уколико се неки закључак односи само на један од наведена три метода, то ће бити посебно наглашено.

Најупадљивија карактеристика везана за конвергенцију ефикасних пресека је њена зависност од инцидентне енергије пројектила, као и постојање максимума конвергенције (најмањи број интеграционих тачака неопходан за остваривање конвергенције на два децимална места). Наиме, најмање интеграционих тачака за остваривање конвергенције на два децимална места је неопходно на некој средњој или високој (зависно од мете) вредности енергије, док се на нижим/вишим енергијама од ове број неопходних интеграционих тачака прогресивно повећава са даљим снижавањем/повећавањем енергије. Анализом ових правилности код водоничне, хелијумске, јонских, као и вишеелектронских мета, утврђено је да положај овог максимума зависи од наелектрисања мете (док, за дату мету, положај максимума не зависи значајно од наелектрисања пројектила). На пример, за водоничну и хелијумску мету, максимум се јавља на вредности енергије реда величине 100 keV/amu. За мете са већим наелектрисањем, максимум се јавља на већој инцидентној енергији. Ово за последицу такође има да се конвергенција квари на енергији испод овог максимума, док се изнад њега поправља са повећањем наелектрисања мете. Управо то је разлог нижег критеријума за конвергенцију код јонских мета (ниво 1%). На пример, код $\text{Li}^{2+}(1s)$ мете се на 30 keV/amu јављају већи проблеми са конвергенцијом. Ови проблеми у принципу јесу отклоњиви са довољно великим бројем интеграционих тачака. Међутим, с обзиром на то да се код јонских мета не добијају нарочито репрезентативни резултати (као што ће бити приказано на сликама 28-31), процењено је да нема потребе додатно повећавати NGL, јер прелаз са нивоа конвергенције од 1% на ниво од два децимална места неће довести до видљивих побољшања. Још једна битна опсервација је да се са растућом вредности наелектрисања пројектила конвергенција на високим енергијама поправља. На нижим енергијама није уочена зависност конвергенције од наелектрисања пројектила.

Уколико говоримо о BCIS-3B методу примењеном на водонику и хелијуму сличне мете, као и BCIS-4B методу примењеном на хелијуму сличне мете (дакле о методима који су развијени за захват у произвољна финална стања), можемо уочити да је на високим вредностима енергије (након максимума конвергенције) неопходно више интеграционих тачака при рачунању ефикасних пресека за захват у виша побуђена стања. Другим речима, што је већи главни кванти број n датог парцијалног пресека, то је већи NGL неопходан за остваривање задовољавајуће конвергенције. Такође, унутар дате љуске, већи NGL је неопходан за ниже орбиталне квантне бројеве l , док се неопходан број интеграционих

тачака смањује са повећањем l . Ова опсервација, заједно са онима изложеним у претходном пасусу, је једна од најзначајнијих са оперативног становишта. Додајемо да сличне правилности везане за квантне бројеве нису уочене на енергијама нижим од максимума конвергенције. Срећом, на најнижим енергијама разматраним у оквиру ове дисертације, а које су већ у домену ниских, не јављају се велики проблеми са конвергенцијом (изузимајући неке јонске мете), која се може остварити са релативно ниским NGL. Далеко веће проблеме стварају високе енергије, за које смо већ утврдили веома корисне правилности.

Још једна корисна опсервација везана је за релативну конвергенцију диференцијалних ефикасних пресека у односу на тоталне, на високим вредностима инцидентних енергија. Наиме, запажено је да је мањи NGL неопходан за остваривање задовољавајуће конвергенције тоталних ефикасних пресека, него диференцијалних. Детаљнија анализа показала је да је то стога што диференцијални ефикасни пресеци значајно боље конвергирају за вредности угла расејања θ веома блиске нули. Како у сударима тешких честица доминира расејање унапред, ово је врло срећна околност, јер главни допринос тоталним ефикасним пресецима долази управо од региона $\theta \approx 0$. За вредности инцидентне енергије разматране у оквиру ове дисертације, за веће вредности угла θ је вредност диференцијалног ефикасног пресека по неколико редова величине мања у односу на ону за $\theta \approx 0$. Стога, иако диференцијални пресеци на већим вредностима угла θ не конвергирају једнако добро као на мањим, те је овде неопходан већи број интеграционих тачака, ова чињеница нема значајне последице на конвергенцију тоталних ефикасних пресека. Дакле, добром конвергенцијом диференцијалних пресека је конвергенција тоталних пресека аутоматски обезбеђена. Ово нуди веома користан метод за брзо утврђивање неопходног NGL за конвергенцију тоталних пресека, с обзиром на то да се диференцијални пресеци знатно брже рачунају, услед једне интеграције мање.

Напоменимо још на крају да се дуго сматрало да је, на високим вредностима инцидентне енергије, узрок значајно спорије конвергенције ефикасних пресека код BCIS метода, у односу на нпр. CB1 методе, члан $f(\tau) = \tau^{i\nu_T-1}(1-\tau)^{-i\nu_T}$ који се јавља у свим изразима за ефикасне пресеке (3.57), (3.130) и (3.193). Наиме, претпоставка је била да је главни проблем у томе што за високе вредности брзине пројектила v Зомерфелдов параметар ν_T постаје веома мали, што изазива велике осцилације поменутог члана $f(\tau) = \tau^{i\nu_T-1}(1-\tau)^{-i\nu_T}$. Међутим, у оквиру израде ове дисертације је показано да то није случај. Наиме, написани су програми у оквиру којих је било могуће применити дељење интервала интеграције на више подинтервала, при чему је најпре извршено дељење само по τ

оси, а тек потом по t или/и z оси (код тоталних ефикасних пресека). Показало се да дељење интервала само по τ оси, за коју је претходно сматрано да је нај-проблематичнија, занемарљиво доприноси побољшању конвергенције ефикасних пресека. Значајно побољшање код тоталних ефикасних пресека се остварује тек када се дељење интервала изврши по све три осе интеграције. Закључак је да узрок лоше конвергенције на високим инцидентним енергијама пројектила није доминантно везана за променљиву τ и члан $f(\tau) = \tau^{i\nu\tau-1}(1-\tau)^{-i\nu\tau}$, већ су интегранди високоосцилаторне функције по све три променљиве τ , t и z по којима се интегрални. Да не би било забуне код читаоца, напоменимо само да је узрок примене дељења интервала интеграције на подинтервале, а не једноставно даљег селективног повећавања броја интеграционих тачака по осам интеграције, била недоступност $NGL > 400$ у датом тренутку. Закључци су свакако идентични.

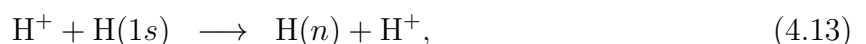
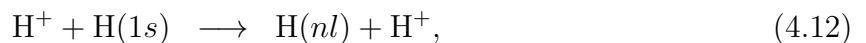
За све процесе које смо разматрали, за добијене резултате употребљено је између 368 и 4048 интеграционих тачака. Изузев при претходно поменутом тестирању осетљивости конвергенције на интеграцију по променљивој τ , нису вршене никакве поделе интеграционих интервала на подинтервале и по свакој оси интеграције употребљен је идентичан број интеграционих тачака. Код свих мета, изузев јонских, остварена је конвергенција свих парцијалних и сумираних, тоталних и диференцијалних ефикасних пресека на два децимална места. Код јонских мета, размотрених како у оквиру BCIS-3B, тако и у оквиру BCIS-4B метода, ефикасни пресеци конвергирају на нивоу од једног процента.

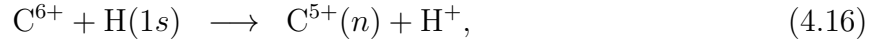
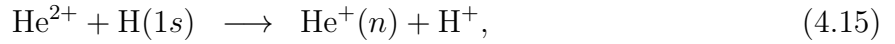
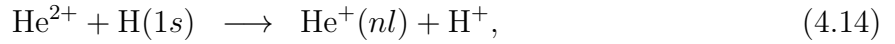
4.2 Водонику сличне мете

У овом одељку биће приказани резултати добијени у оквиру BCIS-3B метода, примењеног на електронски захват из водонику сличних мета од стране потпуно огољених пројектила. Најпре ће бити приказани резултати за саму водоничну мету, а потом и за поједине јонске, водонику сличне мете.

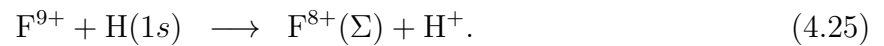
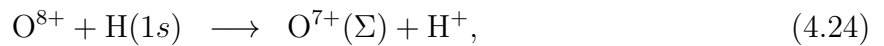
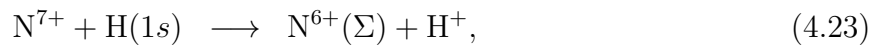
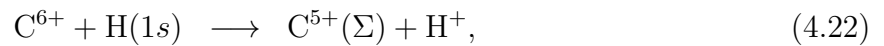
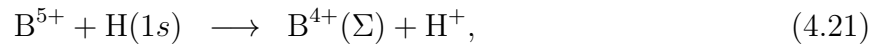
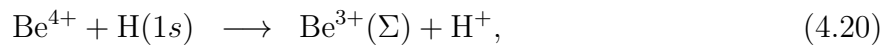
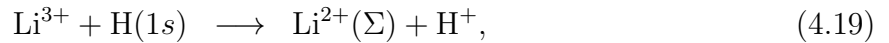
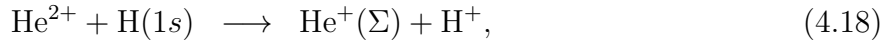
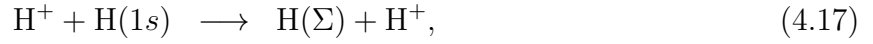
4.2.1 Водонична мета

Приказани графички резултати обухватају парцијалне ефикасне пресеке за следеће процесе (за $n < n_{max}$, које варира од процеса до процеса):





као и сумиране ефикасне пресеке за следеће процесе:



Овакав одабир процеса који ће бити графички представљени начињен је на основу критеријума доступности експерименталних података. Готово за све наведене процесе постоје доступна мерења за поређење са теоријским резултатима. За захват електрона из водоника од стране потпуно јонизованог берилијума, процес (4.20), не постоје доступни експериментални подаци, али се ови резултати свеједно наводе ради комплетности. Такође, до данас нису извршена ни мерења парцијалних пресека за процес (4.13). Међутим, одговарајући резултати ће бити корисни при анализи доприноса од захвата у свако појединачно финално стање ($n < n_{max}$) код сумираних диференцијалних пресека (процес (4.17)). Слична аргументација важи и за процес (4.16), за који су резултати експлицитно приказани због анализе доприноса сваког од финалних стања сумираном тоталном ефикасном пресеку (процес (4.22)).

За процесе (4.13) и (4.17) приказани су резултати за диференцијалне ефикасне пресеке, док су за процесе (4.12), (4.14)-(4.16), као и (4.17)-(4.25) приказани резултати за тоталне ефикасне пресеке. Такође, у Прилогу Г су табеларно приказани сви парцијални тотални ефикасни пресеци Q_{nlm} , Q_{nl} и Q_n (за $n < n_{max}$), као и сумирани ефикасни пресеци Q_Σ за све процесе електронског захвата из водоничне мете од стране потпуно огољених пројектила са $1 \leq Z_P \leq 9$. Ове табеле су публиковане у раду [144], као и делом у раду [132].

Коначно, максимална вредност главног квантног броја n_{max} варирала је у зависности од процеса, како би била обезбеђена конвергенција израза (4.7), односно (4.10), стварној вредности (4.9), односно (4.11). У складу са тим, код тоталних ефикасних пресека за пројектиле H^+ , He^{2+} и Li^{3+} узето је $n_{max} = 4$, затим за пројектил Be^{4+} је $n_{max} = 5$, за B^{5+} је $n_{max} = 6$, док је за пројектиле C^{6+} , N^{7+} , O^{8+} и F^{9+} узето да је $n_{max} = 7$. Код диференцијалних ефикасних пресека код пројектила H^+ је на инцидентним енергијама $E_{cm} = 60 \text{ keV}$ и $E_{cm} = 125 \text{ keV}$ узето $n_{max} = 4$, док је на $E_{lab} = 5 \text{ MeV}$ узето $n_{max} = 3$. Ово је у складу са тим да допринос сумираном ефикасном пресеку виших побуђених стања опада са порастом енергије. У свим наведеним процесима одабрано n_{max} је било сасвим довољно за обезбеђивање конвергенције, с обзиром на то да су разлике у сумираним ефикасним пресецима са максималном вредношћу главног квантног броја n_{max} и $n'_{max} = n_{max} - 1$ већ готово неуочљиве. Сумирани тотални ефикасни пресеци израчунати су по Опенхајмеровом закону скалирања (4.7), имајући у виду да је $\gamma(4) = 2.561$, $\gamma(5) = 3.049$, $\gamma(6) = 3.541$ и $\gamma(7) = 4.035$:

$$Q_{\Sigma} \simeq Q_1 + Q_2 + Q_3 + 2.561Q_4, \quad (4.26)$$

за процесе (4.17)-(4.19), затим:

$$Q_{\Sigma} \simeq Q_1 + Q_2 + Q_3 + Q_4 + 3.049Q_5, \quad (4.27)$$

за процес (4.20), као и:

$$Q_{\Sigma} \simeq Q_1 + Q_2 + Q_3 + Q_4 + Q_5 + 3.541Q_6, \quad (4.28)$$

за процес (4.21) и коначно:

$$Q_{\Sigma} \simeq Q_1 + Q_2 + Q_3 + Q_4 + Q_5 + Q_6 + 4.035Q_7, \quad (4.29)$$

за процесе (4.22)-(4.25). Диференцијални ефикасни пресеци су, коришћењем Опенхајмеровог закона скалирања (4.10), за инцидентне енергије $E_{cm} = 60 \text{ keV}$ и $E_{cm} = 125 \text{ keV}$ израчунати на основу израза:

$$\left(\frac{dQ}{d\Omega}\right)_{\Sigma} \simeq \left(\frac{dQ}{d\Omega}\right)_1 + \left(\frac{dQ}{d\Omega}\right)_2 + \left(\frac{dQ}{d\Omega}\right)_3 + 2.561 \left(\frac{dQ}{d\Omega}\right)_4, \quad (4.30)$$

док су за $E_{lab} = 5 \text{ MeV}$, уз $\gamma(3) = 2.081$, израчунати по формули:

$$\left(\frac{dQ}{d\Omega}\right)_{\Sigma} \simeq \left(\frac{dQ}{d\Omega}\right)_1 + \left(\frac{dQ}{d\Omega}\right)_2 + 2.081 \left(\frac{dQ}{d\Omega}\right)_3. \quad (4.31)$$

Резултати везани за захват из водоничне мете публиковани су у радовима [132, 144, 145].

Захват електрона у судару H^+ са $\text{H}(1s)$

Парцијални тотални ефикасни пресеци Q_{1s} , Q_{2s} и Q_{2p} за захват у $1s$, $2s$ и $2p$ стања (процес (4.12)) приказани су на слици 8. На панелу (а) приказани су Q_{1s} и Q_{2s} пресеци, док су на панелу (б) приказани Q_{2p} пресеци. Затим, на слици 9 приказани су тотални пресеци Q_{3s} , Q_{3p} и Q_{3d} за захват у $3s$, $3p$ и $3d$ стања, респективно. Последњи приказани резултати за парцијалне тоталне ефикасне пресеке су Q_{4s} , Q_{4p} , Q_{4d} и Q_{4f} за захват у $4s$, $4p$, $4d$ и $4f$ стања, респективно, на слици 10. Адекватност ових парцијалних пресека Q_{nl} процењена је у односу на доступне експерименталне податке [146–158]. Веома битна је чињеница да су сви експериментални подаци приказани на сликама 8–10 за захват у сферно симетрична стања ($2s$, $3s$ и $4s$) међусобно усаглашени. Експериментални подаци добијени мерењима на молекуларној водоничној мети H_2 (ефикасни пресеци по молекулу) су преведени у оне који одговарају атомској водоничној мети H (ефикасни пресеци по атому) пратећи референцу [159], уз коришћење измерених енергијских зависности односа ефикасних пресека, $Q_{\text{H}_2}/Q_{\text{H}}$.

Напоменимо на овом месту да ће на свим графицима бити изостављени индекси из ефикасних пресека Q и $(dQ/d\Omega)$, који говоре о томе у које стање се врши захват. С обзиром на то да ће ова информација бити дата у одговарајућим текстовима испод сваког од графика приказаним на сликама 8–60, неће постојати могућност забуне.

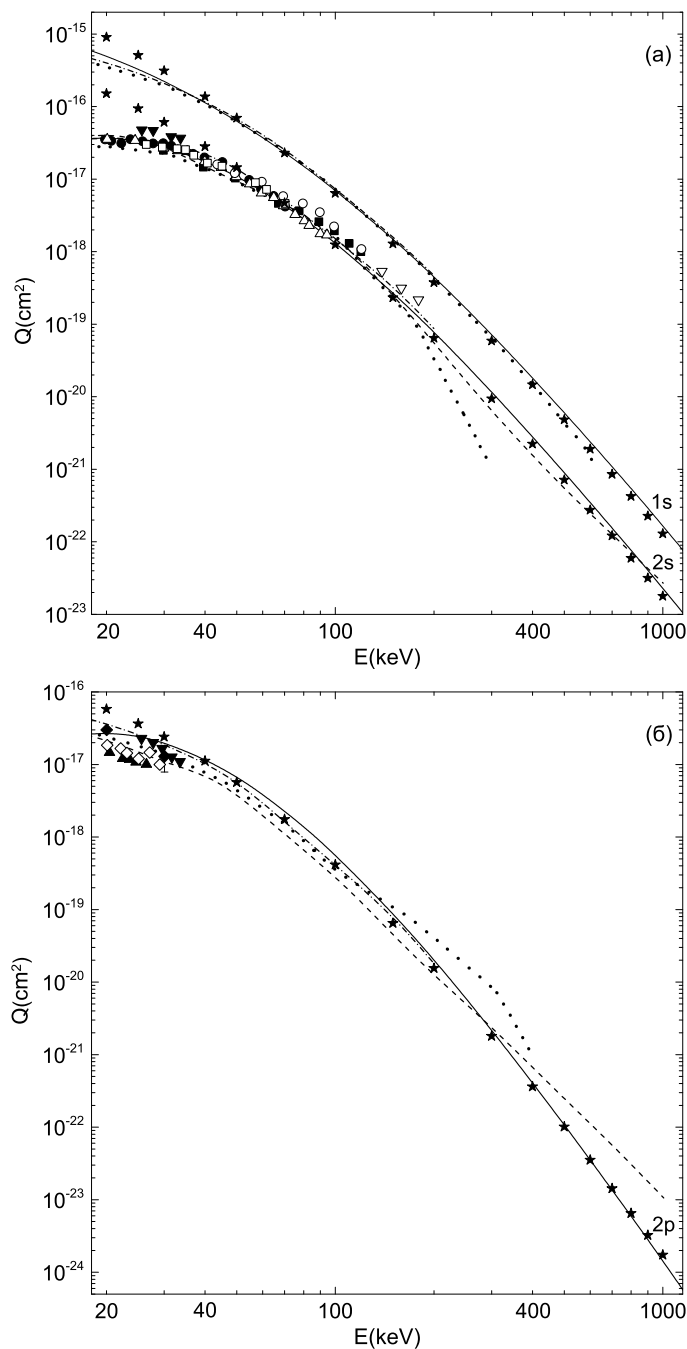
Теоријски резултати добијени у оквиру BCIS-3В метода одлично се слажу са експерименталним подацима у читавом приказаном интервалу средњих енергија ($10 - 300 \text{ keV}$), као што се може видети на сликама 8–10. Ово је изузетан резултат, имајући у виду да је BCIS-3В метод, по самој својој формулацији, високоенергијски. Генерално, неслагања између BCIS-3В метода и мерења су стога очекивана у региону средњих енергија. Међутим, за захват у $2s$, $3s$ и $4s$ стања неслагања не постоје. На пример, усаглашеност теорије и експеримената је одлична чак и до 10 keV за захват у $3s$ стање (слика 9).

Од интереса је такође и упоредити наше резултате са другим теоријским методима. Да би проценили нискоенергијску границу применљивости пертурбативних метода, у које спада и BCIS-3B апроксимација, корисно је извршити поређења са неким нептурбативним методима [79–81], с обзиром на то да они обично дају поуздане вредности ефикасних пресека у интервалу ниских до средњих енергија. На слици 8 су стога приказани и Q_{nl} резултати нептурбативних метода, и то за $nl = 1s$ и $nl = 2s$ на панелу (а), као и за $nl = 2p$ на панелу (б). Размотрене нептурбативне теорије су оне са развојем таласне функције по Штурмијанским стањима (на енглеском *Sturmian-state expansion*, скраћено SSE) [79], затим са приступом базираним на коришћењу временски зависне Шредингерове једначине (на енглеском *time-dependent Schrödinger equation*, скраћено TDSE) [80], као и са полукласичним конвергентним „close-coupling“ методом (на енглеском *semiclassical convergent close-coupling method*, скраћено SC-CCC) [81]. С друге стране, ради утврђивања валидности новоразвијеног BCIS-3B метода на високим енергијама, корисно је укључити резултате једног од најважнијих високоенергијских метода, CDW-3B (за $nl = 1s$ из референце [4], а за $nl = 2s$ и $2p$ из референци [5, 159]).

Јако добро слагање за резонантни захват ($nl = 1s$) између пертурбативних BCIS-3B и CDW-3B метода са једне, и нептурбативних SSE и TDSE метода са друге стране, може се уочити на слици 8а. BCIS-3B и CDW-3B методи блиско прате један другог у интервалу енергија $40 \leq E \leq 1000 \text{ keV}$. Такође, $Q_{1s}^{(SSE)}$ и $Q_{1s}^{(TDSE)}$ ефикасни пресеци су веома добро усаглашени на енергијама за које код оба метода постоје доступни подаци, тј. за $E \leq 200 \text{ keV}$ (за TDSE су вредности пресека доступне до 630 keV).

На слици 8а приказани су и резултати за нерезонантни захват у $2s$ стање. У овом случају постоји више доступних скупова експерименталних података (мада су мерења ограничена до средњих енергија $E \leq 180 \text{ keV}$). Уочава се одлично слагање између BCIS-3B метода и експерименталних података у интервалу $20 \leq E \leq 150 \text{ keV}$. Такође се види да су BCIS-3B и CDW-3B веома добро усаглашени у интервалу $50 \leq E \leq 1000 \text{ keV}$. На истом панелу (а) слике 8, поред SSE и TDSE метода, приказани су и SC-CCC резултати. На енергијама $20 \leq E \leq 200 \text{ keV}$ BCIS-3B и SSE методи се одлично слажу. Поред тога, BCIS-3B метод је у веома доброј сагласности са SC-CCC и TDSE методима у интервалима $20 \leq E \leq 170 \text{ keV}$ и $40 \leq E \leq 170 \text{ keV}$, респективно. За $E \leq 40 \text{ keV}$, предвиђања у оквиру TDSE метода су испод BCIS-3B резултата највише за фактор 1.3.

Нетипично, TDSE ефикасни пресеци за $E > 170 \text{ keV}$ нагло опадају, показујући значајно одступање од осталих теоријских резултата. На пример, TDSE на



Слика 8: Парцијални тотални ефикасни пресеци Q_{1s} , Q_{2s} и Q_{2p} (у cm^2) у функцији инцидентне енергије E (keV) за електронски захват од стране H^+ јона из атома $\text{H}(1s)$, за процес (4.12). Теоријски резултати: BCIS-3B (пуна линија), CDW-3B (\star симбол, [4, 5]), SSE (црта-тачка линија, [79]), TDSE (тачкаста линија, [80]), SC-CCC (црткана линија, [81]). Експериментални подаци са атомском водоничном метом: \circ (Q_{2s}) Ryding *et al.* [146], \bullet (Q_{2s}) Bayfield [147], Δ (Q_{2s}) Morgan *et al.* [148], \blacklozenge (Q_{2p}) Stebbings *et al.* [149], \blacktriangle (Q_{2p}) Morgan *et al.* [150], \diamond (Q_{2p}) Kondow *et al.* [151]. Експериментални подаци са молекулском водоничном метом (трансформисани у атомску водоничну мету по референци [159]): ∇ (Q_{2s}) Ryding *et al.* [146], \blacktriangledown (Q_{2s}, Q_{2p}) Andreev *et al.* [152], \square (Q_{2s}) Bayfield [153], \blacksquare (Q_{2s}) Hughes *et al.* [154].

300 keV даје мање вредности ефикасних пресека од BCIS-3B и SC-CCC метода за факторе 7 и 4, респективно. Иако се $Q_{2s}^{(SC-CCC)}$ резултати налазе испод $Q_{2s}^{(BCIS-3B)}$ за енергије $170 < E < 850$ keV, њима одговарајуће црткане и пуне криве су по облику добро усаглашене. Нажалост, за квантитативне тестове теорије наспрам експеримената, не постоје доступни експериментални подаци за Q_{2s} на енергијама већим од 200 keV. Такође, од 850 до 1000 keV, ситуација је обрнута, тако да $Q_{2s}^{(SC-CCC)}$ сада надмашују $Q_{2s}^{(BCIS-3B)}$, мада не значајно.

Што се тиче захвата у $2p$ стање, са слике 8б види се да су у интервалу $30 \leq E \leq 1000$ keV резултати BCIS-3B и CDW-3B метода веома добро усаглашени. Такође, у интервалу $20 \leq E \leq 200$ keV уочава се солидно до веома добро слагање између BCIS-3B и SSE метода. Испод 130 keV $Q_{2p}^{(BCIS-3B)}$ леже изнад $Q_{2p}^{(TDSE)}$ и $Q_{2p}^{(SC-CCC)}$. Насупрот томе, $Q_{2p}^{(TDSE)}$ и $Q_{2p}^{(SC-CCC)}$ налазе се изнад $Q_{2p}^{(BCIS-3B)}$ на $E > 130$ keV и $E > 300$ keV, респективно. На 300 keV $Q_{2p}^{(TDSE)}$ показује неуобичајену промену нагиба, након чега веома брзо опада са порастом енергије. Овај експериментално неуочен тренд супротан је глатким функцијама $Q_{2p}^{(BCIS-3B)}$, $Q_{2p}^{(CDW-3B)}$ и $Q_{2p}^{(SC-CCC)}$ на високим енергијама. На пример, на 200 keV $Q_{2p}^{(TDSE)}$ надмашује $Q_{2p}^{(SSE)}$ за фактор 2. TDSE и SC-CCC методи су добро усаглашени у интервалу $20 \leq E \leq 100$ keV, али се значајно разликују на вишим енергијама. На пример, на 280 keV може се приметити да је $Q_{2p}^{(TDSE)} \approx 3.5Q_{2p}^{(SC-CCC)}$, при чему такође важи $Q_{2p}^{(SC-CCC)} \approx Q_{2p}^{(BCIS-3B)}$.

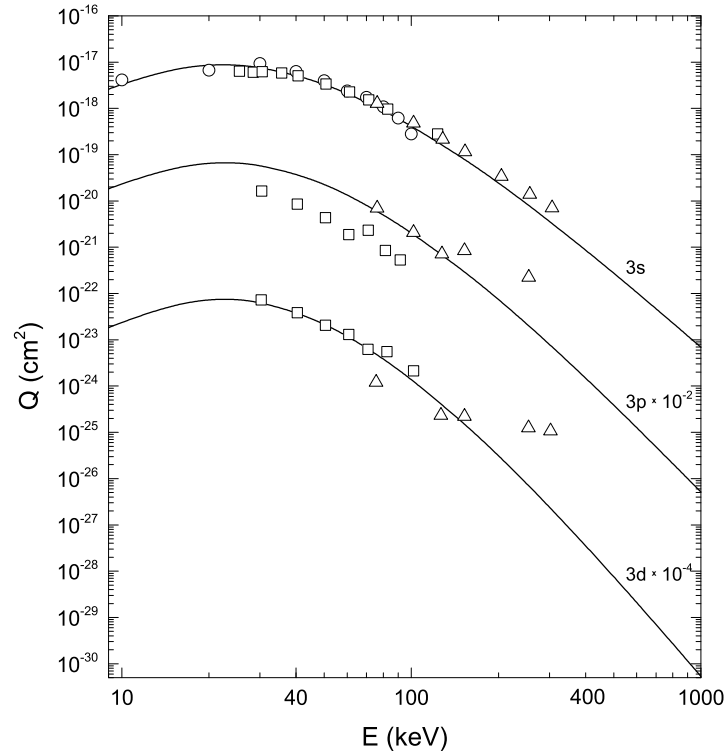
У интервалу од 20 до 200 keV, уочавамо да је $Q_{2p}^{(SC-CCC)} < Q_{2p}^{(BCIS-3B)}$, као и да је разлика између ова два скупа ефикасних пресека унутар фактора 2. С друге стране, боље слагање у истом интервалу енергија ($20 \leq E \leq 200$ keV) се може приметити између BCIS-3B и SSE метода. Изнад 280 keV, јавља се значајна промена пређашњег односа између SC-CCC и BCIS-3B метода, $Q_{2p}^{(SC-CCC)} > Q_{2p}^{(BCIS-3B)}$, толико да нпр. на 1000 keV разлика између ова два ефикасна пресека износи читав ред величине ($Q_{2p}^{(SC-CCC)} \approx 10Q_{2p}^{(BCIS-3B)}$). Истакнимо да се $Q_{2p}^{(BCIS-3B)}$ и $Q_{2p}^{(CDW-3B)}$ на овој енергији готово поклапају. Заправо, недостатак експерименталних података за Q_{2p} пресеке изнад 35 keV, упоредо са значајном разликом између пресека које дају SC-CCC и BCIS-3B метод, уједно представља главну мотивацију за увођење CDW-3B метода у причу. Она у овом случају пружа информацију о валидности других метода на високим енергијама. Одлично слагање BCIS-3B и CDW-3B резултата у том погледу пуно говори.

На највећим вредностима енергије представљеним на слици 8б, разлика између $Q_{2p}^{(BCIS-3B)}$ и $Q_{2p}^{(SC-CCC)}$, у близини „репова“ ове две криве (изнад 300 keV), више је изражена него на слици 8а између $Q_{2s}^{(BCIS-3B)}$ и $Q_{2s}^{(SC-CCC)}$ (изнад 850 keV). Ово имплицира да занемарени јонизациони канал у SC-CCC методу значајније

утиче на захват у $2p$ подљуску, него у $2s$ подљуску $n = 2$ енергијског нивоа атомског водоника. Јонизација доминира у односу на захват на вишим енергијама, где је неопходно укључити електронска континуумска стања, у виду интермедијарног канала који претходи захвату. Управо овај интермедијарни јонизациони ефекат сврстава BCIS-3B метод у категорију пертурбативних теорија другог реда. Ово је насупрот теоријама првог реда, као што је нпр. СВ1-3B метод, где су чисто електронска континуумска интермедијарна стања одсутна (као што је већ напоменуто).

Доступних експерименталних података за Q_{2p} , нажалост, врло је мало. Штавише, мерења су ограничена до 35 keV . Такође, са слике 8 може се приметити да измерене вредности Q_{2p} из референци [149] и [151] нису међусобно потпуно усаглашене. Слично неслагање унутар фактора 2 јавља се и између измерених Q_{2p} ефикасних пресека из референци [150] и [152]. Детаљнијом анализом може се утврдити да важи $1.99 \leq Q_{2p}^{\text{Ref.}[143]} / Q_{2p}^{\text{Ref.}[141]} \leq 2.1$ и $1.4 \leq Q_{2p}^{\text{Ref.}[140]} / Q_{2p}^{\text{Ref.}[142]} \leq 1.9$. Јасно се може видети да се теоријски резултати $Q_{2p}^{(\text{BCIS-3B})}$ и $Q_{2p}^{(\text{SSE})}$ одлично слажу са експерименталним подацима из референци [149] и [152], док су изнад измерених вредности из референци [150] и [151]. С друге стране, $Q_{2p}^{(\text{SC-CCC})}$ се веома добро слажу са мерењима из [150] и [151], али зато леже испод експерименталних података из [149] и [152]. Са овим ограниченим скуповима експерименталних података, ефикасни пресеци $Q_{2p}^{(\text{TDSE})}$ налазе се између $Q_{2p}^{(\text{BCIS-3B})}$ и $Q_{2p}^{(\text{SC-CCC})}$, при чему TDSE метод даје резултате који су ближи SC-CCC него BCIS-3B или SSE резултатима. Очигледно, ситуација код захвата у $2p$ стање је нејасна, и са експерименталног и са теоријског становишта. Новија прецизна мерења у интервалу ниских до средњих енергија би помогла да се ова нејасноћа разреши. Такође, мерења на високим инцидентним енергијама неопходна су ради дефинитивне процене валидности пертурбативних теорија.

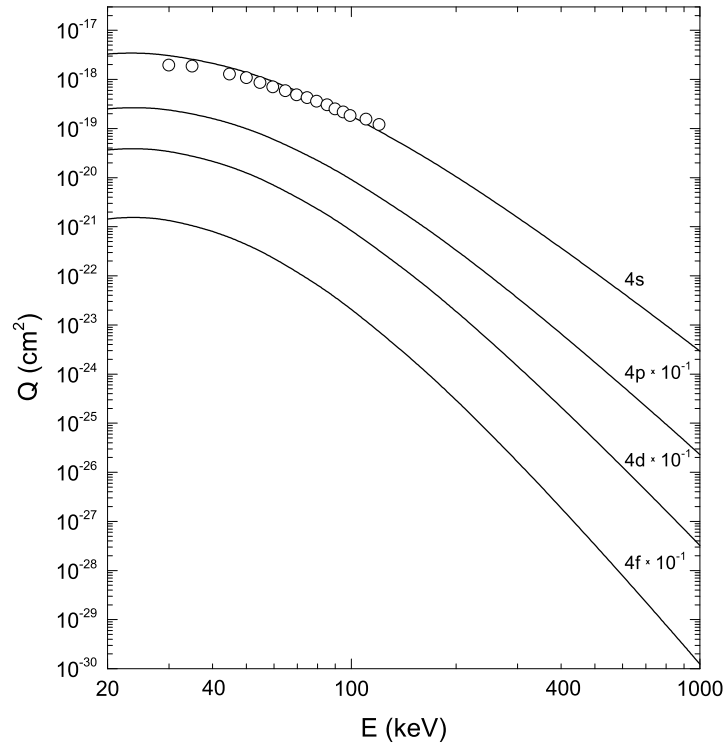
На слици 9 приказани су резултати за захват у одговарајуће три подљуске $n = 3$ нивоа ($3s$, $3p$ и $3d$). У овом случају три скупа мерења [155, 157, 158] за Q_{3s} међусобно су веома добро усаглашена. BCIS-3B метод одлично репродукује расположива мерења, која су у интервалу енергије $10 - 300 \text{ keV}$. Што се тиче истих сетова експерименталних података [157, 158], али за Q_{3p} и Q_{3d} , примећује се да су прилично расејани. BCIS-3B резултати за Q_{3p} се одлично слажу са мерењима из рада [158] у интервалу $75 - 125 \text{ keV}$, али леже испод експерименталних тачака из исте референце за вредности енергије изнад 125 keV . Међутим, два мерења из ове референце [158] на 150 и 250 keV не прате тренд мерења из интервала $75 - 125 \text{ keV}$ из истог експеримента. Експерименталне податке за Q_{3p} из референце [157] BCIS-3B метод надмашује у интервалу $30 - 100 \text{ keV}$. Слично,



Слика 9: Парцијални тотални ефикасни пресеци Q_{3s} , Q_{3p} и Q_{3d} (у cm^2) у функцији инцидентне енергије E (keV) за електронски захват од стране H^+ јона из атома $\text{H}(1s)$, за процес (4.12). Криве представљају резултате у оквиру BCIS-3В метода. Експериментални подаци са атомском водоничном метом: \circ (Q_{3s}) Hughes *et al.* [155]. Експериментални подаци са молекулском водоничном метом (трансформисани у атомску водоничну мету по референци [159]): \square (Q_{3s}, Q_{3p}, Q_{3d}) Hughes *et al.* [157], \triangle (Q_{3s}, Q_{3p}, Q_{3d}) Ford и Thomas [158]. И теоријски и експериментални резултати су подељени одређеним фактором: Q_{3p} са 10^2 и Q_{3d} са 10^4 .

измерени ефикасни пресеци Q_{3p} из [157] леже испод резултата експеримената из [158] унутар енергијског интервала у коме се преклапају (70 – 100 keV). Резултати за Q_{3d} које даје BCIS-3В метод одлично се слажу са мерењима из референце [157] на свим енергијама (30 – 100 keV). Такође, Q_{3d} из BCIS-3В метода се веома добро слажу са мерењима из [158] за $E \leq 150$ keV. На слици 9 се такође може видети да BCIS-3В метод за захват у $3d$ стање за енергије изнад 150 keV даје мање вредности ефикасних пресека од мерења из [158]. Ипак, ови подаци за Q_{3d} су на 250 и 300 keV очигледно у потпуном нескладу са онима из интервала 75 – 150 keV, добијеним у истом мерењу. Нова мерења ефикасних пресека Q_{3p} и Q_{3d} су пожељна, ради разјашњавања очигледне разлике између два скупа мерења [157, 158], као и ради дефинитивне процене валидности BCIS-3В метода за захват у $3p$ и $3d$ стања.

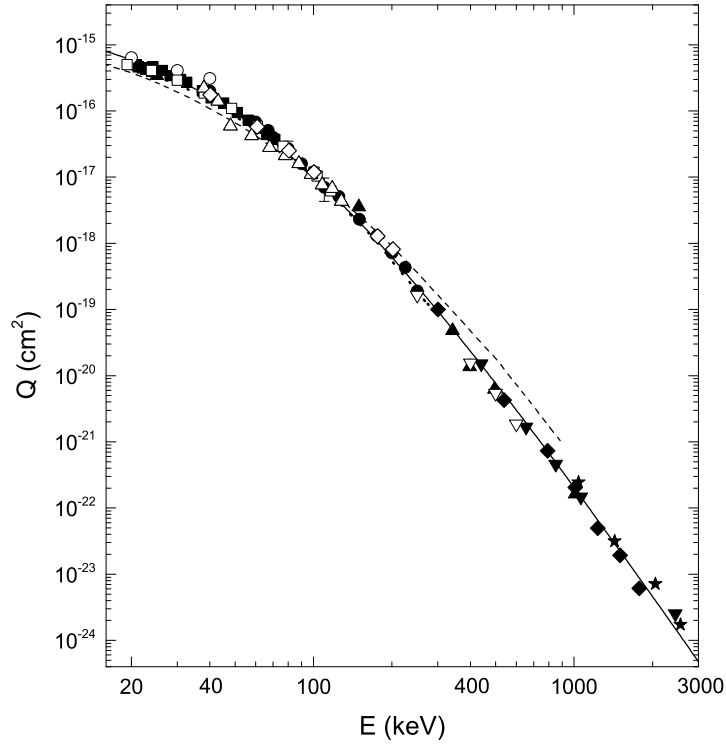
Ефикасни пресеци Q_{4s} , Q_{4p} , Q_{4d} и Q_{4f} добијени у оквиру BCIS-3В метода приказани су на слици 10. Поређења теорије са експерименталним подацима



Слика 10: Парцијални тотални ефикасни пресеци Q_{4s} , Q_{4p} , Q_{4d} и Q_{4f} (у cm^2) у функцији инцидентне енергије E (keV) за електронски захват од стране H^+ јона из атома $\text{H}(1s)$, за процес (4.12). Криве представљају резултате у оквиру BCIS-3B метода. Експериментални подаци са атомском водоничном метом: \circ (Q_{4s}) Hughes *et al.* [156]. Теоријски резултати за Q_{4p} , Q_{4d} и Q_{4f} су подељени са 10.

су дата искључиво за Q_{4s} , с обзиром на то да не постоје доступна мерења за Q_{4l} за $l = 1, 2, 3$ на средњим и високим енергијама. На слици 10 може се запазити да BCIS-3B метод у потпуности репродукује мерења за Q_{4s} из референце [156] на свим вредностима енергије (30 – 125 keV). Ради комплетности, без обзира на недостатак експерименталних података за Q_{4p} , Q_{4d} и Q_{4f} , теоријски резултати су приказани и за ове ефикасне пресеке (слика 10).

Сумирани тотални ефикасни пресеци $Q_{\Sigma}^{(\text{BCIS-3B})}$, добијени у оквиру BCIS-3B метода, приказани су на слици 11. Ови ефикасни пресеци добијени су сумирањем по свим финалним стањима на основу Опенхајмеровог закона скалирања (4.26). Као што се може видети са слике 11, експериментални подаци из готово свих расположивих мерења [147, 160–169] су међусобно веома добро усаглашени. И овде су, као и у случају парцијалних пресека, ефикасни пресеци добијени мерењима на молекуларном водонику преведени на оне који одговарају атомском водонику, на основу референце [159]. Са слике 11 јасно се уочава да је BCIS-3B метод у одличној сагласности са мерењима у читавом енергијском интервалу



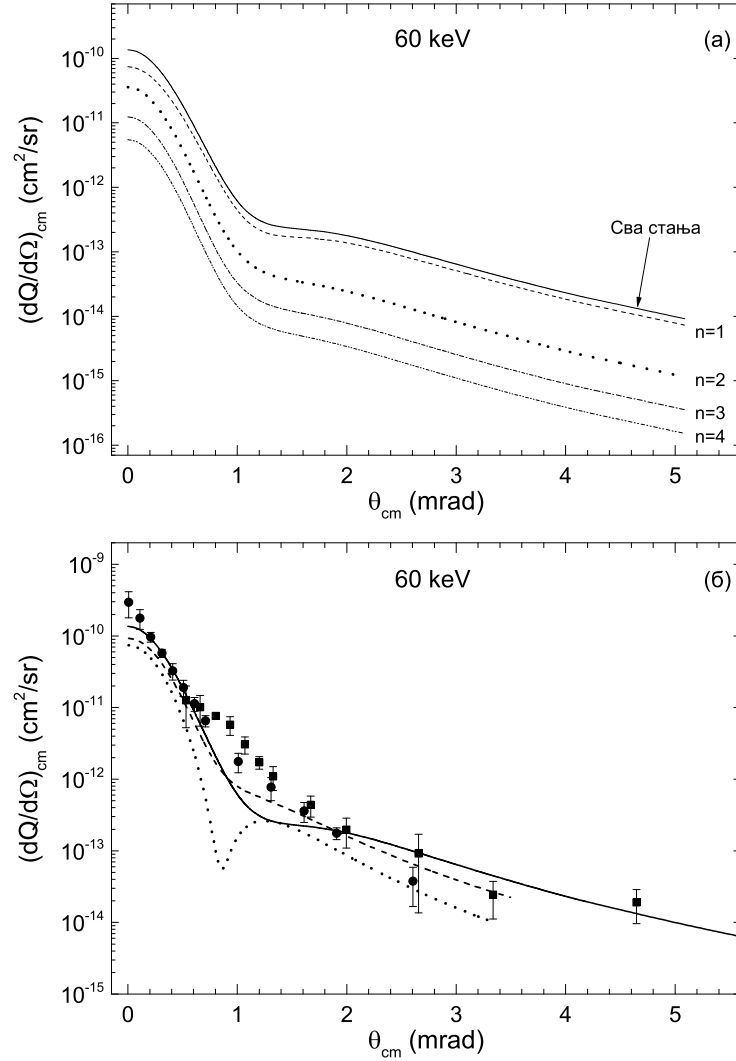
Слика 11: Сумирани тотални ефикасни пресеци Q_{Σ} (cm^2) у функцији инцидентне енергије E (keV) за процес $\text{H}^+ + \text{H}(1s) \rightarrow \text{H}(\Sigma) + \text{H}^+$. Теоријске криве: BCIS-3B (пуна линија) са $Q_{\Sigma} \simeq Q_1 + Q_2 + Q_3 + 2.561Q_4$, TDSE (тачкаста линија, [80]) са $Q_{\Sigma} \simeq Q_1 + 1.616Q_2$, off-shell АОСС (црткана линија, [82]) са $Q_1 \equiv Q_{1s}$. Ефикасни пресеци $Q_{\Sigma} \simeq Q_1 + 1.616Q_2$ добијени на основу SSE метода [79] (нису представљени на слици) су веома близу Q_{Σ} из TDSE метода [80]. Експериментални подаци са атомском водоничном метом: \circ Fite *et al.* [160], \square McClure [161], \triangle Gilbody и Ryding [162], \bullet Wittkower *et al.* [163], \blacksquare Bayfield [147], ∇ Hvelplund и Andersen [164]. Експериментални подаци са молекулском водоничном метом (трансформисани у атомску водоничну мету по референци [159]): \diamond Stier и Barnett [165], \blacktriangle Barnett и Reynolds [166], \blacktriangledown Welsh *et al.* [167], \star Schryber [168], \blacklozenge Toburen *et al.* [169].

20–3000 keV, који покрива ефикасне пресеке у интервалу од преко 9 редова величине. На овој слици су такође представљени и већ поменути теоријски резултати $Q_{\Sigma}^{(\text{TDSE})}$ [80], као и *off-shell atomic-orbital close-coupling* метода, скраћено off-shell АОСС, из рада [82]. Ефикасни пресеци $Q_{nl}^{(\text{TDSE})}$ доступни су до 600, 300 и 400 keV за $nl = 1s, 2s$ и $2p$, респективно [80]. Они дају $Q_{\Sigma}^{(\text{TDSE})}$ до 300 keV уз употребу Опенхајмеровог закона скалирања $Q_{\Sigma}^{(\text{TDSE})} = Q_{1s}^{(\text{TDSE})} + 1.616[Q_{2s}^{(\text{TDSE})} + Q_{2p}^{(\text{TDSE})}]$. Истакнимо да се $Q_{\Sigma}^{(\text{BCIS-3B})}$ и $Q_{\Sigma}^{(\text{TDSE})}$ резултати одлично поклапају у интервалу $30 \leq E \leq 300$ keV. Веома добро слагање јавља се и између BCIS-3B и off-shell АОСС метода у интервалу $20 \leq E \leq 200$ keV. Изнад 200 keV, где интермедијарни јонизациони канал постаје доминантан, off-shell АОСС метод надмашује експерименталне податке. Укључивање спрезања са јонизационим каналима би највероватније довело до бољег слагања off-shell АОСС метода са експерименталним подацима на $E > 200$ keV, што је и истакнуто као очекивање у самом раду [82].

Сада ћемо анализирати теоријске резултате (BCIS-3В и оне из референце [82]) и измерене вредности диференцијалних ефикасних пресека [170–172], који су приказани на сликама 12-14. Конкретно, слике 12 и 13 се односе на средње вредности инцидентних енергија у систему центра масе $E_{cm} = 60$ и 125 keV, респективно, док слика 14 одговара високој инцидентној енергији у лабораторијском систему референце $E_{lab} = 5$ MeV. Ради боље прегледности, парцијални ефикасни пресеци $(dQ/d\Omega)_n$ ($1 \leq n \leq 4$) и сумирани ефикасни пресеци $(dQ/d\Omega)_\Sigma$ приказани су на одвојеним панелима, (а) и (б), респективно, на сликама 12 и 13. С друге стране, на $E_{lab} = 5$ MeV су све криве $(dQ/d\Omega)_n$ ($1 \leq n \leq 3$) и $(dQ/d\Omega)_\Sigma$ довољно прегледно приказане на истој слици 14.

Панели (а) на сликама 12 и 13 показују да главни допринос $(dQ/d\Omega)_\Sigma$ долази од $(dQ/d\Omega)_1$. Све криве $(dQ/d\Omega)_n$ ($n = 1, 2, 3, 4$) имају исти облик и немају никакве минимуме. Као што се може видети са панела (б) на сликама 12 (60 keV) и 13 (125 keV), BCIS-3В метод је у доброј сагласности са експерименталним подацима [170, 171]. Такође, и BCIS-3В метод и експериментални подаци показују сличну промену нагиба криве у близини 1 mrad. Код BCIS-3В метода, ово је последица суперпозиције два различита механизма, од којих један потиче од електронског расејања, а други од расејања самих језгара. Електрон-језгро (пројектил) интеракција је узрочник првог механизма, док се у основи другог налази језгро-језгро интеракција, такође позната и као *еластично Радерфордово расејање*. Електрон-језгро интеракција доминира на мањим вредностима угла расејања (расејање унапред, тј. у близини $\theta = 0$). Главна карактеристика овог механизма је оштар пораст диференцијалних ефикасних пресека са смањивањем угла θ , који кулминира максимумом на $\theta \approx 0$. Језгро-језгро Радерфордова компонента мања је у близини уског конуса око $\theta \approx 0$, али постаје доминантна на већим вредностима угла расејања. Код Радерфордовог механизма диференцијални ефикасни пресеци немају пик, већ испољавају дугачак „реп“ са повећавањем угла расејања (видети референцу [173]). С обзиром на то да ове две компонентне криве имају различите нагибе (није представљено на сликама), њихова суперпозиција (није прост збир!) даје промену нагиба на око 1 mrad у укупном резултату за диференцијалне ефикасне пресеке, што се за BCIS-3В метод може видети на оба панела (а) и (б), на сликама 12 и 13.

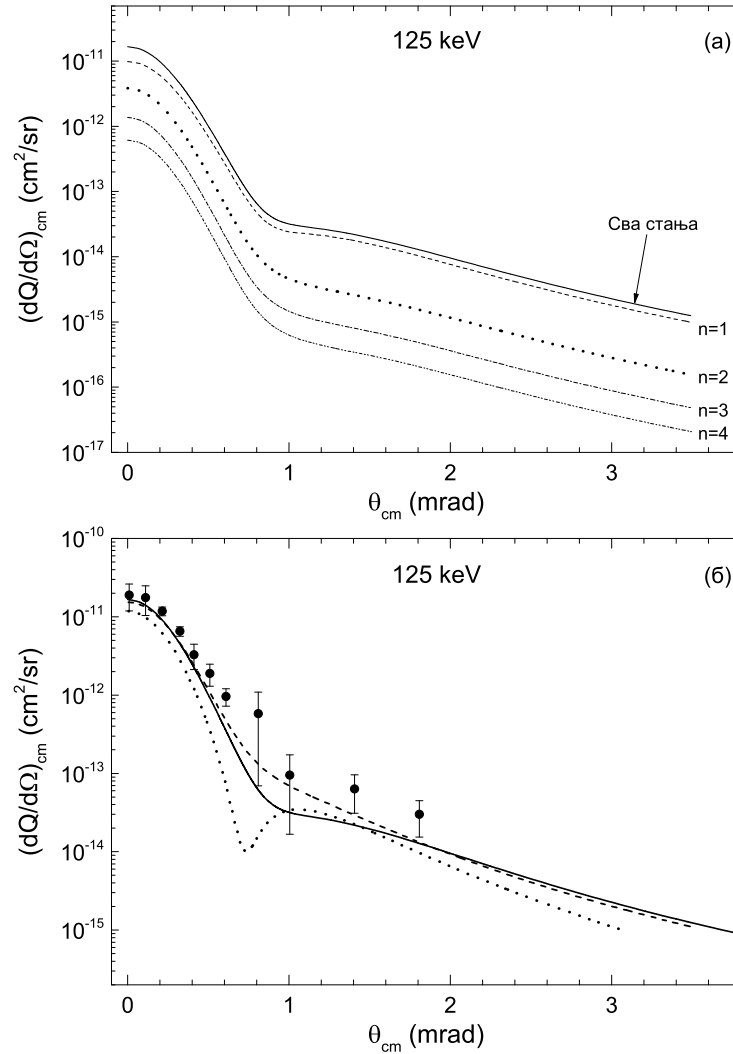
На панелима (б) на сликама 12 и 13 приказани су диференцијални ефикасни пресеци добијени on-shell и off-shell АОСС методима [82]. Може се приметити да се BCIS-3В и off-shell АОСС методи добро слажу један са другима, као и са експерименталним подацима [170, 171]. С друге стране, тачкасте криве on-shell АОСС метода имају минимуме у 0.9 и 0.7 mrad на 60 keV (слика 12) и 125 keV



Слика 12: Парцијални $(dQ/d\Omega)_n$ (cm^2/sr) и сумирани диференцијални ефикасни пресеци $(dQ/d\Omega)_\Sigma$ (cm^2/sr) у функцији угла расејања θ (mrad) у систему центра масе на инцидентној енергији $E = 60$ keV за електронски захват од стране H^+ јона из атома $\text{H}(1s)$, за процесе (4.13) и (4.17). Панел (а): BCIS-3B за $(dQ/d\Omega)_n$ ($n = 1, 2, 3, 4$) и $(dQ/d\Omega)_\Sigma$. Панел (б): теоријске криве за сумиране ефикасне пресеке: BCIS-3B (пуна линија), off-shell АОСС (црткана линија, [82]), on-shell АОСС (тачкаста линија, [82]). Експериментални подаци са атомском водоничном метом: ● Martin *et al.* [170], ■ Park [171].

(слика 13), респективно. Ове минимуме не показују ни мерења, ни BCIS-3B и off-shell-АОСС методи.

За захват електрона H^+ јоном из атома водоника, СВ1-3В, BCIS-3В као и АОСС метод имају исти пертурбациони потенцијал, који се састоји од језгро-језгро и електрон-пројектил интеракције $(1/R - 1/s)$. Познато је да се изражено дубок минимум увек јавља у $(dQ/d\Omega)_{nlm}^{(\text{CB1-3B})}$ за сваки фиксирани триплет квантих бројева $\{n, l, m\}$, као што је илустровано у референци [174] за $1 \leq n \leq 9$. Ово се дешава услед готово комплетног анулирања потенцијала $(1/R - 1/s)$ на тзв.



Слика 13: Исто као и на слици 12, само за инцидентну енергију $E = 125 \text{ keV}$ и само један скуп експерименталних података. Експериментални подаци са атомском водоничном методом: • Martin *et al.* [170].

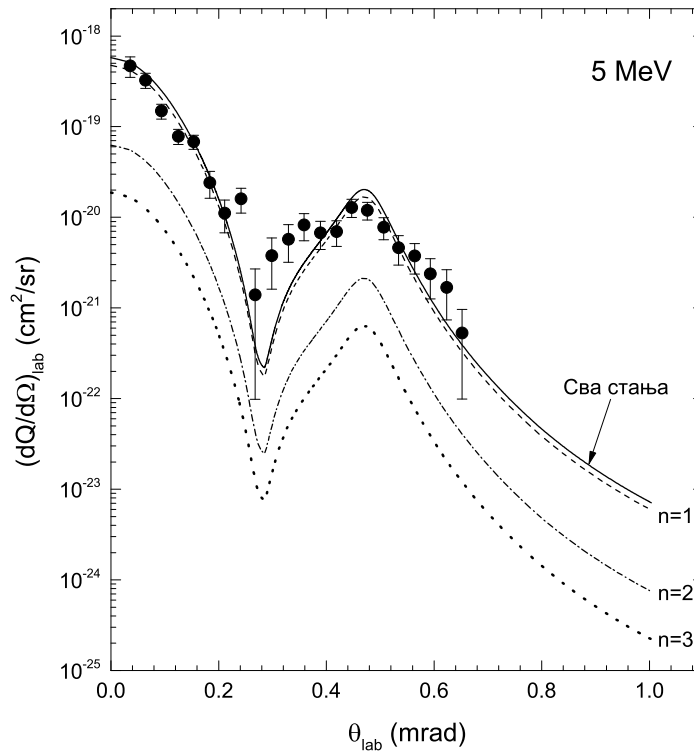
тамном углу (на енглеском *dark angle*, скраћено da) θ_{da} , лоцираном на 1.1, 0.9 и 0.8 mrad за 25, 60 и 125 keV, респективно (што је већа инцидентна енергија, тамни угао је мањи) [174]. Другим речима, у близини $\theta \approx \theta_{da}$, доприноси од одбојног $1/R$ и привлачног $1/s$ потенцијала у укупној интеракцији $(1/R - 1/s)$ су готово једнаки. На датој инцидентној енергији, вредности тамног угла θ_{da} у СВ1-3В методу се не поклапају у потпуности за различите $(dQ/d\Omega)_{nlm}^{(CB1-3B)}$. Ово делимично маскира минимуме у парцијалним диференцијалним ефикасним пресецима, након што се сумирањем по l и m добије $(dQ/d\Omega)_n^{(CB1-3B)}$. До даљег попуњавања минимума долази сумирањем по n , ради добијања $(dQ/d\Omega)_\Sigma^{(CB1-3B)}$. Стога, дубоки минимуми су делимично попуњени када се саберу доприноси од $n = 1$ и $n = 2$ [174]. Без обзира на то, нефизички минимум се не изравњава у потпуности

ни када се сума $\sum_{n=1}^2 (dQ/d\Omega)_n^{(\text{CB1-3B})}$ прошири са $\sum_{n=3}^9 (dQ/d\Omega)_n^{(\text{CB1-3B})}$, као ни у $(dQ/d\Omega)_\Sigma^{(\text{CB1-3B})}$ са урачунатим доприносима од свих побуђених стања $n > 1$ [174].

Ово је у супротности са ситуацијом код BCIS-3B и off-shell АОСС метода, где не долази до појаве минимума. Код BCIS-3B метода, поништавање два потенцијала у иницијалној пертурбацији $(1/R - 1/s)$ потпуно је маскирано конструктивном интерференцијом чланова у високоосцилаторном електронском Кулоновом таласу (континуумско интермедијарно стање) у интегранду амплитуде прелаза. Код off-shell АОСС метода, у интеракцији $(1/R - 1/s)$ не долази до поништавања услед присуства битних ефеката који потичу од укључивања виртуелних прелаза. Дубоки минимума за различите углове θ_{da} , типични за СВ1-3B метод, не јављају се ни код on-shell АОСС метода. Уместо ових експериментално неопажених минимума, on-shell АОСС метод предвиђа један минимум по инцидентној енергији, који се налази на 1.1, 0.9 и 0.7 mrad за 25, 60 и 125 keV, респективно [82]. Ове ситуације приказане су у виду тачкастих кривих на панелу (б) слике 12 (0.9 mrad, $E_{\text{cm}} = 60$ keV) и слике 13 (0.7 mrad, $E_{\text{cm}} = 125$ keV).

Високоенергијски теоријски резултати у оквиру BCIS-3B метода упоређени су са експерименталним резултатима [172] на слици 14, за инцидентну енергију $E_{\text{lab}} = 5$ MeV. Као што се може видети, слагање је одлично. BCIS-3B резултати испољавају уобичајене ефекте другог реда, кроз двоструко расејање (на енглеском *double scattering*, скраћено ds) захваћеног електрона на језгрима пројектила и мете. Ово представља квантномеханички аналогон класичног Томасовог двостепеног „билијарског“ судара $P - e - T$. У класичној слици, процес захвата електрона из водонику сличне мете од стране потпуно огољеног пројектила је схваћен на следећи начин: најпре долази до судара пројектила са електроном, при чему се пројектил расејава под углом θ_{ds} (у односу на свој иницијални правац кретања), док се електрон расејава под углом 60° (у односу на иницијални правац кретања пројектила) и креће ка језгру мете. Затим долази до расејања електрона на језгру мете под углом 60° (у односу на правац кретања електрона након судара са пројектилом), тако да се електрон након овог двостепеног судара креће истим правцем и смером којим се кретао и пројектил пре судара. Како је угао расејања пројектила θ_{ds} јако мали (због $M_P \gg 1$), сада се пројектил и електрон крећу готово паралелно, а уз то и истим интензитетом брзине. Услед овога долази до захвата електрона од стране пројектила. Кинематика класичног Томасовог двоструког расејања одређена је законима одржања енергије и импулса. Пројектил се одбија под критичним Томасовим углом за двоструко расејање $\theta_{\text{ds}} = (1/M_P) \sin 60^\circ = (1/M_P)\sqrt{3}/2$ (у лабораторијском систему референце). Овај критични угао не зависи ни од брзине

пројектила, ни од масе мете. У случају H^+ јона као пројектила је $\theta_{ds} \simeq 0.47$ mrad. Квантномеханичке теорије другог реда, као што су BCIS-3В и CDW-3В, предвиђају максимум диференцијалног ефикасног пресека на истом углу θ_{ds} . За судар H^+ јона са атомским водоником, ово предвиђање је експериментално најјасније потврђено на 5 MeV [172]. Слагање између BCIS-3В предвиђања и мерења [172] је нарочито добро за расејање унапред и у близини Томасовог пика, као што се може видети на слици 14. Сви парцијални диференцијални ефикасни пресеци код BCIS-3В метода имају максимум на идентичној вредности критичног угла θ_{ds} . Ово се може увидети анализирањем све три компоненте $(dQ/d\Omega)_n$ ($n = 1, 2, 3$) укупног пресека $(dQ/d\Omega)_\Sigma$, што је приказано на слици 14. Слично као и на средњим енергијама (60 и 125 keV), главни допринос укупном пресеку долази од захвата у основно стање пројектила. Такође, све три криве $(dQ/d\Omega)_n$ ($n = 1, 2, 3$), а самим тим и $(dQ/d\Omega)_\Sigma$, имају веома сличне облике.



Слика 14: Парцијални $(dQ/d\Omega)_n$ (cm^2/sr) и сумирани диференцијални ефикасни пресеци $(dQ/d\Omega)_\Sigma$ (cm^2/sr) у функцији угла расејања θ (mrad) у лабораторијском систему референце на инцидентној енергији $E = 5$ MeV за електронски захват од стране H^+ јона из атома $H(1s)$, за процесе (4.13) и (4.17). Криве представљају резултате у оквиру BCIS-3В метода за $(dQ/d\Omega)_n$ ($n = 1, 2, 3$) и $(dQ/d\Omega)_\Sigma$. Експериментални подаци са атомском водоничном метом: • Vogt *et al.* [172].

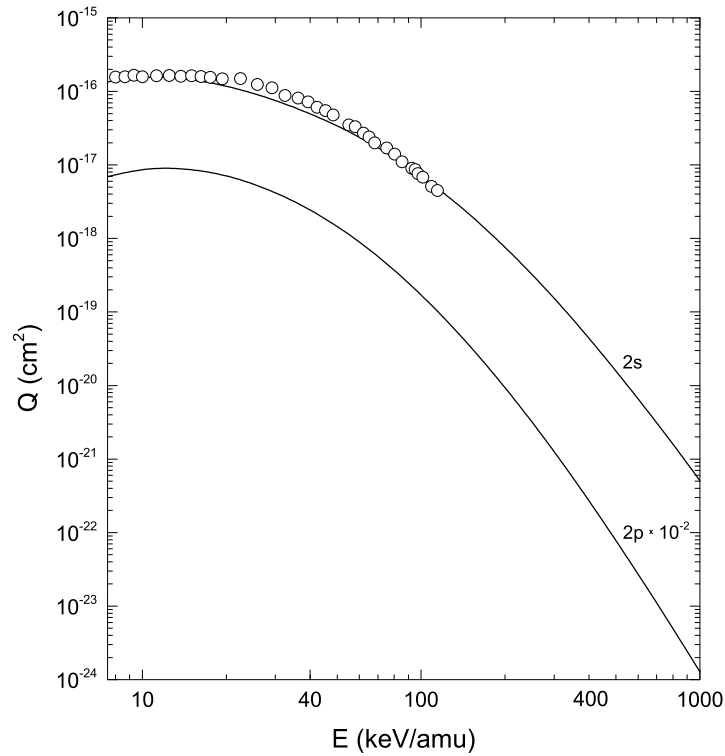
Може се приметити да на 5 MeV, између пика који одговара расејању унапред и Томасовог пика, и мерења [172] и BCIS-3В резултати показују постојање

минимума (слика 14). Међутим, са теоријског становишта, природа овог минимума потпуно је другачија од оне у близини тамних углова који се јављају на већ дискутованим средњим вредностима енергије. Овај експериментално *регистровани* минимум се у оквиру теорија другог реда јавља услед механизма деструктивне интерференције између доприноса који потичу од судара првог и другог реда. Ефекти првог реда заслужни су за пик на $\theta \approx 0$, услед једноструког расејања језгра пројектила и електрона мете. Ефекти другог реда, услед двоструког расејања истог електрона на два језгра, дају Томасов пик на критичном углу θ_{ds} . На слици 14 се види да је теоријски предвиђени положај минимума мало померен од оног детектованог у мерењима [172]. Ово се код BCIS-3В метода не јавља услед сабирања доприноса од свих финалних ексцитованих стања nlm , што се лако може видети са слике 14 (анализирањем појединачних доприноса $(dQ/d\Omega)_n$ ($n = 1, 2, 3$)). Сумирани диференцијални ефикасни пресеци $(dQ/d\Omega)_\Sigma$, које на основу релације (4.30) даје BCIS-3В метод, конвергирани су правој вредности (4.11) за све углове расејања θ . Минимум између пика на $\theta \approx 0$ и Томасовог пика може се делимично поунити конволуцијом теоријски добијеног ефикасног пресека $(dQ/d\Omega)_\Sigma$ са експериментално процењеном „folding“ функцијом [172], као што је урађено у референци [1] за друге методе другог реда, нпр. CDW-3В [4], CB2-3В (друга Борнова апроксимација са гранично коректним условима) [175], као и реформулисану импулсну апроксимацију [42]. Овакву конволуцију ми нисмо урадили.

Захват електрона у судару He^{2+} са $\text{H}(1s)$

Сада прелазимо на разматрање електронског захвата из атома водоника He^{2+} јоном (процеси (4.14), (4.15) и (4.18)). На слици 15 приказани су резултати за парцијалне ефикасне пресеке Q_{2s} и Q_{2p} , заједно са доступним експерименталним подацима за захват у $2s$ стање [176]. Као што се може видети, BCIS-3В теоријска крива одлично репродукује мерења, и то и на толико ниским енергијама од чак $E = 8 \text{ keV/amu}$, што је резултат без преседана у категорији високоенергијских апроксимација. За захват у $2p$ стање, нажалост, нема доступних експерименталних података са којима бисмо упоредили наше теоријске резултате. Свеједно, Q_{2p} ефикасни пресеци су приказани на слици 15, ради комплетности.

Теоријски резултати за захват у нека виша побуђена стања, заједно са мерењима из референце [177], приказани су на слици 16 за процес (4.14) са $n = 4$ и $l = 0, 1, 2, 3$, као и на слици 17 за процес (4.15) са $n = 4$. Квалитативно, слика

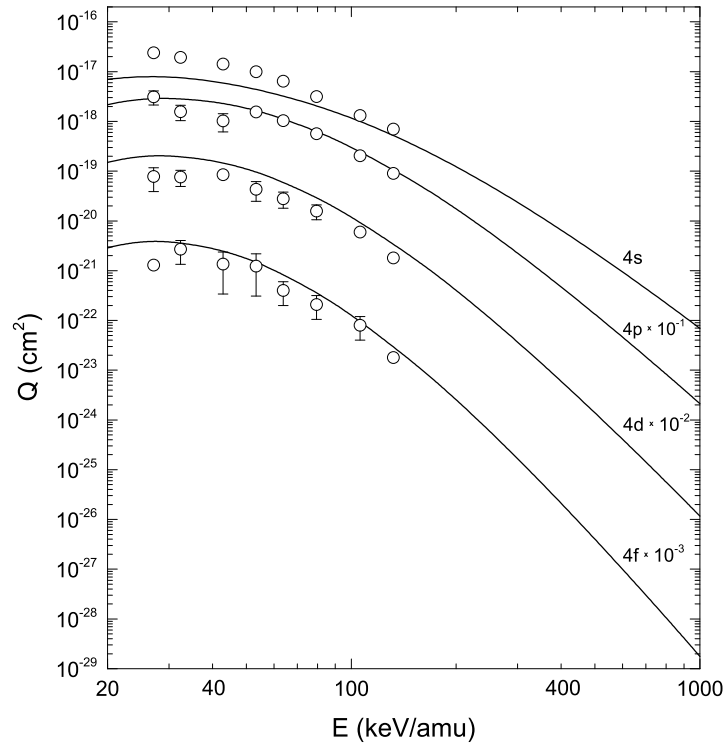


Слика 15: Парцијални тотални ефикасни пресеци Q_{2s} и Q_{2p} (у cm^2) у функцији инцидентне енергије E (keV/amu) за електронски захват од стране He^{2+} јона из атома $\text{H}(1s)$, за процес (4.14). Криве представљају резултате у оквиру BCIS-3В метода. Експериментални подаци са атомском водоничном метом: \circ (Q_{2s}) Shah и Gilbody [176]. Теоријски резултати за Q_{2p} су подељени са 10^2 .

16 показује усклађеност облика зависности теоријских и експерименталних података за Q_{4p} , Q_{4d} и Q_{4f} . Квантитативно, BCIS-3В метод и мерења се веома добро слажу за Q_{4p} и Q_{4f} парцијалне пресеке. Што се тиче Q_{4s} и Q_{4d} , теорија лежи испод и надмашује, респективно, одговарајуће експерименталне податке. Међутим, када се доприноси од појединачних парцијалних пресека Q_{4s} , Q_{4p} , Q_{4d} и Q_{4f} саберу, теоријска предвиђања за Q_4 одлично репродукују експерименталне податке из [177] на свим вредностима инцидентне енергије, као што се може видети на слици 17.

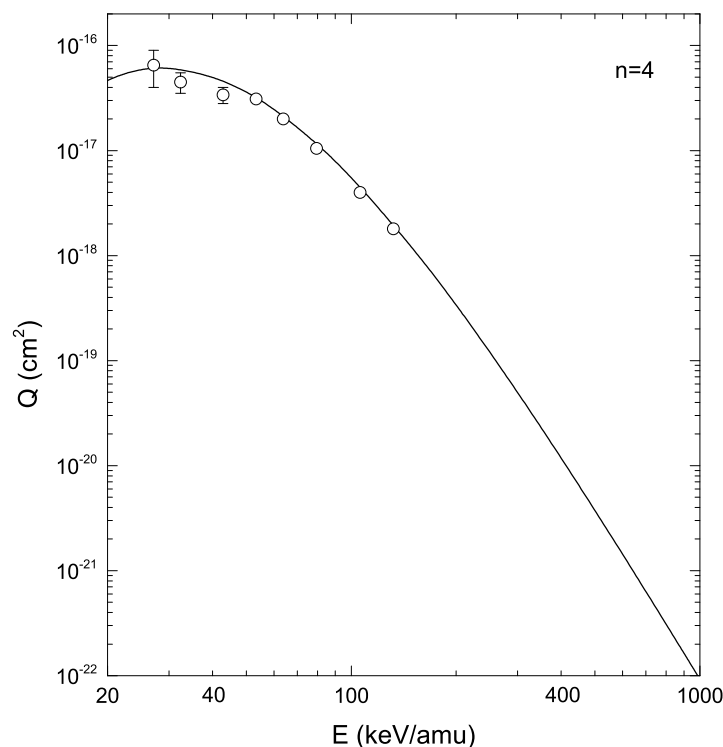
Експериментални резултати приказани на сликама 16 и 17 потичу из истог мерења [177]. Заправо, у раду [177] су директно мерене само вредности парцијалних пресека Q_4 , сумиране по свим подљускама $0 \leq l \leq 3$. Ниједан од појединачних пресека Q_{4s} , Q_{4p} , Q_{4d} и Q_{4f} није директно измерен, већ су ови подаци екстраполирани на основу измерених Q_4 , што може увести одређене непрецизности. Ово ограничење треба имати у виду при разматрању слике 16, када се подаци из [177] за Q_{4s} , Q_{4p} , Q_{4d} и Q_{4f} пореде са теоријским резултатима.

За сумиране тоталне ефикасне пресеке (процес (4.18)), теоријски резултати



Слика 16: Парцијални тотални ефикасни пресеци Q_{4s} , Q_{4p} , Q_{4d} и Q_{4f} (у cm^2) у функцији инцидентне енергије E (keV/amu) за електронски захват од стране He^{2+} јона из атома $\text{H}(1s)$, за процес (4.14). Криве представљају резултате у оквиру BCIS-3В метода. Експериментални подаци са атомском водоничном метом: \circ (Q_{4s} , Q_{4p} , Q_{4d} , Q_{4f}) Frieling *et al.* [177]. И теоријски и експериментални резултати су подељени одређеним фактором: Q_{4p} са 10, Q_{4d} са 10^2 и Q_{4f} са 10^3 .

добијени су сумирањем парцијалних пресека по свим финалним стањима на основу Опенхајмеровог закона скалирања (4.26) и приказани на слици 18, заједно са експерименталним подацима [164, 176, 178–184]. Нека од приказаних мерења су оригинално начињена на молекуларном водонику, али су одговарајући подаци за атомску водоничну мету добијени пратећи референцу [159]. Готово сви у литератури доступни експериментални подаци приказани су на овој слици. Прво што се може приметити је да су експериментални подаци за овај процес доста раштрканији у односу на оне код процеса (4.17). На пример, значајно одступање од тренда осталих мерења се на слици 18 уочава испод 40 keV/amu код мерења из референце [181], као и изнад 250 keV/amu код мерења из референце [182]. Без обзира на то, већина мерења приказаних на слици 18 су међусобно усаглашена и одлично се поклапају и са теоријским резултатима BCIS-3В метода.

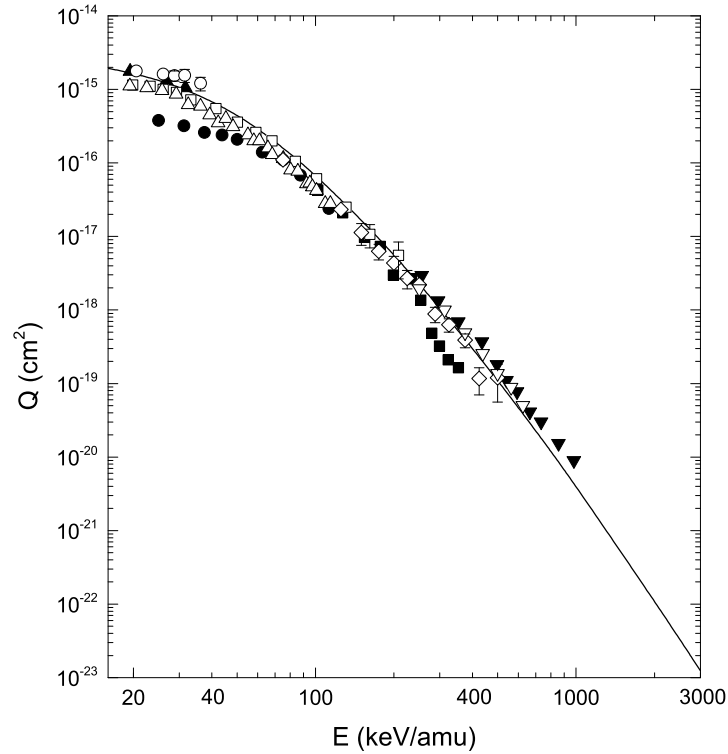


Слика 17: Парцијални тотални ефикасни пресеци $Q_4(\text{cm}^2)$ у функцији инцидентне енергије E (keV/amu) за електронски захват од стране He^{2+} јона из атома $\text{H}(1s)$, за процес (4.15). Крива представља резултате у оквиру BCIS-3B метода. Експериментални подаци са атомском водоничном метом: \circ Frieling *et al.* [177].

Захват електрона у судару Li^{3+} са $\text{H}(1s)$

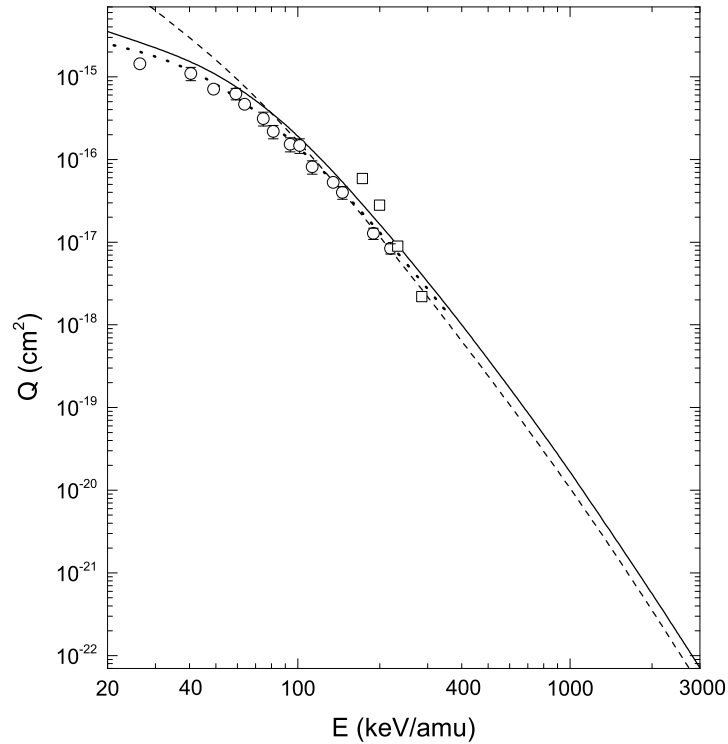
Теоријски резултати за сумиране тоталне ефикасне пресеке за електронски захват од стране Li^{3+} јона из $\text{H}(1s)$ приказани су на слици 19. На овој слици су презентовани и доступни експериментални подаци [185, 186], као и поређење са појединим другим теоријским резултатима [92, 187, 188]. Поједина мерења одговарају молекуларној водоничној мети. У том случају су резултати преведени на атомску водоничну мету, једноставним дељењем ефикасних пресека добијених за захват из молекуларног водоника са 2. Ова апроксимација подразумева да се сваки од атома водоника H из молекула H_2 разматра као независан од другог, при чему између њих не постоји никаква молекуларна интеракција. У случају довољно високих енергија, ова апроксимација се сматра оправданом, с обзиром на то да брзи пројектили интерагују са метом H_2 током врло кратког временског интервала, што није довољно да „виде“ њену молекуларну структуру.

На слици 19 су, поред теоријских резултата BCIS-3B метода ($Q_{\Sigma}^{(\text{BCIS-3B})}$), приказани и сумирани тотални ефикасни пресеци добијени у оквиру CB1-3B [92] и CDW-3B метода [187, 188], $Q_{\Sigma}^{(\text{CB1-3B})}$ и $Q_{\Sigma}^{(\text{CDW-3B})}$, респективно. Презентовани



Слика 18: Сумирани тотални ефикасни пресеци Q_{Σ} (cm^2) у функцији инцидентне енергије E (keV/amu) за процес $\text{He}^{2+} + \text{H}(1s) \rightarrow \text{He}^+(\Sigma) + \text{H}^+$. Крива представља резултате у оквиру BCIS-3B метода. Експериментални подаци са атомском водоничном метом: \circ Bayfield и Khayrallah [178], \square Olson *et al.* [179], \triangle Shah и Gilbody [176], \diamond Hvelplund и Andersen [164], ∇ Sant'Anna *et al.* [180]. Експериментални подаци са молекулском водоничном метом (трансформисани у атомску водоничну мету по референци [159]): \bullet Allison [181], \blacksquare Pivovarov *et al.* [182], \blacktriangle Bayfield и Khayrallah [183], \blacktriangledown Hvelplund *et al.* [184].

CB1-3B резултати су за приор форму, тако да је смислено упоредити их са новодобијеним BCIS-3B ефикасним пресецима. Као што већ раније истакнуто, BCIS-3B и CB1-3B метод имају идентичну иницијалну укупну таласну функцију, као и пертурбацију у улазном каналу. У излазном каналу, с друге стране, код BCIS-3B метода се јавља додатан дисторзиони фактор, у виду електронског Кулоновог таласа центрираног на језгру мете. Стога, поређење $Q_{\Sigma}^{(\text{BCIS-3B})}$ и $Q_{\Sigma}^{(\text{CB1-3B})}$ може показати колика је улога електронског јонизационог континуума у излазном каналу. Поређење са резултатима CDW-3B метода, у коме се електронски Кулонови таласи јављају и у улазном и у излазном каналу, ће додатно осветлити одговор на ово питање. Такође, на овај начин ћемо упоредити теорију првог реда (CB1-3B) са теоријама другог реда (BCIS-3B, CDW-3B) и кроз поређење са мерењима утврдити које су адекватније за описивање процеса (4.19). Још један битан разлог увођења CDW-3B апроксимације у причу је то што она представља једну од најбољих метода другог реда. Стога је поређење



Слика 19: Сумирани тотални ефикасни пресеци Q_{Σ} (cm^2) у функцији инцидентне енергије E (keV/amu) за процес $\text{Li}^{3+} + \text{H}(1s) \rightarrow \text{Li}^{2+}(\Sigma) + \text{H}^+$. Сви теоријски ефикасни пресеци су израчунати помоћу израза $Q_{\Sigma} \simeq Q_1 + Q_2 + Q_3 + 2.561Q_4$. Теоријске криве: BCIS-3B (пуна линија), CB1-3B (тачкаста линија, [92]), CDW-3B (црткана линија, [187, 188]). Експериментални подаци са атомском водоничном метом: \circ Shah *et al.* [185]. Експериментални подаци са молекулском водоничном метом (трансформисани у атомску водоничну мету дељењем са 2): \square Pivovar *et al.* [186].

BCIS-3B метода са CDW-3B резултатима додатно значајно.

Истакнимо на овом месту да ће идентична поређења бити спроведена и за захват електрона из атома водоника од стране јонских пројектила Be^{4+} , B^{5+} и C^{6+} , за процесе (4.20), (4.21) и (4.22), респективно. Закључци ће бити веома слични. Напоменимо још да су у нашем раду [145] за поједине процесе приказана и поређења са резултатима прве Борнове апроксимације која не задовољава коректне граничне услове [92]. Из тог разлога, ова апроксимација генерално има веома лоше слагање са експериментима, као и са методима који задовољавају коректне граничне услове. Стога, ради боље прегледности, резултати ове апроксимације су изостављени са графика који следе.

Као што се са слике 19 може видети, два скупа експерименталних података из референци [185] (26 – 219 keV/amu) и [186] (173 – 286 keV/amu) нису у доброј сагласности на свим вредностима енергије, ни квалитативно, ни квантитативно. Конкретно, $Q_{\Sigma}^{(\text{Ref.}[176])} < Q_{\Sigma}^{(\text{Ref.}[177])}$ на нижим енергијама. Такође, $Q_{\Sigma}^{(\text{Ref.}[176])}$ и

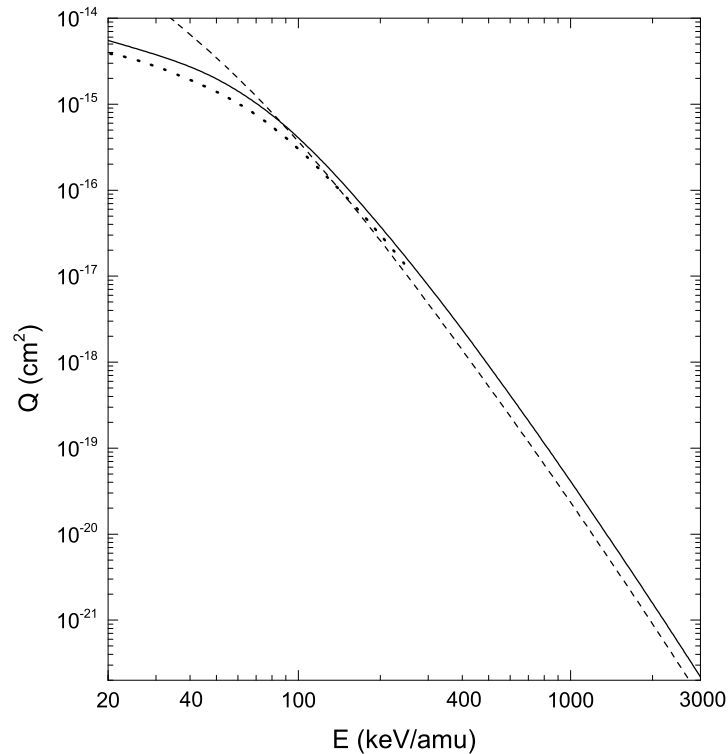
$Q_{\Sigma}^{(\text{Ref.}[177])}$ показују веома различите зависности са растућом инцидентном енергијом. Другим речима, облици кривих које интерполирају експерименталне податке (нису приказане на слици) $Q_{\Sigma}^{(\text{Ref.}[176])}$ и $Q_{\Sigma}^{(\text{Ref.}[177])}$ су различити. Облик криве $Q_{\Sigma}^{(\text{BCIS-3B})}$ је сличан оној која одговара $Q_{\Sigma}^{(\text{Ref.}[176])}$, али не и $Q_{\Sigma}^{(\text{Ref.}[177])}$. Очигледно, нова мерења су неопходна да би се ситуација разјаснила, бар на нивоу природе енергијских зависности ефикасних пресека.

По питању квантитативног поређења теорије и мерења, ефикасни пресеци $Q_{\Sigma}^{(\text{BCIS-3B})}$ надмашују $Q_{\Sigma}^{(\text{Ref.}[176])}$ у целом енергијском интервалу, мада не превише. С друге стране, услед различитих енергијских зависности, $Q_{\Sigma}^{(\text{BCIS-3B})}$ и $Q_{\Sigma}^{(\text{Ref.}[177])}$ ефикасни пресеци слажу се једино на 232 keV/amu. На 172 и 200 keV/amu, $Q_{\Sigma}^{(\text{BCIS-3B})}$ су испод $Q_{\Sigma}^{(\text{Ref.}[177])}$. Овај тренд је обрнут на 286 keV/amu, где важи $Q_{\Sigma}^{(\text{BCIS-3B})} > Q_{\Sigma}^{(\text{Ref.}[177])}$. Што се релативне успешности BCIS-3B, CB1-3B и CDW-3B метода тиче, може се приметити да су $Q_{\Sigma}^{(\text{CB1-3B})}$ ближи експерименталним подацима и од $Q_{\Sigma}^{(\text{BCIS-3B})}$ и од $Q_{\Sigma}^{(\text{CDW-3B})}$. Разлика између BCIS-3B и CB1-3B метода смањује се са порастом енергије, док се BCIS-3B и CDW-3B криве пресецају на око 80 keV/amu, након чега BCIS-3B даје нешто веће вредности ефикасних пресека него CDW-3B. Такође треба истакнути да BCIS-3B и CDW-3B имају веома сличне енергијске зависности у интервалу 200 – 3000 keV/amu, тј. имају сличан конкаван облик и простиру се „паралелно“ једна другој. Ефикасни пресеци $Q_{\Sigma}^{(\text{CB1-3B})}$ одлично репродукују мерења $Q_{\Sigma}^{(\text{Ref.}[176])}$.

Најупадљивија разлика између CDW-3B резултата са једне, и BCIS-3B и CB1-3B резултата са друге стране, су знатно већи пресеци које CDW-3B даје на ниским вредностима инцидентне енергије (у односу на упоредиве резултате BCIS-3B и CB1-3B). У том региону су ефикасни пресеци $Q_{\Sigma}^{(\text{BCIS-3B})}$ и $Q_{\Sigma}^{(\text{CB1-3B})}$ знатно ближе експерименталним вредностима него што су $Q_{\Sigma}^{(\text{CDW-3B})}$. Прецизније, BCIS-3B и CB1-3B почињу да се „савијају“ на инцидентној енергији ~ 50 keV/amu и испољавају *Мејсијев пик* (који се генерално очекује на око 25 keV/amu). Мејсијев пик се јавља када се брзина пројектила v поклапа са средњом брзином електрона v_e на љусци са које се врши захват. С друге стране, CDW-3B неометано наставља да расте са смањивањем енергије, без икаквог наговештаја постојања Мејсијевог максимума. Ово је најдраматичнија разлика између једноцентричних BCIS метода и двоцентричних CDW метода (при чему напомињемо да се Мејсијев пик евидентно јавља и код CB1 метода, који уопште не укључују електронске Кулонове таласе). Узрок овоме је тзв. *нормализациони проблем*, који се јавља код CDW метода. Наиме, укупна таласна функција у улазном каналу је код BCIS метода (у приор форми) нормализована у сваком временском тренутку t , као и за сва растојања између пројектила и мете R . С друге стране, код CDW

метода ово важи искључиво у асимптотској регији расејања $|t| \rightarrow \infty$, $R \rightarrow \infty$. Услед овога, $Q_{\Sigma}^{(\text{CDW-3B})}$ преоштро расту са смањивањем енергије и самим тим драматично одступају од експерименталних података. Ова карактеристика CDW метода може се уочити и на наредним сликама, за преостале процесе захвата из атомског водоника.

Захват електрона у судару Be^{4+} са $\text{H}(1s)$

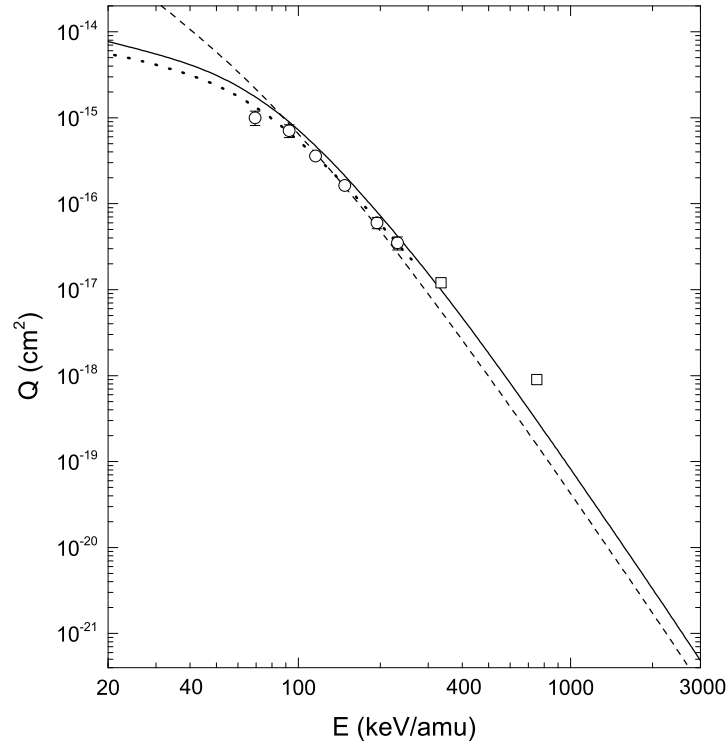


Слика 20: Сумирани тотални ефикасни пресеци Q_{Σ} (cm^2) у функцији инцидентне енергије E (keV/amu) за процес $\text{Be}^{4+} + \text{H}(1s) \rightarrow \text{Be}^{3+}(\Sigma) + \text{H}^+$. Сви теоријски ефикасни пресеци су израчунати помоћу израза $Q_{\Sigma} \simeq Q_1 + Q_2 + Q_3 + Q_4 + 3.049Q_5$. Теоријске криве: BCIS-3B (пуна линија), CB1-3B (тачкаста линија, [92]), CDW-3B (црткана линија, [187, 188]).

На слици 20 приказани су само теоријски резултати за процес $\text{Be}^{4+} + \text{H}(1s) \rightarrow \text{Be}^{3+}(\Sigma) + \text{H}^+$, с обзиром на то да, у овом случају, у литератури нема доступних експерименталних података. Зато је нарочито важно упоредити наше BCIS-3B резултате са другим теоријским методима. На слици 20 уочава се да је ситуација са односом BCIS-3B, CB1-3B и CDW-3B резултата квалитативно идентична оној већ виђеној на слици 19 (код Li^{3+} као пројектила). CB1-3B метод на нижим енергијама даје мање ефикасне пресеке него BCIS-3B, док се са повећањем енергије CB1-3B крива све више приближава BCIS-3B кривој. На нижим енергијама CDW-3B знатно премашује вредности које дају BCIS-3B и CB1-3B. Након

одређене вредности енергије $\sim 200 \text{ keV/amu}$, облици линија BCIS-3B и CDW-3B постају готово исти и међусобно „паралелни“. Нажалост, док за овај процес не буду извршена мерења, ништа детаљније не можемо овде рећи о успешности примењених теоријских метода.

Захват електрона у судару B^{5+} са $\text{H}(1s)$



Слика 21: Сумирани тотални ефикасни пресеци Q_{Σ} (cm^2) у функцији инцидентне енергије E (keV/amu) за процес $\text{B}^{5+} + \text{H}(1s) \rightarrow \text{B}^{4+}(\Sigma) + \text{H}^+$. Сви теоријски ефикасни пресеци су израчунати помоћу израза $Q_{\Sigma} \simeq Q_1 + Q_2 + Q_3 + Q_4 + Q_5 + 3.541Q_6$. Теоријске криве: BCIS-3B (пуна линија), CB1-3B (тачкаста линија, [92]), CDW-3B (црткана линија, [187, 188]). Експериментални подаци са атомском водоничном метом: \circ Goffe *et al.* [189]. Експериментални подаци са молекулском водоничном метом (трансформисани у атомску водоничну мету дељењем са 2): \square Dmitriev *et al.* [190].

Сада ћемо размотрити захват електрона од стране B^{5+} јона из $\text{H}(1s)$, са резултатима приказаним на слици 21. Експериментални подаци Goffe *et al.* [189] на атомској водоничној мети покривају енергијски интервал $E \in [69, 232] \text{ keV/amu}$, који спада у област ниских до средњих енергија. И овде се може уочити да $Q_{\Sigma}^{(\text{BCIS-3B})}$ ефикасни пресеци надмашују $Q_{\Sigma}^{(\text{Ref.}[180])}$ за отприлике исти проценат као и на слици 19 (са Li^{3+} као пројектилом). Слагање између $Q_{\Sigma}^{(\text{BCIS-3B})}$ и $Q_{\Sigma}^{(\text{Ref.}[180])}$ се поправља са порастом инцидентне енергије, тако да се нпр. на $E = 232 \text{ keV/amu}$

теоријска BCIS-3B крива приближава измереној вредности ефикасног пресека унутар граница експерименталне грешке.

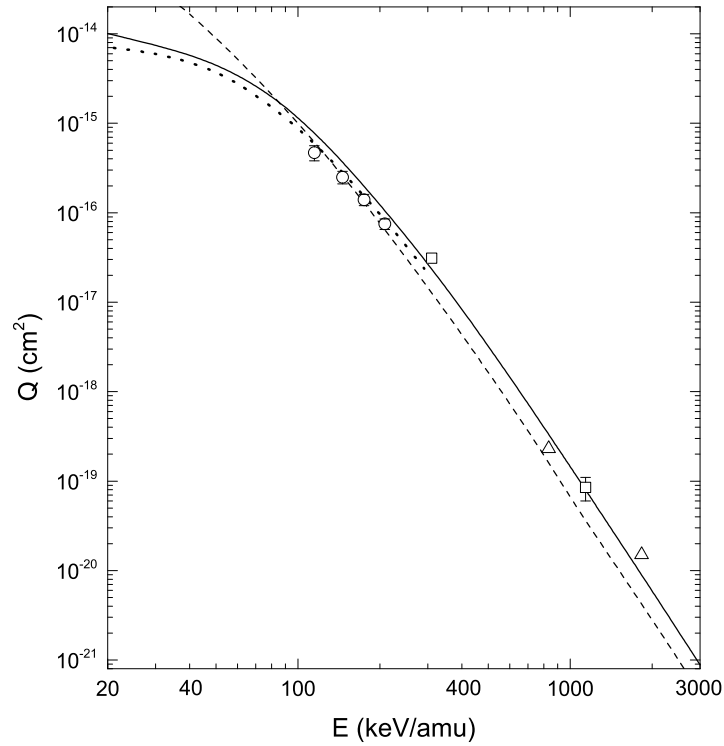
Преостале две експерименталне тачке (на 334 и 752 keV/amu) су из референце [190]. На 334 keV/amu $Q_{\Sigma}^{(BCIS-3B)}$ и $Q_{\Sigma}^{(Ref.[181])}$ се поклапају. Међутим, на 752 keV/amu ефикасни пресеци $Q_{\Sigma}^{(BCIS-3B)}$ и $Q_{\Sigma}^{(Ref.[181])}$ су веома различити. Иако се ништа са сигурношћу не може рећи ослањајући се на само две измерене вредности $Q_{\Sigma}^{(Ref.[181])}$, изненађујуће је да су $Q_{\Sigma}^{(BCIS-3B)}$ и $Q_{\Sigma}^{(Ref.[181])}$ боље усаглашени на нижој него на вишој вредности енергије. Стога, за процес (4.21) такође су пожељна нова мерења, нарочито из високоенергијског региона.

Што се тиче различитих теоријских метода ситуација је готово идентична претходним, приказаним на сликама 19 и 20. Као што се може видети на слици 21, ефикасни пресеци $Q_{\Sigma}^{(CB1-3B)}$ одлично репродукују експерименталне податке $Q_{\Sigma}^{(Ref.[180])}$. И $Q_{\Sigma}^{(CDW-3B)}$ резултати су генерално у бољој сагласности са мерењима него $Q_{\Sigma}^{(BCIS-3B)}$. Ипак, BCIS-3B метод и овде даје задовољавајуће слагање, које се све више побољшава са растућом вредношћу инцидентне енергије.

Захват електрона у судару C^{6+} са $H(1s)$

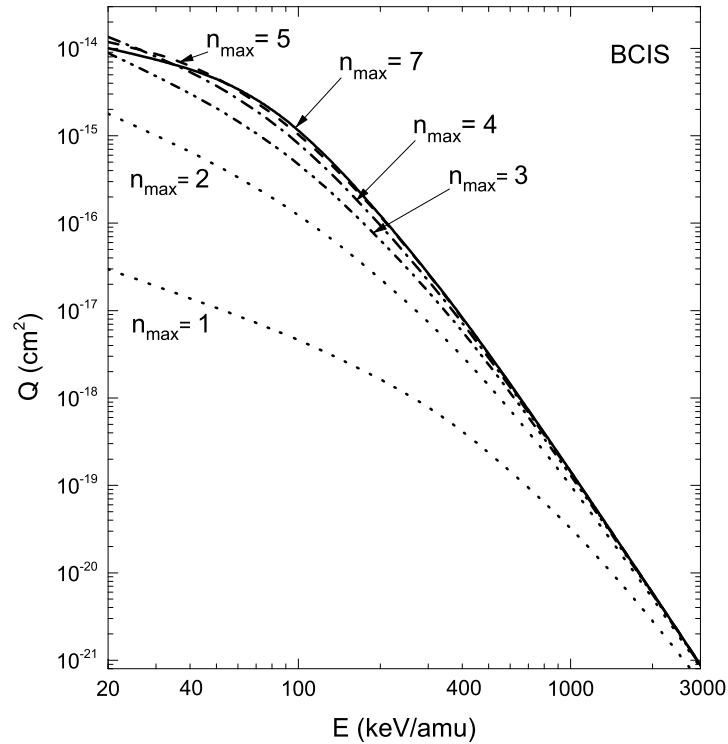
На слици 22 приказани су резултати за процес $C^{6+} + H(1s) \rightarrow C^{5+}(\Sigma) + H^+$. У овом случају постоје три скупа мерења: Goffe *et al.* [189] (115 – 208 keV/amu), Graham *et al.* [191] (310, 1140 keV/amu) и Anholt *et al.* [192] (833, 1830 keV/amu). На слици 22 види се да пресеци $Q_{\Sigma}^{(BCIS-3B)}$ надмашују $Q_{\Sigma}^{(Ref.[180])}$ на средњим вредностима енергије 115 – 208 keV/amu [189], налик ситуацији на слици 21. Ово указује на конзистентност самих мерења начињених у раду [189]. Такође, већ истакнута опсервација да се разлика између $Q_{\Sigma}^{(BCIS-3B)}$ и експерименталних података $Q_{\Sigma}^{(Ref.[180])}$ смањује са повећањем енергије важи и овде. Преостала два скупа мерења [191] и [192] имају сваки по само две експерименталне тачке. Измерене вредности $Q_{\Sigma}^{(Ref.[182])}$ и $Q_{\Sigma}^{(Ref.[183])}$ међусобно су усаглашене. Штавише, када се посматрају скупа, оне су у веома доброј сагласности са $Q_{\Sigma}^{(BCIS-3B)}$. Ово је и очекивано, с обзиром на то да су мерења из [191] и [192] начињена на високим енергијама, на којима BCIS-3B метод и треба бити адекватан.

Што се тиче поређења различитих теоријских резултата (BCIS-3B, CB1-3B и CDW-3B), ситуација је потпуно аналогна претходно дискутованој. Истакнимо само још да су, на основу слике 22, CB1-3B и CDW-3B резултати у бољој сагласности са експериментом [189] на нижим енергијама, док BCIS-3B боље репродукује резултате мерења на вишим енергијама [191, 192].



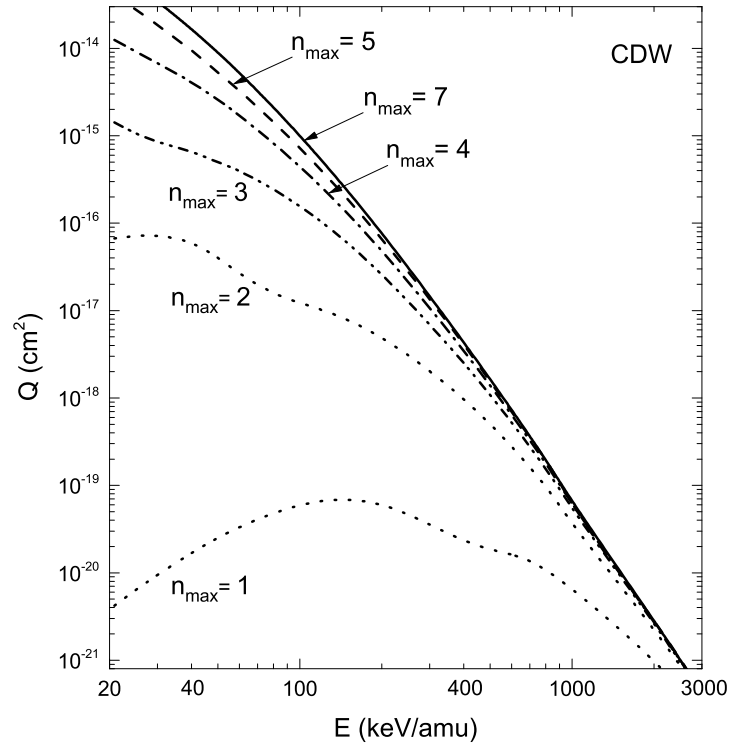
Слика 22: Сумирани тотални ефикасни пресеци Q_{Σ} (cm^2) у функцији инцидентне енергије E (keV/amu) за процес $\text{C}^{6+} + \text{H}(1s) \rightarrow \text{C}^{5+}(\Sigma) + \text{H}^+$. Сви теоријски ефикасни пресеци су израчунати помоћу израза $Q_{\Sigma} \simeq Q_1 + Q_2 + Q_3 + Q_4 + Q_5 + Q_6 + 4.035Q_7$. Теоријске криве: BCIS-3B (пуна линија), CB1-3B (тачкаста линија, [92]), CDW-3B (црткана линија, [187, 188]). Експериментални подаци са атомском водоничном метом: \circ Goffe *et al.* [189]. Експериментални подаци са молекулском водоничном метом (трансформисани у атомску водоничну мету дељењем са 2): \square Graham *et al.* [191] и \triangle Anholt *et al.* [192].

За овај процес приказане су и две помоћне слике 23 и 24, на којима су, респективно за BCIS-3B и CDW-3B случај, приказани резултати израчунавања сумираних тоталних ефикасних пресека по формулама $Q_{\Sigma} \approx 1.202Q_1$ са $n_{max} = 1$, $Q_{\Sigma} \approx Q_1 + 1.616Q_2$ са $n_{max} = 2$, $Q_{\Sigma} \approx Q_1 + Q_2 + 2.081Q_3$ са $n_{max} = 3$, као и изразима (4.26), (4.27) и (4.29) са $n_{max} = 4$, $n_{max} = 5$ и $n_{max} = 7$, респективно. Резултати за (4.28) са $n_{max} = 6$ нису приказани, јер је разлика између ефикасних пресека добијених са $n_{max} = 6$ и $n_{max} = 7$ готово неуочљива. Ове две слике служе најпре да илуструју значај правилног одабира n_{max} , с обзиром на то да приказују како се за превише ниске вредности n_{max} јављају велика одступања у вредностима ефикасних пресека (и по неколико редова величине на најнижим енергијама). Затим, слике 23 и 24 служе да покажу да је $n_{max} = 7$ заиста довољно за израчунавање сумираних ефикасних пресека за случај захвата C^{6+} јоном. Идентична ситуација добија се и у случају N^{7+} , O^{8+} и F^{9+} јона. Стога, ради избегавања додатног оптерећивања текста, ове слике нису презентоване. Коначно, слике 23 и



Слика 23: Сумирани тотални ефикасни пресеци Q_{Σ} (cm^2) у функцији инцидентне енергије E (keV/amu) за процес $\text{C}^{6+} + \text{H}(1s) \rightarrow \text{C}^{5+}(\Sigma) + \text{H}^+$. Криве представљају резултате у оквиру BCIS-3В метода: $Q_{\Sigma} \simeq Q_1 + Q_2 + Q_3 + Q_4 + Q_5 + Q_6 + 4.035Q_7$ (пуна линија), $Q_{\Sigma} \simeq Q_1 + Q_2 + Q_3 + Q_4 + 3.049Q_5$ (црткана линија), $Q_{\Sigma} \simeq Q_1 + Q_2 + Q_3 + 2.561Q_4$ (тачка-црта линија), $Q_{\Sigma} \simeq Q_1 + Q_2 + 2.081Q_3$ (дупла тачка-црта линија), $Q_{\Sigma} \simeq Q_1 + 1.616Q_2$ и $Q_{\Sigma} \simeq 1.202Q_1$ (тачкасте линије).

24 служе и за анализирање разлике између резултата добијених у оквиру BCIS-3В и CDW-3В метода, у зависности од n_{max} . Поређењем слика 23 и 24 видимо да, иако је у оба случаја $n_{max} = 7$ сасвим довољно, BCIS-3В резултати много брже конвергирају него CDW-3В. Ово показује да се доприноси од различитих љуски Q_n у сумираном тоталном ефикасном пресеку Q_{Σ} код BCIS-3В и CDW-3В метода значајно разликују. Нажалост, не постоје доступни експериментални подаци за парцијалне ефикасне пресеке при захвату из атома водоника јонима са $Z_p > 2$. Када би они били доступни, могли бисмо да утврдимо који од ова два теоријска метода је у овом случају адекватнији. Имајући у виду велике разлике у парцијалним пресецима које ова два метода дају, (најмање) један од ова два метода не би показао добро слагање са мерењима. На нивоу сумираних ефикасних пресека, иако и даље различити, резултати које дају BCIS-3В и CDW-3В методи су много више усаглашени.

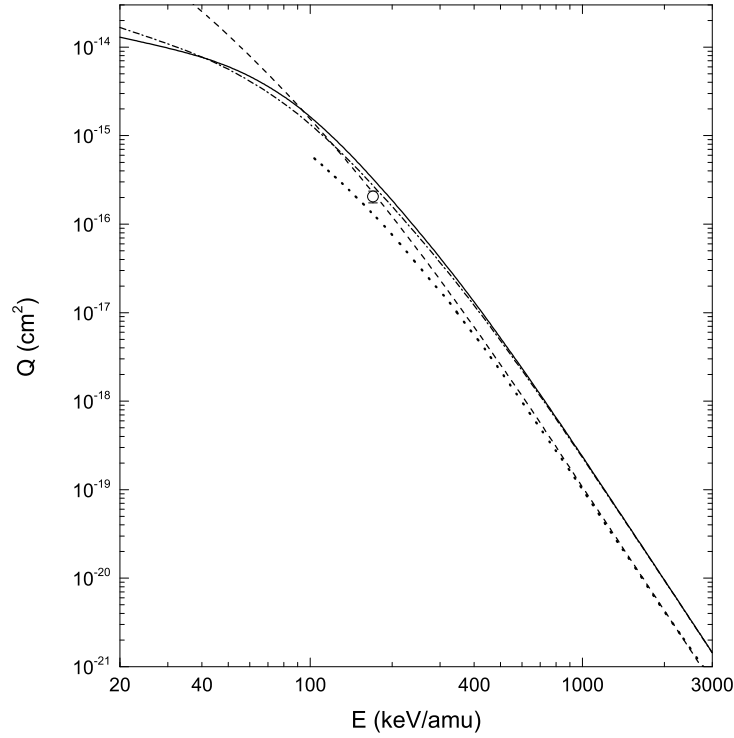


Слика 24: Исто као и на слици 23, само за CDW-3B метод [187, 188].

Захват електрона у судару N^{7+} са $H(1s)$

Ради обogaћивања поређења између различитих метода, за електронски захват од стране N^{7+} , O^{8+} и F^{9+} јона из атома водоника $H(1s)$, поред BCIS-3B и CDW-3B [187, 188], на слици 25 ће бити приказани и резултати трочестичног метода са континуумским изобличеним таласима са еиконалним финалним стањем (на енглеском *three-body continuum distorted wave eikonal final state method*, скраћено CDW-EFS-3B) [193]. Кретање електрона у улазном и излазном каналу се у BCIS-3B и CDW-EFS-3B методу третира на различит начин. У излазном каналу, у оквиру BCIS-3B метода у приор форми, интеракција електрона са језгром мете $V_T(x) = -Z_T/x$ генерише одговарајући електронски Кулонов талас, док је код CDW-EFS-3B метода он представљен својим асимптотским обликом (кулоновском логаритамском фазом). У улазном каналу, у оквиру CDW-EFS-3B метода, интеракција електрона са језгром пројектила $V_P(s) = -Z_P/s$ резултује одговарајућим електронским Кулоновим таласом, док се код BCIS-3B метода у приор форми јавља кулоновска логаритамска фаза, услед потенцијала $V_P(R) = -Z_P/R$. Електронски потенцијали $V_P(s)$ и $V_P(R)$ су асимптотски једнаки када $R \rightarrow \infty$, јер тада важи $R \approx s$.

Резултати за захват N^{7+} јоном из атомског водоника приказани су на слици



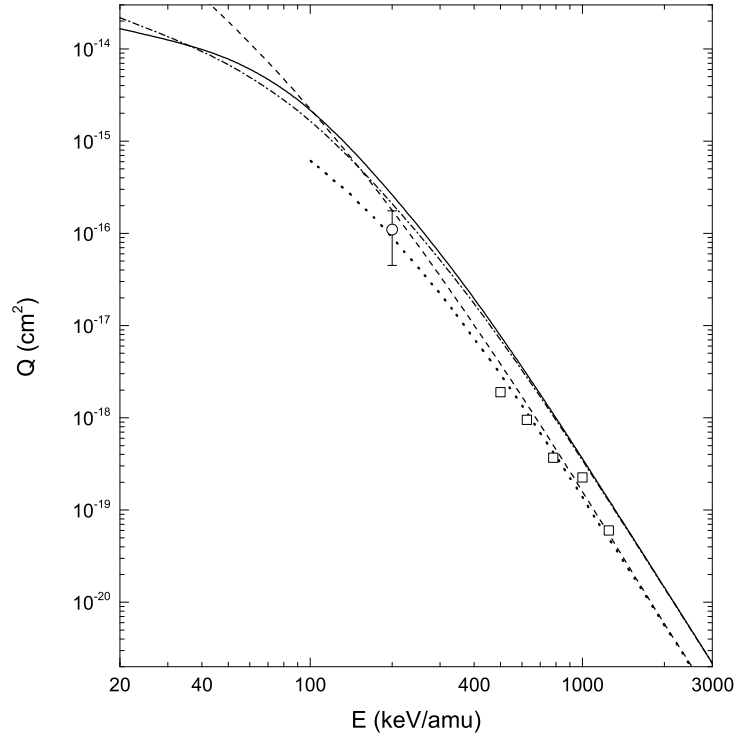
Слика 25: Сумирани тотални ефикасни пресеци Q_{Σ} (cm^2) у функцији инцидентне енергије E (keV/amu) за процес $N^{7+} + H(1s) \rightarrow N^{6+}(\Sigma) + H^+$. Теоријске криве: BCIS-3B са $Q_{\Sigma} \simeq Q_1 + Q_2 + Q_3 + Q_4 + Q_5 + Q_6 + 4.035Q_7$ (пуна линија) и $Q_{\Sigma} \simeq Q_1 + Q_2 + Q_3 + Q_4 + 3.049Q_5$ (тачка-црта линија), CDW-3B (црткана линија, [187, 188]) са $Q_{\Sigma} \simeq Q_1 + Q_2 + Q_3 + Q_4 + Q_5 + Q_6 + 4.035Q_7$, CDW-EFS-3B (тачаста линија, [193]) са $Q_{\Sigma} \simeq Q_1 + Q_2 + Q_3 + Q_4 + 3.049Q_5$. Експериментални подаци са атомском водоничном метом: \circ Goffe *et al.* [189].

25. Доступни експериментални подаци ограничени су само на једну тачку на $170 \text{ keV}/\text{amu}$ из референце [189]. Са слике се јасно види да $Q_{\Sigma}^{(\text{BCIS-3B})}$ ефикасни пресеци надмашују $Q_{\Sigma}^{(\text{Ref.}[180])}$, док $Q_{\Sigma}^{(\text{CDW-EFS-3B})}$ леже испод $Q_{\Sigma}^{(\text{Ref.}[180])}$, а $Q_{\Sigma}^{(\text{CDW-3B})}$ се одлично слажу са истим мерењем. Наравно, овом (не)слагању не треба придавати превелик значај, с обзиром на то да једна измерена вредност ефикасног пресека, и то на релативно ниској енергији, ни приближно није довољна за смислено поређење са високоенергијским BCIS-3B, CDW-EFS-3B и CDW-3B методима. Настављајући даље са дискусијом, можемо приметити да на свим инцидентним енергијама важи да је $Q_{\Sigma}^{(\text{CDW-EFS-3B})} < Q_{\Sigma}^{(\text{BCIS-3B})}$. Ефикасни пресеци $Q_{\Sigma}^{(\text{CDW-EFS-3B})}$ су у раду [193] израчунати на основу израза (4.27) са $n_{\text{max}} = 5$. С друге стране, ефикасни пресеци $Q_{\Sigma}^{(\text{BCIS-3B})}$ представљени пуном линијом на слици 25 добијени су на основу једначине (4.29) са $n_{\text{max}} = 7$. Управо зато су на слици 25 представљени и BCIS-3B резултати са $n_{\text{max}} = 5$ (тачка-црта линија), израчунати на основу израза (4.27), да би се проценило колико би на CDW-EFS-3B резултате

утицало укључивање додатних побуђених стања. Занемарени егзактни допринос од захвата у стања са $n = 6$ и $n = 7$ у $Q_{\Sigma}^{(\text{CDW-EFS-3B})}$ не би требало да има значајну улогу изнад 300 keV/amu , имајући у виду колико су блиске BCIS-3B криве $Q_{\Sigma}^{(\text{BCIS-3B})}(n_{\text{max}} = 5)$ и $Q_{\Sigma}^{(\text{BCIS-3B})}(n_{\text{max}} = 7)$ за $E > 300 \text{ keV/amu}$. Стога, узрок неслагања између BCIS-3B и CDW-EFS-3B на енергијама $E > 300 \text{ keV/amu}$ не лежи у томе што је егзактно укључен различити број побуђених стања, већ ова два метода сами по себи дају неусаглашене вредности ефикасних пресека. На разлику у самој адекватности ова два метода ћемо се осврнути након разматраног захвата O^{8+} и F^{9+} јонима, с обзиром на то да за ова два процеса има више расположивих експерименталних података. Што се тиче односа BCIS-3B и CDW-3B метода, ситуација је потпуно аналогна претходно разматраној. Са слике 25 може се видети и да CDW-EFS-3B ефикасни пресеци теже CDW-3B ефикасним пресецима са порастом енергије, што је и очекивано. И ово опажање такође указује на то да су $Q_{\Sigma}^{(\text{CDW-EFS-3B})}$ ефикасни пресеци конвергирани ка тачним вредностима, бар на довољно високим инцидентним енергијама ($E > 300 \text{ keV/amu}$). Испод 300 keV/amu могућа су значајнија одступања. Ово разматрање важи и у случају O^{8+} и F^{9+} пројектила, при чему су граничне енергије природно нешто више и износе 400 keV/amu и 500 keV/amu , респективно (слика 26 и 27).

Захват електрона у судару O^{8+} са $\text{H}(1s)$

Теоријски резултати за процес $\text{O}^{8+} + \text{H}(1s) \rightarrow \text{O}^{7+}(\Sigma) + \text{H}^+$ приказани су на слици 26, заједно са експерименталним подацима [194, 195], као и CDW-3B [187, 188] и CDW-EFS-3B [193] теоријским резултатима. Ефикасни пресеци $Q_{\Sigma}^{(\text{BCIS-3B})}(n_{\text{max}} = 7)$ налазе се изнад резултата мерења $Q_{\Sigma}^{(\text{Ref.}[185])}$ и $Q_{\Sigma}^{(\text{Ref.}[186])}$. С друге стране, ефикасни пресеци $Q_{\Sigma}^{(\text{CDW-EFS-3B})}(n_{\text{max}} = 5)$ су у одличној сагласности и са $Q_{\Sigma}^{(\text{Ref.}[185])}$ и са $Q_{\Sigma}^{(\text{Ref.}[186])}$. На овом месту је неопходно истаћи да CDW-EFS-3B ефикасни пресеци надмашују пресеке добијене у оквиру њему блиског асиметричног метода, трочестичног метода са континуумским изобличеним таласима са еиконалним иницијалним стањем (на енглеском *three-body continuum distorted wave eikonal initial state method*, скраћено CDW-EIS-3B) [196]. Ови резултати нису представљени на слици 26, због прегледности. На крају, са слике 26 примећујемо да су резултати CDW-3B метода такође у доброј сагласности са експериментима, мада у за нијансу мањој мери него CDW-EFS-3B.

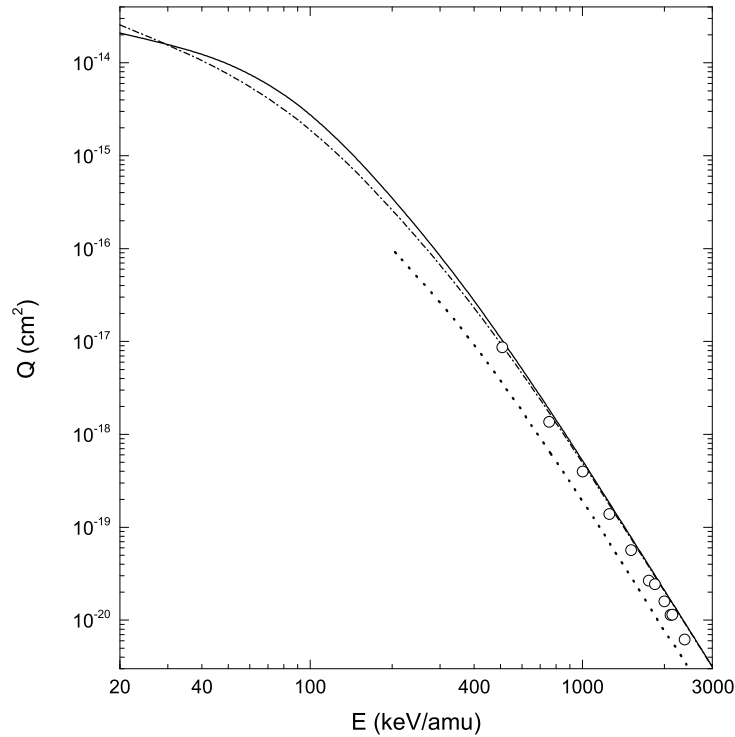


Слика 26: Сумирани тотални ефикасни пресеци Q_{Σ} (cm^2) у функцији инцидентне енергије E (keV/amu) за процес $\text{O}^{8+} + \text{H}(1s) \rightarrow \text{O}^{7+}(\Sigma) + \text{H}^+$. Теоријске криве: BCIS-3B са $Q_{\Sigma} \simeq Q_1 + Q_2 + Q_3 + Q_4 + Q_5 + Q_6 + 4.035Q_7$ (пуна линија) и $Q_{\Sigma} \simeq Q_1 + Q_2 + Q_3 + Q_4 + 3.049Q_5$ (тачка-црта линија), CDW-3B (црткана линија, [187, 188]) са $Q_{\Sigma} \simeq Q_1 + Q_2 + Q_3 + Q_4 + Q_5 + Q_6 + 4.035Q_7$, CDW-EFS-3B (тачаста линија, [193]) са $Q_{\Sigma} \simeq Q_1 + Q_2 + Q_3 + Q_4 + 3.049Q_5$. Експериментални подаци са атомском водоничном метом: \circ Meyer *et al.* [194]. Експериментални подаци са молекулском водоничном метом (трансформисани у атомску водоничну мету дељењем са 2): \square Cheng *et al.* [195].

Захват електрона у судару F^{9+} са $\text{H}(1s)$

Коначно, резултати за процес електронског захвата од стране F^{9+} јона из атома $\text{H}(1s)$ приказани су на слици 27. Од теоријских резултата, на овој слици су представљени BCIS-3B и CDW-EFS-3B, с обзиром на то да у литератури нема CDW-3B ефикасних пресека за овај процес. Мерења из рада Richard *et al.* [197] начињена су у интервалу $507 - 2374 \text{ keV/amu}$. Ово су задовољавајуће високе инцидентне енергије, те би требало да буду адекватне за тестирање предвиђања високоенергијских теоријских BCIS-3B и CDW-EFS-3B метода. Уочава се да се ефикасни пресеци $Q_{\Sigma}^{(\text{BCIS-3B})}$ ($n_{\text{max}} = 7$) веома добро слажу са измереним вредностима $Q_{\Sigma}^{(\text{Ref.}[188])}$. С друге стране, ефикасни пресеци $Q_{\Sigma}^{(\text{CDW-EFS-3B})}$ ($n_{\text{max}} = 5$) се налазе испод експерименталних података.

Када се заједно сагледају слике 26 и 27, уочава се интригантна веза између



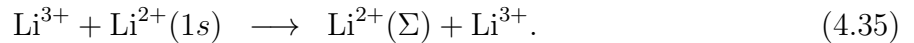
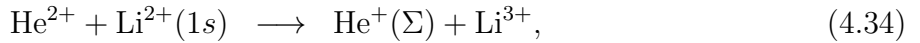
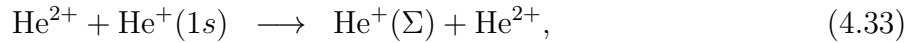
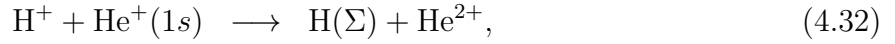
Слика 27: Сумирани тотални ефикасни пресеци Q_{Σ} (cm^2) у функцији инцидентне енергије E (keV/amu) за процес $F^{9+} + H(1s) \rightarrow F^{8+}(\Sigma) + H^+$. Теоријске криве: BCIS-3B са $Q_{\Sigma} \simeq Q_1 + Q_2 + Q_3 + Q_4 + Q_5 + Q_6 + 4.035Q_7$ (пуна линија) и $Q_{\Sigma} \simeq Q_1 + Q_2 + Q_3 + Q_4 + 3.049Q_5$ (тачка-прта линија), CDW-EFS-3B (тачаста линија, [193]) са $Q_{\Sigma} \simeq Q_1 + Q_2 + Q_3 + Q_4 + 3.049Q_5$. Експериментални подаци са молекулском водоничном метом (трансформисани у атомску водоничну мету дељењем са 2): \circ Richard *et al.* [197].

високоенергијских BCIS-3B и CDW-EFS-3B формализама. На обе слике се примећују значајне разлике између ова два метода, чему је узрок њихово различито укључивање интермедијарног јонизационог континуума, о чему је већ било речи. Ово је нарочито изражено код хетеројезгарних судара, као што су $O^{8+} + H$ и $F^{9+} + H$. Интересантно је што експериментални подаци са слике 26 фаворизују CDW-EFS-3B метод, док BCIS-3B метод успешније репородукује мерења са слике 27, без обзира на то што оба мерења из референци [195, 197] одговарају високим инцидентним енергијама.

С обзиром на изнете опсервације, било би јако важно испитати како се пост форма BCIS-3B метода слаже са експерименталним резултатима. У општем случају, асиметрични формализми (какви су нпр. BCIS-3B, CDW-EIS-3B и CDW-EFS-3B) код хетеројезгарних судара испољавају тзв. „пост-приор разлику“. CDW-3B метод је симетричан, тако да даје исте ефикасне пресеке и у приор и у пост форми. Израчунавање ефикасних пресека у пост форми BCIS-3B метода би био један од наших наредних задатака.

4.2.2 Јонске мете

У овом одељку биће приказани графички резултати за следеће процесе електронског захвата из водонику сличних јонских мета:

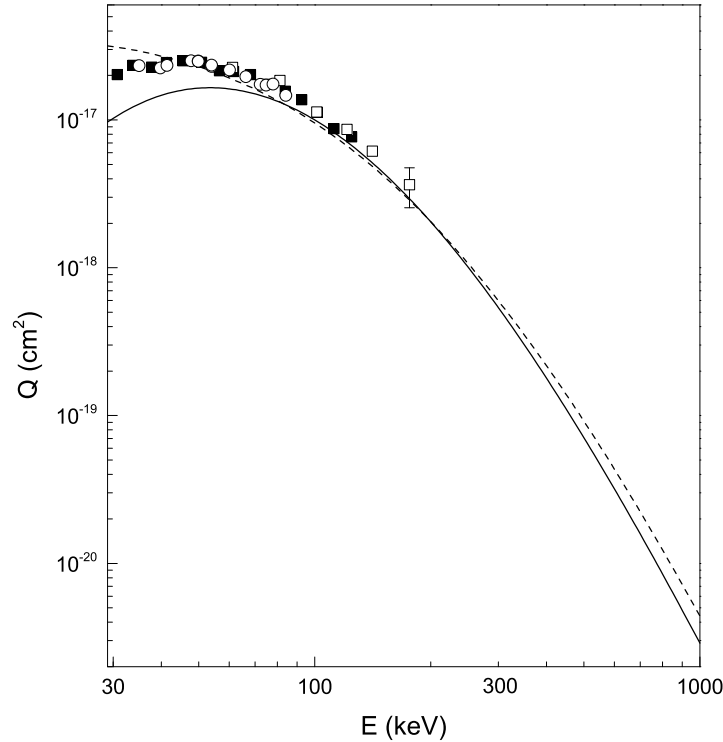


Представљени су резултати за сумиране тоталне ефикасне пресеке, израчунате на основу израза (4.26). Теоријски резултати обухватају наш BCIS-3В метод, као и раније формулисани СВ1-3В метод [92]. Иако је сам СВ1-3В метод много раније развијен, претходно није био примењен на процесе (4.32)-(4.35), до публиковања наших радова [198, 199]. Експериментални подаци обухватају референце [200–204]. Електронски захват у јон-јонским сударима до сад је био предмет теоријских разматрања у оквиру неколико различитих приступа [89, 205–207].

Пре него што пређемо на дискусију резултата за појединачне процесе, истакнимо да су сва доступна мерења извршена у интервалу средњих енергија, при чему највећа енергија за коју су мерени ефикасни пресеци износи 175 keV/amu . Ово онемогућава реалну критичку евалуацију високоенергијских BCIS-3В и СВ1-3В метода (у случају јонских мета). Код водоничне мете видели смо да је слагање BCIS-3В метода и експеримената некада одлично чак и на тако ниској енергији од 8 keV/amu . Стога, иако има смисла поредити високоенергијске теорије са мерењима на средњим енергијама, не треба губити из вида да се у овом интервалу генерално не очекује претерано добро слагање. Потенцијална будућа мерења на високим вредностима инцидентних енергија би овде пуно помогла.

Захват електрона у судару H^+ са $\text{He}^+(1s)$

На слици 28 приказани су BCIS-3В и СВ1-3В резултати за електронски захват у процесу $\text{H}^+ + \text{He}^+(1s) \longrightarrow \text{H}(\Sigma) + \text{He}^{2+}$, заједно са три скупа мерења [200–202]. Приметимо да су сва три скупа мерења добро усаглашена. Као што се може видети на слици 28, СВ1-3В ефикасни пресеци одлично репродукују мерења за $E \geq 40 \text{ keV}$, све до последњег експерименталног податка на



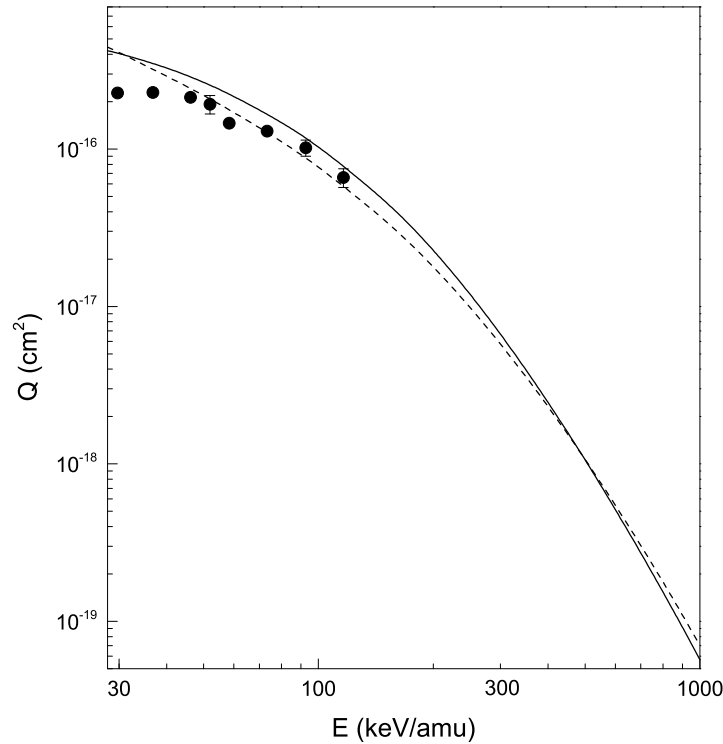
Слика 28: Сумирани тотални ефикасни пресеци Q_{Σ} (cm^2) у функцији инцидентне енергије E (keV) за процес $\text{H}^+ + \text{He}^+(1s) \rightarrow \text{H}(\Sigma) + \text{He}^{2+}$. Криве представљају резултате у оквиру BCIS-3B (пуна линија) и CB1-3B метода (црткана линија). Експериментални подаци: \circ Peart *et al.* [200], \blacksquare Rinn *et al.* [201], \square Watts *et al.* [202].

$E = 175$ keV. BCIS-3B резултати налазе се испод мерења у целом енергијском интервалу са доступним експерименталним подацима, мада се слагање поправља са растућим вредностима енергије и постаје задовољавајуће отприлике на $E \geq 80$ keV. Такође, BCIS-3B ефикасни пресеци су нешто већи од CB1-3B пресека у интервалу $80 \text{ keV} \leq E \leq 220 \text{ keV}$, док у остатку приказаног енергијског интервала важи $Q_{\Sigma}^{(\text{BCIS-3B})} < Q_{\Sigma}^{(\text{CB1-3B})}$. Поменимо још само да је CB1-3B метод, као и CDW-3B, симетричан, те се ни код њега не јавља пост-приор разлика.

Захват електрона у судару He^{2+} са $\text{He}^+(1s)$

На слици 29 приказани су теоријски резултати за електронски захват од стране He^{2+} јона из јонске мете $\text{He}^+(1s)$, уз једини доступан скуп експерименталних података [203].

Ситуација је овде слична оној са којом смо се сусрели на слици 28: $Q_{\Sigma}^{(\text{CB1-3B})}$ су генерално у бољој сагласности са мерењима него $Q_{\Sigma}^{(\text{BCIS-3B})}$, мада не претерано. Обе теорије се задовољавајуће слажу са мерењима (нарочито када се узме у

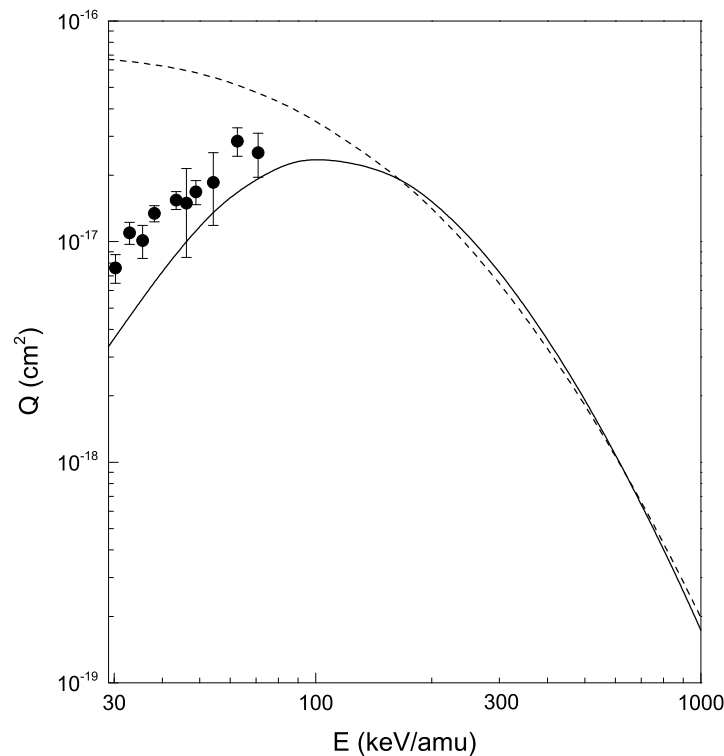


Слика 29: Сумирани тотални ефикасни пресеци Q_{Σ} (cm^2) у функцији инцидентне енергије E (keV/amu) за процес $\text{He}^{2+} + \text{He}^+(1s) \rightarrow \text{He}^+(\Sigma) + \text{He}^{2+}$. Криве представљају резултате у оквиру BCIS-3B (пуна линија) и CB1-3B метода (црткана линија). Експериментални подаци: • Melchert *et al.* [203].

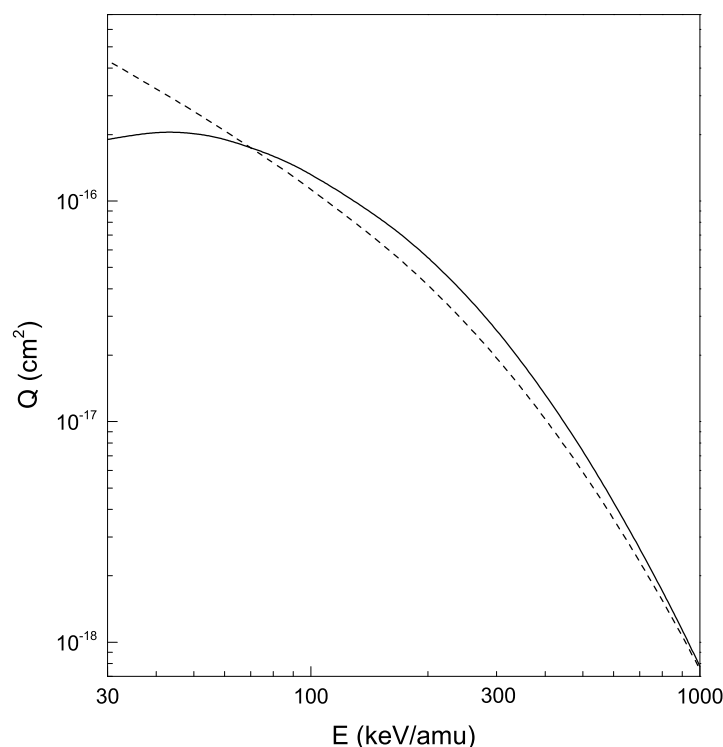
обзир да су мерења доступна само на нижим вредностима енергије), мада је слагање слабије него у претходном случају ($\text{H}^+ + \text{He}^+$ судар, на слици 28). CB1-3B метод се веома добро слаже са мерењима за $E \geq 50 \text{ keV/amu}$, док BCIS-3B резултати прилазе експерименталним вредностима за $E \geq 90 \text{ keV/amu}$. Анализирајући слике 28 и 29 (као и слику 30 дату у наставку, за $\text{He}^{2+} + \text{Li}^{2+}$ судар), видимо да се доње границе доброг слагања теорија са експериментима повећавају са растућим вредностима наелектрисања језгара пројектила и мете. Ово сугерише да доња граница применљивости високоенергијских метода расте са порастом Z_P и Z_T , што може бити објашњено све значајнијом улогом Кулонове интеракције. У сваком случају, оба теоријска метода дају релативно задовољавајуће слагање са мерењем, иако је оно ограничено на само 115 keV/amu на горњој граници. Још се може приметити да у интервалу $30 \text{ keV/amu} \leq E \leq 500 \text{ keV/amu}$ важи $Q_{\Sigma}^{(\text{BCIS-3B})} > Q_{\Sigma}^{(\text{CB1-3B})}$, док је овај тренд обрнут на већим вредностима енергије.

Захват електрона у судару He^{2+} са $\text{Li}^{2+}(1s)$

Теоријски резултати $Q_{\Sigma}^{(\text{BCIS-3B})}$ и $Q_{\Sigma}^{(\text{CB1-3B})}$, заједно са експерименталним подацима [204] за процес $\text{He}^{2+} + \text{Li}^{2+}(1s) \rightarrow \text{He}^+(\Sigma) + \text{Li}^{3+}$, представљени су на слици 30. Мерења су начињена у интервалу енергија $30 \text{ keV/amu} \leq E \leq 70 \text{ keV/amu}$, што је још даље од високоенергијског региона него у претходним случајевима. Ниједан од два примењена теоријска метода не даје задовољавајуће резултате у репродуковању експеримента [204]. CB1-3B метод их драматично надмашује, док се BCIS-3B показује као нешто бољи, мада и даље лежи испод мерења у целом енергијском интервалу. Ефикасни пресеци BCIS-3B ипак, за неке експерименталне тачке, прилазе измереним вредностима унутар граница грешке. Такође, испод 165 keV/amu , CB1-3B резултати надмашују BCIS-3B (резултати ова два теоријска метода значајно дивергирају на нижим вредностима инцидентних енергија), док за $E \geq 165 \text{ keV/amu}$ обе теорије дају мање-више исте вредности ефикасних пресека (при чему су вредности BCIS-3B ефикасних пресека мало изнад CB1-3B вредности за $165 \text{ keV/amu} \leq E \leq 630 \text{ keV/amu}$, а мало испод за $630 \text{ keV/amu} \leq E \leq 1000 \text{ keV/amu}$).



Слика 30: Сумирани тотални ефикасни пресеци $Q_{\Sigma} (\text{cm}^2)$ у функцији инцидентне енергије $E (\text{keV/amu})$ за процес $\text{He}^{2+} + \text{Li}^{2+}(1s) \rightarrow \text{He}^+(\Sigma) + \text{Li}^{3+}$. Криве представљају резултате у оквиру BCIS-3B (пуна линија) и CB1-3B метода (црткана линија). Експериментални подаци: • Brauning *et al.* [204].

Захват електрона у судару Li^{3+} са $\text{Li}^{2+}(1s)$ 

Слика 31: Сумирани тотални ефикасни пресеци Q_{Σ} (cm^2) у функцији инцидентне енергије E (keV/amu) за процес $\text{Li}^{3+} + \text{Li}^{2+}(1s) \rightarrow \text{Li}^{2+}(\Sigma) + \text{Li}^{3+}$. Криве представљају резултате у оквиру BCIS-3B (пуна линија) и CB1-3B метода (црткана линија).

Коначно, на слици 31 приказани су теоријски резултати за електронски захват из јонске мете $\text{Li}^{2+}(1s)$ јонским пројектилом Li^{3+} . У литератури у овом случају нема доступних експерименталних података, тако да се морамо ограничити на анализу разлика у самим теоријским резултатима. Са слике 31 се може приметити да CB1-3B резултати надмашују BCIS-3B за $E \leq 70 \text{ keV}/\text{amu}$, док је ситуација обрнута у интервалу енергија $70 \text{ keV}/\text{amu} \leq E \leq 1000 \text{ keV}/\text{amu}$. BCIS-3B ефикасни пресеци и овде имају заобљенију криву него CB1-3B. Нажалост, док не буду спроведена мерења ефикасних пресека за овај процес, овде се ништа више не може рећи о валидности самих BCIS-3B и CB1-3B метода.

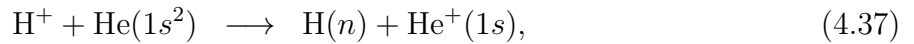
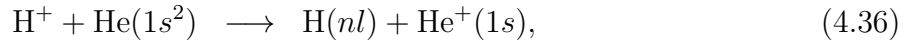
4.3 Хелијуму сличне мете

У овом одељку биће приказани резултати добијени у оквиру BCIS-4B и (ефективног) BCIS-3B метода, примењених на једноструки електронски захват из хелијуму сличних мета од стране потпуно огољених пројектила. Најпре ће бити

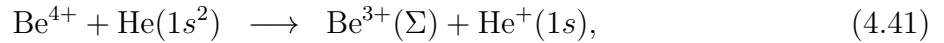
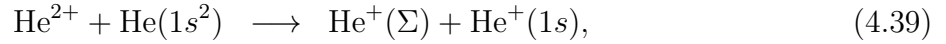
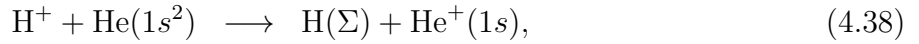
приказани резултати за саму хелијумску мету, а потом и за јонску, хелијуму сличну мету $\text{Li}^+(1s^2)$.

4.3.1 Хелијумска мета

Приказани графички резултати обухватају парцијалне ефикасне пресеке за следеће процесе (за $n \leq n_{max}$, које варира од процеса до процеса):



као и сумиране ефикасне пресеке за једноструки електронски захват у следећим сударима:



Овакав одабир процеса који ће бити графички приказани начињен је на основу критеријума доступности експерименталних података. Готово за све наведене процесе постоје доступна мерења за поређење са теоријским резултатима. За једноструки захват електрона из хелијума од стране потпуно јонизованог берилијума, процес (4.41), не постоје доступни експериментални подаци, али се ови резултати свеједно наводе ради комплетности.

За процесе (4.37) и (4.38) приказани су резултати за диференцијалне ефикасне пресеке, док су за процесе (4.36) и (4.38)-(4.46) приказани резултати за тоталне ефикасне пресеке. Такође, у Прилогу Г су табеларно приказани сви парцијални тотални ефикасни пресеци Q_{nlm} , Q_{nl} и Q_n (за $n \leq 4$), као и сумиране ефикасни пресеци Q_Σ , за процес једноструког електронског захвата из хелијумске мете од стране H^+ јона, засебно у оквиру BCIS-3В и BCIS-4В метода.

Подаци из табеле добијене у оквиру BCIS-3B метода публиковани су у радовима [132, 144].

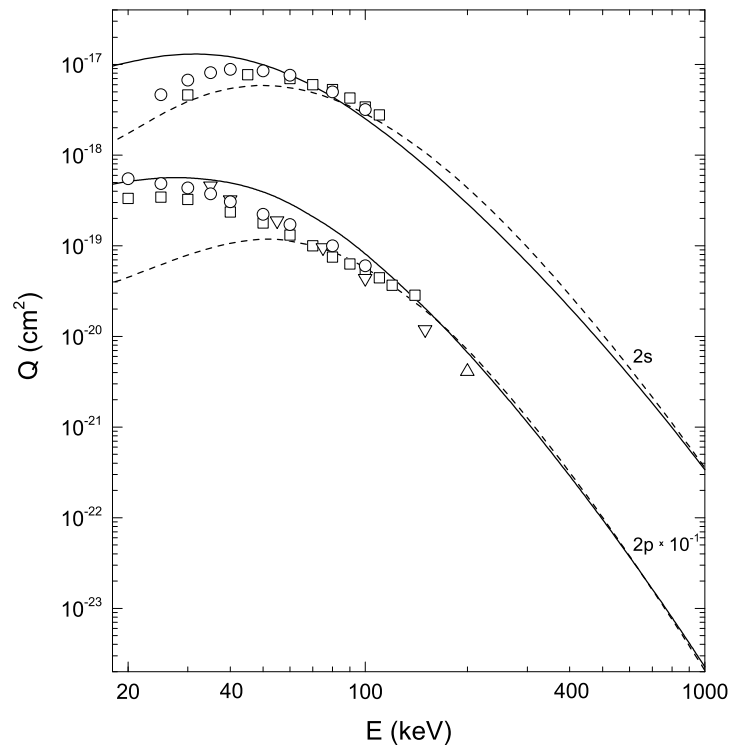
Као и у случају захвата из водоничне мете, максимална вредност главног квантног броја n_{max} варира је у зависности од процеса, како би се обезбедила конвергенција израза (4.7), односно (4.10), стварним вредностима (4.9), односно (4.11). У складу са тим, код тоталних ефикасних пресека за пројектиле H^+ , He^{2+} и Li^{3+} узето је $n_{max} = 4$, затим за пројектил Be^{4+} је $n_{max} = 5$, за B^{5+} је $n_{max} = 6$, док је за пројектиле C^{6+} , N^{7+} , O^{8+} и F^{9+} узето $n_{max} = 7$. Код диференцијалних ефикасних пресека са H^+ пројектилом, на средњим инцидентним енергијама $E_{lab} = 100 \text{ keV}$, $E_{lab} = 150 \text{ keV}$ и $E_{lab} = 300 \text{ keV}$ узето је $n_{max} = 4$, као и код високих инцидентних енергија $E_{lab} = 1.3 \text{ MeV}$ и $E_{lab} = 2.5 \text{ MeV}$. На високим инцидентним енергијама $E_{lab} = 5 \text{ MeV}$ и $E_{lab} = 7.5 \text{ MeV}$ узето је $n_{max} = 3$, док је на $E_{lab} = 12.5 \text{ MeV}$ узето $n_{max} = 2$. Ово је у складу са тим да допринос виших побуђених стања опада са порастом енергије. У свим наведеним процесима је одабрано n_{max} било сасвим довољно, у смислу да су разлике у сумираним ефикасним пресецима са максималном вредношћу главног квантног броја n_{max} и $n'_{max} = n_{max} - 1$ већ готово неуочљиве. Нагласимо још да су сва мерења диференцијалних ефикасних пресека извршена у лабораторијском систему референце. Сумирани тотални ефикасни пресеци израчунати су по Опенхајмеровом закону скалирања (4.7), по формулама (4.26)-(4.29), зависно од вредности n_{max} . Диференцијални ефикасни пресеци су за $E_{lab} = 100 \text{ keV}$, 150 keV , 300 keV , 1.3 MeV и 2.5 MeV израчунати на основу израза (4.30), док су за $E_{lab} = 5 \text{ MeV}$ и 7.5 MeV израчунати на основу израза (4.31). Коначно, за $E_{lab} = 12.5 \text{ MeV}$ израчунати су на основу формуле:

$$\left(\frac{dQ}{d\Omega}\right)_{\Sigma} \simeq \left(\frac{dQ}{d\Omega}\right)_1 + 1.616 \left(\frac{dQ}{d\Omega}\right)_2. \quad (4.47)$$

До сада публиковани резултати обухватају процесе (4.36)-(4.38) у радовима [132, 144].

Захват електрона у судару H^+ са $He(1s^2)$

Парцијални тотални ефикасни пресеци Q_{2s} и Q_{2p} за једноструки електронски захват у $2s$ и $2p$ стања (процес (4.36)), респективно, приказани су на слици 32. Затим, на слици 33 су приказани парцијални пресеци Q_{3s} , Q_{3p} и Q_{3d} за захват у $3s$, $3p$ и $3d$ стања, респективно. Последњи приказани резултати за парцијалне тоталне ефикасне пресеке су Q_{4s} , Q_{4p} , Q_{4d} и Q_{4f} за захват у $4s$, $4p$, $4d$ и

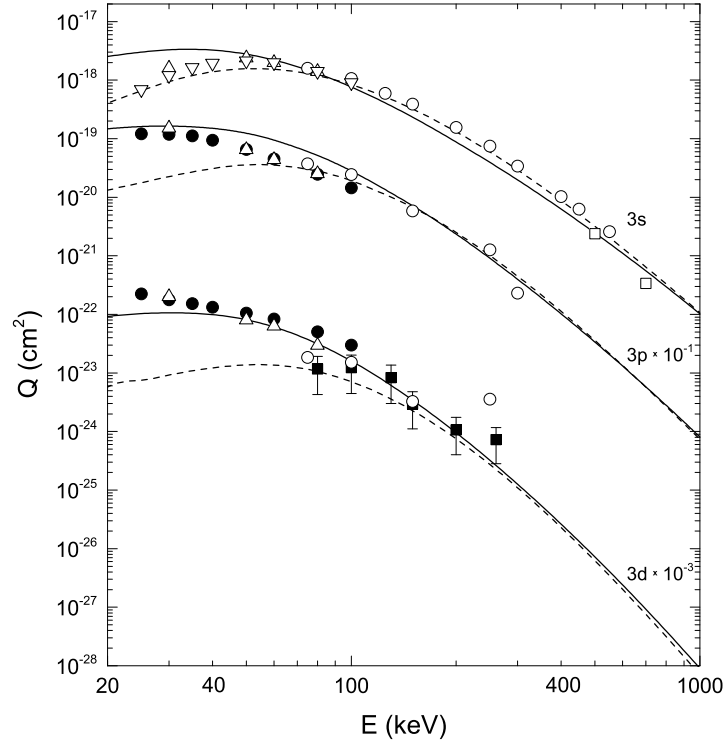


Слика 32: Парцијални тотални ефикасни пресеци Q_{2s} и Q_{2p} (у cm^2) у функцији инцидентне енергије E (keV) за једноструки електронски захват од стране H^+ јона из атома $\text{He}(1s^2)$, за процес (4.36). Криве представљају резултате у оквиру BCIS-4B (пуна линија) и BCIS-3B метода (црткана линија). Експериментални подаци: \square (Q_{2s} , Q_{2p}) Hughes *et al.* [154], \circ (Q_{2s} , Q_{2p}) Cline *et al.* [208], \triangle (Q_{2p}) Hippler *et al.* [209], ∇ (Q_{2p}) Hippler *et al.* [210]. И теоријски и експериментални резултати за Q_{2p} су подељени фактором 10.

$4f$ стања, респективно, на слици 34. Адекватност ових парцијалних пресека је процењена у односу на доступне експерименталне податке [154, 156, 158, 208–215]. Истакнимо већ на почетку битну чињеницу: готово сви експериментални подаци приказани на сликама 32-34 за захват у све подљуске nl су међусобно усаглашени. Мерења ефикасних пресека Q_{2p} и Q_{3d} јесу дала нешто раштрканије експерименталне податке, али, генерално гледано, и даље су у релативно задовољавајућој сагласности.

Пре него што пређемо на дискусију захвата у сваку подљуску понаособ, истакнимо пар генералних опсервација. Пре свега, видимо да се код оба метода (BCIS-4B и ефективног BCIS-3B) на сликама 32-34 генерално уочавају одлична слагања са експерименталним подацима, у неким случајевима чак и на вредностима енергија до доње границе од 20 keV. Ово је изузетан резултат, имајући у виду да су BCIS методи, по самој својој формулацији, високоенергијски. Генерално, неслагања између BCIS-4B и BCIS-3B метода и мерења су стога очекивана у региону ниских и средњих енергија. Наравно, код BCIS-3B метода очекују се

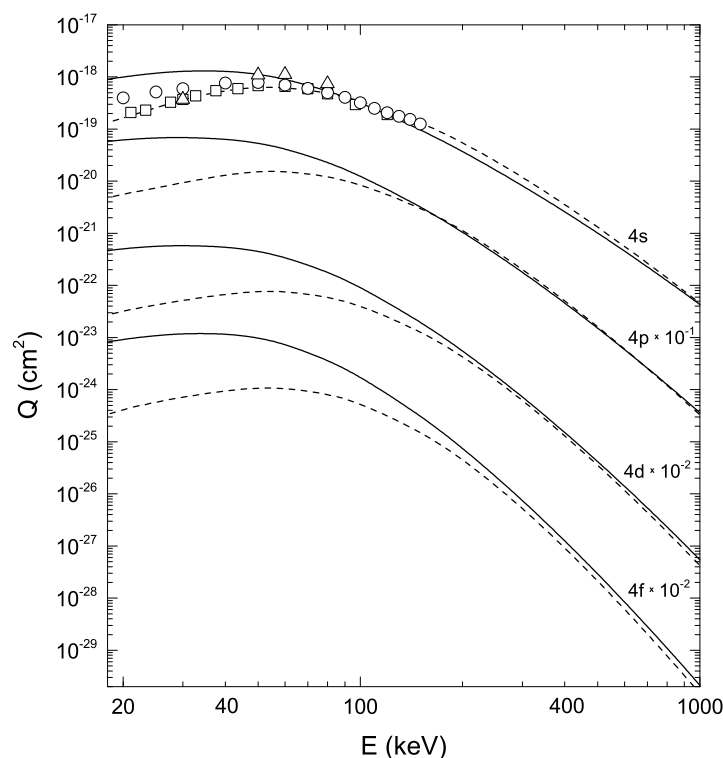
додатна неслагања, с обзиром на то да је трочестични формализам примењен на проблем који је суштински четворочестични. Колико заиста и долази до неслагања у BCIS-3В случају, утврдићемо тек након анализе приказаних резултата.



Слика 33: Парцијални тотални ефикасни пресеци Q_{3s} , Q_{3p} и Q_{3d} (у cm^2) у функцији инцидентне енергије E (keV) за једноструки електронски захват од стране H^+ јона из атома $\text{He}(1s^2)$, за процес (4.36). Криве представљају резултате у оквиру BCIS-4В (пуна линија) и BCIS-3В метода (црткана линија). Експериментални подаци: \circ (Q_{3s} , Q_{3p} , Q_{3d}) Ford *et al.* [158], \square (Q_{3s}) Conrads *et al.* [211], \triangle (Q_{3s} , Q_{3p} , Q_{3d}) Brower и Pipkin [212], ∇ (Q_{3s}) Cline *et al.* [208], \bullet (Q_{3p} , Q_{3d}) Cline *et al.* [213], \blacksquare (Q_{3d}) Edwards и Thomas [215]. И теоријски и експериментални резултати су подељени одређеним фактором: Q_{3p} са 10 и Q_{3d} са 10^3 .

С обзиром на то да постоје велике сличности у уоченим трендовима за једноелектронски захват за свако n са $l = 0$, затим са $l = 1$ и на крају са $l = 2$, дискусију ћемо и конципирати на основу тога. Најпре ћемо размотрити захват у $2s$, $3s$ и $4s$ стања ($l = 0$), затим у $2p$ и $3p$ стања ($l = 1$) и на крају у $3d$ стање ($l = 2$).

Посматрајући резултате за захват у сферносиметрична стања ($l = 0$) са слика 32-34, видимо да је слагање BCIS-3В метода са мерењима готово перфектно у читавим енергијским интервалима у којима има доступних експерименталних података (Q_{2s} за $E \in [25, 115]$ keV, Q_{3s} за $E \in [25, 700]$ keV и Q_{4s} за $E \in [20, 150]$ keV). Ово је изузетан резултат, који није био очекиван од BCIS-3В метода примењеног на четворочестичне проблеме, нарочито на енергијама блиским 20 keV.



Слика 34: Парцијални тотални ефикасни пресеци Q_{4s} , Q_{4p} , Q_{4d} и Q_{4f} (у cm^2) у функцији инцидентне енергије E (keV) за једноструки електронски захват од стране H^+ јона из атома $\text{He}(1s^2)$, за процес (4.36). Криве представљају резултате у оквиру BCIS-4B (пуна линија) и BCIS-3B метода (црткана линија). Експериментални подаци: \square (Q_{4s}) Hughes *et al.* [156], \circ (Q_{4s}) Doughty *et al.* [214], \triangle (Q_{4s}) Brower и Pirkin [212]. Теоријски резултати за Q_{4p} су подељени са 10, а за Q_{4d} и Q_{4f} са 100.

Овако добри резултати потпуно оправдавају валидност ефективног BCIS-3B модела, бар за захват у сферносиметрична стања. Што се тиче четворочестичног BCIS-4B метода, видимо да он генерално такође даје јако добро слагање са експериментима, али да се ипак увиђа његова јасна нискоенергијска граница применљивости, која износи око 50 keV. Изнад ове енергије, слагање BCIS-4B метода са мерењима је одлично. Испод 50 keV, међутим, BCIS-4B резултати све више надмашују мерења са смањењем инцидентне енергије. Закључак је да за захват у $2s$, $3s$ и $4s$ стања BCIS-3B метод поузданије предвиђа вредности ефикасних пресека од BCIS-4B метода. Са све три слике 32-34 можемо уочити универзалан тренд: BCIS-4B и BCIS-3B метод дивергирају један од другог испод 50 keV (при чему BCIS-4B даје веће вредности пресека), затим наступа интервал $50 \text{ keV} \leq E \leq 1000 \text{ keV}$, у коме је BCIS-4B благо испод BCIS-3B резултата. Како се вредности инцидентне енергије ближе 1000 keV, BCIS-4B и BCIS-3B методи конвергирају један ка другом. Коначно, напоменимо још да би додатна мерења,

начињена на вишим вредностима енергије, још више помогла у критичкој евалуацији теоријских метода. Ово говоримо имајући у виду да једино експериментални подаци Q_{3s} заиста залазе у високоенергијски регион (иду до 700 keV), док су Q_{2s} и Q_{4s} ограничени само до 115 keV и 150 keV, респективно.

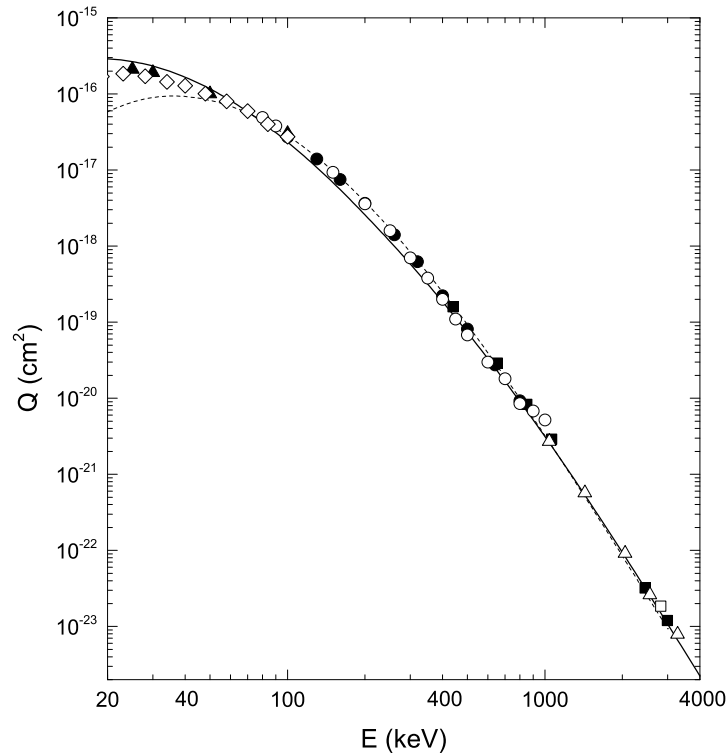
Резултати за сферноасиметрична стања са $l = 1$, дакле за Q_{2p} и Q_{3p} ефикасне пресеке, дати су на сликама 32 и 33, респективно. BCIS-4В резултати за Q_{2p} надмашују мерења у читавом доступном енергијском интервалу $E \in [20, 200]$ keV, мада не значајно (слика 32). BCIS-4В теоријска крива пролази кроз пар експерименталних тачака у $E = 20$ keV и 25 keV из референце [208], као и у $E = 120$ keV и 140 keV из референце [154]. Стога, имајући у виду да су сва мерења [154, 208] извршена искључиво на средњим вредностима инцидентне енергије, може се рећи да је слагање BCIS-4В теорије са експериментима за Q_{2p} релативно задовољавајуће. Треба истакнути и да су и сама мерења у овом случају помало неусклађена, тако да би евентуална будућа мерења била добродошла. На слици 33, за $3p$ ефикасне пресеке, уочава се да BCIS-4В резултати веома задовољавајуће репродукују експерименталне резултате у читавом доступном енергијском интервалу, до доње границе од $E = 25$ keV. У интервалу $E \in [35, 80]$ keV, BCIS-4В теорија ипак у врло малој мери надмашује мерења, док је слагање у интервалу $E \in [100, 300]$ keV одлично. Што се BCIS-3В ефикасних пресека тиче, Q_{2p} и Q_{3p} резултати су у одличној сагласности са експериментима у интервалу $E \in [50, 200]$ keV, односно $E \in [50, 300]$ keV, респективно (слике 32 и 33) и ту BCIS-3В даје боље резултате него BCIS-4В метод. Ограничења трочестичног модела су, међутим, евидентна на енергијама нижим од 50 keV, где BCIS-3В резултати леже значајно испод експеримената и у $2p$ и у $3p$ случају. Узрок овом неслагању је, највероватније, пре свега заснован у примени трочестичног модела на четворочестични проблем, као и у ограниченој применљивости високоенергијског BCIS-3В метода на ниске енергије. С друге стране, BCIS-4В метод, који је такође високоенергијски, али четворочестични, знатно боље репродукује експерименталне резултате за $2p$ и $3p$ ефикасне пресеке у интервалу $E \in [20, 50]$ keV. Запазимо да је ова ситуација у супротности са оном код $2s$, $3s$ и $4s$ пресека, где се BCIS-3В показао као поузданији метод, чак и на нижим вредностима енергије. Истакнимо још да у интервалу $E \in [150, 1000]$ keV оба метода дају готово исте вредности ефикасних пресека. Као и у $l = 0$ случају, и у $l = 1$ би додатна мерења начињена у високоенергијском региону значајно допринела процени адекватности новоразвијених метода.

Коначно, посматрајући ефикасне пресеке за захват у $3d$ стање, са слике 33

видимо да BCIS-4B метод одлично репродукује експерименталне податке у читавом приказаном интервалу енергија $25 \text{ keV} \leq E \leq 260 \text{ keV}$ (изузев једне експерименталне тачке из референце [158] на 250 keV , која је у потпуном нескладу са осталим мерењима). Слагање је одлично готово до најниже енергије $E = 25 \text{ keV}$, где теорија даје за нијансу ниже ефикасне пресеке од експеримената. Код захвата у $3d$ стање се већ јасно манифестују ограничења BCIS-3B модела, где добро слагање почиње тек од 80 keV . Напоменимо додуше да у околини вредности енергије $E = 80 \text{ keV}$ постоји неколико раштрканих измерених ефикасних пресека, при чему се BCIS-4B боље слаже са мерењима из референци [212, 213], а BCIS-3B са онима из [158, 215]. Додатна прецизнија мерења у интервалу $80 \text{ keV} \leq E \leq 100 \text{ keV}$ би потенцијално могла да разреши конфузију. У сваком случају, изнад 80 keV се и BCIS-3B резултати добро слажу са експерименталним, мада се BCIS-4B метод овде недвосмислено показује као адекватнији. Такође, у интервалу $260 \text{ keV} \leq E \leq 1000 \text{ keV}$, оба теоријска метода дају готово идентичне вредности ефикасних пресека. Као и у претходним случајевима, додатна мерења у региону високих енергија би и овде била врло пожељна.

Нажалост, за Q_{4p} , Q_{4d} и Q_{4f} ефикасне пресеке у литератури нема доступних експерименталних података, али одговарајуће теоријске резултате наводимо на слици 34, ради комплетности. Напоменимо још да се и овде уочавају исти трендови као и у свим претходним случајевима: за најниже вредности енергије (како се приближавамо 20 keV), BCIS-4B и BCIS-3B теоријски резултати међусобно дивергирају, док се са растућом вредношћу енергије две криве приближавају једна другој и готово преклапају почев од $200 - 300 \text{ keV}$.

Коначно, на слици 35 представљени су резултати за сумиране тоталне ефикасне пресеке Q_{Σ} . Сви експериментални резултати [167, 168, 216–220] су готово савршено међусобно усклађени. На слици 35 видимо да BCIS-4B метод одлично репродукује експерименталне податке у читавом размотреном интервалу енергија $E \in [20, 4000] \text{ keV}$ (више од три реда величине), док се сами ефикасни пресеци протежу преко више од осам редова величине. Ово је изузетан резултат, који говори о потпуној адекватности BCIS-4B метода у описивању процеса једноструктог електронског захвата у $\text{H}^+ + \text{He}(1s^2)$ сударима. Слагање је одлично чак и на јако ниским енергијама, за које се оно није а priori очекивало. Са слике 35 такође видимо да се и BCIS-3B метод одлично слаже са експерименталним резултатима у интервалу енергија $E \in [50, 4000] \text{ keV}$. Испод 50 keV , BCIS-3B резултати се прогресивно удаљавају од експерименталних тачака са смањивањем енергије, што је последица непотпуне адекватности трочестичног модела (на ниским вредностима енергије). Без обзира на то, како је 50 keV свакако у домену нижих

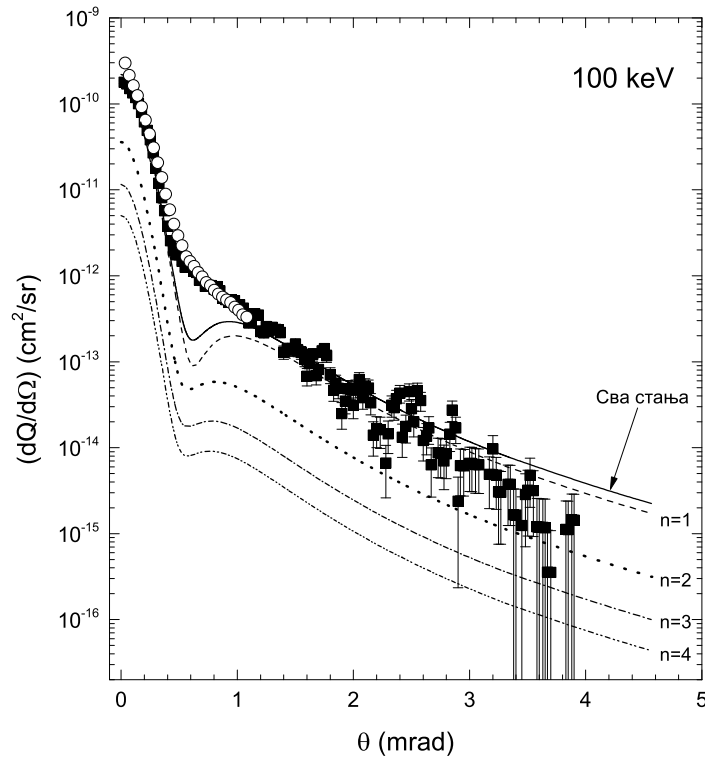


Слика 35: Сумирани тотални ефикасни пресеци Q_{Σ} (cm^2) у функцији инцидентне енергије E (keV) за процес $\text{H}^+ + \text{He}(1s^2) \rightarrow \text{H}(\Sigma) + \text{He}^+(1s)$. Криве представљају резултате у оквиру BCIS-4B (пуна линија) и BCIS-3B метода (црткана линија). Експериментални подаци: \blacksquare Welsh *et al.* [167], \triangle Scryber [168], \circ Williams [216], \blacktriangle Martin *et al.* [217], \square Horsdal-Pedersen *et al.* [218], \bullet Shah и Gilbody [219], \diamond Shah *et al.* [220].

средњих вредности енергије, за које се генерално није очекивало добро слагање високоенергијске теорије са експериментима, закључујемо да BCIS-3B такође показује изузетан резултат. Закључак је да је и овај метод потпуно адекватан за описивање једноструког електронског захвата у $\text{H}^+ + \text{He}(1s^2)$ сударима. Штавише, можемо приметити да је у неким енергијским регионима BCIS-3B чак и адекватнији од BCIS-4B метода. Нпр. за $E \in [100, 300]$ keV, BCIS-4B резултати леже мало испод експерименталних вредности, док се BCIS-3B одлично слажу са њима. Након 300 keV, када залазимо у прави високоенергијски регион, обе теорије се перфектно слажу са мерењима и дају готово идентичне вредности ефикасних пресека.

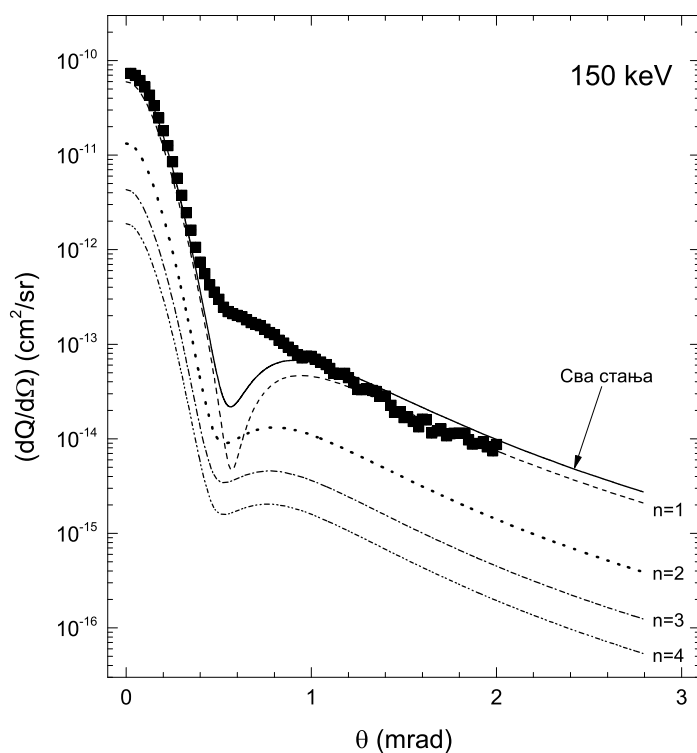
Сада ћемо се фокусирати на разматрање диференцијалних ефикасних пресека, који су израчунати искључиво у оквиру BCIS-4B метода. Подсећамо да BCIS-3B метод омогућује директно израчунавање диференцијалних ефикасних пресека само за захват из водоничне мете, тако га није могуће директно применити на захват из хелијумске (без увођења додатних Фурије-Беселових интеграла). Резултати су приказани за парцијалне и сумиране диференцијалне

ефикасне пресеке $(dQ/d\Omega)_n$ и $(dQ/d\Omega)_\Sigma$, на средњим вредностима инцидентне енергије $E = 100, 150$ и 300 keV на сликама 36-38, као и на високим вредностима енергије $E = 1.3, 2.5, 5.0, 7.5$ и 12.5 MeV на сликама 39-43, респективно. Поређења предвиђања теоријских метода са експериментално измереним вредностима за диференцијалне ефикасне пресеке нуде строжији критеријум за процену њихове валидности, као и могућност за детаљнију анализу колизивног система од интереса. Сва мерења начињена су у лабораторијском систему референце.

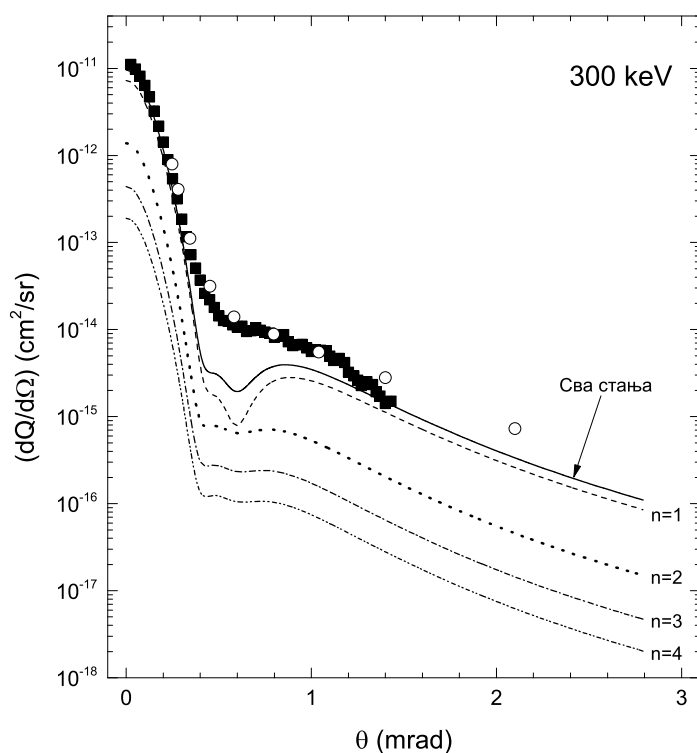


Слика 36: Парцијални $(dQ/d\Omega)_n$ (cm^2/sr) и сумирани диференцијални ефикасни пресеци $(dQ/d\Omega)_\Sigma$ (cm^2/sr) у функцији угла расејања θ (mrad) у лабораторијском систему референце на инцидентној енергији $E = 100 \text{ keV}$ за једноструки електронски захват од стране H^+ јона из атома $\text{He}(1s^2)$, за процес (4.37) и (4.38). Криве представљају резултате у оквиру BCIS-4В метода за $(dQ/d\Omega)_n$ ($n = 1, 2, 3, 4$) и $(dQ/d\Omega)_\Sigma \simeq (dQ/d\Omega)_1 + (dQ/d\Omega)_2 + (dQ/d\Omega)_3 + 2.561(dQ/d\Omega)_4$. Експериментални подаци: ■ Schöffler *et al.* [221], ○ Guo *et al.* [222].

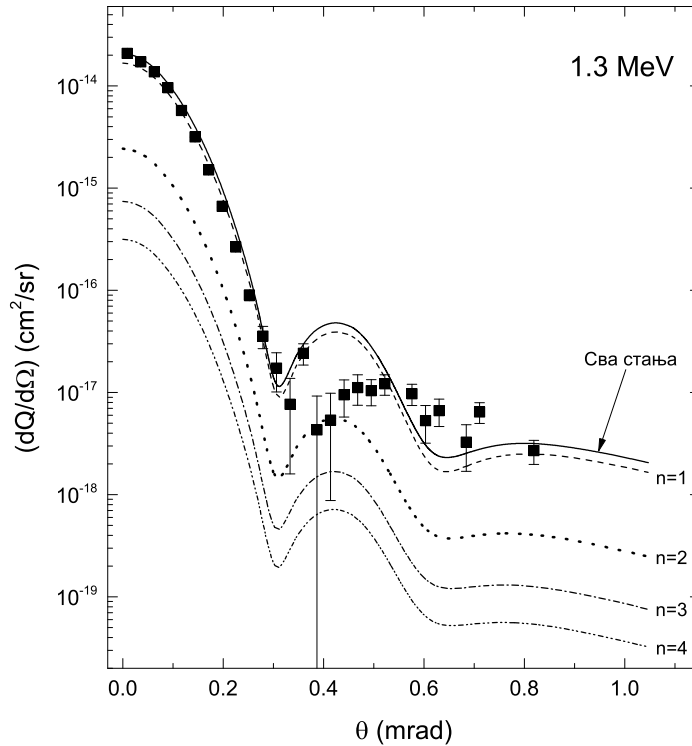
Резултати за парцијалне $(dQ/d\Omega)_n$ ($n = 1, 2, 3, 4$) и сумиране диференцијалне ефикасне пресеке $(dQ/d\Omega)_\Sigma$, израчунате на основу израза (4.30), приказани су на сликама 36-38 за средње инцидентне енергије $E = 100, 150$ и 300 keV , респективно. Поред теоријских BCIS-4В, у сва три случаја презентовани су и експериментални резултати рада [221], уз допуну резултатима из рада [222] на $E = 100 \text{ keV}$, као и мерењима Loftager-а [223] на $E = 300 \text{ keV}$. Сами експериментални резултати су међусобно добро усаглашени. На све три слике 36-38 се



Слика 37: Исто као и на слици 36, само за инцидентну енергију $E = 150$ keV.

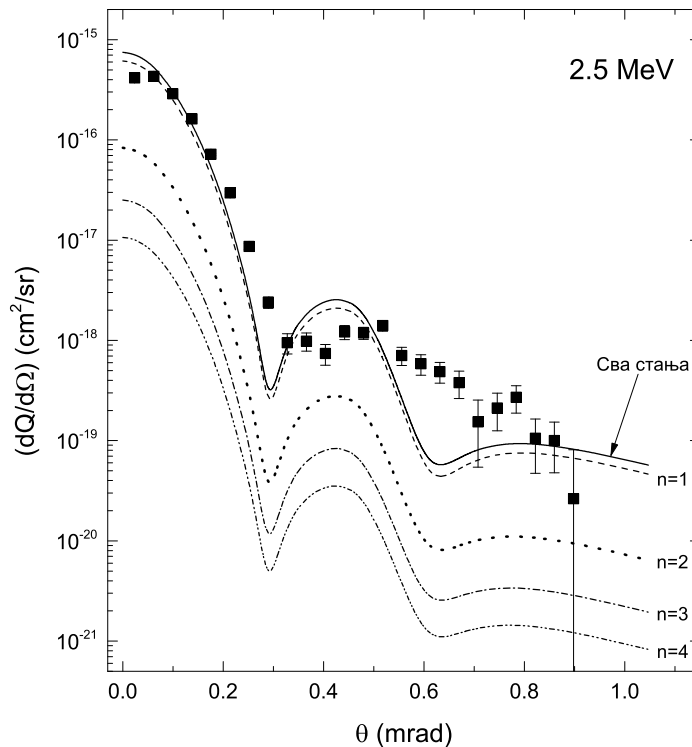


Слика 38: Исто као и на слици 36, само за инцидентну енергију $E = 300$ keV и за други скуп мерења. Експериментални подаци: ■ Schöffler *et al.* [221], ○ Loftager [223].



Слика 39: Парцијални $(dQ/d\Omega)_n$ (cm^2/sr) и сумирани диференцијални ефикасни пресеци $(dQ/d\Omega)_\Sigma$ (cm^2/sr) у функцији угла расејања θ (mrad) у лабораторијском систему референце на инцидентној енергији $E = 1.3 \text{ MeV}$ за једноструки електронски захват од стране H^+ јона из атома $\text{He}(1s^2)$, за процесе (4.37) и (4.38). Криве представљају резултате у оквиру BCIS-4В метода за $(dQ/d\Omega)_n$ ($n = 1, 2, 3, 4$) и $(dQ/d\Omega)_\Sigma \simeq (dQ/d\Omega)_1 + (dQ/d\Omega)_2 + (dQ/d\Omega)_3 + 2.561(dQ/d\Omega)_4$. Експериментални подаци: ■ Fischer *et al.* [224].

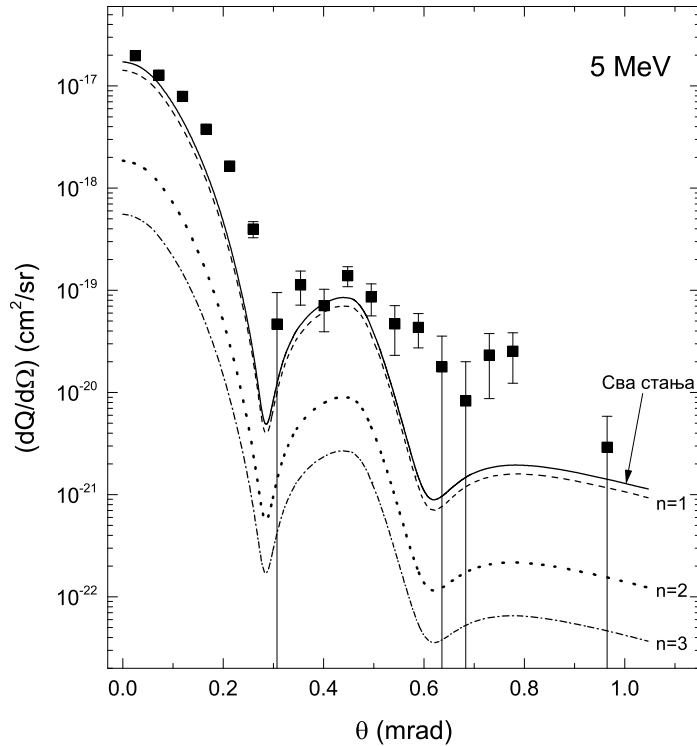
уочава мање-више иста ситуација: теоријски резултати успешно репродукују експерименталне резултате, изузев у околини тзв. тамног угла, где теоријски ефикасни пресеци леже значајно испод резултата експеримената. Тамни угао налази се на око 0.60 mrad у $E = 100 \text{ keV}$ случају, док се на $E = 150 \text{ keV}$ налази на око 0.56 mrad . Тамни угао представља експериментално неуочени минимум, чији узрок лежи у поништавању доприноса чланова различитог знака у укупном изразу за пертурбациони потенцијал $2Z_P/R - Z_P(1/s_1 + 1/s_2)$. Поништавање ових доприноса је мање него у случају већ дискутоване СВ1-3В апроксимације (а исти случај се среће и код СВ1-4В апроксимације [94]). Код СВ1 апроксимација минимума су веома дубоки, али нешто померени за свако од финалних стања, те долази до делимичног попуњавања минимума у сумираном диференцијалном ефикасном пресеку. Код BCIS апроксимација, са друге стране, минимума нису дубоки као код СВ1 апроксимација, већ су у великој мери маскирани конструктивним интерференционим ефектима, који потичу од високоосцилаторног карактера електронског Кулоновог таласа (за континуумско интермедијарно стање на



Слика 40: Исто као и на слици 39, само за инцидентну енергију $E = 2.5 \text{ MeV}$.

енергијској љусци) у интегранду амплитуде прелаза. Анализирањем $\text{H}^+ + \text{H}(1s)$ судара видели смо да је тамни угао на средњим вредностима енергије у потпуности маскиран код BCIS-3B метода, тј. минимум се уопште и не јавља. Са слика 36-38 видимо да код BCIS-4B метода то није случај и минимума се овде јављају. Они су ипак у великој мери редуковани поменутом конструктивном интерференцијом, и то у већој мери за ексцитована стања него за основно. Такође, као и код СВ1 метода, и овде се уочава да се минимума благо померају са растућим n (ка нижим вредностима θ), те и овај ефекат резултује додатним попуњавањем (мада не и потпуним) минимума у сумираном диференцијалном ефикасном пресеку. У случају $E = 300 \text{ keV}$, приказаном на слици 38, уочава се нешто другачија ситуација него код $E = 100$ и 150 keV , на сликама 36 и 37, респективно. Минимум добија нешто сложенији облик за $n = 1$, док готово да нестаје за $n > 1$. Ова промена у облику минимума одговара постепеном појављивању максимума лоцираног на око 0.47 mrad , што представља Томасов угао, а сам максимум потиче од (квантномеханичког) Томасовог двоструког расејања. Максимум још није добио свој пун облик на слици 38, али се његов зачетак јасно уочава.

Још један закључак који се са слика 36-38 може извући је следећи: главни допринос сумираном диференцијалном ефикасном пресеку потиче од захвата у

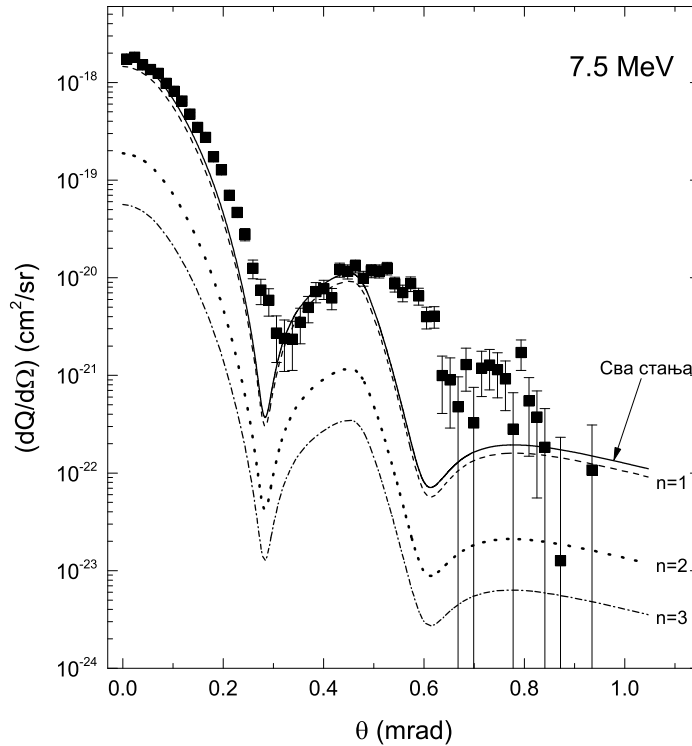


Слика 41: Исто као и на слици 39, само за инцидентну енергију $E = 5.0 \text{ MeV}$ и за резултате у оквиру BCIS-4B метода за $(dQ/d\Omega)_n$ ($n = 1, 2, 3$) и $(dQ/d\Omega)_\Sigma \simeq (dQ/d\Omega)_1 + (dQ/d\Omega)_2 + 2.081(dQ/d\Omega)_3$.

основно стање пројектила, при чему улога побуђених стања постаје све мања са растућом вредношћу главног квантног броја n финалног стања. Једини изузетак овом правилу је мали угаони интервал око $\theta = 0.57 \text{ mrad}$ за $E = 150 \text{ keV}$ (слика 37), где допринос од $(dQ/d\Omega)_2$ надмашује $(dQ/d\Omega)_1$.

Теоријски резултати за парцијалне $(dQ/d\Omega)_n$ и сумиране диференцијалне ефикасне пресеке $(dQ/d\Omega)_\Sigma$ су на сликама 39-43 приказани за високе инцидентне енергије $E = 1.3, 2.5, 5.0, 7.5$ и 12.5 MeV , респективно. На сликама 39 и 40 су, на $E = 1.3 \text{ MeV}$ и 2.5 MeV , представљени резултати за $(dQ/d\Omega)_n$ ($1 \leq n \leq 4$) и $(dQ/d\Omega)_\Sigma$, израчунате на основу израза (4.30). Услед занемарљивих разлика у $(dQ/d\Omega)_\Sigma$ када се узме $n_{max} = 3$ и $n_{max} = 2$ на $E = 5.0 \text{ MeV}$ и 7.5 MeV , на сликама 41 и 42 су приказани резултати за $(dQ/d\Omega)_n$ ($1 \leq n \leq 3$), док су $(dQ/d\Omega)_\Sigma$ израчунати на основу израза (4.31). Коначно, услед већ готово неуочљивих разлика у $(dQ/d\Omega)_\Sigma$ са $n_{max} = 2$ и $n_{max} = 1$ на $E = 12.5 \text{ MeV}$, на слици 43 приказани су резултати за $(dQ/d\Omega)_n$ ($1 \leq n \leq 2$), заједно са $(dQ/d\Omega)_\Sigma$ израчунатим на основу израза (4.47). Теоријски резултати су упоређени са мерењима из референце [224] за свих пет вредности енергије из високоенергијског региона.

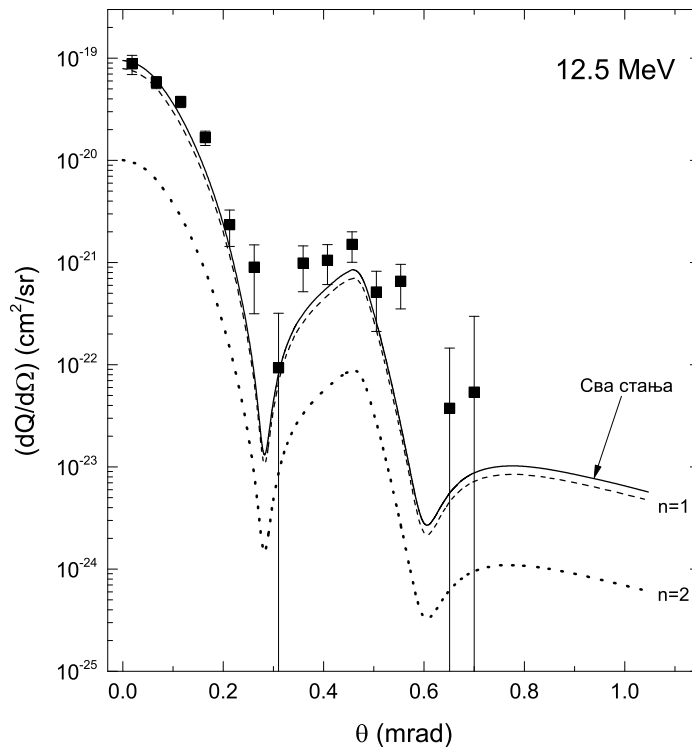
Као што се може видети са слика 39-43, теоријске криве за парцијалне и



Слика 42: Исто као и на слици 39, само за инцидентну енергију $E = 7.5 \text{ MeV}$ и за резултате у оквиру BCIS-4В метода за $(dQ/d\Omega)_n$ ($n = 1, 2, 3$) и $(dQ/d\Omega)_\Sigma \simeq (dQ/d\Omega)_1 + (dQ/d\Omega)_2 + 2.081(dQ/d\Omega)_3$.

сумиране диференцијалне ефикасне пресеке показују идентично понашање на свим (високим) вредностима инцидентне енергије. Све имају глобални максимум у $\theta = 0$ (расејање унапред), као и локални максимум око $\theta = 0.47 \text{ mrad}$ (што је управо Томасов угао). Са порастом инцидентне енергије уочава се и увећање Томасовог пика у односу на пик који одговара расејању унапред. Очекује се да, на некој довољно високој инцидентној вредности енергије (није приказана овде), Томасов пик надмаши онај у $\theta = 0$. Као и у случају $\text{H}^+ + \text{H}(1s)$ судара, Томасов пик представља ефекат другог реда, који потиче од двоструког расејања „билијарског“ типа $Z_P - e_1 - Z_T$. Са слика 39-43 уочава се да, за дату вредност инцидентне енергије, сви парцијални ефикасни пресеци $(dQ/d\Omega)_n$ ($1 \leq n \leq n_{max}$) достижу максимум у истој вредности угла расејања θ .

Поред Томасовог пика, уочава се и минимум на око $\theta = 0.28 \text{ mrad}$, што је такође заједничка карактеристика графика на свих пет вредности инцидентне енергије. Сlike 39-43 показују да се, за дату вредност инцидентне енергије, овај тамни угао налази у истој вредности θ за све парцијалне пресеке $(dQ/d\Omega)_n$ ($1 \leq n \leq n_{max}$). Његов положај се асимптотски приближава вредности угла $\theta = 0.28 \text{ mrad}$ са растућом енергијом. И предвиђање тамног угла у $\theta = 0.28 \text{ mrad}$



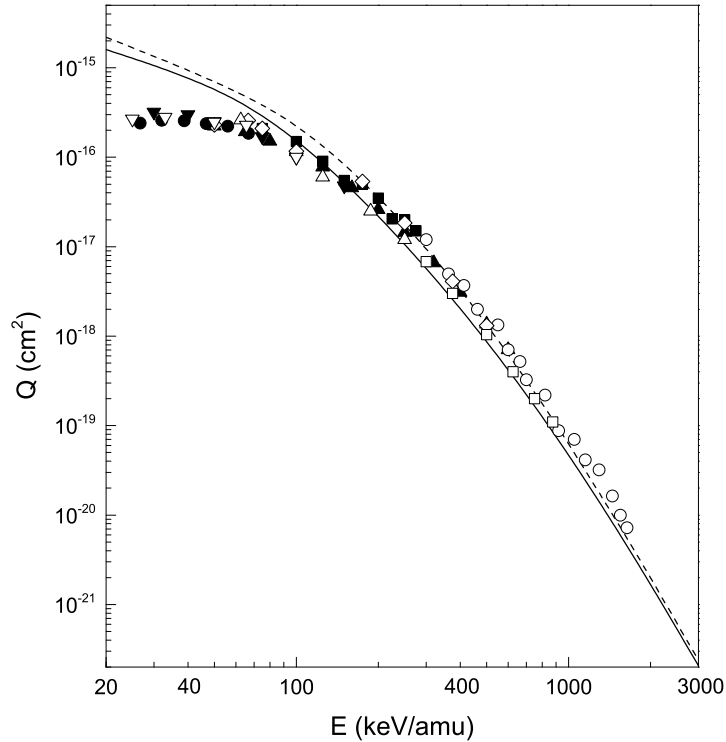
Слика 43: Исто као и на слици 39, само за инцидентну енергију $E = 12.5 \text{ MeV}$ и за резултате у оквиру BCIS-4B метода за $(dQ/d\Omega)_n$ ($n = 1, 2$) и $(dQ/d\Omega)_\Sigma \simeq (dQ/d\Omega)_1 + 1.616(dQ/d\Omega)_2$.

и Томасовог пика у $\theta = 0.47 \text{ mrad}$ сматра се карактеристиком свих теорија другог реда, бар у њиховом високоенергијском лимесу. Као што се најбоље уочава на инцидентним енергијама $E = 7.5$ и 12.5 MeV (слике 42 и 43), за разлику од нефизичког минимума на средњим вредностима енергије, минимум на високим инцидентним вредностима енергије заиста је и експериментално опажен. Природа овог минимума је идентична као и већ дискутована природа минимума код $\text{H}^+ + \text{H}(1s)$ судара и BCIS-3B метода, и потиче од деструктивне интерференције између ефеката првог реда (заслужних за пик код расејања унапред) и ефеката другог реда, тј. Томасовог пика (видети референцу [173]).

Са слика 39-43 такође се види да BCIS-4B метод предвиђа још један минимум, на око $\theta = 0.60 \text{ mrad}$. Оба минимума лоцирана на око $\theta = 0.28 \text{ mrad}$ и $\theta = 0.60 \text{ mrad}$ постају израженији са порастом инцидентне енергије, док се њихово релативно растојање благо смањује. Минимум на око $\theta = 0.60 \text{ mrad}$ је, у свим случајевима, праћен још једним локалним максимумом на око $\theta = 0.80 \text{ mrad}$. Овај максимум није нарочито изражен, за разлику од оних у $\theta = 0$ и $\theta = 0.47 \text{ mrad}$. Насупрот њима, овај пик је веома широк и далеко мање вредности. Следи га дугачак „реп“, који потиче од Радерфордовога расејања. Детаљна дискусија порекла

сваког од ових максимума и минимума, са разматрањем доприноса сваке од компоненти пертурбационог потенцијала $2Z_P/R - Z_P(1/s_1 + 1/s_2)$, је за $(dQ/d\Omega)_1$ ефикасне пресеке дата у раду [173].

Захват електрона у судару He^{2+} са $\text{He}(1s^2)$



Слика 44: Сумирани тотални ефикасни пресеци Q_{Σ} (cm^2) у функцији инцидентне енергије E (keV/amu) за процес $\text{He}^{2+} + \text{He}(1s^2) \rightarrow \text{He}^+(\Sigma) + \text{He}^+(1s)$. Криве представљају резултате у оквиру BCIS-4B (пуна линија) и BCIS-3B метода (црткана линија). Експериментални подаци: \blacksquare Pivovar *et al.* [225], \circ Hvelplund *et al.* [184], \blacktriangle Shah и Gilbody [219], \blacktriangledown Rudd *et al.* [226], \diamond DuBois [227], \square de Castro Faria *et al.* [228], \bullet Shah *et al.* [220], \triangle Mergel *et al.* [229], ∇ Alessi *et al.* [230].

Сада ћемо размотрити једноструки електронски захват у $\text{He}^{2+} + \text{He}(1s^2)$ сударима. Теоријски резултати за сумиране тоталне ефикасне пресеке у оквиру BCIS-4B и BCIS-3B метода, заједно са експерименталним резултатима [184, 219, 220, 225–230], приказани су на слици 44. Приметимо најпре да су резултати свих доступних мерења међусобно добро усклађени. Такође, експериментални подаци су доступни и у високоенергијском региону (до 1640 keV/amu), што омогућава проверу валидности BCIS апроксимација управо за вредности енергије за које су оне и намењене.

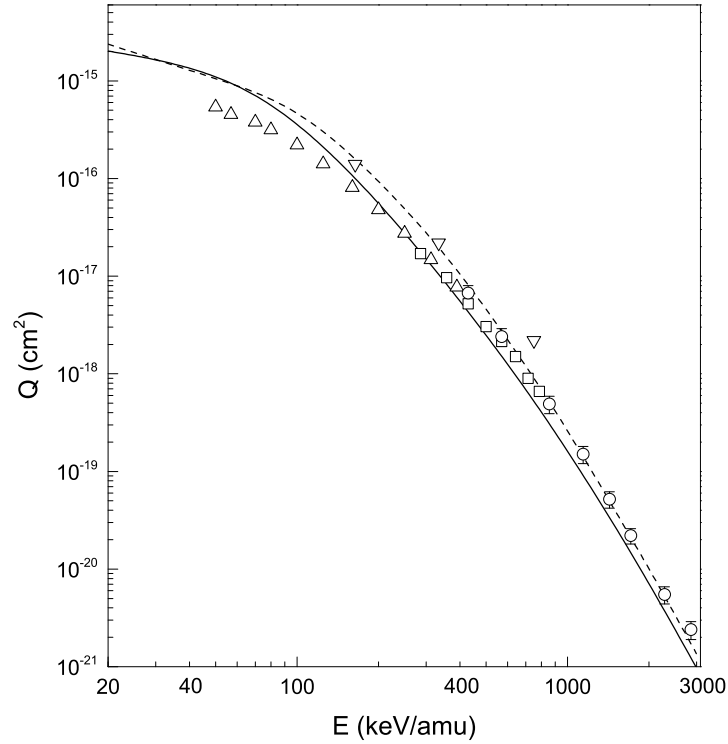
Као што се са слике 44 може уочити, и BCIS-4B и BCIS-3B теоријски резултати су у одличној сагласности са мерењима за енергије веће од 100 keV/amu и

175 keV/amu, респективно, па све до последње експерименталне тачке на енергији $E = 1640$ keV/amu. Закључак је да су оба метода потпуно валидна за описивање овог процеса у високоенергијском региону, као и, у одређеној мери, у региону средњих енергија. За енергије испод 100 keV/amu и 175 keV/amu, респективно, BCIS-4B и BCIS-3B методи надмашују експерименталне податке и то све више са опадајућим вредностима енергије. До око 60 keV/amu слагање је и даље задовољавајуће, док у интервалу $25 \text{ keV/amu} \leq E \leq 60 \text{ keV/amu}$ теоријски методи знатно премашују мерења. Такође, можемо приметити да BCIS-3B даје нешто веће ефикасне пресеке од BCIS-4B у читавом енергијском интервалу $20 \text{ keV/amu} \leq E \leq 3000 \text{ keV/amu}$ (ово је у супротности са ситуацијом код $\text{H}^+ + \text{He}(1s^2)$ судара, где долази до пресецања две криве), али да теоријски резултати конвергирају једни другима са порастом инцидентне енергије до 3000 keV/amu. Запазимо још и интересантну чињеницу да, иако се оба метода одлично слажу са експериментима изнад $E \geq 100 \text{ keV/amu}$, односно $E \geq 175 \text{ keV/amu}$, BCIS-3B апроксимација се заправо боље слаже са мерењима него BCIS-4B у интервалу $175 \text{ keV/amu} \leq E \leq 1640 \text{ keV/amu}$. Са оваквом ситуацијом смо се већ сусрели код $\text{H}^+ + \text{He}(1s^2)$ судара, за одређене парцијалне/сумиране тоталне ефикасне пресеке, у појединим интервалима енергија. Као што ћемо видети у наставку, са оваквим сценаријом ћемо се још сусретати.

Захват електрона у судару Li^{3+} са $\text{He}(1s^2)$

На слици 45 приказани су резултати за једноструки електронски захват од стране Li^{3+} јона из атома хелијума, и то теоријски у оквиру BCIS-4B и BCIS-3B метода, као и експериментални [220, 231–233]. Мерења се протежу у интервалу $50 \text{ keV/amu} \leq E \leq 2860 \text{ keV/amu}$, што значи да залазе значајно у високоенергијски регион, за који BCIS методи и треба да дају најбоље резултате. Истакнимо да су готово сва мерења међусобно добро усклађена, изузев [231], који дају нешто више вредности ефикасних пресека од осталих.

Као што се са слике 45 може видети, и BCIS-4B и BCIS-3B теоријски резултати су у одличној сагласности са мерењима за енергије веће од 160 keV/amu, при чему се BCIS-4B резултати боље слажу са мерењима из референце [220], док се BCIS-3B боље слажу са мерењима из референце [231]. Оба теоријска метода су у одличној сагласности са преосталим мерењима из радова [232, 233]. Приметимо да се и овде BCIS-3B апроксимација заправо генерално боље слаже са мерењима него BCIS-4B, која ипак у високоенергијском интервалу $640 \text{ keV/amu} \leq E \leq$

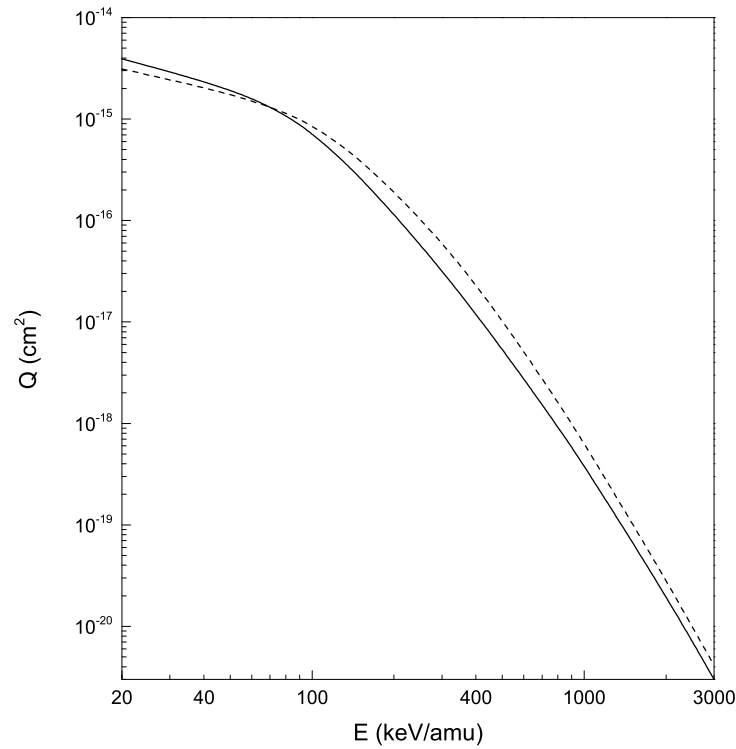


Слика 45: Сумирани тотални ефикасни пресеци Q_{Σ} (cm^2) у функцији инцидентне енергије E (keV/amu) за процес $\text{Li}^{3+} + \text{He}(1s^2) \rightarrow \text{Li}^{2+}(\Sigma) + \text{He}^+(1s)$. Криве представљају резултате у оквиру BCIS-4B (пуна линија) и BCIS-3B метода (црткана линија). Експериментални подаци: \triangle Shah и Gilbody [220], ∇ Nikolaev *et al.* [231], \circ Woitke *et al.* [232], \square Sant'Anna *et al.* [233].

2860 keV/amu даје нешто ниже вредности ефикасних пресека у односу на експерименте. На нижим енергијама, у интервалу $50 \text{ keV/amu} \leq E \leq 310 \text{ keV/amu}$, BCIS-4B метод боље репродукује експерименталне резултате, док су у интервалу $310 \text{ keV/amu} \leq E \leq 640 \text{ keV/amu}$ оба теоријска метода једнако успешна. Даље, можемо приметити да у интервалу $E \in [20, 30] \text{ keV/amu}$ BCIS-3B резултати у малој мери надмашују BCIS-4B ефикасне пресеке, након чега у интервалу $E \in [30, 60] \text{ keV/amu}$ оба теоријска метода дају готово једнаке вредности ефикасних пресека. За све енергије $E > 60 \text{ keV/amu}$ BCIS-3B надмашује BCIS-4B.

Захват електрона у судару Be^{4+} са $\text{He}(1s^2)$

На слици 46 приказани су резултати за процес једноструког електронског захвата $\text{Be}^{4+} + \text{He}(1s^2) \rightarrow \text{Be}^{3+}(\Sigma) + \text{He}^+(1s)$, за који у литератури не постоје доступни експериментални подаци. Стога, презентовани су искључиво теоријски BCIS-4B и BCIS-3B резултати. У енергијском интервалу $20 \text{ keV/amu} \leq E \leq 70 \text{ keV/amu}$ BCIS-4B метод даје нешто више вредности ефикасних пресека него



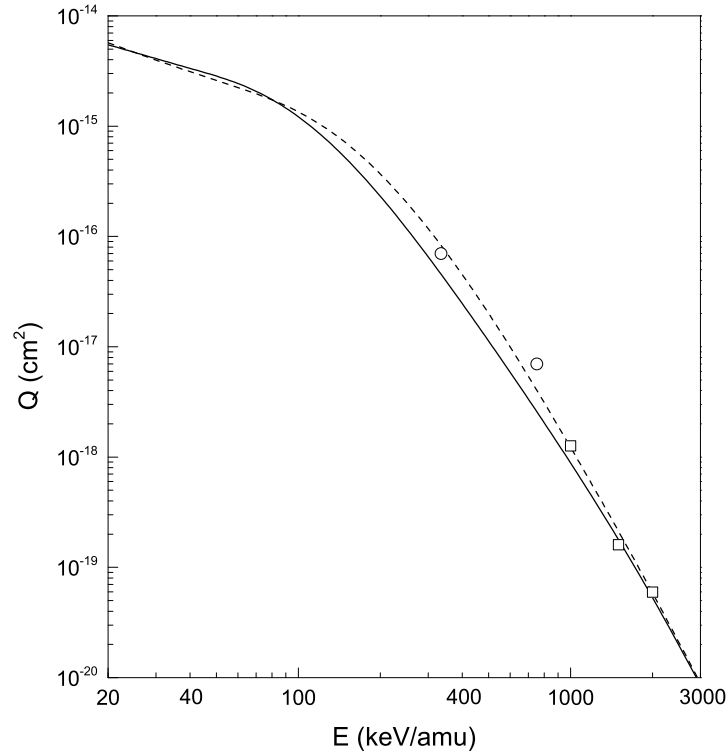
Слика 46: Сумирани тотални ефикасни пресеци Q_{Σ} (cm^2) у функцији инцидентне енергије E (keV/amu) за процес $\text{Be}^{4+} + \text{He}(1s^2) \rightarrow \text{Be}^{3+}(\Sigma) + \text{He}^+(1s)$. Криве представљају резултате у оквиру BCIS-4B (пуна линија) и BCIS-3B метода (црткана линија).

BCIS-3B метод, док је ситуација за $E > 70 \text{ keV}/\text{amu}$ обрнута. Уочава се да резултати два теоријска метода полако конвергирају једни ка другима са повећавањем инцидентне енергије (бар до $3000 \text{ keV}/\text{amu}$). Нажалост, док год не буду спроведена мерења, ништа више не можемо рећи о адекватности BCIS метода у случају овог процеса.

Захват електрона у судару B^{5+} са $\text{He}(1s^2)$

На слици 47 приказани су резултати за једноструки електронски захват од стране B^{5+} јона из атома хелијума, како експериментални [234, 235], тако и BCIS-4B и BCIS-3B теоријски. Мерења се протежу у интервалу $334 \text{ keV}/\text{amu} \leq E \leq 2000 \text{ keV}/\text{amu}$. С обзиром на то да припадају интервалу средњих и високих енергија, мерења су погодна за поређење са високоенергијским теоријским методима. Генерално гледано, два скупа експерименталних података из референци [234, 235] су међусобно добро усклађена.

Сами теоријски методи дају готово исте вредности ефикасних пресека у интервалу $E \in [20, 90] \text{ keV}/\text{amu}$. За $E > 90 \text{ keV}/\text{amu}$ резултати BCIS-3B метода премашују BCIS-4B, али конвергирају једни другима са приближавањем највећој



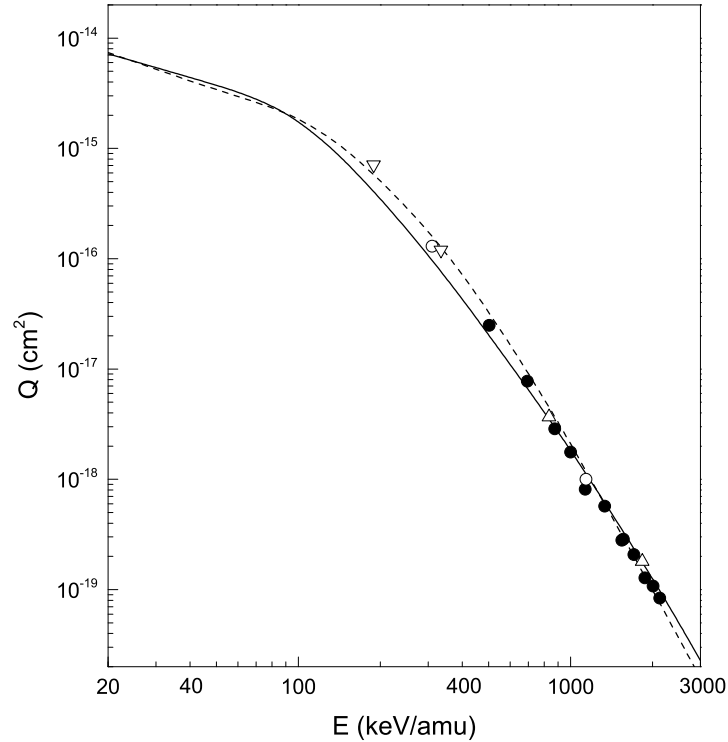
Слика 47: Сумирани тотални ефикасни пресеци Q_{Σ} (cm^2) у функцији инцидентне енергије E (keV/amu) за процес $\text{B}^{5+} + \text{He}(1s^2) \rightarrow \text{B}^{4+}(\Sigma) + \text{He}^+(1s)$. Криве представљају резултате у оквиру BCIS-4B (пуна линија) и BCIS-3B метода (црткана линија). Експериментални подаци: \circ Dmitriev *et al.* [234], \square Hippler *et al.* [235].

приказаној инцидентној енергији $E = 3000 \text{ keV}/\text{amu}$. Теоријски резултати BCIS-3B метода су у одличној сагласности са мерењима у читавом енергијском интервалу $334 \text{ keV}/\text{amu} \leq E \leq 2000 \text{ keV}/\text{amu}$. С друге стране, BCIS-4B метод одлично репродукује експерименталне резултате на $1500 \text{ keV}/\text{amu}$ и $2000 \text{ keV}/\text{amu}$, док у интервалу $E \in [334, 1000] \text{ keV}/\text{amu}$ даје нешто ниже ефикасне пресеке у односу на мерења. Потребна су нова мерења како би се урадила боља евалуација презентованих метода (BCIS-3B и BCIS-4B).

Захват електрона у судару C^{6+} са $\text{He}(1s^2)$

Слика 48 приказује теоријске BCIS-4B и BCIS-3B, као и доступне експерименталне [191, 192, 234, 236] резултате за процес $\text{C}^{6+} + \text{He}(1s^2) \rightarrow \text{C}^{5+}(\Sigma) + \text{He}^+(1s)$. Приказани експериментални резултати припадају енергијском интервалу $E \in [190, 2130] \text{ keV}/\text{amu}$ и сви су међусобно одлично усклађени.

Са слике 48 види се да се BCIS-4B метод јако добро слаже са свим експерименталним резултатима, при чему је слагање за енергије веће од $690 \text{ keV}/\text{amu}$



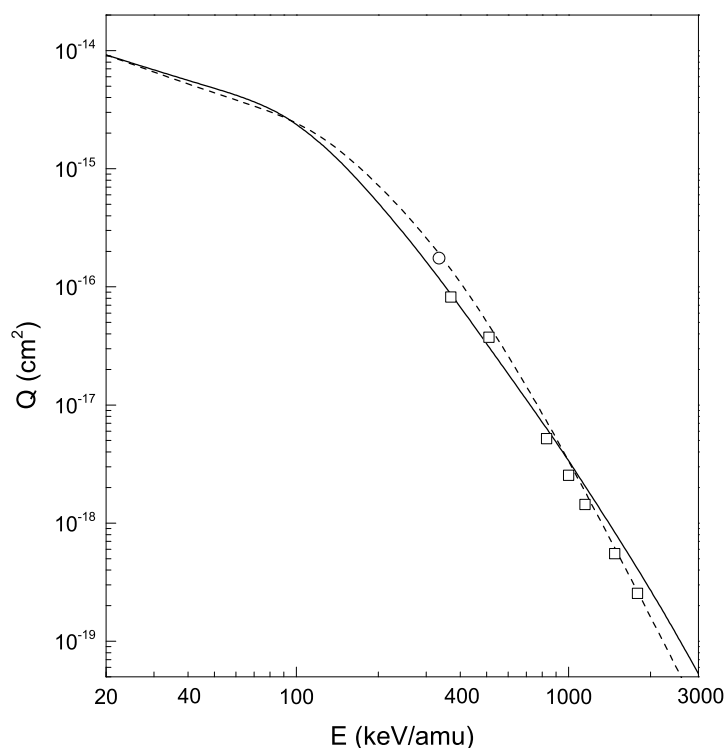
Слика 48: Сумирани тотални ефикасни пресеци Q_{Σ} (cm^2) у функцији инцидентне енергије E (keV/amu) за процес $\text{C}^{6+} + \text{He}(1s^2) \rightarrow \text{C}^{5+}(\Sigma) + \text{He}^+(1s)$. Криве представљају резултате у оквиру BCIS-4B (пуна линија) и BCIS-3B метода (црткана линија). Експериментални подаци: \circ Graham *et al.* [191], \triangle Anholt *et al.* [192], ∇ Dmitriev *et al.* [234], \bullet Dillingham *et al.* [236].

готово перфектно, што показује да је овај метод потпуно адекватан за примену у намењеном високоенергијском региону. У интервалу средњих енергија $E \in [190, 690] \text{ keV/amu}$, четворочестични метод ипак даје нешто ниже вредности ефикасних пресека у односу на експерименте. С друге стране, BCIS-3B се поново показује као адекватнији, с обзиром на то да се, у читавом доступном енергијском интервалу $E \in [190, 2130] \text{ keV/amu}$, готово савршено слаже са свим експерименталним подацима.

На слици 48 уочава се и одређена тенденција везана за међусобни однос BCIS-4B и BCIS-3B метода. Она ће бити испољена и у случају пројектила N^{7+} , O^{8+} и F^{9+} на сликама 49-51, респективно, тако да ћемо сада обједињено продискутовати све поменуте случајеве. Наиме, ефикасни пресеци које дају BCIS-4B и BCIS-3B методи су отприлике исти (BCIS-4B углавном даје за нијансу веће вредности) у интервалу од 20 keV/amu до горње границе од око 90 keV/amu (код $\text{C}^{6+} + \text{He}(1s^2)$ судара). Са слика 48-51 се уочава да ова горња граница благо расте са порастом наелектрисања пројектила, достижући максимум од око 105 keV/amu у $\text{F}^{9+} + \text{He}(1s^2)$ судару. BCIS-3B ефикасни пресеци затим премашују оне из BCIS-4B

метода, до вредности енергије од око 1300 keV/amu (код $C^{6+} + He(1s^2)$ судара). На овој енергији долази до пресецања кривих које одговарају овим теоријским методима. Са слика 48-51 уочава се да енергија на којој долази до пресецања опада са порастом наелектрисања пројектила, тако да се у случају пројектила F^{9+} пресек налази у $E = 850$ keV/amu. Након пресецања криве дивергирају једна у односу на другу са растућом енергијом, при чему BCIS-4B почиње знатно да надмашује BCIS-3B метод. Ова тенденција ће постепено довести до све горег слагања BCIS-4B метода са експерименталним подацима, као што се може видети на сликама 48-51.

Захват електрона у судару N^{7+} са $He(1s^2)$



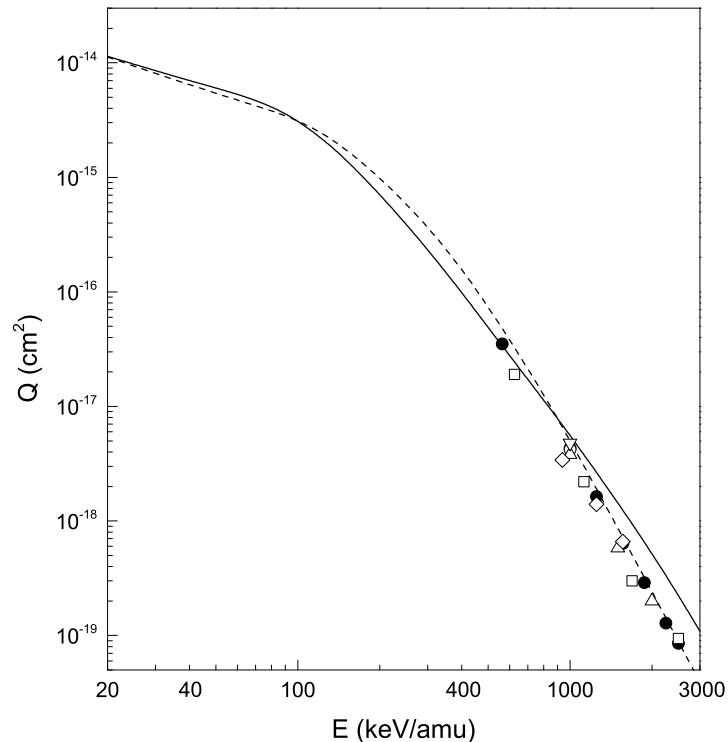
Слика 49: Сумирани тотални ефикасни пресеци Q_{Σ} (cm^2) у функцији инцидентне енергије E (keV/amu) за процес $N^{7+} + He(1s^2) \rightarrow N^{6+}(\Sigma) + He^+(1s)$. Криве представљају резултате у оквиру BCIS-4B (пуна линија) и BCIS-3B метода (црткана линија). Експериментални подаци: \circ Dmitriev *et al.* [234], \square Dillingham *et al.* [236].

На слици 49 су, за процес једноструког електронског захвата од стране N^{7+} јона из $He(1s^2)$, приказани теоријски BCIS-4B и BCIS-3B резултати, уз мерења из радова [234, 236]. У раду [234] начињено је само једно мерење ефикасног

пресека на $E = 334 \text{ keV/amu}$, које је у доброј сагласности са трендом (експерименталним тачкама богатијег) мерења из рада [236]. У овом раду експерименталне тачке припадају интервалу $E \in [370, 1800] \text{ keV/amu}$, који обухвата и високоенергијски регион.

Са слике 49 уочава се да се BCIS-3B резултати и овде одлично слажу са мерењима у читавом доступном енергијском интервалу $E \in [334, 1800] \text{ keV/amu}$. Штавише, BCIS-3B крива пролази кроз готово све експерименталне тачке (једини изузетак је она у $E = 370 \text{ keV/amu}$ из референце [236]). Што се BCIS-4B метода тиче, уочава се погоршање тенденције запажене код $\text{C}^{6+} + \text{He}(1s^2)$ судара. Иако BCIS-4B још увек даје генерално задовољавајуће резултате, с обзиром на то да и даље пролази кроз неке експерименталне тачке, са слике 49 се види да теоријска BCIS-4B крива пресеца (замишљену) криву која би интерполирала експерименталне податке из референце [236]. Дакле, BCIS-4B метод у овом случају све више надмашује мерење [236] са растућом инцидентном енергијом.

Захват електрона у судару O^{8+} са $\text{He}(1s^2)$



Слика 50: Сумирани тотални ефикасни пресеци $Q_{\Sigma} (\text{cm}^2)$ у функцији инцидентне енергије $E (\text{keV/amu})$ за процес $\text{O}^{8+} + \text{He}(1s^2) \rightarrow \text{O}^{7+}(\Sigma) + \text{He}^+(1s)$. Криве представљају резултате у оквиру BCIS-4B (пуна линија) и BCIS-3B метода (црткана линија). Експериментални подаци: Δ Hippler *et al.* [235], \bullet Dillingham *et al.* [236], \square Macdonald *et al.* [237], \circ Knudsen *et al.* [238], ∇ Boman *et al.* [239], \diamond Houck *et al.* [240].

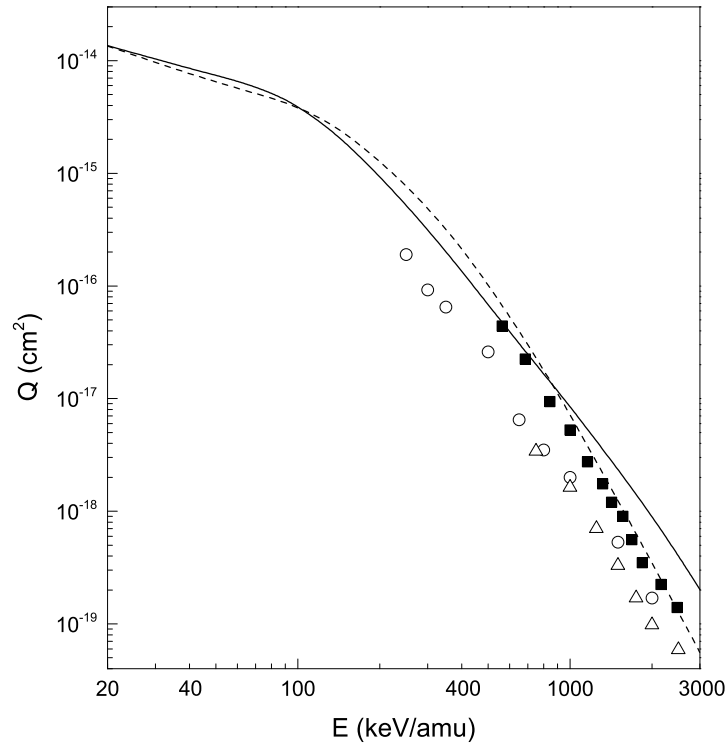
На слици 50 презентовани су теоријски BCIS-4B и BCIS-3B, као и експериментални [235–240] резултати за једноструки електронски захват у $O^{8+} + He(1s^2)$ сударима. Запажамо да су сви скупови експерименталних података међусобно одлично усклађени, као и да мерења припадају интервалу $E \in [560, 2500] \text{ keV/amu}$, а самим тим и високоенергијском региону.

Са слике 50 видимо да BCIS-3B метод и овде даје одличне резултате у поређењу са мерењима, нарочито за $E > 1000 \text{ keV/amu}$. Присутно је врло благо надмашивање експерименталних тачака на $E = 563 \text{ keV/amu}$ из референце [236] и $E = 625 \text{ keV/amu}$ из референце [237], док је слагање са мерењима за $E > 1000 \text{ keV/amu}$ готово перфектно. BCIS-4B метод се, с друге стране, све слабије слаже са експериментима при растућем наелектрисању пројектила. Иако пролази кроз пар експерименталних тачака на 563 keV/amu из референце [236], 625 keV/amu из референце [237] и 1000 keV/amu из референце [239], теоријска BCIS-4B крива дивергира од мерења (и уједно од резултата BCIS-3B метода) са растућом енергијом, генерално дајући незадовољавајуће резултате за овај процес.

Захват електрона у судару F^{9+} са $He(1s^2)$

На слици 51 приказани су теоријски BCIS-4B и BCIS-3B резултати за једноструки електронски захват из атома хелијума од стране F^{9+} јона, заједно са мерењима из референци [236, 241, 242].

Као што се са слике може видети, иако се експериментални подаци налазе у енергијском интервалу $250 \text{ keV/amu} \leq E \leq 2500 \text{ keV/amu}$ (тако да покривају и високоенергијски регион), мерења из различитих референци [236, 241, 242] потпуно су међусобно неусклађена. Услед тога, критичка евалуација теоријских метода је наизглед јако отежана. Међутим, ипак постоји начин да проценимо који од наведена три скупа мерења највише одговара реалности, и то на основу следећег разматрања: узмимо у обзир да вредности ефикасних пресека, за фиксирану вредност инцидентне енергије (по нуклеону) и фиксирану мету, расту са порастом наелектрисања пројектила Z_p . Ова (за сад) претпоставка, која се састоји у тврдњи да је вероватноћа да дође до једноструког електронског захвата већа уколико је наелектрисање пројектила веће, темељно је потврђена у свим до сад размотреним случајевима (нпр. анализирајући слике 11 и 18-27 за захват из водоничне мете или слике 35 и 44-50 за захват из хелијумске мете). Полазећи од овог закључка, утврђујемо да ефикасни пресеци за једноструки електронски захват у $F^{9+} + He(1s^2)$ сударима морају бити већи него они у $O^{8+} + He(1s^2)$ сударима. Имајући ово у виду, сада ћемо поредити вредности



Слика 51: Сумирани тотални ефикасни пресеци Q_{Σ} (cm^2) у функцији инцидентне енергије E (keV/amu) за процес $\text{F}^{9+} + \text{He}(1s^2) \rightarrow \text{F}^{8+}(\Sigma) + \text{He}^+(1s)$. Криве представљају резултате у оквиру BCIS-4B (пуна линија) и BCIS-3B метода (црткана линија). Експериментални подаци: ■ Dillingham *et al.* [236], ○ Shinpaugh *et al.* [241], △ Unal *et al.* [242].

ефикасних пресека које, на истим вредностима инцидентне енергије (по нуклеону), дају сва три мерења [236, 241, 242] код $\text{F}^{9+} + \text{He}(1s^2)$ судара (слика 51), са мерењима [235–240] (која су сва међусобно усаглашена) код $\text{O}^{8+} + \text{He}(1s^2)$ судара (слика 50). Запажамо да експериментални подаци за F^{9+} пројектил из радова [241] и [242] генерално дају ниже вредности ефикасних пресека од измерених за O^{8+} пројектил (код свих скупова мерења [235–240]). Нпр. на погодно одабраној инцидентној енергији $E = 1000 \text{ keV/amu}$, за захват F^{9+} јоном, Shinpaugh *et al.* [241] дају вредност $Q_{\Sigma} = 2.0 \cdot 10^{-18} \text{ cm}^2$. На истој инцидентној енергији, за захват O^{8+} јоном, Hippler *et al.* [235], Knudsen *et al.* [238], Dillingham *et al.* [236] и Voman *et al.* [239] дају вредности $Q_{\Sigma} = 3.8 \cdot 10^{-18} \text{ cm}^2$, $Q_{\Sigma} = 4.2 \cdot 10^{-18} \text{ cm}^2$, $Q_{\Sigma} = 4.33 \cdot 10^{-18} \text{ cm}^2$ и $Q_{\Sigma} = 4.8 \cdot 10^{-18} \text{ cm}^2$, респективно. Дакле, уколико би мерења из референце [241] била коректна, испоставило би се да O^{8+} јон захвата електрон из атома хелијума са већом вероватноћом него F^{9+} јон, што је бесмислено. Једини преостали закључак је да мерење [241] није дало исправне вредности ефикасних пресека за једноструки електронски захват у $\text{F}^{9+} + \text{He}(1s^2)$ сударима. Слично разматрање се може спровести и са мерењима из референце [242]. С друге стране, за захват F^{9+} јоном на истој инцидентној енергији $E = 1000 \text{ keV/amu}$, Dillingham *et al.* [236]

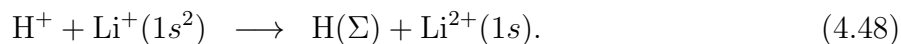
дају вредност ефикасног пресека $Q_{\Sigma} = 5.26 \cdot 10^{-18} \text{ cm}^2$, које јесу веће од свих претходно наведених из референци [235, 236, 238, 239] у $\text{O}^{8+} + \text{He}(1s^2)$ сударима. Сада можемо сумирати закључке: скупови измерених вредности из радова [241, 242] нису конзистентни са претходним налазима из $\text{O}^{8+} + \text{He}(1s^2)$ судара, те највероватније нису меродавни. С друге стране, код експерименталних података [236] не уочавамо поменућу недоследност. Ово нужно не имплицира да је скуп мерења из референце [236] коректан, али га свакако чини далеко меродавнијим од друга два (из радова [241, 242]).

Имајући ово у виду, сада можемо ставити у контекст и наше теоријске резултате. И на слици 51 уочава се да се BCIS-3B метод готово перфектно слаже са скупом мерења [236]. BCIS-3B теоријска крива пролази кроз све експерименталне тачке, изузев оне на најнижој инцидентној енергији $E = 563 \text{ keV/amu}$. Напоменимо још да се BCIS-3B метод, с обзиром на то да се показао као јако поуздан у предвиђању вредности ефикасних пресека за једноструки електронски захват из хелијумске мете на високим инцидентним енергијама (независно од наелектрисања пројектила), сада може користити и као критички тест за експерименталне резултате. Логика је, дакле, могла ићи и обрнутим смером, тј. могли смо тврдити да је скуп мерења из рада [236] коректан, за разлику од оних из референци [241, 242], имајући у виду њихово слагање са теоријским резултатима верификованог BCIS-3B метода. С друге стране, BCIS-4B метод код $\text{F}^{9+} + \text{He}(1s^2)$ судара даје лошије резултате, са практично идентичном ситуацијом као код $\text{O}^{8+} + \text{He}(1s^2)$ судара. BCIS-4B крива пролази кроз само две експерименталне тачке из референце [236], и то на најнижим вредностима енергије. Са растућом вредности енергије, BCIS-4B метод дивергира и од мерења из рада [236] (а и из [241, 242]) и од резултата BCIS-3B метода.

На крају, упоредићемо и саме BCIS-3B и BCIS-4B теоријске резултате међусобно. Са слике 51 уочавамо да BCIS-4B у врло малој мери надмашује BCIS-3B резултате у интервалу енергије $E \in [20, 100] \text{ keV/amu}$. У енергијском интервалу $E \in [100, 850] \text{ keV/amu}$ ситуација је обрнута, тако да BCIS-3B овде даје веће вредности ефикасних пресека него BCIS-4B. Почев од $E = 850 \text{ keV/amu}$, два теоријска метода дивергирају један од другог, при чему BCIS-4B даје све веће вредности ефикасних пресека од BCIS-3B са порастом енергије.

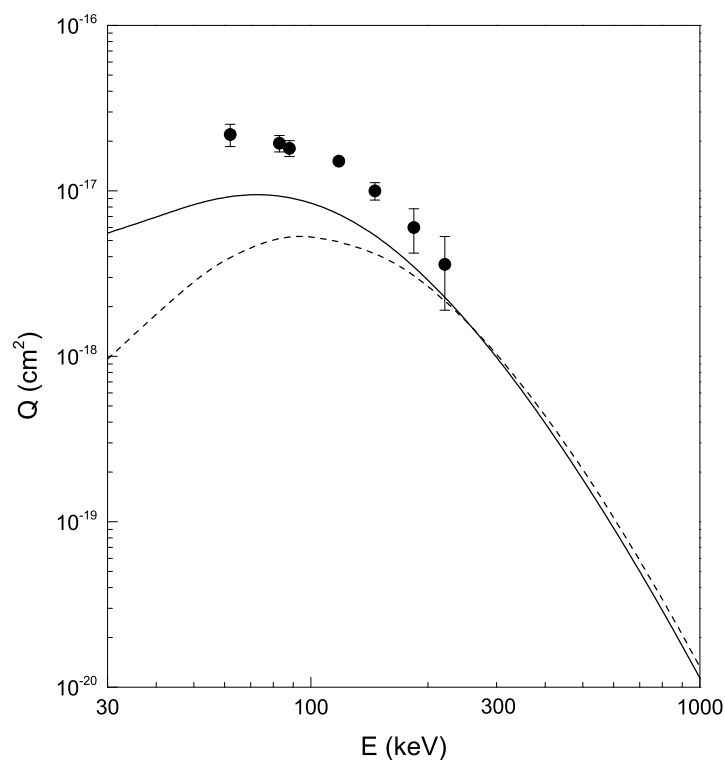
4.3.2 Јонске мете

У овом одељку биће приказани графички резултати за следећи процес једноструког електронског захвата из хелијуму сличне јонске мете Li^+ :



Представљени су резултати за сумиране тоталне ефикасне пресеке, израчунате на основу израза (4.26). Теоријски резултати обухватају BCIS-4В и BCIS-3В методе. Приказани експериментални подаци су из референце [243]. Процес (4.48) био је предмет разматрања у оквиру СВ1-4В метода [244], при чему су добијена одлична слагања теоријских са експерименталним резултатима.

Захват електрона у судару H^+ са $\text{Li}^+(1s^2)$



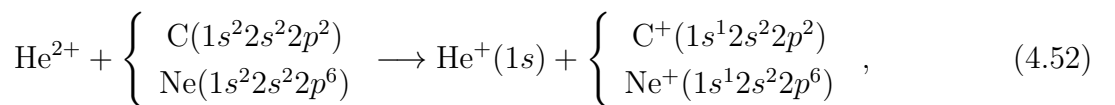
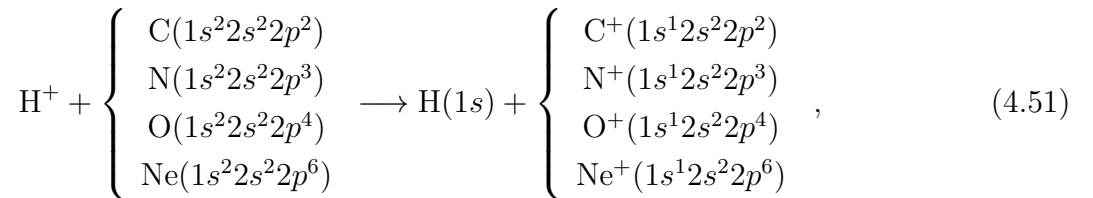
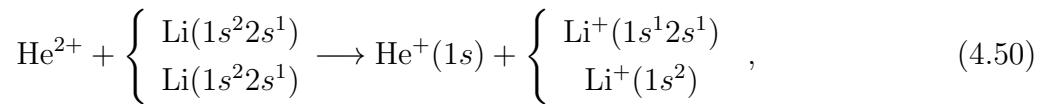
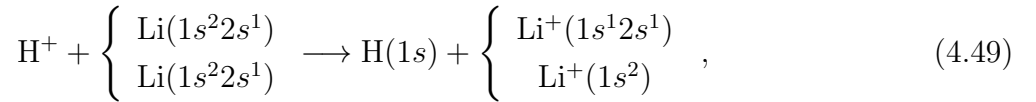
Слика 52: Сумирани тотални ефикасни пресеци Q_{Σ} (cm²) у функцији инцидентне енергије E (keV) за процес $\text{H}^+ + \text{Li}^+(1s^2) \longrightarrow \text{H}(\Sigma) + \text{Li}^{2+}(1s)$. Криве представљају резултате у оквиру BCIS-4В (пуна линија) и BCIS-3В метода (црткана линија). Експериментални подаци: • Sewell *et al.* [243].

Приметимо најпре да су сва мерења извршена у интервалу средњих енергија $E \in [60, 220]$ keV. Ово онемогућава реалну критичку евалуацију високоенергијских BCIS-4В и BCIS-3В метода, тако да би додатна мерења на високим инцидентним енергијама овде пуно допринела. Ипак, како је до сада често уочено одлично слагање BCIS метода са експериментима, и на енергијама и до неколико пута нижим од 60 keV, смислено је и овде начинити поређење са мерењима из референце [243].

Нажалост, као што видимо са слике 52, ниједан од примењена два BCIS метода не даје добро слагање са експерименталним подацима. Резултати оба метода леже значајно испод измерених вредности ефикасних пресека, а прилазе им у оквирима граница грешке тек за последњу експерименталну тачку на $E = 220$ keV.

4.4 Вишеелектронске мете

У овом одељку биће приказани резултати добијени у оквиру BCIS-3В метода примењеног у оквиру RHF модела [107] на једноструки електронски захват из вишеелектронских мета од стране потпуно огољених пројектила. Конкретно, биће размотрени следећи процеси:



при чему први процес из (4.49) и (4.50) одговара захвату из K, а други захвату из L љуске.

У оквиру разматрања једноструког електронског захвата из вишеелектронских мета нису разматрана финална стања јонске мете након судара. Као што је већ речено, ова стања потпуно ишчезавају из израза за амплитуду прелаза, због употребе модела независних честица, апроксимације смрзнутог језгра, као и чињенице да само један електрон сматрамо активним. Такође, као што се на основу израза (4.49)-(4.52) може запазити, разматран је искључиво захват у основно стање пројектила $H(1s)$, тј. израчунати су искључиво парцијални ефикасни пресеци Q_1 . Графички приказани резултати су за сумиране ефикасне пресеке Q_Σ , при чему је допринос од свих побуђених стања урачунат кроз Опенхајмеров закон скалирања, по формули:

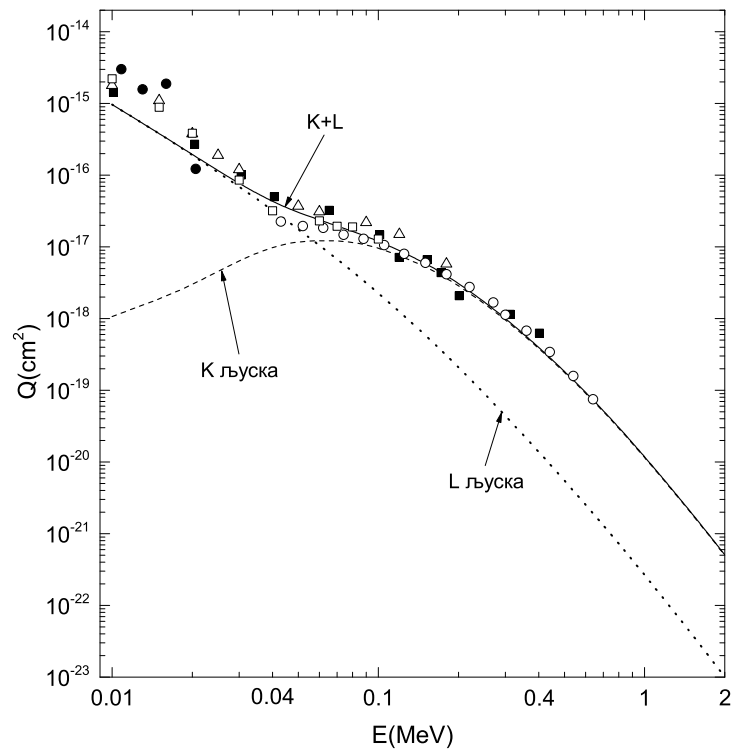
$$Q_\Sigma \simeq 1.202Q_1. \quad (4.53)$$

За све процесе (4.49)-(4.52) у литератури постоје доступни експериментални подаци, са којима ће наши теоријски резултати бити упоређени. Ради релативне процене валидности BCIS-3В метода у оквиру RHF модела, за поједине процесе биће дата и поређења са резултатима других теоријских метода.

Захват електрона у судару H^+ са $Li(1s^22s^1)$

На слици 53 представљени су резултати за једноструки електронски захват од стране H^+ јона из атома литијума: теоријски BCIS-3В са RHF1 таласном функцијом, као и експериментални [245–249]. Сва мерења су у доброј међусобној сагласности. За литијум као мету, засебно израчунати ефикасни пресеци Q^K и Q^L за једноструки електронски захват из K и L љуске, респективно, сабрани су да се добије укупни ефикасни пресек $Q^{K+L} = Q^K + Q^L$ за захват из K и L љуске заједно. Ефикасни пресеци за захват из K љуске су помножени са 2, с обзиром на то да се сваки од два електрона из ове љуске може захватити са једнаком вероватноћом. Слична мултипликација за захват из L љуске није урађена, с обзиром на то да ова љуска у атому литијума садржи само један електрон.

Као што се може видети са слике 53, главни допринос укупним ефикасним пресецима на нижим вредностима енергије долази од захвата у L љуску. Допринос од Q^L све више расте са смањивањем инцидентне енергије. Q^K ефикасни пресеци су у овом случају релативно мали (у односу на Q^L) за енергије ниже од 50 keV. Међутим, како инцидентна енергија пројектила расте, тако захват у



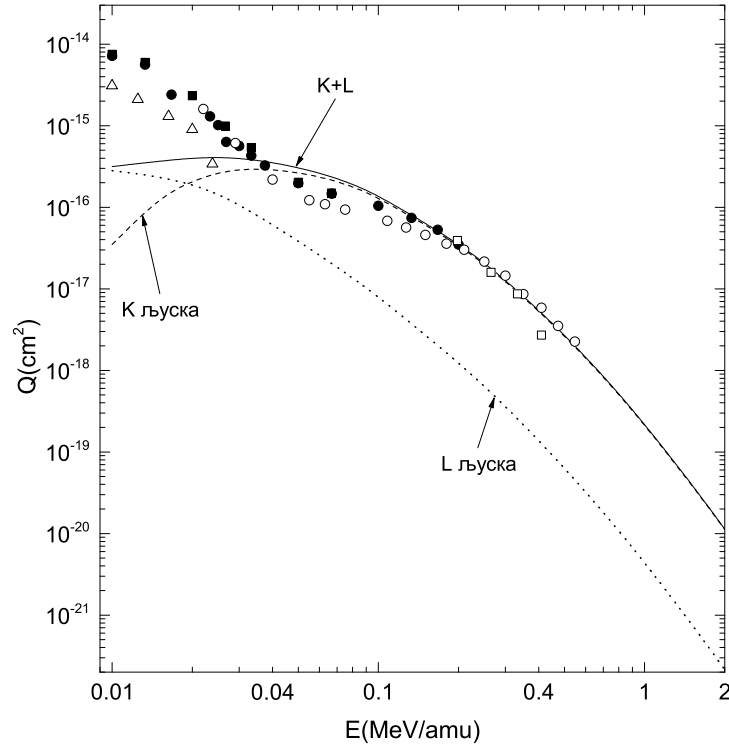
Слика 53: Сумирани тотални ефикасни пресеци Q_{Σ} (cm^2) у функцији инцидентне енергије E (MeV) за процес $\text{H}^+ + \text{Li} \rightarrow \text{H}(1s) + \text{Li}^+$. Криве представљају резултате BCIS-3В метода са RHF1 таласном функцијом за ефикасне пресеке Q^K (захват из К љуске, црткана линија), Q^L (захват из L љуске, тачкаста линија) и Q^{K+L} (захват из К и L љуске, пуна линија). Експериментални подаци: \triangle P'in *et al.* [245], \square DuBois и Toburen [246], \circ Shah *et al.* [247], \bullet Grüebler *et al.* [248], \blacksquare D'yachkov [249].

К љуску почиње да доминира. Са слике 53 видимо да су наши теоријски резултати у одличној сагласности са свим мерењима [245–249] у читавом енергијском интервалу где постоје доступни експериментални подаци.

Захват електрона у судару He^{2+} са $\text{Li}(1s^2 2s^1)$

Теоријски BCIS-3В резултати за тоталне ефикасне пресеке Q^K , Q^L и Q^{K+L} за једноструки електронски захват од стране He^{2+} јона из атома литијума презентовани су на слици 54. Ради поређења, приказани су и резултати мерења [246, 247, 250–252], који су и овде сви међусобно конзистентни.

На слици 54 може се запазити да су, за $E \geq 300 \text{ keV/amu}$, теоријски Q^{K+L} резултати у веома доброј сагласности са свим експерименталним подацима [246, 247, 250–252]. За вредности енергије ниже од 300 keV/amu , теоријска крива лежи испод резултата мерења, и то све више са опадајућом вредношћу енергије. Ова ситуација би се можда могла поправити експлицитним укључивањем доприноса од захвата у побуђена стања (не најгрубље кроз Опенхајмеров закон скалирања



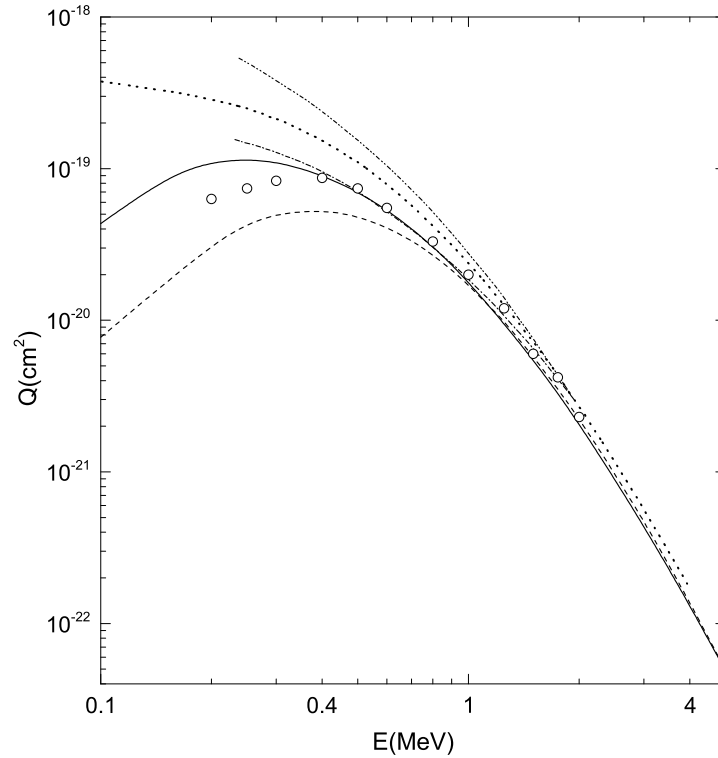
Слика 54: Сумирани тотални ефикасни пресеци Q_{Σ} (cm^2) у функцији инцидентне енергије E (MeV/amu) за процес $\text{He}^{2+} + \text{Li} \rightarrow \text{He}^+(1s) + \text{Li}^+$. Криве представљају резултате ВСИС-3В метода са RHF1 таласном функцијом за ефикасне пресеке Q^K (захват из К љуске, црткана линија), Q^L (захват из L љуске, тачкаста линија) и Q^{K+L} (захват из К и L љуске, пуна линија). Експериментални подаци: \blacksquare DuBois и Toburen [246], \circ Shah *et al.* [247], \square Sassao *et al.* [250], \bullet McCullough *et al.* [251], \triangle Murray *et al.* [252].

(4.53), већ кроз нпр. (4.26), или бар $Q_{\Sigma} = Q_1 + Q_2 + 2.081Q_3$). Ова тема ће највероватније бити предмет неког од будућних истраживања.

Захват електрона у судару H^+ са $\text{C}(1s^2 2s^2 2p^2)$

На слици 55 приказани су резултати за једноструки електронски захват из К љуске атома угљеника од стране H^+ јона. Теоријски резултати обухватају ВСИС-3В са RHF1 и водоничним таласним функцијама [68] за описивање основног стања мете. У оквиру водоничног модела, ефикасно наелектрисање $Z_{\text{T}}^{\text{eff}}$ употребљено је и у самој водоничној таласној функцији $\varphi_i(\vec{x}) = [(Z_{\text{T}}^{\text{eff}})^{3/2}/\sqrt{\pi}]e^{-Z_{\text{T}}^{\text{eff}}x}$, као и њој одговарајућој својственој вредности енергије $E_i = -(Z_{\text{T}}^{\text{eff}})^2/2$. У водоничном моделу се за $Z_{\text{T}}^{\text{eff}}$ узима екранирано наелектрисање мете $Z_{\text{T}}^{\text{eff}} = Z_{\text{T}} - 5/16$, где је 5/16 Слејтерова константа екранирања.

Ради поређења са нашим резултатима, на слици 55 наведени су и резултати експеримента из рада [254] и теоријски резултати добијени у оквиру СВ1-3В метода [253], као и из приор и пост верзије трочестичног Кулон-Борновог



Слика 55: Сумирани тотални ефикасни пресеци Q^K (cm^2) у функцији инцидентне енергије E (MeV) за процес $\text{H}^+ + \text{C} \rightarrow \text{H}(1s) + \text{C}^+$. Теоријске криве: BCIS-3B са RHF1 таласном функцијом мете (пуна линија), BCIS-3B са водоничном таласном функцијом мете (црткана линија, [68]), CB1-3B (тачкаста линија, [253]), приор и пост верзије CBDW-3B (црта-тачка и црта-дупла тачка линија, респективно, [44]). Експериментални подаци: \circ Rødbro *et al.* [254].

метода са изобличеним таласима (на енглеском *three-body Coulomb-Born distorted wave method*, скраћено CBDW-3B) [44]. У референци [44] за описивање иницијалног стања мете узета је једнострука зета таласна функција (на енглеском *single-zeta wave function*, скраћено SZF) [107], док је у референци [253] употребљена RHF1 таласна функција [107]. Са слике 55 се јасно види да приор верзија CBDW-3B метода даје ниже вредности ефикасних пресека него пост верзија. У раду [253] (CB1-3B апроксимација), пост-приор разлика избегнута је увођењем усредњене матрице прелаза, $T_{if} = (T_{if}^- + T_{if}^+)/2$ (ови усредњени резултати су и приказани на слици 55). Нагласимо да се у случају CB1-3B метода пост-приор разлика не јавља када год су таласне функције у *оба* канала познате егзактно, јер је CB1-3B метод сам по себи симетричан. Пост-приор разлика се код овог метода (у овом случају) јавља услед апроксимативног познавања таласне функције мете у улазном каналу.

Нагласимо да и CBDW-3B и CB1-3B методи задовољавају коректне граничне услове. Ипак, између ова два метода постоје две битне разлике. Прва је да

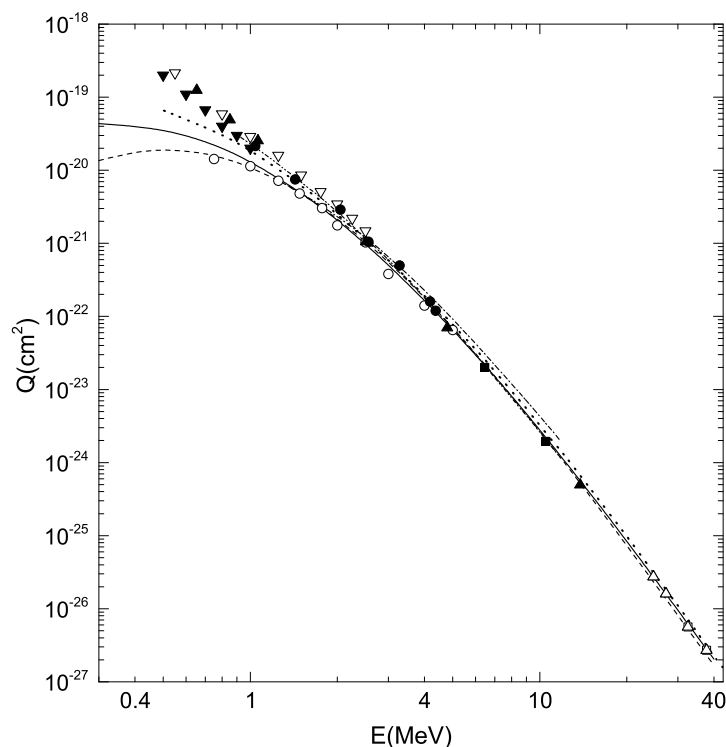
CBDW-3В користи Кулонове таласе, док СВ1-3В користи одговарајуће асимптотске форме ових Кулонових таласа (кулоновске логаритамске фазе за описивање релативног кретања тешких честица). Друга разлика састоји се у томе да СВ1-3В метод користи еиконалну апроксимацију, док је CBDW-3В не уводи. Може се стога рећи да СВ1-3В представља еиконалну верзију CBDW-3В метода. Пертурбациони потенцијал је у оба метода идентичан (засебно у пост и приор формама). За исту таласну функцију која описује иницијално стање мете, помоћу Кулонових таласа и кулоновских логаритамских фаза, добијене вредности ефикасних пресека у CBDW-3В и СВ1-3В методима требало би да буду идентичне. Разлике у ефикасним пресецима које се опажају на слици 55 би требало да потичу искључиво од употребе различитих иницијалних таласних функција мете: SZF и RHF1 функција код CBDW-3В и СВ1-3В метода, респективно.

Као што се може видети са слике 55, две верзије CBDW-3В метода и усредњени ефикасни пресеци СВ1-3В метода надмашују експерименталне податке (нарочито на нижим вредностима инцидентних енергија). Поменути теоријски резултати такође надмашују и BCIS-3В метод, са обе таласне функције (RHF1 и водоничном). BCIS-3В метод са RHF1 таласном функцијом се одлично слаже са мерењима [254] за $E \geq 0.4 \text{ MeV}$, док на нижим енергијама мало надмашује мерења. Са слике 55 види се и да је BCIS-3В метод са RHF1 таласном функцијом упадљиво успешнији у репродуковању експерименталних резултата од BCIS-3В метода са водоничном таласном функцијом, нарочито на нижим вредностима енергије. Са порастом инцидентне енергије, ефикасни пресеци које дају ова два метода конвергирају један ка другом.

Захват електрона у судару H^+ са $\text{N}(1s^2 2s^2 2p^3)$

Слика 56 илуструје резултате за захват електрона од стране H^+ јона из атома азота, који обухватају BCIS-3В са RHF1 таласном функцијом, као и експерименталне из референци [167–169, 181, 255–258]. Као и у случају угљеничне атомске мете, теоријски резултати су допуњени BCIS-3В методом са водоничном таласном функцијом [68], СВ1-3В методом [253], као и пост и приор верзијама CBDW-3В метода [44]. Једино експериментални подаци *Coske et al.* [255] одговарају захвату искључиво из К љуске, док су у свим осталим радовима [167–169, 181, 256–258] мерени ефикасни пресеци за једноструки електронски захват из ма које љуске атома азота. Као што можемо видети са слике 56, сви ови експериментални подаци [167–169, 181, 256–258] су међусобно добро усклађени. Резултати *Coske et al.* [255] на нижим енергијама дају мање вредности ефикасних пресека

од свих осталих мерења, што је и природно, с обзиром на то да једино она урачунавају захват искључиво из К љуске. Са растућом инцидентном енергијом, експерименталне тачке Cocks *et al.* [255] конвергирају заједничком тренду мерења [167–169, 181, 256–258]. Ово је у складу са већ опаженом тенденцијом на сликама 53 и 54, а то је да захват из К љуске почиње да доминира са порастом инцидентне енергије.

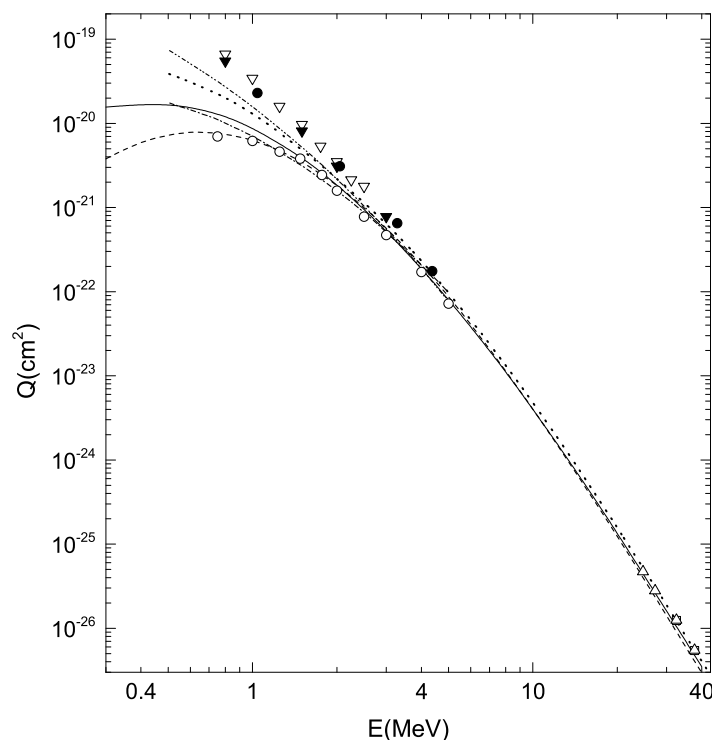


Слика 56: Исто као и на слици 55, само за процес $\text{H}^+ + \text{N} \rightarrow \text{H}(1s) + \text{N}^+$ и за други скуп мерења. Експериментални подаци са молекулском азотном метом (трансформисани у атомску азотну мету дељењем са 2): \blacktriangle Welsh *et al.* [167], \bullet Schryber *et al.* [168], ∇ Toburen *et al.* [169], \blacktriangledown Allison *et al.* [181], \circ Cocks *et al.* [255], \square Acerbi *et al.* [256], Δ Acerbi *et al.* [257], \blacksquare Berkner *et al.* [258].

Као што се може видети са слике 56, резултати BCIS-3В метода са RHF1 таласном функцијом се, у широком енергијском интервалу, одлично слажу са доступним експерименталним подацима [167–169, 181, 255–258]. Ово нарочито важи на већим вредностима инцидентне енергије, за које, као што смо већ напоменули, почиње да доминира захват из К љуске. Ту је слагање готово перфектно. На нижим вредностима енергије, новодобијени BCIS-3В резултати прате тренд скупа мерења [255], за захват искључиво из К љуске. Слагање са овим скупом мерења је одлично, а до одступања долази искључиво за експерименталну тачку на најнижој инцидентној енергији $E = 0.75 \text{ MeV}$. Као што је већ речено, теорија развијена у оквиру ове дисертације односи се на атомске мете,

док се сви експериментални подаци [167–169, 181, 255–258] односе на молекуларни азот N_2 као мету. Међутим, на високим енергијама, ефикасни пресеци за електронски захват из молекуларне хомонуклеарне двоатомске мете могу се трансформисати у оне за одговарајућу атомску мету једноставним дељењем са 2, тј. $Q_N = Q_{N_2}/2$ (у случају азотне мете). Истакнимо на крају да и сви остали размотрени теоријски методи [44, 68, 253] дају веома добра слагања са експерименталним резултатима. У приказаним енергијским интервалима, значајне разлике између различитих теоријских приступа јављају се искључиво на нижим вредностима енергије.

Захват електрона у судару H^+ са $O(1s^2 2s^2 2p^4)$



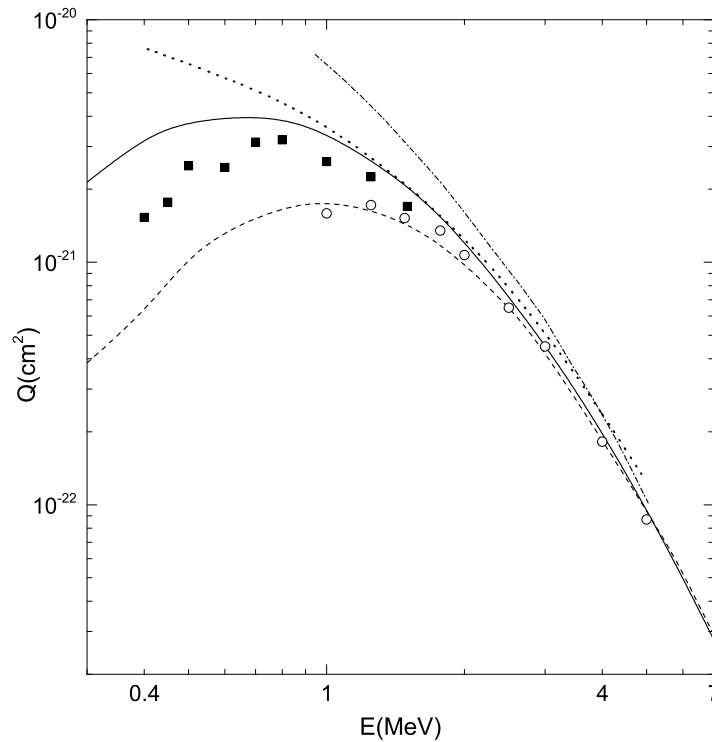
Слика 57: Исто као и на слици 55, само за процес $H^+ + O \rightarrow H(1s) + O^+$ и за други скуп мерења. Експериментални подаци са молекулском кисеоничном метом (трансформисани у атомску кисеоничну мету дељењем са 2): ● Schryber *et al* [168], ▽ Toburen *et al.* [169], ○ Cocks *et al.* [255], □ Acerbi *et al.* [256], △ Acerbi *et al.* [257], ▼ Varghese *et al.* [259].

На слици 57 приказани су резултати за процес $H^+ + O \rightarrow H(1s) + O^+$. Као и на сликама 55 и 56, теоријски резултати обухватају BCIS-3В са RHF1 таласном функцијом, затим BCIS-3В са водоничном функцијом [68], СВ1-3В [253], као и пост и приор верзије CBDW-3В [44], док експериментални резултати обухватају оне из радова [168, 169, 255–257, 259]. И у случају кисеоничне мете важи да се

сва мерења [168, 169, 255–257, 259] односе на молекуларну мету O_2 , а ефикасни пресеци за атомску мету O добијени су по релацији $Q_O = Q_{O_2}/2$.

Ситуација је код овог процеса потпуно аналогна оној код претходног (азотна мета), тако да је нећемо засебно детаљно анализирати. Напоменућемо само да се овде јављају нешто већа одступања мерења *Cocke et al.* [255] (која одговарају захвату искључиво из K љуске) од осталих мерења [168, 169, 256, 257, 259] (која одговарају захвату из ма које љуске атома кисеоника). Ово је и било очекивано, с обзиром на то да атом кисеоника садржи један електрон више у односу на атом азота. Последишно, на нижим енергијама је слагање свих теорија са експерименталним резултатима нешто лошије. На вишим инцидентним енергијама слагање је и даље изузетно добро.

Захват електрона у судару H^+ са $Ne(1s^2 2s^2 2p^6)$

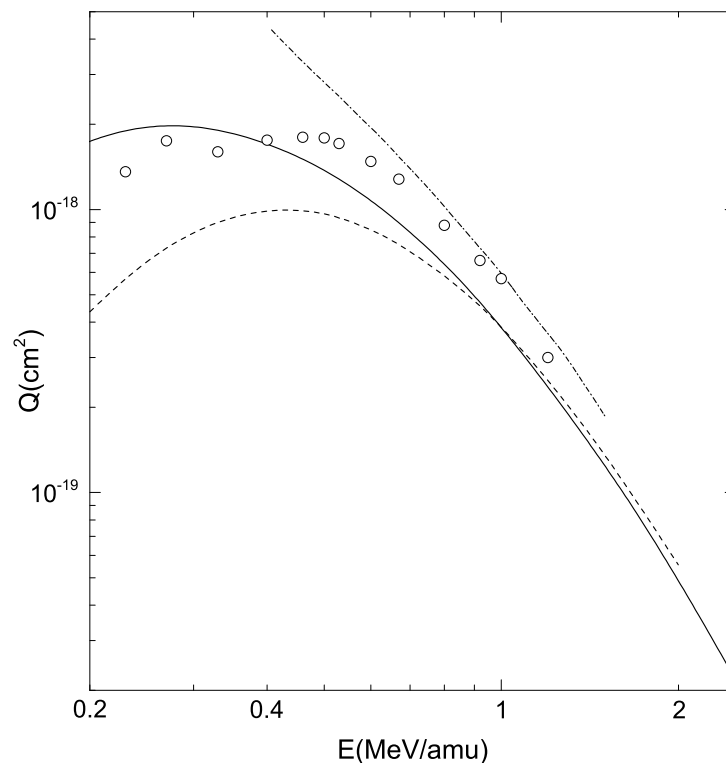


Слика 58: Сумирани тотални ефикасни пресеци Q^K (cm^2) у функцији инцидентне енергије E (MeV) за процес $H^+ + Ne \rightarrow H(1s) + Ne^+$. Теоријске криве: BCIS-3B са RHF1 таласном функцијом мете (пуна линија), BCIS-3B са водоничном таласном функцијом мете (црткана линија, [68]), приор форма CBDW-3B (тачкаста линија, [44]), CDW-3B (црта-тачка линија, [5]). Експериментални подаци: ■ Rødbro *et al.* [254], ○ Cocke *et al.* [255].

Теоријски ефикасни пресеци за формирање атомског водоника у $H^+ + Ne$ сударима приказани су на слици 58, заједно са доступним експерименталним подацима [254, 255]. На слици су презентовани и резултати BCIS-3B метода са водоничном таласном функцијом [68], затим резултати CDW-3B метода са RHF1 таласном функцијом [5], као и приор форме CBDW-3B метода [44] са једноструком зета функцијом [107].

Резултати BCIS-3B метода са RHF1 таласном функцијом у благој мери надмашују измерене вредности на нижим енергијама. Међутим, за веће вредности енергије (преко 2 MeV), наши резултати се веома добро слажу са мерењима. Можемо констатовати да се наши теоријски резултати у случају $H^+ + Ne$ судара боље слажу са доступним експерименталним подацима од осталих теоријских резултата приказаних на слици 58.

Захват електрона у судару He^{2+} са $C(1s^2 2s^2 2p^2)$



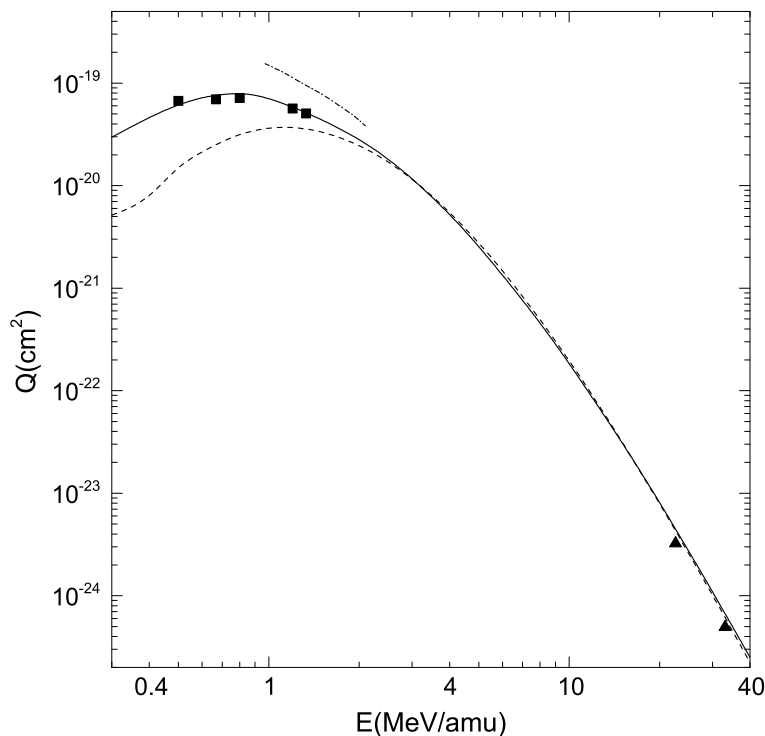
Слика 59: Исто као и на слици 58, само за процес $He^{2+} + C \rightarrow He^+(1s) + C^+$ и за други скуп мерења. Експериментални подаци: \circ Rødbro *et al.* [254].

На слици 59 приказани су резултати за једноструки електронски захват из К љуске у $He^{2+} + C$ сударима, при чему теоријски резултати укључују BCIS-3B

са RHF1 таласном функцијом, затим BCIS-3B са водоничном таласном функцијом [68], као и резултате CDW-3B метода [5].

Као што се може видети са слике 59, у овом случају ниједан од три теоријска метода не даје нарочито репрезентативне резултате у поређењу са мерењима, мада се наш BCIS-3B метод ипак показује као најадекватнији. Унутар самог BCIS-3B метода, на нижим енергијама јавља се значајно одступање између резултата добијених коришћењем RHF1 и водоничне таласне функције за описивање иницијалног основног стања мете (слична ситуација ће се јавити и код $\text{He}^{2+} + \text{Ne}$ судара, на слици 60). На већим вредностима енергије одступање је далеко мање. Такође, уочавамо да CDW-3B метод у читавом енергијском интервалу надмашује експерименталне податке.

Захват електрона у судару He^{2+} са $\text{Ne}(1s^2 2s^2 2p^6)$



Слика 60: Исто као и на слици 58, само за процес $\text{He}^{2+} + \text{Ne} \rightarrow \text{He}^+(1s) + \text{Ne}^+$ и за други скуп мерења. Експериментални подаци: ■ Rødbro *et al.* [254], ▲ Katayama *et al.* [260].

Коначно, слика 60 приказује резултате за једноструки електронски захват из К љуске атома Ne од стране He^{2+} јона. Теоријски резултати укључују исте методе као и у случају $\text{He}^{2+} + \text{C}$ судара, док експериментални резултати обухватају референце [254, 260].

Са слике 60 уочава се да наши резултати готово перфектно репродукују експерименталне резултате у читавом доступном енергијском интервалу $E \in [0.3, 30.5] \text{ MeV/amu}$. Штавише, максимум који BCIS-3В метод са RHF1 таласном функцијом предвиђа тачно се поклапа са оним измереним у референци [254]. И овде се запажа да CDW-3В метод надмашује експерименталне податке и BCIS-3В резултате у читавом доступном енергијском интервалу.

Сада ћемо се фокусирати на анализу везану за улогу таласних функција које се користе за описивање иницијалног основног стања мета, све у оквиру BCIS-3В метода. Као што смо запазили са слика 55-60, криве које одговарају BCIS-3В методу са RHF1 таласним функцијама и са водоничним таласним функцијама [68] за високе инцидентне енергије дају готово идентичне вредности ефикасних пресека. Обе се генерално одлично слажу са експерименталним подацима (на високим енергијама). На нижим вредностима енергије, међутим, ове две теоријске криве показују веома различито понашање. Наиме, резултати са RHF1 таласним функцијама премашују оне који се добијају коришћењем водоничних функција. Са слика 55-60 се такође види да BCIS-3В метод са RHF1 таласним функцијама даје боље слагање са експерименталним подацима него BCIS-3В метод са водоничним таласним функцијама, посматрано за читав енергијски интервал.

Главни разлог за разлику између ефикасних пресека који се добијају BCIS-3В методом са RHF1 и са водоничним (HYD) таласним функцијама лежи у веома различитим вредностима везивних енергија које одговарају RHF1 и HYD ефективним наелектрисањима мете. На пример, у случају атома угљеника као мете, у оквиру HYD модела везивна енергија и одговарајуће ефективно наелектрисање износе $E_i^{\text{HYD}} = -16.173828$ и $Z_{\text{HYD}}^{\text{eff}} = 5.6875$, док код RHF1 функције они узимају вредности $E_i^{\text{RHF1}} = -11.32554$ и $Z_{\text{RHF1}}^{\text{eff}} = 4.7593$ [107]. Природа електронског захвата намеће очекивање да би ефективно наелектрисање требало значајно да утиче на вредности ефикасних пресека, кроз Зомерфелдов параметар $\nu_T = Z_T^{\text{eff}}/v$ у Кулоновом таласу за континуумска интермедијарна стања у амплитуди прелаза. Питање које се надовезује на ову тврдњу је следеће: колики је утицај различитих форми таласних функција основног стања мете (RHF1 и HYD) за исте вредности параметара мете (везивне енергије и ефективног наелектрисања)? Да би смо дали одговор на ово питање, искористили смо BCIS-3В метод да изведемо „нумерички експеримент“ за једноструки електронски захват од стране H^+ јона из К љуске атома угљеника у основном стању. Наиме, искористили смо RHF1 таласну функцију са коефицијентима и експоненцијалним факторима из референце [107], али са HYD везивном енергијом $E_i^{\text{HYD}} = -16.173828$, уместо RHF1 вредности $E_i^{\text{RHF1}} = -11.32554$. Штавише, у овом сценарију, кроз

Зомерфелдов параметар $\nu_T = Z_T^{\text{eff}}/v$ који улази у континуумски Кулонов талас, RHF1 ефективно наелектрисање мете $Z_{\text{RHF1}}^{\text{eff}} = 4.7593$ је замењено HYD ефективним наелектрисањем $Z_{\text{HYD}}^{\text{eff}} = 5.6875$. За овај помоћни модел, провизорно назван RHF-HYD модел, добијени тотални ефикасни пресеци су, за све вредности енергије из интервала $E \in [100, 5000]$ keV, јако блиски онима које даје чист HYD модел. Закључак је да, за разлику од везивне енергије и ефективног наелектрисања, сама форма таласне функције иницијалног стања мете готово да не утиче на вредности ефикасних пресека.

Да бисмо испитали осетљивост ефикасних пресека на избор базе по којој се развија таласна функција мете, искористићемо две различите RHF таласне функције: RHF1 [107] и RHF2 [141–143]. Параметри RHF1 таласних функција дати су у табелама 1 и 2 у претходној глави. С друге стране, за основно стање атома угљеника ($C(1s^2 2s^2 2p^2)$), RHF2 таласна функција садржи пет $1s$ и три $2s$ нормализоване Слејтерове орбитале, са параметрима: $c_1 = -6.29084$, $\zeta_1 = 9.23879$, $c_2 = -7.52355$, $\zeta_2 = 5.10037$, $c_3 = -2.41986 \times 10^{-2}$, $\zeta_3 = 3.27663$, $c_4 = -2.64897 \times 10^{-4}$, $\zeta_4 = 1.19296$, $c_5 = -5.91045 \times 10^{-5}$, $\zeta_5 = 0.93096$, $N_1 = -0.491606$, $\lambda_1 = 18.89045$, $N_2 = -13.04477$, $\lambda_2 = 7.51751$, $N_3 = -4.96865 \times 10^{-3}$, $\lambda_3 = 2.27024$ и везивном енергијом $E_i = -11.3255187$. Као што се може видети из табеле 3, ефикасни пресеци израчунати са RHF1 и RHF2 таласним функцијама основног стања мете су готово идентични.

Поред RHF1 и RHF2, искористили смо и једноструку зета функцију (SZF) са следећим параметрима за $C(1s^2 2s^2 2p^2)$ [107]: $c_1 = 13.47608$, $\zeta_1 = 5.67263$, $N_1 = 2.16483 \times 10^{-2}$, $\lambda_1 = 1.60833$ са $E_i = -11.30156$, као и двоструку зета функцију (на енглеском *double-zeta wave function*, скраћено DZF), са параметрима [107]: $c_1 = 4.77121$, $\zeta_1 = 7.52232$, $c_2 = 9.03253$, $\zeta_2 = 5.12306$, $N_1 = -9.13684 \times 10^{-3}$, $\lambda_1 = 1.83068$, $N_2 = 2.19142 \times 10^{-3}$, $\lambda_2 = 1.15282$ са $E_i = -11.32343$. Добијене вредности ефикасних пресека са SZF и DZF таласним функцијама веома су блиске онима добијеним са RHF1 и RHF2 таласним функцијама.

Још једна илустрација дата је у табели 3, која приказује како су ефикасни пресеци који се у случају $\text{He}^{2+} + \text{Ne}$ судара добијају употребом RHF1, RHF2, SZF и DZF таласних функција готово идентични (за шири интервал енергија него код $\text{H}^+ + \text{C}$ судара). Експлицитном провером утврдили смо да исти закључак важи за све колизионе системе са вишеелектронским метама размотрене у овом одељку. Стога, може се дефинитивно извести закључак да је BCIS-3B метод практично неосетљив на избор таласне функције основног стања мете (за скуп таласних функција које су овде размотрене).

Табела 3: Сумирани тотални ефикасни пресеци $Q_{\Sigma} \simeq 1.202Q_1$ (y cm^2) у приор форми BCIS-3В метода за једноструки електронски захват из К љуске у $\text{H}^+ + \text{C}$ и $\text{He}^{2+} + \text{Ne}$ сударима, за различите таласне функције основног стања: SZF [107], DZF [107], RHF1 [107] и RHF2 функцију [141–143].

$\text{H}^+ + \text{C}$ судар				
E(MeV)	SZF	DZF	RHF1	RHF2
0.1	4.5310E-20	4.3135E-20	4.3343E-20	4.3328E-20
0.15	8.7174E-20	8.7117E-20	8.7020E-20	8.7022E-20
0.2	1.1083E-19	1.1363E-19	1.1321E-19	1.1323E-19
0.3	1.1388E-19	1.1770E-19	1.1748E-19	1.1747E-19
0.5	7.3225E-20	7.4527E-20	7.4401E-20	7.4396E-20
0.75	3.4883E-20	3.6139E-20	3.6095E-20	3.6091E-20
1	1.7803E-20	1.8246E-20	1.8197E-20	1.8199E-20
1.5	5.6545E-21	5.5697E-21	5.5817E-21	5.5816E-21
2	2.1699E-21	2.0852E-21	2.0982E-21	2.0975E-21
3	4.6590E-22	4.4025E-22	4.4317E-22	4.4318E-22
4	1.3869E-22	1.3143E-22	1.3180E-22	1.3187E-22
5	5.1010E-23	4.8813E-23	4.8753E-23	4.8784E-23
$\text{He}^{2+} + \text{Ne}$ судар				
E(MeV/amu)	SZF	DZF	RHF1	RHF2
0.3	3.1073E-20	2.9698E-20	2.9756E-20	2.9750E-20
0.5	6.6168E-20	6.6309E-20	6.6252E-20	6.6259E-20
0.75	8.0571E-20	8.2230E-20	8.2391E-20	8.2388E-20
1	7.4433E-20	7.5723E-20	7.5856E-20	7.5856E-20
2	2.9805E-20	2.9813E-20	3.0596E-20	3.0595E-20
3	1.1814E-20	1.1996E-20	1.1996E-20	1.1997E-20
4	5.3208E-21	5.2902E-21	5.2920E-21	5.2924E-21
5	2.6381E-21	2.5804E-21	2.5868E-21	2.5865E-21
7.5	6.1790E-22	5.9362E-22	5.9629E-22	5.9618E-22
10	1.9430E-22	1.8643E-22	1.8700E-22	1.8703E-22
15	3.2557E-23	3.1644E-23	3.1576E-23	3.1589E-23
20	8.3412E-24	8.2298E-24	8.1889E-24	8.1904E-24
30	1.0991E-24	1.1120E-24	1.1043E-24	1.1038E-24
40	2.4545E-25	2.5300E-25	2.5110E-25	2.5094E-25

Различито описивање основног стања активног електрона у вишеелектронским атомским метама размотреним у оквиру ове дисертације (литијум, угљеник, азот, кисеоник, неон) се у суштини састоји у коришћењу различитог броја $2s$

Табела 4: Сумирани тотални ефикасни пресеци $Q_{\Sigma} \simeq 1.202Q_1$ (y cm^2) у приор форми VCIS-3В метода за једноструки електронски захват из К љуске у $\text{H}^+ + \text{O}$ сударима, приказани у функцији броја интеграционих тачака (NGL) по свакој оси интеграције, за различите инцидентне енергије пројектила H^+ . Иницијално основно стање (К љуска) атома кисеоника описано је RHF1 функцијом [107].

NGL	300 keV	2000 keV	10000 keV	40000 keV
8	9.3494E-19	2.2015E-21	3.2019E-24	8.8902E-27
16	7.0508E-20	2.1625E-21	4.6702E-24	3.1019E-27
24	5.1647E-20	1.8212E-21	5.4976E-24	3.7035E-27
32	2.9848E-20	1.8957E-21	3.7785E-24	4.2000E-27
40	1.7645E-20	1.9068E-21	3.5385E-24	4.9320E-27
48	1.3011E-20	1.9000E-21	3.9826E-24	6.3040E-27
64	1.2722E-20	1.8974E-21	4.1716E-24	2.7268E-27
80	1.4628E-20	1.8969E-21	4.0251E-24	3.0885E-27
96	1.5871E-20	1.8970E-21	4.0985E-24	3.8573E-27
112	1.6385E-20	1.8972E-21	4.0664E-24	4.1701E-27
128	1.6473E-20	1.8975E-21	4.0783E-24	3.1924E-27
144	1.6368E-20	1.8977E-21	4.0741E-24	3.2460E-27
160	1.6198E-20	1.8979E-21	4.0753E-24	3.6415E-27
176	1.6026E-20	1.8980E-21	4.0749E-24	3.7203E-27
192	1.5879E-20	1.8982E-21	4.0749E-24	3.4081E-27
208	1.5764E-20	1.8983E-21	4.0749E-24	3.3761E-27
224	1.5679E-20	1.8983E-21	4.0749E-24	3.5406E-27
240	1.5622E-20	1.8984E-21	4.0748E-24	3.5790E-27
256	1.5586E-20	1.8985E-21	4.0748E-24	3.4707E-27
272	1.5566E-20	1.8985E-21	4.0748E-24	3.4473E-27
288	1.5558E-20	1.8986E-21	4.0748E-24	3.5083E-27
304	1.5559E-20	1.8986E-21	4.0748E-24	3.5267E-27
320	1.5565E-20	1.8986E-21	4.0748E-24	3.4888E-27
336	1.5575E-20	1.8986E-21	4.0748E-24	3.4771E-27
352	1.5587E-20	1.8987E-21	4.0748E-24	3.4991E-27
368	1.5601E-20	1.8987E-21	4.0748E-24	3.5071E-27
384	1.5615E-20	1.8987E-21	4.0748E-24	3.4938E-27
400	1.5628E-20	1.8987E-21	4.0748E-24	3.4887E-27

орбитала у базисним функцијама. Тако за нпр. угљеник таласне функције означене са RHF1, RHF2, DZF и SZF садрже четири, три, две и једну $2s$ базисну функцију, респективно. Како све четири таласне функције дају готово исте вредности ефикасних пресека, може се закључити да сам број $2s$ базисних орбитала

не утиче значајно на израчунате вредности ефикасних пресека.

Као што је претходно наведено, у оквиру трочестичног BCIS метода који је овде употребљен само се један електрон из вишеелектронске мете сматра активним. Сви остали електрони мете третирају се као пасивни, у оквиру пратеће апроксимације смрзнутог језгра. Услед тога, ова верзија BCIS метода не укључује никакве корелационе ефекте. Да би се испитао утицај ових ефеката, неопходно је искористити корелисане таласне функције. Међутим, ово се налазило изван замисли овде представљене студије. Овакав приступ би захтевао употребу далеко захтевније четворо- и вишечестичне верзије BCIS метода, примењеног на вишеелектронске мете. Ова тема може бити предмет неког од предстојећих истраживања.

Претходно је већ истакнуто да је посебна пажња посвећена конвергенцији нумерички израчунатих интеграла, уз детаљно разматрање дато на почетку овог поглавља. Ради илустрације неких од тамо наведених опсервација, у табели 4 приказани су резултати за сумиране ефикасне пресеке које даје BCIS-3B метод са RHF1 таласном функцијом за $H^+ + O$ сударе, и то за четири вредности инцидентних енергија, уз варирање NGL у интервалу 8 – 400.

Напоменимо да у еиконалној апроксимацији, која је и у овој дисертацији усвојена, уобичајени начин представљања ефикасних пресека укључује два децимална места (три значајне цифре). У табелама 3 и 4 је од овог правила одступљено и ефикасни пресеци дати су са четири децимална места, искључиво са мотивацијом да се детаљније упореде вредности ефикасних пресека које дају различити одабири таласних функција иницијалног стања мете (табела 3), односно да би се подробније испратио ток конвергенције ефикасних пресека са растућом вредношћу NGL (табела 4).

Глава 5

Закључак

Сада ћемо рекапитулирати главне предмете истраживања ове дисертације, уз сумирање њених најважнијих доприноса. Затим ћемо укратко истаћи најбитније закључке, до којих се дошло детаљном анализом резултата приказаних у претходном поглављу. Коначно, навешћемо неколико могућих праваца даљих истраживања, које планирамо да спроведемо у блиској будућности.

У овој дисертацији разматран је процес једноструког електронског захвата из водонику и хелијуму сличних мета. Поред самог атомског водоника $H(1s)$ и хелијума $He(1s^2)$, проучаван је захват и из појединих јонских мета: $He^+(1s)$ и $Li^{2+}(1s)$ (водонику сличне), као и $Li^+(1s^2)$ (хелијуму слична). Пројектили су били потпуно огољени јони: H^+ , He^{2+} , Li^{3+} , Be^{4+} , B^{5+} , C^{6+} , N^{7+} , O^{8+} и F^{9+} . У свим до сад наведеним случајевима, мете су се налазиле у основном иницијалном стању ($1s$ код водонику сличних, $1s^2$ код хелијуму сличних), док је захват вршен у произвољно финално стање пројектила. Водонику сличне мете описане су водоничним таласним функцијама основног стања, док је основно стање хелијуму сличних мета описано двопараметарском функцијом Silverman *et al.* [96] (која укључује око 95% радијалних корелација). Коначно, разматран је и једноструки електронски захват из вишеелектронских мета. У овом случају су мете, коришћењем модела независних честица и апроксимације смрзнутог језгра, моделоване као водонику сличне. Мете су укључивале атоме Li , C , N , O и Ne . Код атома Li као мете, проучаван је захват из K и L љуске, док је код свих осталих вишеелектронских мета посматран искључиво захват из K љуске. Разматрани пројектили су обухватили H^+ и He^{2+} . За описивање основног стања вишеелектронских мета искоришћена су два типа RHF таласних функција [107, 141–143], као и SZF и DZF таласне функције [107]. Узети су у обзир и претходно добијени резултати у оквиру BCIS-3B метода, али са водоничним таласним функцијама [68].

Сви поменути процеси разматрани су у оквирима трочестичне и четворочестичне BCIS апроксимације у приор форми. Код ова два метода интермедијарна јонизациона стања укључена су у излазном каналу, кроз присуство електронских Кулонових таласа, центрираних на језгру мете. До електронског захвата долази путем двостепеног механизма: најпре долази до јонизације, затим се електрон захвата из тог интермедијарног јонизационог стања (захват из континуума). У овом смислу, BCIS методи спадају у категорију метода другог реда. У оквиру ове дисертације су по први пут развијене BCIS-3В и BCIS-4В апроксимације за једноструки електронски захват из основног стања водонику и хелијуму сличних мета у *произвољна* финална стања потпуно огољених пројектила. Такође, по први пут је развијен BCIS-3В метод за захват из К и L љуске појединих вишеелектронских мета, у случају када се основна стања ових мета описују помоћу RHF таласних функција. Код вишеелектронских мета, BCIS-3В метод развијен је за захват у финално *основно* стање потпуно огољених пројектила. Оригинални шестодимензиони (BCIS-3В) и деветодимензиони (BCIS-4В) интегрални за амплитуду прелаза аналитички су редуковани на дводимензионе интеграле по реалним променљивима. На основу израза за амплитуду прелаза добијени су изрази за тоталне ефикасне пресеке за једноструки електронски захват, који представљају тродимензионе интеграле по реалним променљивима. Ове преостале три интеграције се спроводе нумерички, помоћу Гаус-Лежандрових квадратура. Искоришћена је такође и Кошијева регуларизација, ради убрзавања конвергенције нумеричких интеграла. Посебна погодност код водоничне мете у оквиру BCIS-3В метода, као и код хелијумске мете у оквиру BCIS-4В метода, искоришћена је да би се директно добили диференцијални ефикасни пресеци за захват пројектилом H^+ (у овим случајевима се спроводе две нумеричке интеграције, помоћу Гаус-Лежандрових квадратурних формула). Добијени резултати обухватају парцијалне и сумиране тоталне ефикасне пресеке (код свих размотрених колизионих система), као и парцијалне и сумиране диференцијалне ефикасне пресеке (код $H^+ + H(1s)$ и $H^+ + He(1s^2)$ колизионих система). Сумирани ефикасни пресеци добијени су на основу Опенхајмеровог n^{-3} закона скалирања [25]. Код водоничне, хелијумске и јонских мета допринос од побуђених стања егзактно је урачунат до неке максималне вредности главног квантног броја n_{max} , док је допринос од виших побуђених стања са $n > n_{max}$ урачунат апроксимативно (на основу Опенхајмеровог закона скалирања). Вредност n_{max} је варирала од процеса до процеса, а бирања је тако да приближне вредности ефикасних пресека конвергирају стварним вредностима (у смислу да одсецања суме на n_{max} и на $n'_{max} = n_{max} - 1$ дају готово идентичне

вредности ефикасних пресека). Као што је већ речено, код вишеелектронских мета експлицитно је израчунат тотални ефикасни пресек за захват у основно стање. У сумираном тоталном ефикасном пресеку допринос од свих побуђених стања урачунат је апроксимативно (помоћу Опенхајмеровог закона скалирања).

За већину размотрених колиззионих система постоје доступни експериментални подаци, са којима је извршено поређење наших теоријских резултата. Генерално гледано, сви новоразвијени теоријски методи су показали одлично слагање са експерименталним резултатима. У појединим случајевима, приказали смо и поређења са неким другим теоријским приступима, ради релативне процене валидности BCIS метода. И у том погледу су се наши модели изузетно показали. Сада ћемо нешто детаљније анализирати ситуације код водонику сличних, хелијуму сличних, као и вишеелектронских мета (понаособ).

Код захвата из водонику сличних мета примењен је BCIS-3В метод. Постигнута су изванредна слагања са експерименталним подацима код H^+ и He^{2+} пројектила, у погледу свих парцијалних и сумираних тоталних ефикасних пресека. Доња граница применљивости BCIS-3В метода је чак 8 keV/amu у случају $2s$ парцијалних пресека код $He^{2+} + H(1s)$ судара, што је веома значајан резултат у категорији високоенергијских метода. BCIS-3В теоријске вредности сумираних диференцијалних ефикасних пресека код $H^+ + H(1s)$ судара се такође одлично слажу са експериментима на свим размотреним вредностима инцидентне енергије ($E_{cm} = 60$ и 125 keV , као и $E_{lab} = 5\text{ MeV}$). BCIS-3В метод се на енергијама $E_{cm} = 60$ и 125 keV упоредиво добро слаже са експериментима као и off-shell АОСС [82], а боље него on-shell АОСС [82], који припадају категорији непертурбативних метода. На високој инцидентној енергији $E_{lab} = 5\text{ MeV}$, BCIS-3В даје изузетне резултате, коректно предвиђајући све минимуме и максимуме уочене у експериментима. Као метод другог реда, BCIS-3В предвиђа (квантномеханичку верзију) Томасовог двоструког расејања, које карактерише појава Томасовог пика. За наелектрисања пројектила $3 \leq Z_p \leq 9$ код захвата из атома $H(1s)$, као и у јон-јонским сударима, BCIS-3В метод даје задовољавајуће резултате, мада су слагања са мерењима нешто слабија него у $H^+ + H(1s)$ и $He^{2+} + H(1s)$ случају. Треба напоменути да су ова мерења начињена махом на средњим вредностима инцидентних енергија. Будућа мерења ефикасних пресека на високим енергијама би овде пуно помогла. Очекивање је да ће ту слагање високоенергијског BCIS-3В метода са мерењима такође бити одлично.

Једноструки електронски захват из хелијуму сличних мета разматран је у оквирима BCIS-4В, као и ефективног BCIS-3В метода. Употреба BCIS-3В метода подразумевала је увођење модела независних честица, као и апроксимације

смрзнутог језгра. У том приступу само један електрон сматран је активним (онај који се захвата), док је други сматран пасивним (онај који учествује у екранирању мете). Добијени ефикасни пресеци на крају су помножени са 2, с обзиром на то да се сваки од два електрона захвата са једнаком вероватноћом. Оба BCIS метода дала су одлична слагања са експериментима код $H^+ + He(1s^2)$ судара, и за парцијалне и за сумиране тоталне ефикасне пресеке. Показало се да BCIS-3B даје боље резултате за захват у сферносиметрична стања ($l = 0$), док BCIS-4B даје боље резултате за захват у $l = 1$ и $l = 2$ финална стања. Такође, BCIS-4B метод се изузетно слаже са мерењима у погледу диференцијалних ефикасних пресека, на свим размотреним вредностима инцидентних енергија (средњим $E_{lab} = 100, 150$ и 300 keV и високим $E_{lab} = 1.3, 2.5, 5.0, 7.5$ и 12.5 MeV). И овде се на високим инцидентним енергијама коректно предвиђа Томасов пик, као ефекат другог реда (заправо, зачетак Томасовог пика се код BCIS-4B метода уочава већ и на средњим инцидентним енергијама). За наелектрисања пројектила $3 \leq Z_p \leq 7$, BCIS-4B метод показује веома задовољавајуће слагање са експериментима, мада све слабије са растућим Z_p . Код O^{8+} и F^{9+} пројектила BCIS-4B метод не даје добре резултате. Штавише, слагање са експериментима је овде све горе са растућом инцидентном енергијом, што никако не би смео да буде случај код једног високоенергијског метода. С друге стране, BCIS-3B метод, ефективно примењен на хелијумску мету, даје готово перфектно слагање са мерењима за све $1 \leq Z_p \leq 9$. Треба нагласити да, у свим поменутих случајевима, доступна мерења обухватају и високоенергијски регион. У случају једноструког електронског захвата у $H^+ + Li^+(1s^2)$ судару, ниједан од два BCIS метода не даје добре резултате. Напоменимо да су, додуше, сва мерења у овом случају из региона средњих инцидентних енергија.

Код вишеелектронских мета примењен је BCIS-3B метод у оквиру RHF модела. За све размотрене процесе, који обухватају сударе пројектила H^+ са атомима литијума, угљеника, азота, кисеоника и неона, као и пројектила He^{2+} са атомима угљеника и неона, добијена су веома добра до готово перфектна слагања са експерименталним резултатима. Такође, код вишеелектронских мета, ново-развијени теоријски модел показао се као супериорнији у односу на све остале размотрене теоријске моделе (CDW-3B [5], CBDW-3B [44], BCIS-3B са водоничним функцијама [68], CB1-3B [253]). Добијени резултати су готово неосетљиви на избор таласних функција за описивање иницијалних стања мета (RHF таласне функције [107, 141–143], SZF и DZF таласне функције [107]). Утврђено је да вредност иницијалне енергије везаног стања доминантно утиче на добијене вредности ефикасних пресека, у поређењу са самом формом таласне функције

која описује основно стање мете.

Истакнимо још један незанемарљив резултат ове дисертације, а то су одређена емпиријски утврђена правила везана за конвергенцију нумеричких интеграла. Сама правила дата су у главном тексту. Ове опсервације омогућују систематично и ефикасно суочавање са проблемом нумеричке конвергенције и растућим бројем непходних интеграционих тачака, који се неизбежно јављају на довољно ниским/високим инцидентним енергијама пројектила. Без употребе ових правила неопходно рачунарско време за добијање ефикасних пресека би могло бити вишеструко увећано. Такође, у оквиру израде ове дисертације, оповргнута је пређашња претпоставка да је осцилаторни члан $f(\tau) = \tau^{i\nu\tau-1}(1 - \tau)^{-i\nu\tau}$ најодговорнији за спорије конвергирање ефикасних пресека на високим вредностима инцидентне енергије пројектила. Интегранди у изразу за ефикасне пресеке су високоосцилаторне функције по све три осе интеграције. До значајног убрзавања конвергенције не долази увећавањем броја интеграционих тачака по само једној од ових оса, већ по све три.

Добијене вредности ефикасних пресека, сем фундаменталног аспекта у оквирима квантне теорије расејања и атомске физике, истовремено налазе и бројне примене. Неке од области у којима су вредности ефикасних пресека у јон-атомским сударним процесима неопходне су: физика плазме, физика елементарних честица (при планирању експеримената), термонуклеарна фузија, астрофизика, физика транспорта тешких јона, медицинска физика (у радиотерапији пацијената оболелих од тумора), итд.

На крају, наведимо неколико праваца даљих истраживања, која планирамо да спроведемо у блиској будућности. Најпре, већ развијени BCIS-4В метод може се применити на једноструки захват електрона из вишеелектронских мета. Неопходно је моделовати вишеелектронске мете као двоелектронске (хелијуму сличне), уз употребу одговарајућих таласних функција за описивање њиховог основног стања. Ова истраживања су, у тренутку писања ове дисертације, већ започета, при чему су прелиминарни резултати врло обећавајући. Затим, BCIS-3В метод у оквиру RHF модела може се проширити, тако да се експлицитно укључи и захват у побуђена стања. На овај начин би се слагање са експериментима код He^{2+} пројектила потенцијално могло још више побољшати, а такође би се могао разматрати и захват (и очекивати добри резултати) код пројектила са наелектрисањем $Z_p > 2$. Још једно проширивање приор форме BCIS-3В метода подразумевало би разматрање захвата из *произвољног* иницијалног стања водонику сличне мете у произвољно финално стање пројектила. Даље, излазећи из оквира директне примене/проширивања постојећих метода,

наредни корак могао би бити развој пост форми BCIS-3B и BCIS-4B метода. Такође, треба напоменути да се код пост форме BCIS-4B метода очекују велики проблеми са конвергенцијом, с обзиром на присуство $1/r_{12}$ члана у пертурбационом потенцијалу (електрон-електрон интеракције). Овај члан обично имплицира да ће у пост форми, након аналитичке редукције, остати већи број интеграла за нумеричко решавање (него у приор форми). Затим, даљи напредак би, код хелијуму сличних мета, могао бити остварен разматрањем процеса *трансфер-ексцитације*. Стога, у овом погледу би се могли развити и СВ1-4B и BCIS-4B методи (за трансфер-ексцитацију), што је такође план за блиску будућност. Наравно, даљи правци истраживања нису ограничени искључиво на овде наведене. За сада ћемо се ипак задовољити истицањем ових неколико, који се већ налазе на хоризонту.

Прилог А

Оператор кинетичке енергије у релативним координатама

У овом прилогу ће бити приказани детаљи извођења израза за оператор кинетичке енергије H_0 , изражен преко релативних координата (Јакобијевих променљивих). Извођења ће бити дата засебно за случајеве трочестичних и четворочестичних проблема.

А.1 Трочестични проблеми

Оператор кинетичке енергије у случају трочестичних проблема (са водонику сличним метама) дат изразом (2.8) ће бити изражен преко Јакобијевих променљивих, најпре за улазни, а потом и за излазни канал (у случају електронског захвата).

А.1.1 Улазни канал

У улазном каналу је најпогодније искористити скуп Јакобијевих координата $\{\vec{x}, \vec{r}_i, \vec{r}_{\text{CM}}\}$, које су дате следећим изразима:

$$\vec{x} = \vec{r}_3 - \vec{r}_2, \quad (\text{A.1})$$

$$\vec{r}_i = \vec{r}_1 - \frac{M_{\text{T}}\vec{r}_2 + \vec{r}_3}{M_{\text{T}} + 1}, \quad (\text{A.2})$$

$$\vec{r}_{\text{CM}} = \frac{M_{\text{P}}\vec{r}_1 + M_{\text{T}}\vec{r}_2 + \vec{r}_3}{M_{\text{P}} + M_{\text{T}} + 1}. \quad (\text{A.3})$$

Сада након смене променљивих имамо:

$$\Psi_i^+(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3) = \tilde{\Psi}_i^+(\vec{x}, \vec{r}_i, \vec{r}_{\text{CM}}), \quad (\text{A.4})$$

одакле следи:

$$\begin{aligned} \vec{\nabla}_{r_k} \Psi_i^+ &\equiv \frac{\partial \Psi_i^+}{\partial \vec{r}_k} = \frac{\partial \tilde{\Psi}_i^+}{\partial \vec{r}_k} = \frac{\partial \vec{x}}{\partial \vec{r}_k} \frac{\partial \tilde{\Psi}_i^+}{\partial \vec{x}} + \frac{\partial \vec{r}_i}{\partial \vec{r}_k} \frac{\partial \tilde{\Psi}_i^+}{\partial \vec{r}_i} + \frac{\partial \vec{r}_{\text{CM}}}{\partial \vec{r}_k} \frac{\partial \tilde{\Psi}_i^+}{\partial \vec{r}_{\text{CM}}} \\ &= \frac{\partial \vec{x}}{\partial \vec{r}_k} \vec{\nabla}_x \tilde{\Psi}_i^+ + \frac{\partial \vec{r}_i}{\partial \vec{r}_k} \vec{\nabla}_{r_i} \tilde{\Psi}_i^+ + \frac{\partial \vec{r}_{\text{CM}}}{\partial \vec{r}_k} \vec{\nabla}_{r_{\text{CM}}} \tilde{\Psi}_i^+ \\ &= \left(\frac{\partial \vec{x}}{\partial \vec{r}_k} \vec{\nabla}_x + \frac{\partial \vec{r}_i}{\partial \vec{r}_k} \vec{\nabla}_{r_i} + \frac{\partial \vec{r}_{\text{CM}}}{\partial \vec{r}_k} \vec{\nabla}_{r_{\text{CM}}} \right) \tilde{\Psi}_i^+, \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

где је $k = 1, 2, 3$. Сада видимо да важи:

$$\begin{aligned} \vec{\nabla}_{r_k}^2 \Psi_i^+ &= (\vec{\nabla}_{r_k} \cdot \vec{\nabla}_{r_k}) \Psi_i^+ = \vec{\nabla}_{r_k} \cdot (\vec{\nabla}_{r_k} \Psi_i^+) \\ &= \frac{\partial \vec{x}}{\partial \vec{r}_k} \vec{\nabla}_x \cdot \left[\left(\frac{\partial \vec{x}}{\partial \vec{r}_k} \vec{\nabla}_x + \frac{\partial \vec{r}_i}{\partial \vec{r}_k} \vec{\nabla}_{r_i} + \frac{\partial \vec{r}_{\text{CM}}}{\partial \vec{r}_k} \vec{\nabla}_{r_{\text{CM}}} \right) \tilde{\Psi}_i^+ \right] \\ &+ \frac{\partial \vec{r}_i}{\partial \vec{r}_k} \vec{\nabla}_{r_i} \cdot \left[\left(\frac{\partial \vec{x}}{\partial \vec{r}_k} \vec{\nabla}_x + \frac{\partial \vec{r}_i}{\partial \vec{r}_k} \vec{\nabla}_{r_i} + \frac{\partial \vec{r}_{\text{CM}}}{\partial \vec{r}_k} \vec{\nabla}_{r_{\text{CM}}} \right) \tilde{\Psi}_i^+ \right] \\ &+ \frac{\partial \vec{r}_{\text{CM}}}{\partial \vec{r}_k} \vec{\nabla}_{r_{\text{CM}}} \cdot \left[\left(\frac{\partial \vec{x}}{\partial \vec{r}_k} \vec{\nabla}_x + \frac{\partial \vec{r}_i}{\partial \vec{r}_k} \vec{\nabla}_{r_i} + \frac{\partial \vec{r}_{\text{CM}}}{\partial \vec{r}_k} \vec{\nabla}_{r_{\text{CM}}} \right) \tilde{\Psi}_i^+ \right] \\ &= \left(\frac{\partial \vec{x}}{\partial \vec{r}_k} \vec{\nabla}_x + \frac{\partial \vec{r}_i}{\partial \vec{r}_k} \vec{\nabla}_{r_i} + \frac{\partial \vec{r}_{\text{CM}}}{\partial \vec{r}_k} \vec{\nabla}_{r_{\text{CM}}} \right) \cdot \left[\left(\frac{\partial \vec{x}}{\partial \vec{r}_k} \vec{\nabla}_x + \frac{\partial \vec{r}_i}{\partial \vec{r}_k} \vec{\nabla}_{r_i} + \frac{\partial \vec{r}_{\text{CM}}}{\partial \vec{r}_k} \vec{\nabla}_{r_{\text{CM}}} \right) \tilde{\Psi}_i^+ \right] \\ &= \left(\frac{\partial \vec{x}}{\partial \vec{r}_k} \vec{\nabla}_x + \frac{\partial \vec{r}_i}{\partial \vec{r}_k} \vec{\nabla}_{r_i} + \frac{\partial \vec{r}_{\text{CM}}}{\partial \vec{r}_k} \vec{\nabla}_{r_{\text{CM}}} \right)^2 \tilde{\Psi}_i^+. \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

Користећи изразе (A.1), (A.2), (A.3), (A.5) и (A.6) лако долазимо до следећих израза:

$$\vec{\nabla}_{r_1} = \vec{\nabla}_{r_i} + \frac{M_{\text{P}}}{M_{\text{P}} + M_{\text{T}} + 1} \vec{\nabla}_{r_{\text{CM}}}, \quad (\text{A.7})$$

$$\vec{\nabla}_{r_2} = -\vec{\nabla}_x - \frac{M_{\text{T}}}{M_{\text{T}} + 1} \vec{\nabla}_{r_i} + \frac{M_{\text{T}}}{M_{\text{P}} + M_{\text{T}} + 1} \vec{\nabla}_{r_{\text{CM}}}, \quad (\text{A.8})$$

$$\vec{\nabla}_{r_3} = \vec{\nabla}_x - \frac{1}{M_{\text{T}} + 1} \vec{\nabla}_{r_i} + \frac{1}{M_{\text{P}} + M_{\text{T}} + 1} \vec{\nabla}_{r_{\text{CM}}}. \quad (\text{A.9})$$

Заменом израза (А.7), (А.8) и (А.9) у израз (2.8), за оператор кинетичке енергије H_0 изражен у новим координатама добијамо:

$$\begin{aligned}
 H_0 &= -\frac{1}{2M_P} \left(\vec{\nabla}_{r_i} + \frac{M_P}{M_P + M_T + 1} \vec{\nabla}_{r_{CM}} \right)^2 \\
 &- \frac{1}{2M_T} \left(-\vec{\nabla}_x - \frac{M_T}{M_T + 1} \vec{\nabla}_{r_i} + \frac{M_T}{M_P + M_T + 1} \vec{\nabla}_{r_{CM}} \right)^2 \\
 &- \frac{1}{2} \left(\vec{\nabla}_x - \frac{1}{M_T + 1} \vec{\nabla}_{r_i} + \frac{1}{M_P + M_T + 1} \vec{\nabla}_{r_{CM}} \right)^2 \\
 &= -\frac{1}{2M_P} \vec{\nabla}_{r_i}^2 - \frac{1}{2(M_P + M_T + 1)^2} \vec{\nabla}_{r_{CM}}^2 - \frac{1}{M_P + M_T + 1} \vec{\nabla}_{r_i} \cdot \vec{\nabla}_{r_{CM}} - \frac{1}{2M_T} \vec{\nabla}_x^2 \\
 &- \frac{1}{2(M_T + 1)^2} \vec{\nabla}_{r_i}^2 - \frac{1}{2(M_P + M_T + 1)^2} \vec{\nabla}_{r_{CM}}^2 - \frac{1}{M_T + 1} \vec{\nabla}_x \cdot \vec{\nabla}_{r_i} \\
 &+ \frac{1}{M_P + M_T + 1} \vec{\nabla}_x \cdot \vec{\nabla}_{r_{CM}} + \frac{M_T}{(M_T + 1)(M_P + M_T + 1)} \vec{\nabla}_{r_i} \cdot \vec{\nabla}_{r_{CM}} - \frac{1}{2} \vec{\nabla}_x^2 \\
 &- \frac{1}{2(M_T + 1)^2} \vec{\nabla}_{r_i}^2 - \frac{1}{2(M_P + M_T + 1)^2} \vec{\nabla}_{r_{CM}}^2 + \frac{1}{M_T + 1} \vec{\nabla}_x \cdot \vec{\nabla}_{r_i} \\
 &- \frac{1}{M_P + M_T + 1} \vec{\nabla}_x \cdot \vec{\nabla}_{r_{CM}} + \frac{1}{(M_T + 1)(M_P + M_T + 1)} \vec{\nabla}_{r_i} \cdot \vec{\nabla}_{r_{CM}} \\
 &= -\frac{1}{2} \frac{(M_T + 1)^2 + M_P M_T + M_P}{M_P (M_T + 1)^2} \vec{\nabla}_{r_i}^2 - \frac{1}{2} \frac{M_T + 1}{M_T} \vec{\nabla}_x^2 - \frac{1}{2} \frac{M_P + M_T + 1}{(M_P + M_T + 1)^2} \vec{\nabla}_{r_{CM}}^2 \\
 &+ \frac{M_T + 1 - (M_T + 1)}{(M_T + 1)(M_P + M_T + 1)} \vec{\nabla}_{r_i} \cdot \vec{\nabla}_{r_{CM}} \\
 &= -\frac{1}{2} \frac{(M_T + 1)^2 + M_P (M_T + 1)}{M_P (M_T + 1)^2} \vec{\nabla}_{r_i}^2 - \frac{1}{2} \frac{M_T}{M_T + 1} \vec{\nabla}_x^2 - \frac{1}{2(M_P + M_T + 1)} \vec{\nabla}_{r_{CM}}^2 \\
 &= -\frac{1}{2} \frac{M_P (M_T + 1)}{M_P + M_T + 1} \vec{\nabla}_{r_i}^2 - \frac{1}{2} \frac{M_T}{M_T + 1} \vec{\nabla}_x^2 - \frac{1}{2(M_P + M_T + 1)} \vec{\nabla}_{r_{CM}}^2 \\
 &= -\frac{1}{2\mu_i} \vec{\nabla}_{r_i}^2 - \frac{1}{2b} \vec{\nabla}_x^2 - \frac{1}{2M} \vec{\nabla}_{r_{CM}}^2, \tag{A.10}
 \end{aligned}$$

где су:

$$\mu_i = \frac{M_P (M_T + 1)}{M_P + M_T + 1}, \quad b = \frac{M_T}{M_T + 1}, \quad M = M_P + M_T + 1. \tag{A.11}$$

Као што се може приметити, M представља укупну масу читавог система.

А.1.2 Излазни канал

У излазном каналу је најпогодније искористити скуп Јакобијевих координата $\{\vec{s}, \vec{r}_f, \vec{r}_{\text{CM}}\}$, које су дате следећим изразима:

$$\vec{s} = \vec{r}_3 - \vec{r}_1, \quad (\text{A.12})$$

$$\vec{r}_f = \vec{r}_2 - \frac{M_{\text{P}}\vec{r}_1 + \vec{r}_3}{M_{\text{P}} + 1}, \quad (\text{A.13})$$

$$\vec{r}_{\text{CM}} = \frac{M_{\text{P}}\vec{r}_1 + M_{\text{T}}\vec{r}_2 + \vec{r}_3}{M_{\text{P}} + M_{\text{T}} + 1}. \quad (\text{A.14})$$

Након смене променљивих имамо:

$$\Psi_f^-(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3) = \tilde{\Psi}_f^-(\vec{s}, \vec{r}_f, \vec{r}_{\text{CM}}), \quad (\text{A.15})$$

одакле следи:

$$\vec{\nabla}_{r_k} \Psi_f^- = \left(\frac{\partial \vec{s}}{\partial \vec{r}_k} \vec{\nabla}_s + \frac{\partial \vec{r}_f}{\partial \vec{r}_k} \vec{\nabla}_{r_f} + \frac{\partial \vec{r}_{\text{CM}}}{\partial \vec{r}_k} \vec{\nabla}_{r_{\text{CM}}} \right) \tilde{\Psi}_f^-, \quad (\text{A.16})$$

$$\vec{\nabla}_{r_k}^2 \Psi_f^- = \left(\frac{\partial \vec{s}}{\partial \vec{r}_k} \vec{\nabla}_s + \frac{\partial \vec{r}_f}{\partial \vec{r}_k} \vec{\nabla}_{r_f} + \frac{\partial \vec{r}_{\text{CM}}}{\partial \vec{r}_k} \vec{\nabla}_{r_{\text{CM}}} \right)^2 \tilde{\Psi}_f^-, \quad (\text{A.17})$$

где је $k = 1, 2, 3$.

Користећи сада изразе (А.12), (А.13), (А.14), (А.16) и (А.17) лако долазимо до следећих израза:

$$\vec{\nabla}_{r_1} = -\vec{\nabla}_s - \frac{M_{\text{P}}}{M_{\text{P}} + 1} \vec{\nabla}_{r_f} + \frac{M_{\text{P}}}{M_{\text{P}} + M_{\text{T}} + 1} \vec{\nabla}_{r_{\text{CM}}}, \quad (\text{A.18})$$

$$\vec{\nabla}_{r_2} = \vec{\nabla}_{r_f} + \frac{M_{\text{T}}}{M_{\text{P}} + M_{\text{T}} + 1} \vec{\nabla}_{r_{\text{CM}}}, \quad (\text{A.19})$$

$$\vec{\nabla}_{r_3} = \vec{\nabla}_s - \frac{1}{M_{\text{P}} + 1} \vec{\nabla}_{r_f} + \frac{1}{M_{\text{P}} + M_{\text{T}} + 1} \vec{\nabla}_{r_{\text{CM}}}, \quad (\text{A.20})$$

којима су градијенти по старим координатама $\{\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3\}$ изражени преко градијената по новим координатама $\{\vec{s}, \vec{r}_f, \vec{r}_{\text{CM}}\}$. Заменом израза (А.18), (А.19) и (А.20)

у израз (2.8), добијамо оператор кинетичке енергије H_0 изражен у новим координатама у излазном каналу:

$$\begin{aligned}
 H_0 &= -\frac{1}{2M_P} \left(-\vec{\nabla}_s - \frac{M_P}{M_P + 1} \vec{\nabla}_{r_f} + \frac{M_P}{M_P + M_T + 1} \vec{\nabla}_{r_{CM}} \right)^2 \\
 &- \frac{1}{2M_T} \left(\vec{\nabla}_{r_f} + \frac{M_T}{M_P + M_T + 1} \vec{\nabla}_{r_{CM}} \right)^2 \\
 &- \frac{1}{2} \left(\vec{\nabla}_s - \frac{1}{M_P + 1} \vec{\nabla}_{r_f} + \frac{1}{M_P + M_T + 1} \vec{\nabla}_{r_{CM}} \right)^2 \\
 &= -\frac{1}{2\mu_f} \vec{\nabla}_{r_f}^2 - \frac{1}{2a} \vec{\nabla}_s^2 - \frac{1}{2M} \vec{\nabla}_{r_{CM}}^2,
 \end{aligned} \tag{A.21}$$

где је укупна маса система M дата изразом (A.11), док су:

$$\mu_f = \frac{(M_P + 1)M_T}{M_P + M_T + 1}, \quad a = \frac{M_P}{M_P + 1}. \tag{A.22}$$

A.2 Четворочестични проблеми

Оператор кинетичке енергије у случају четворочестичних проблема (са хелијуму сличним метама) дат изразом (2.84) ће бити изражен преко Јакобијевих променљивих, најпре за улазни, а потом и за излазни канал (у случају једноструког електронског захвата).

A.2.1 Улазни канал

У улазном каналу је најпогодније искористити скуп Јакобијевих координата $\{\vec{x}_1, \vec{x}_2, \vec{r}_i, \vec{r}_{CM}\}$, које су дате следећим изразима:

$$\vec{x}_1 = \vec{r}_3 - \vec{r}_2, \tag{A.23}$$

$$\vec{x}_2 = \vec{r}_4 - \vec{r}_2, \tag{A.24}$$

$$\vec{r}_i = \vec{r}_1 - \frac{M_T \vec{r}_2 + \vec{r}_3 + \vec{r}_4}{M_T + 2}, \tag{A.25}$$

$$\vec{r}_{CM} = \frac{M_P \vec{r}_1 + M_T \vec{r}_2 + \vec{r}_3 + \vec{r}_4}{M_P + M_T + 2}. \tag{A.26}$$

Након смене променљивих имамо:

$$\Psi_i^+(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, \vec{r}_4) = \tilde{\Psi}_i^+(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \vec{r}_i, \vec{r}_{\text{CM}}), \quad (\text{A.27})$$

одакле следи:

$$\vec{\nabla}_{r_k} \Psi_i^+ = \left(\frac{\partial \vec{x}_1}{\partial \vec{r}_k} \vec{\nabla}_{x_1} + \frac{\partial \vec{x}_2}{\partial \vec{r}_k} \vec{\nabla}_{x_2} + \frac{\partial \vec{r}_i}{\partial \vec{r}_k} \vec{\nabla}_{r_i} + \frac{\partial \vec{r}_{\text{CM}}}{\partial \vec{r}_k} \vec{\nabla}_{r_{\text{CM}}} \right) \tilde{\Psi}_i^+, \quad (\text{A.28})$$

$$\vec{\nabla}_{r_k}^2 \Psi_i^+ = \left(\frac{\partial \vec{x}_1}{\partial \vec{r}_k} \vec{\nabla}_{x_1} + \frac{\partial \vec{x}_2}{\partial \vec{r}_k} \vec{\nabla}_{x_2} + \frac{\partial \vec{r}_i}{\partial \vec{r}_k} \vec{\nabla}_{r_i} + \frac{\partial \vec{r}_{\text{CM}}}{\partial \vec{r}_k} \vec{\nabla}_{r_{\text{CM}}} \right)^2 \tilde{\Psi}_i^+, \quad (\text{A.29})$$

где је $k = 1, 2, 3, 4$. Користећи изразе (A.23), (A.24), (A.25), (A.26), (A.28) и (A.29) лако долазимо до следећих израза:

$$\vec{\nabla}_{r_1} = \vec{\nabla}_{r_i} + \frac{M_{\text{P}}}{M_{\text{P}} + M_{\text{T}} + 2} \vec{\nabla}_{r_{\text{CM}}}, \quad (\text{A.30})$$

$$\vec{\nabla}_{r_2} = -\vec{\nabla}_{x_1} - \vec{\nabla}_{x_2} - \frac{M_{\text{T}}}{M_{\text{T}} + 2} \vec{\nabla}_{r_i} + \frac{M_{\text{T}}}{M_{\text{P}} + M_{\text{T}} + 2} \vec{\nabla}_{r_{\text{CM}}}, \quad (\text{A.31})$$

$$\vec{\nabla}_{r_3} = \vec{\nabla}_{x_1} - \frac{1}{M_{\text{T}} + 2} \vec{\nabla}_{r_i} + \frac{1}{M_{\text{P}} + M_{\text{T}} + 2} \vec{\nabla}_{r_{\text{CM}}}, \quad (\text{A.32})$$

$$\vec{\nabla}_{r_4} = \vec{\nabla}_{x_2} - \frac{1}{M_{\text{T}} + 2} \vec{\nabla}_{r_i} + \frac{1}{M_{\text{P}} + M_{\text{T}} + 2} \vec{\nabla}_{r_{\text{CM}}}. \quad (\text{A.33})$$

Заменом израза (A.30), (A.31), (A.32) и (A.33) у израз (2.84), за оператор кинетичке енергије H_0 изражен у новим координатама добијамо:

$$\begin{aligned} H_0 &= -\frac{1}{2M_{\text{P}}} \left(\vec{\nabla}_{r_i} + \frac{M_{\text{P}}}{M_{\text{P}} + M_{\text{T}} + 2} \vec{\nabla}_{r_{\text{CM}}} \right)^2 \\ &- \frac{1}{2M_{\text{T}}} \left(-\vec{\nabla}_{x_1} - \vec{\nabla}_{x_2} - \frac{M_{\text{T}}}{M_{\text{T}} + 2} \vec{\nabla}_{r_i} + \frac{M_{\text{T}}}{M_{\text{P}} + M_{\text{T}} + 2} \vec{\nabla}_{r_{\text{CM}}} \right)^2 \\ &- \frac{1}{2} \left(\vec{\nabla}_{x_1} - \frac{1}{M_{\text{T}} + 2} \vec{\nabla}_{r_i} + \frac{1}{M_{\text{P}} + M_{\text{T}} + 2} \vec{\nabla}_{r_{\text{CM}}} \right)^2 \\ &- \frac{1}{2} \left(\vec{\nabla}_{x_2} - \frac{1}{M_{\text{T}} + 2} \vec{\nabla}_{r_i} + \frac{1}{M_{\text{P}} + M_{\text{T}} + 2} \vec{\nabla}_{r_{\text{CM}}} \right)^2 \\ &= -\frac{1}{2\mu_i} \vec{\nabla}_{r_i}^2 - \frac{1}{2b} \vec{\nabla}_{x_1}^2 - \frac{1}{2b} \vec{\nabla}_{x_2}^2 - \frac{1}{M_{\text{T}}} \vec{\nabla}_{x_1} \cdot \vec{\nabla}_{x_2} - \frac{1}{2M} \vec{\nabla}_{r_{\text{CM}}}^2, \end{aligned} \quad (\text{A.34})$$

где су:

$$\mu_i = \frac{M_P(M_T + 2)}{M_P + M_T + 2}, \quad b = \frac{M_T}{M_T + 1}, \quad M = M_P + M_T + 2. \quad (\text{A.35})$$

И овде M представља укупну масу читавог система.

А.2.2 Излазни канал

У излазном каналу је најпогодније искористити скуп Јакобијевих координата $\{\vec{s}_1, \vec{x}_2, \vec{r}_f, \vec{r}_{\text{CM}}\}$, које су дате следећим изразима:

$$\vec{s}_1 = \vec{r}_3 - \vec{r}_1, \quad (\text{A.36})$$

$$\vec{x}_2 = \vec{r}_4 - \vec{r}_2, \quad (\text{A.37})$$

$$\vec{r}_f = \frac{M_T \vec{r}_2 + \vec{r}_4}{M_T + 1} - \frac{M_P \vec{r}_1 + \vec{r}_3}{M_P + 1}, \quad (\text{A.38})$$

$$\vec{r}_{\text{CM}} = \frac{M_P \vec{r}_1 + M_T \vec{r}_2 + \vec{r}_3 + \vec{r}_4}{M_P + M_T + 2}. \quad (\text{A.39})$$

Након смене променљивих имамо:

$$\Psi_f^-(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, \vec{r}_4) = \tilde{\Psi}_f^-(\vec{s}_1, \vec{x}_2, \vec{r}_f, \vec{r}_{\text{CM}}), \quad (\text{A.40})$$

одакле следи:

$$\vec{\nabla}_{r_k} \Psi_f^- = \left(\frac{\partial \vec{s}_1}{\partial \vec{r}_k} \vec{\nabla}_{s_1} + \frac{\partial \vec{x}_2}{\partial \vec{r}_k} \vec{\nabla}_{x_2} + \frac{\partial \vec{r}_f}{\partial \vec{r}_k} \vec{\nabla}_{r_f} + \frac{\partial \vec{r}_{\text{CM}}}{\partial \vec{r}_k} \vec{\nabla}_{r_{\text{CM}}} \right) \tilde{\Psi}_f^-, \quad (\text{A.41})$$

$$\vec{\nabla}_{r_k}^2 \Psi_f^- = \left(\frac{\partial \vec{s}_1}{\partial \vec{r}_k} \vec{\nabla}_{s_1} + \frac{\partial \vec{x}_2}{\partial \vec{r}_k} \vec{\nabla}_{x_2} + \frac{\partial \vec{r}_f}{\partial \vec{r}_k} \vec{\nabla}_{r_f} + \frac{\partial \vec{r}_{\text{CM}}}{\partial \vec{r}_k} \vec{\nabla}_{r_{\text{CM}}} \right)^2 \tilde{\Psi}_f^-, \quad (\text{A.42})$$

где је $k = 1, 2, 3, 4$.

Користећи сада изразе (А.36), (А.37), (А.38), (А.39), (А.41) и (А.42) лако долазимо до следећих израза:

$$\vec{\nabla}_{r_1} = -\vec{\nabla}_{s_1} - \frac{M_P}{M_P + 1} \vec{\nabla}_{r_f} + \frac{M_P}{M_P + M_T + 2} \vec{\nabla}_{r_{\text{CM}}}, \quad (\text{A.43})$$

$$\vec{\nabla}_{r_2} = -\vec{\nabla}_{x_2} + \frac{M_T}{M_T + 1} \vec{\nabla}_{r_f} + \frac{M_T}{M_P + M_T + 2} \vec{\nabla}_{r_{\text{CM}}}, \quad (\text{A.44})$$

$$\vec{\nabla}_{r_3} = \vec{\nabla}_{s_1} - \frac{1}{M_P + 1} \vec{\nabla}_{r_f} + \frac{1}{M_P + M_T + 2} \vec{\nabla}_{r_{\text{CM}}}, \quad (\text{A.45})$$

$$\vec{\nabla}_{r_4} = \vec{\nabla}_{x_2} + \frac{1}{M_T + 1} \vec{\nabla}_{r_f} + \frac{1}{M_P + M_T + 2} \vec{\nabla}_{r_{\text{CM}}}. \quad (\text{A.46})$$

Заменом израза (А.43), (А.44), (А.45) и (А.46) у израз (2.84), добијамо оператор кинетичке енергије H_0 изражен у новим координатама у излазном каналу:

$$\begin{aligned} H_0 &= -\frac{1}{2M_P} \left(-\vec{\nabla}_{s_1} - \frac{M_P}{M_P + 1} \vec{\nabla}_{r_f} + \frac{M_P}{M_P + M_T + 2} \vec{\nabla}_{r_{\text{CM}}} \right)^2 \\ &\quad - \frac{1}{2M_T} \left(-\vec{\nabla}_{x_2} + \frac{M_T}{M_T + 1} \vec{\nabla}_{r_f} + \frac{M_T}{M_P + M_T + 2} \vec{\nabla}_{r_{\text{CM}}} \right)^2 \\ &\quad - \frac{1}{2} \left(\vec{\nabla}_{s_1} - \frac{1}{M_P + 1} \vec{\nabla}_{r_f} + \frac{1}{M_P + M_T + 2} \vec{\nabla}_{r_{\text{CM}}} \right)^2 \\ &\quad - \frac{1}{2} \left(\vec{\nabla}_{x_2} + \frac{1}{M_T + 1} \vec{\nabla}_{r_f} + \frac{1}{M_P + M_T + 2} \vec{\nabla}_{r_{\text{CM}}} \right)^2 \\ &= -\frac{1}{2\mu_f} \vec{\nabla}_{r_f}^2 - \frac{1}{2a} \vec{\nabla}_{s_1}^2 - \frac{1}{2b} \vec{\nabla}_{x_2}^2 - \frac{1}{2M} \vec{\nabla}_{r_{\text{CM}}}^2, \end{aligned} \quad (\text{A.47})$$

где су b и M дати изразом (А.35), док су:

$$\mu_f = \frac{(M_P + 1)(M_T + 1)}{M_P + M_T + 2}, \quad a = \frac{M_P}{M_P + 1}. \quad (\text{A.48})$$

Прилог Б

Таласне функције у Кулоновом потенцијалу

Долазеће (са ознаком „+“) и одлазеће (са ознаком „–“) таласне функције честице у привлачном Кулоновом потенцијалу $U = -\alpha/r$, $\alpha > 0$ имају облик (видети референце [93, 261]):

$$\Psi_k^\pm = N^\pm(\nu) e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} {}_1F_1(\pm i\nu, 1, \pm ikr - i\vec{k}\cdot\vec{r}), \quad (\text{Б.1})$$

где су:

$$N^\pm(\nu) = e^{\pi\nu/2} \Gamma(1 \mp i\nu), \quad \nu = \frac{\mu\alpha}{k}, \quad (\text{Б.2})$$

при чему је μ маса честице која се расејава, \vec{r} њен вектор положаја, а \vec{k} њен таласни вектор. Функција ${}_1F_1(a, c, z)$ представља Кумерову конфлуентну (дегенерисану) хипергеометријску функцију, док је $\Gamma(z)$ гама функција. Асимптотско понашање таласне функције (Б.1) дато је следећим изразом:

$$\Psi_k^\pm \xrightarrow{r \rightarrow \infty} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r} \mp i\nu \ln(kr \mp \vec{k}\cdot\vec{r})}. \quad (\text{Б.3})$$

Долазеће (са ознаком „+“) и одлазеће (са ознаком „–“) таласне функције честице у одбојном Кулоновом потенцијалу $U = \alpha/r$, $\alpha > 0$ имају облик:

$$\Psi_k^\pm = \mathcal{N}^\pm(\nu) e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} {}_1F_1(\mp i\nu, 1, \pm ikr - i\vec{k}\cdot\vec{r}), \quad (\text{Б.4})$$

где је:

$$\mathcal{N}^\pm(\nu) = e^{-\pi\nu/2} \Gamma(1 \pm i\nu), \quad (\text{Б.5})$$

док остале ознаке имају исти смисао као и у случају привлачног потенцијала. Асимптотско понашање таласне функције (Б.4) дато је следећим изразом:

$$\Psi_k^\pm \xrightarrow{r \rightarrow \infty} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r} \pm i\nu \ln(kr \mp \vec{k} \cdot \vec{r})}. \quad (\text{Б.6})$$

Таласне функције (Б.1) и (Б.4) називају се *Кулонови таласи*. Нормиране су на делта функцију (као и равни таласи):

$$\langle \Psi_{k'}^\pm | \Psi_k^\pm \rangle = (2\pi)^3 \delta(\vec{k}' - \vec{k}). \quad (\text{Б.7})$$

Нормализациона константа је одабрана тако да одговарајући равни талас има јединичну амплитуду.

Прилог В

Решавање диференцијалних једначина за изобличене таласе

У овом прилогу је изложен начин на који се решавају диференцијалне једначине за таласне функције ψ_i^+ и ψ_f^- , које се јављају у изразима за изобличене таласе χ_i^+ и ξ_f^- , респективно. Излагање за улазни канал код четворочестичних проблема преузето је из референци [27, 93] и допуњено детаљном дискусијом у случају излазног канала (код четворочестичних проблема), као и проширено аналогним разматрањима код трочестичних проблема. Природно, најпре ћемо изложити случај трочестичних проблема.

В.1 Трочестични проблеми

В.1.1 Улазни канал

У улазном каналу је неопходно решити једначину (2.225), која експлицитно записана има следећи облик:

$$\left(\frac{k_i^2}{2\mu_i} + \frac{1}{2\mu_f} \vec{\nabla}_{r_f}^2 + \frac{1}{2a} \vec{\nabla}_s^2 - \frac{Z_P Z_T}{R} + \frac{Z_P}{s} \right) \psi_i^+ = 0, \quad (\text{В.1})$$

при чему смо искористили једначине (2.27), (2.33) и (2.48), док су величине μ_i , μ_f и a дате једначинама (2.23) и (2.49), респективно. Оператор кинетичке енергије H_0 је овде записан у Јакобијевим координатама $\{\vec{r}_f, \vec{s}\}$, датим једначинама (2.10) и (2.46).

Коришћењем еиконалне апроксимације је $\vec{r}_f \approx -\vec{R}$, те се у једначини (В.1) може извршити раздвајање променљивих, тако да се таласна функција ψ_i^+ може записати у следећем облику:

$$\psi_i^+ = C_i^+ \mathcal{F}_f^+(\vec{r}_f) \mathcal{F}^+(\vec{s}), \quad (\text{В.2})$$

где је C_i^+ константа коју треба одредити, а одређује из услова да изобличени талас поседује коректну асимптотику.

Сада се једначина (В.1) рашчлањује на две диференцијалне једначине:

$$\left(-\frac{1}{2\mu_f}\vec{\nabla}_{r_f}^2 + \frac{Z_P Z_T}{r_f} - \frac{p_f^2}{2\mu_f}\right) \mathcal{F}_f^+(\vec{r}_f) = 0, \quad (\text{В.3})$$

$$\left(-\frac{1}{2a}\vec{\nabla}_s^2 - \frac{Z_P}{s} - \frac{p^2}{2a}\right) \mathcal{F}^+(\vec{s}) = 0, \quad (\text{В.4})$$

при чему смо векторе \vec{p}_f и \vec{p} увели на следећи начин:

$$\frac{p_f^2}{2\mu_f} + \frac{p^2}{2a} = \frac{k_i^2}{2\mu_i}, \quad (\text{В.5})$$

$$\vec{p}_f \cdot \vec{r}_f + \vec{p} \cdot \vec{s} = \vec{k}_i \cdot \vec{r}_i. \quad (\text{В.6})$$

Једначина (В.6) је неопходна да би изобличени талас имао коректно асимптотско понашање. На основу Прилога Б, решења једначина (В.3) и (В.4) су дата следећим изразима:

$$\mathcal{F}_f^+(\vec{r}_f) = \mathcal{N}^+(\nu) e^{i\vec{p}_f \cdot \vec{r}_f} {}_1F_1(-i\nu, 1, ip_f r_f - i\vec{p}_f \cdot \vec{r}_f), \quad (\text{В.7})$$

$$\mathcal{F}^+(\vec{s}) = \mathcal{N}^+(\nu_P) e^{i\vec{p} \cdot \vec{s}} {}_1F_1(i\nu_P, 1, ips - i\vec{p} \cdot \vec{s}), \quad (\text{В.8})$$

где су уведене следеће ознаке:

$$\nu = \frac{\mu_f Z_P Z_T}{p_f}, \quad \nu_P = \frac{a Z_P}{p}. \quad (\text{В.9})$$

Важење следећих релација:

$$\vec{r}_i = -b\vec{r}_f - \frac{a}{\mu_i}\vec{s}, \quad \vec{r}_f = -a\vec{r}_i - \frac{b}{\mu_f}\vec{x}, \quad (\text{В.10})$$

се једноставно проверава на основу дефинишућих релација за све величине у њима (једначине (2.10), (2.19), (2.23), (2.46) и (2.49)). На основу релација (В.6)

и (В.10), узимањем у обзир да је $M_{P,T} \gg 1$, лако се може показати да важи:

$$\vec{p}_f = -b\vec{k}_i \approx -\vec{k}_i, \quad (\text{В.11})$$

$$\vec{p} = -\frac{a}{\mu_i}\vec{k}_i \approx -\vec{v}, \quad (\text{В.12})$$

при чему изрази (В.11) и (В.12) задовољавају и релацију (В.5). Следи (поново узимајући у обзир да је $M_{P,T} \gg 1$):

$$\nu \approx \frac{Z_P Z_T}{v}, \quad \nu_P \approx \frac{Z_P}{v}. \quad (\text{В.13})$$

Сада је могуће одредити константу C_i^+ из захтева да изобличени талас има коректну асимптотику:

$$C_i^+ e^{i\nu \ln(p_f r_f - \vec{p}_f \cdot \vec{r}_f) - i\nu_P \ln(ps - \vec{p} \cdot \vec{s})} \xrightarrow{r_i \rightarrow \infty} e^{i\nu_i \ln(k_i r_i - \vec{k}_i \cdot \vec{r}_i)}, \quad (\text{В.14})$$

где је ν_i дато изразом (2.44). Сада се на основу израза (В.14), коришћењем израза (В.11) и (В.12), као и израза $\vec{k}_i = \mu_i \vec{v}$, једноставно налази тражена константа C_i^+ :

$$C_i^+ = e^{i\nu_i \ln(k_i r_i - \vec{k}_i \cdot \vec{r}_i) - i\nu \ln(p_f r_f - \vec{p}_f \cdot \vec{r}_f) + i\nu_P \ln(ps - \vec{p} \cdot \vec{s})} \approx \mu_i^{-i\nu_P}. \quad (\text{В.15})$$

Коначно, долазимо до израза:

$$\begin{aligned} \psi_i^+ &= \mu_i^{-i\nu_P} \mathcal{N}^+(\nu) N^+(\nu_P) e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_i} {}_1F_1(-i\nu, 1, ik_i r_f + i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_f) \\ &\times {}_1F_1(i\nu_P, 1, i\nu s + i\vec{v} \cdot \vec{s}). \end{aligned} \quad (\text{В.16})$$

Коришћењем еиконалне апроксимације $\vec{r}_f \approx -\vec{r}_i$, коначан облик функције ψ_i^+ дат је следећим изразом:

$$\begin{aligned} \psi_i^+ &= \mu_i^{-i\nu_P} \mathcal{N}^+(\nu) N^+(\nu_P) e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_i} {}_1F_1(-i\nu, 1, ik_i r_i - i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_i) \\ &\times {}_1F_1(i\nu_P, 1, i\nu s + i\vec{v} \cdot \vec{s}). \end{aligned} \quad (\text{В.17})$$

В.1.2 Излазни канал

У излазном каналу је процедура аналогна улазном. Овде је неопходно решити једначину (2.239), која се може експлицитно записати у следећем облику:

$$\left(\frac{k_f^2}{2\mu_f} + \frac{1}{2\mu_i} \vec{\nabla}_{r_i}^2 + \frac{1}{2b} \vec{\nabla}_x^2 - \frac{Z_P Z_T}{R} + \frac{Z_T}{x} \right) \psi_f^- = 0. \quad (\text{B.18})$$

Оператор кинетичке енергије H_0 је овде записан у Јакобијевим координатама $\{\vec{r}_i, \vec{x}\}$, дефинисаним једначинама (2.10) и (2.19). Коришћењем еиконалне апроксимације $\vec{r}_i \approx \vec{R}$, у једначини (B.18) се може извршити раздвајање променљивих, тако да се таласна функција ψ_f^- може записати у следећем облику:

$$\psi_f^- = C_f^- \mathcal{F}_i^-(\vec{r}_i) \mathcal{F}^-(\vec{x}), \quad (\text{B.19})$$

где је C_f^- константа коју треба одредити, а која се одређује из услова да изобличени талас поседује коректну асимптотику.

Сада се једначина (B.18) рапчлањује на две диференцијалне једначине:

$$\left(-\frac{1}{2\mu_i} \vec{\nabla}_{r_i}^2 + \frac{Z_P Z_T}{r_i} - \frac{p_i^2}{2\mu_i} \right) \mathcal{F}_i^-(\vec{r}_i) = 0, \quad (\text{B.20})$$

$$\left(-\frac{1}{2b} \vec{\nabla}_x^2 - \frac{Z_T}{x} - \frac{p^2}{2b} \right) \mathcal{F}^-(\vec{x}) = 0, \quad (\text{B.21})$$

при чему смо векторе \vec{p}_i и \vec{p} увели на следећи начин:

$$\frac{p_i^2}{2\mu_i} + \frac{p^2}{2b} = \frac{k_f^2}{2\mu_f}, \quad (\text{B.22})$$

$$\vec{p}_i \cdot \vec{r}_i + \vec{p} \cdot \vec{x} = -\vec{k}_f \cdot \vec{r}_f, \quad (\text{B.23})$$

Једначина (B.23) је поново неопходна да би изобличени талас имао коректно асимптотско понашање. На основу Прилога Б, решења једначина (B.20) и (B.21) су дата следећим изразима:

$$\mathcal{F}_i^-(\vec{r}_i) = \mathcal{N}^-(\nu) e^{i\vec{p}_i \cdot \vec{r}_i} {}_1F_1(i\nu, 1, -ip_i r_i - i\vec{p}_i \cdot \vec{r}_i), \quad (\text{B.24})$$

$$\mathcal{F}^-(\vec{x}) = \mathcal{N}^-(\nu_T) e^{i\vec{p} \cdot \vec{x}} {}_1F_1(-i\nu_T, 1, -ipx - i\vec{p} \cdot \vec{x}), \quad (\text{B.25})$$

где је:

$$\nu_{\text{T}} \approx \frac{Z_{\text{T}}}{v}. \quad (\text{B.26})$$

На основу идентичног разматрања као и у случају улазног канала лако се може показати да важи:

$$\vec{p}_i \approx \vec{k}_f, \quad (\text{B.27})$$

$$\vec{p} \approx \vec{v}. \quad (\text{B.28})$$

Константу C_f^- одређујемо из услова да изобличени талас има коректан асимптотски облик (на начин аналоган случају улазног канала):

$$C_f^- \approx \mu_f^{i\nu_{\text{T}}}. \quad (\text{B.29})$$

Коначно, за функцију ψ_f^- добијамо:

$$\begin{aligned} \psi_f^- &= \mu_f^{i\nu_{\text{T}}} \mathcal{N}^-(\nu) N^-(\nu_{\text{T}}) e^{-i\vec{k}_f \cdot \vec{r}_f} {}_1F_1(i\nu, 1, -ik_f r_i - i\vec{k}_f \cdot \vec{r}_i) \\ &\times {}_1F_1(-i\nu_{\text{T}}, 1, -ivx - i\vec{v} \cdot \vec{x}). \end{aligned} \quad (\text{B.30})$$

Коришћењем еиконалне апроксимације $\vec{r}_i \approx -\vec{r}_f$, коначан облик функције ψ_f^- дат је следећим изразом:

$$\begin{aligned} \psi_f^- &= \mu_f^{i\nu_{\text{T}}} \mathcal{N}^-(\nu) N^-(\nu_{\text{T}}) e^{-i\vec{k}_f \cdot \vec{r}_f} {}_1F_1(i\nu, 1, -ik_f r_f + i\vec{k}_f \cdot \vec{r}_f) \\ &\times {}_1F_1(-i\nu_{\text{T}}, 1, -ivx - i\vec{v} \cdot \vec{x}). \end{aligned} \quad (\text{B.31})$$

В.2 Четворочестични проблеми

В.2.1 Улазни канал

У улазном каналу потребно је решити једначину (2.248), која се записује као:

$$\left(\frac{k_i^2}{2\mu_i} + \frac{1}{2\mu'_f} \vec{\nabla}_{r'_f}^2 + \frac{1}{2a} \vec{\nabla}_{s_1}^2 + \frac{1}{2a} \vec{\nabla}_{s_2}^2 - \frac{Z_P Z_{\text{T}}}{R} + \frac{Z_P}{s_1} + \frac{Z_P}{s_2} \right) \psi_i^+ = 0. \quad (\text{B.32})$$

Оператор кинетичке енергије H_0 дат је следећим изразом:

$$H_0 = -\frac{1}{2\mu'_f} \vec{\nabla}_{r'_f}^2 - \frac{1}{2a} \vec{\nabla}_{s_1}^2 - \frac{1}{2a} \vec{\nabla}_{s_2}^2, \quad (\text{B.33})$$

при чему је вектор положаја \vec{r}'_f дефинисан на следећи начин:

$$\vec{r}'_f = \vec{r}_2 - \frac{M_P \vec{r}_1 + \vec{r}_3 + \vec{r}_4}{M_P + 2}, \quad (\text{B.34})$$

и означен је примом да га не бисмо помешали са \vec{r}_f из (2.116). И овде важи да је $a = M_P/(M_P + 1)$, док је μ'_f дато следећим изразом:

$$\mu'_f = \frac{(M_P + 2)M_T}{M_P + M_T + 2}, \quad (\text{B.35})$$

Вектори \vec{s}_1 и \vec{s}_2 су дефинисани на исти начин као и у главном тексту. Овакав одабир Јакобијевих координата $\{\vec{r}'_f, \vec{s}_1, \vec{s}_2\}$ извршен је ради лакшег решавања диференцијалне једначине (B.32). Напоменимо да бисмо у излазном каналу у случају двоструког електронског захвата одабрали управо овај скуп Јакобијевих координата.

Коришћењем еиконалне апроксимације $\vec{r}'_f \approx -\vec{R}$, у једначини (B.32) се може извршити раздвајање променљивих, тако да се таласна функција ψ_i^+ може записати у следећем облику:

$$\psi_i^+ = C_i^+ \mathcal{F}_f^+(\vec{r}'_f) \mathcal{F}_1^+(\vec{s}_1) \mathcal{F}_2^+(\vec{s}_2), \quad (\text{B.36})$$

где је C_i^+ константа коју треба одредити, а одређује из услова да изобличени талас поседује коректну асимптотику.

Сада се једначина (B.32) рашчлањује на три диференцијалне једначине:

$$\left(-\frac{1}{2\mu'_f} \vec{\nabla}_{r'_f}^2 + \frac{Z_P Z_T}{r'_f} - \frac{p_f^2}{2\mu'_f} \right) \mathcal{F}_f^+(\vec{r}'_f) = 0, \quad (\text{B.37})$$

$$\left(-\frac{1}{2a} \vec{\nabla}_{s_k}^2 - \frac{Z_P}{s_k} - \frac{p_k^2}{2a} \right) \mathcal{F}_k^+(\vec{s}_k) = 0, \quad (\text{B.38})$$

где је $k = 1, 2$. Векторе \vec{p}_f и \vec{p}_k смо увели на следећи начин:

$$\frac{p_f^2}{2\mu'_f} + \frac{p_1^2}{2a} + \frac{p_2^2}{2a} = \frac{k_i^2}{2\mu_i}, \quad (\text{B.39})$$

$$\vec{p}_f \cdot \vec{r}'_f + \vec{p}_1 \cdot \vec{s}_1 + \vec{p}_2 \cdot \vec{s}_2 = \vec{k}_i \cdot \vec{r}_i. \quad (\text{B.40})$$

Једначина (B.40) је неопходна да би изобличени талас имао коректно асимптотско понашање. На основу Прилога Б, решења једначина (B.37) и (B.38) дата су следећим изразима:

$$\mathcal{F}_f^+(\vec{r}'_f) = \mathcal{N}^+(\nu) e^{i\vec{p}_f \cdot \vec{r}'_f} {}_1F_1(-i\nu, 1, ip_f r'_f - i\vec{p}_f \cdot \vec{r}'_f), \quad (\text{B.41})$$

$$\mathcal{F}_k^+(\vec{s}_k) = N^+(\nu_{Pk}) e^{i\vec{p}_k \cdot \vec{s}_k} {}_1F_1(i\nu_{Pk}, 1, ip_k s_k - i\vec{p}_k \cdot \vec{s}_k), \quad (\text{B.42})$$

где су уведене следеће ознаке:

$$\nu = \frac{\mu'_f Z_P Z_T}{p_f}, \quad \nu_{Pk} = \frac{a Z_P}{p_k}. \quad (\text{B.43})$$

Може се показати да важи:

$$\vec{r}_i = -d\vec{r}'_f - \frac{c}{\mu_i} (\vec{s}_1 + \vec{s}_2), \quad \vec{r}'_f = -c\vec{r}_i - \frac{d}{\mu'_f} (\vec{x}_1 + \vec{x}_2), \quad (\text{B.44})$$

где су:

$$c = \frac{M_P}{M_P + 2}, \quad d = \frac{M_T}{M_T + 2}. \quad (\text{B.45})$$

На основу израза (B.40) и (B.44), као и $\mu_i \vec{v} = \vec{k}_i$, лако се показује да важи:

$$\vec{p}_f = -d\vec{k}_i \approx -\vec{k}_i, \quad (\text{B.46})$$

$$\vec{p}_k = -\frac{c}{\mu_i} \vec{k}_i \approx -\vec{v}, \quad (\text{B.47})$$

узимањем у обзир да је $M_{P,T} \gg 1$. Изрази (B.46) и (B.47) задовољавају и једначину (B.39). Затим, једноставно се може утврдити да је:

$$\nu \approx \frac{Z_P Z_T}{v}, \quad \nu_P \approx \frac{Z_P}{v}. \quad (\text{B.48})$$

Сада је могуће одредити константу C_i^+ из захтева да изобличени талас има коректну асимптотику:

$$C_i^+ e^{i\nu \ln(p_f r'_f - \vec{p}_f \cdot \vec{r}'_f) - i\nu_P \sum_{k=1}^2 \ln(p_k s_k - \vec{p}_k \cdot \vec{s}_k)} \xrightarrow{r_i \rightarrow \infty} e^{i\nu_i \ln(k_i r_i - \vec{k}_i \cdot \vec{r}_i)}, \quad (\text{B.49})$$

одакле се, уз употребу еиконалне апроксимације, једноставно налази тражена константа:

$$C_i^+ = e^{i\nu_i \ln(k_i r_i - \vec{k}_i \cdot \vec{r}_i) - i\nu \ln(p_f r'_f - \vec{p}_f \cdot \vec{r}'_f) + i\nu_P \sum_{k=1}^2 \ln(p_k s_k - \vec{p}_k \cdot \vec{s}_k)} \approx \mu_i^{-2i\nu_P}. \quad (\text{B.50})$$

Коначно, долазимо до израза:

$$\begin{aligned} \psi_i^+ &= \mu_i^{-2i\nu_P} \mathcal{N}^+(\nu) [N^+(\nu_P)]^2 e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_i} {}_1F_1(-i\nu, 1, ik_i r'_f + i\vec{k}_i \cdot \vec{r}'_f) \\ &\times {}_1F_1(i\nu_P, 1, i\nu s_1 + i\vec{v} \cdot \vec{s}_1) {}_1F_1(i\nu_P, 1, i\nu s_2 + i\vec{v} \cdot \vec{s}_2). \end{aligned} \quad (\text{B.51})$$

Како на основу еиконалне апроксимације важи $\vec{r}'_f \approx -\vec{r}_i$, коначан облик функције ψ_i^+ дат је следећим изразом:

$$\begin{aligned} \psi_i^+ &= \mu_i^{-2i\nu_P} \mathcal{N}^+(\nu) [N^+(\nu_P)]^2 e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_i} {}_1F_1(-i\nu, 1, ik_i r_i - i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_i) \\ &\times {}_1F_1(i\nu_P, 1, i\nu s_1 + i\vec{v} \cdot \vec{s}_1) {}_1F_1(i\nu_P, 1, i\nu s_2 + i\vec{v} \cdot \vec{s}_2). \end{aligned} \quad (\text{B.52})$$

В.2.2 Излазни канал

У излазном каналу је процедура аналогна улазном, при чему је поново неопходно одабрати погодан облик оператора кинетичке енергије H_0 (тј. Јакобијевих координата). Одабиром Јакобијевих координата $\{\vec{r}_i, \vec{x}_1, \vec{x}_2\}$ за записивање оператора кинетичке енергије H_0 , једначина (2.261) се експлицитно може записати у следећем облику:

$$\left(\frac{k_f^2}{2\mu_f} + \frac{1}{2\mu_i} \vec{\nabla}_{r_i}^2 + \frac{1}{2b} \vec{\nabla}_{x_1}^2 + \frac{1}{2b} \vec{\nabla}_{x_2}^2 - \frac{Z_P(Z_T - 1)}{R} + \frac{Z_T - 1}{x_1} \right) \psi_f^- = 0. \quad (\text{B.53})$$

Коришћењем еиконалне апроксимације $\vec{r}_i \approx \vec{R}$, у једначини (B.53) се може извршити сепарација променљивих, тако да се таласна функција ψ_f^- може записати у следећем облику:

$$\psi_f^- = C_f^- \mathcal{F}_i^-(\vec{r}_i) \mathcal{F}_1^-(\vec{x}_1) \mathcal{F}_2^-(\vec{x}_2), \quad (\text{B.54})$$

где је C_f^- константа коју треба одредити, а одређује из услова да изобличени талас поседује коректну асимптотику.

Сада се једначина (В.53) рашчлањује на три диференцијалне једначине:

$$\left(-\frac{1}{2\mu_i}\vec{\nabla}_{r_i}^2 + \frac{Z_P(Z_T - 1)}{r_i} - \frac{p_i^2}{2\mu_i}\right) \mathcal{F}_i^-(\vec{r}_i) = 0, \quad (\text{В.55})$$

$$\left(-\frac{1}{2b}\vec{\nabla}_{x_1}^2 - \frac{Z_T - 1}{x_1} - \frac{p_1^2}{2b}\right) \mathcal{F}_1^-(\vec{x}_1) = 0, \quad (\text{В.56})$$

$$\left(-\frac{1}{2b}\vec{\nabla}_{x_2}^2 - \frac{p_2^2}{2b}\right) \mathcal{F}_2^-(\vec{x}_2) = 0, \quad (\text{В.57})$$

при чему смо векторе \vec{p}_i и \vec{p}_k , где је $k = 1, 2$, увели на следећи начин:

$$\frac{p_i^2}{2\mu_i} + \frac{p_1^2}{2b} + \frac{p_2^2}{2b} = \frac{k_f^2}{2\mu_f}, \quad (\text{В.58})$$

$$\vec{p}_i \cdot \vec{r}_i + \vec{p}_1 \cdot \vec{x}_1 + \vec{p}_2 \cdot \vec{x}_2 = -\vec{k}_f \cdot \vec{r}_f. \quad (\text{В.59})$$

Једначина (В.59) је поново неопходна да би изобличени талас имао коректно асимптотско понашање. На основу Прилога Б, решења једначина (В.55), (В.56) и (В.57) дата су следећим изразима:

$$\mathcal{F}_i^-(\vec{r}_i) = \mathcal{N}^-(\nu) e^{i\vec{p}_i \cdot \vec{r}_i} {}_1F_1(i\nu, 1, -ip_i r_i - i\vec{p}_i \cdot \vec{r}_i), \quad (\text{В.60})$$

$$\mathcal{F}_1^-(\vec{x}_1) = \mathcal{N}^-(\nu_T) e^{i\vec{p}_1 \cdot \vec{x}_1} {}_1F_1(-i\nu_T, 1, -ip_1 x_1 - i\vec{p}_1 \cdot \vec{x}_1), \quad (\text{В.61})$$

$$\mathcal{F}_2^-(\vec{s}_2) = e^{i\vec{p}_2 \cdot \vec{x}_2}, \quad (\text{В.62})$$

где су:

$$\nu \approx \frac{Z_P(Z_T - 1)}{v}, \quad \nu_T \approx \frac{Z_T - 1}{v}. \quad (\text{В.63})$$

Примећујемо да избор потенцијала V_x дат релацијом (2.260) директно утиче на то да у коначном изразу за ψ_f^- фигуришу само две Кумерове конфлуентне хипергеометријске функције.

Може се показати да важи:

$$\vec{r}_f = -a\vec{r}_i - \frac{f}{\mu_f}\vec{x}_1 + \frac{g}{\mu_f}\vec{x}_2, \quad (\text{В.64})$$

где су:

$$f = \frac{M_T + 1}{M_T + 2}, \quad g = \frac{1}{M_T + 2}, \quad (\text{B.65})$$

док је и овде $a = M_P / (M_P + 1)$. На основу израза (B.59) и (B.64), као и $\mu_f \vec{v} = \vec{k}_f$, лако се може показати да важи:

$$\vec{p}_i \approx \vec{k}_f, \quad (\text{B.66})$$

$$\vec{p}_1 \approx \vec{v}, \quad (\text{B.67})$$

$$\vec{p}_2 \approx 0, \quad (\text{B.68})$$

при чему смо узели у обзир да важи $M_{P,T} \gg 1$. Наравно, изрази (B.66), (B.67) и (B.68) задовољавају и једначину (B.58). Константу C_f^- одређујемо из услова да изобличени талас има коректан асимптотски облик (на начин аналоган случају улазног канала):

$$C_f^- \approx \mu_f^{i\nu_T}. \quad (\text{B.69})$$

Коначно, долазимо до израза:

$$\begin{aligned} \psi_f^- &= \mu_f^{i\nu_T} \mathcal{N}^-(\nu) N^-(\nu_T) e^{-i\vec{k}_f \cdot \vec{r}_f} {}_1F_1(i\nu, 1, -ik_f r_i - i\vec{k}_f \cdot \vec{r}_i) \\ &\times {}_1F_1(-i\nu_T, 1, -ivx_1 - i\vec{v} \cdot \vec{x}_1). \end{aligned} \quad (\text{B.70})$$

Како на основу еиконалне апроксимације важи $\vec{r}_i \approx -\vec{r}_f$, коначан облик функције ψ_f^- дат је следећим изразом:

$$\begin{aligned} \psi_f^- &= \mu_f^{i\nu_T} \mathcal{N}^-(\nu) N^-(\nu_T) e^{-i\vec{k}_f \cdot \vec{r}_f} {}_1F_1(i\nu, 1, -ik_f r_f + i\vec{k}_f \cdot \vec{r}_f) \\ &\times {}_1F_1(-i\nu_T, 1, -ivx_1 - i\vec{v} \cdot \vec{x}_1). \end{aligned} \quad (\text{B.71})$$

Прилог Г

Ефикасни пресеци за једноструки електронски захват

Објашњење табела:

Финално стање $n \quad l \quad m$	
3	Ефикасни пресеци за захват у $n = 3$ сумирани по свим l и m
3 0 0	Ефикасни пресеци за захват у $n = 3, l = 0, m = 0$
3 1	Ефикасни пресеци за захват у $n = 3, l = 1$ сумирани по свим m
3 1 0	Ефикасни пресеци за захват у $n = 3, l = 1, m = 0$
3 1 1	Ефикасни пресеци за захват у $n = 3, l = 1, m = 1$
3 2	Ефикасни пресеци за захват у $n = 3, l = 2$ сумирани по свим m
3 2 0	Ефикасни пресеци за захват у $n = 3, l = 2, m = 0$
3 2 1	Ефикасни пресеци за захват у $n = 3, l = 2, m = 1$
3 2 2	Ефикасни пресеци за захват у $n = 3, l = 2, m = 2$
Сумирани	Ефикасни пресеци сумирани по свим n, l и m

Сви ефикасни пресеци су приказани у јединицама cm^2 .

Г.1 Ефикасни пресеци за једноструки електронски захват из атома $H(1s)$ од стране огољених јона

Табела 1. Ефикасни пресеци за електронски захват из атома $H(1s)$ од стране H^+ јона

Финално стање			Енергија (keV/amu)					
n	l	m	20	40	60	80	100	150
1	0	0	4.97E-16	1.14E-16	3.76E-17	1.52E-17	7.05E-18	1.51E-18
2			6.54E-17	2.97E-17	1.07E-17	4.28E-18	1.90E-18	3.62E-19
2	0	0	3.78E-17	1.78E-17	6.84E-18	2.87E-18	1.33E-18	2.74E-19
2	1		2.77E-17	1.19E-17	3.90E-18	1.41E-18	5.71E-19	8.88E-20
2	1	0	2.05E-17	9.14E-18	3.07E-18	1.13E-18	4.61E-19	7.28E-20
2	1	1	3.60E-18	1.36E-18	4.13E-19	1.41E-19	5.49E-20	8.00E-21
3			1.64E-17	9.47E-18	3.62E-18	1.46E-18	6.47E-19	1.21E-19
3	0	0	8.89E-18	5.24E-18	2.13E-18	9.10E-19	4.24E-19	8.68E-20
3	1		6.75E-18	3.84E-18	1.37E-18	5.10E-19	2.09E-19	3.27E-20
3	1	0	5.05E-18	2.98E-18	1.09E-18	4.11E-19	1.70E-19	2.70E-20
3	1	1	8.46E-19	4.26E-19	1.40E-19	4.95E-20	1.95E-20	2.88E-21
3	2		7.60E-19	3.96E-19	1.22E-19	3.94E-20	1.42E-20	1.71E-21
3	2	0	4.16E-19	2.25E-19	7.23E-20	2.40E-20	8.84E-21	1.09E-21
3	2	1	1.53E-19	7.69E-20	2.25E-20	7.01E-21	2.46E-21	2.81E-22
3	2	2	1.89E-20	8.40E-21	2.32E-21	6.96E-22	2.37E-22	2.59E-23
4			6.44E-18	4.08E-18	1.59E-18	6.46E-19	2.86E-19	5.34E-20
4	0	0	3.42E-18	2.20E-18	9.14E-19	3.93E-19	1.83E-19	3.75E-20
4	1		2.62E-18	1.65E-18	6.08E-19	2.29E-19	9.43E-20	1.48E-20
4	1	0	1.97E-18	1.29E-18	4.85E-19	1.85E-19	7.69E-20	1.22E-20
4	1	1	3.24E-19	1.81E-19	6.15E-20	2.20E-20	8.72E-21	1.29E-21
4	2		3.81E-19	2.23E-19	7.15E-20	2.35E-20	8.55E-21	1.03E-21
4	2	0	2.11E-19	1.28E-19	4.26E-20	1.44E-20	5.33E-21	6.64E-22
4	2	1	7.54E-20	4.30E-20	1.31E-20	4.15E-21	1.47E-21	1.69E-22
4	2	2	9.27E-21	4.64E-21	1.34E-21	4.07E-22	1.40E-22	1.54E-23
4	3		1.52E-20	8.36E-21	2.33E-21	6.67E-22	2.14E-22	1.99E-23
4	3	0	6.82E-21	3.73E-21	1.08E-21	3.18E-22	1.04E-22	1.00E-23
4	3	1	3.27E-21	1.86E-21	5.09E-22	1.44E-22	4.55E-23	4.13E-24
4	3	2	8.27E-22	4.15E-22	1.06E-22	2.85E-23	8.72E-24	7.43E-25
4	3	3	8.14E-23	3.71E-23	9.15E-24	2.40E-24	7.21E-25	5.94E-26
Сумирани			5.96E-16	1.64E-16	5.60E-17	2.26E-17	1.03E-17	2.13E-18

Финално стање			Енергија (keV/amu)					
n	l	m	300	500	800	1000	2000	3000
1	0	0	7.37E-20	6.17E-21	5.47E-22	1.67E-22	3.79E-24	3.93E-25
2			1.41E-20	1.03E-21	8.27E-23	2.44E-23	5.13E-25	5.19E-26
2	0	0	1.19E-20	9.16E-22	7.68E-23	2.30E-23	4.97E-25	5.08E-26
2	1		2.22E-21	1.10E-22	5.95E-24	1.44E-24	1.58E-26	1.07E-27
2	1	0	1.85E-21	9.20E-23	5.00E-24	1.21E-24	1.31E-26	8.80E-28
2	1	1	1.84E-22	8.80E-24	4.75E-25	1.15E-25	1.32E-27	9.28E-29

Табела 1 (наставак)

3			4.52E-21	3.21E-22	2.53E-23	7.44E-24	1.54E-25	1.55E-26
3	0	0	3.68E-21	2.80E-22	2.32E-23	6.93E-24	1.49E-25	1.52E-26
3	1		8.10E-22	3.95E-23	2.13E-24	5.13E-25	5.58E-27	3.76E-28
3	1	0	6.78E-22	3.33E-23	1.79E-24	4.31E-25	4.65E-27	3.11E-28
3	1	1	6.60E-23	3.14E-24	1.69E-25	4.09E-26	4.65E-28	3.27E-29
3	2		2.48E-23	7.80E-25	2.73E-26	5.35E-27	2.98E-29	1.35E-30
3	2	0	1.65E-23	5.27E-25	1.86E-26	3.65E-27	2.04E-29	9.18E-31
3	2	1	3.82E-24	1.16E-25	4.01E-27	7.80E-28	4.31E-30	1.95E-31
3	2	2	3.29E-25	9.78E-27	3.38E-28	6.63E-29	3.90E-31	1.87E-32
4			1.96E-21	1.38E-22	1.08E-23	3.17E-24	6.54E-26	6.57E-27
4	0	0	1.58E-21	1.19E-22	9.88E-24	2.94E-24	6.29E-26	6.40E-27
4	1		3.65E-22	1.78E-23	9.52E-25	2.29E-25	2.49E-27	1.68E-28
4	1	0	3.06E-22	1.49E-23	8.02E-25	1.93E-25	2.07E-27	1.39E-28
4	1	1	2.96E-23	1.40E-24	7.53E-26	1.82E-26	2.07E-28	1.46E-29
4	2		1.50E-23	4.71E-25	1.65E-26	3.22E-27	1.79E-29	8.10E-31
4	2	0	1.00E-23	3.19E-25	1.12E-26	2.20E-27	1.23E-29	5.53E-31
4	2	1	2.30E-24	7.02E-26	2.41E-27	4.69E-28	2.59E-30	1.17E-31
4	2	2	1.97E-25	5.88E-27	2.03E-28	3.98E-29	2.35E-31	1.12E-32
4	3		1.69E-25	3.42E-27	7.81E-29	1.24E-29	3.54E-32	1.07E-33
4	3	0	8.92E-26	1.84E-27	4.24E-29	6.74E-30	1.94E-32	5.89E-34
4	3	1	3.41E-26	6.78E-28	1.53E-29	2.42E-30	6.88E-33	2.08E-34
4	3	2	5.60E-27	1.06E-28	2.33E-30	3.66E-31	1.03E-33	3.14E-35
4	3	3	4.27E-28	7.97E-30	1.76E-31	2.80E-32	8.43E-35	2.72E-36
Сумирани			9.73E-20	7.86E-21	6.83E-22	2.07E-22	4.62E-24	4.77E-25

Табела 2. Ефикасни пресеци за електронски захват из атома $H(1s)$ од стране He^{2+} јона

Финално стање			Енергија (keV/amu)					
n	l	m	20	40	60	80	100	150
1	0	0	5.34E-16	1.49E-16	6.32E-17	3.23E-17	1.83E-17	5.84E-18
2			8.26E-16	2.93E-16	1.13E-16	4.96E-17	2.41E-17	5.49E-18
2	0	0	1.17E-16	4.95E-17	2.37E-17	1.25E-17	7.06E-18	2.08E-18
2	1		7.08E-16	2.43E-16	8.93E-17	3.71E-17	1.71E-17	3.41E-18
2	1	0	4.91E-16	1.78E-16	6.74E-17	2.86E-17	1.34E-17	2.73E-18
2	1	1	1.08E-16	3.28E-17	1.09E-17	4.24E-18	1.85E-18	3.37E-19
3			1.63E-16	1.18E-16	5.24E-17	2.36E-17	1.14E-17	2.46E-18
3	0	0	2.20E-17	1.54E-17	8.21E-18	4.50E-18	2.57E-18	7.58E-19
3	1		8.52E-17	6.59E-17	3.06E-17	1.40E-17	6.75E-18	1.39E-18
3	1	0	6.39E-17	5.06E-17	2.40E-17	1.12E-17	5.44E-18	1.14E-18
3	1	1	1.06E-17	7.65E-18	3.30E-18	1.42E-18	6.55E-19	1.26E-19
3	2		5.56E-17	3.63E-17	1.36E-17	5.11E-18	2.09E-18	3.12E-19
3	2	0	2.90E-17	2.00E-17	7.78E-18	3.03E-18	1.27E-18	1.97E-19
3	2	1	1.18E-17	7.33E-18	2.60E-18	9.42E-19	3.73E-19	5.27E-20
3	2	2	1.52E-18	8.61E-19	2.88E-19	9.99E-20	3.83E-20	5.13E-21
4			4.85E-17	5.14E-17	2.51E-17	1.16E-17	5.64E-18	1.20E-18
4	0	0	7.00E-18	6.38E-18	3.61E-18	2.02E-18	1.16E-18	3.44E-19
4	1		2.27E-17	2.54E-17	1.32E-17	6.33E-18	3.11E-18	6.52E-19
4	1	0	1.75E-17	1.98E-17	1.05E-17	5.09E-18	2.53E-18	5.38E-19
4	1	1	2.62E-18	2.81E-18	1.36E-18	6.17E-19	2.91E-19	5.70E-20
4	2		1.57E-17	1.67E-17	7.26E-18	2.93E-18	1.24E-18	1.91E-19
4	2	0	8.59E-18	9.42E-18	4.26E-18	1.77E-18	7.62E-19	1.22E-19
4	2	1	3.18E-18	3.28E-18	1.36E-18	5.26E-19	2.15E-19	3.15E-20
4	2	2	3.85E-19	3.63E-19	1.42E-19	5.32E-20	2.12E-20	2.97E-21
4	3		3.03E-18	2.90E-18	1.05E-18	3.59E-19	1.31E-19	1.51E-20
4	3	0	1.26E-18	1.25E-18	4.75E-19	1.67E-19	6.26E-20	7.51E-21
4	3	1	6.95E-19	6.59E-19	2.34E-19	7.83E-20	2.82E-20	3.15E-21
4	3	2	1.76E-19	1.52E-19	5.06E-20	1.62E-20	5.61E-21	5.89E-22
4	3	3	1.73E-20	1.39E-20	4.47E-21	1.40E-21	4.76E-22	4.85E-23
Сумирани			1.65E-15	6.91E-16	2.93E-16	1.35E-16	6.83E-17	1.69E-17

Финално стање			Енергија (keV/amu)					
n	l	m	300	500	800	1000	2000	3000
1	0	0	5.57E-19	7.08E-20	8.51E-21	2.92E-21	8.61E-23	9.88E-24
2			2.79E-19	2.35E-20	2.09E-21	6.37E-22	1.45E-23	1.51E-24
2	0	0	1.53E-19	1.57E-20	1.59E-21	5.10E-22	1.29E-23	1.40E-24
2	1		1.26E-19	7.79E-21	4.95E-22	1.27E-22	1.60E-24	1.14E-25
2	1	0	1.04E-19	6.48E-21	4.13E-22	1.06E-22	1.32E-24	9.38E-26
2	1	1	1.11E-20	6.55E-22	4.10E-23	1.05E-23	1.38E-25	1.02E-26
3			1.10E-19	8.46E-21	7.05E-22	2.10E-22	4.55E-24	4.65E-25
3	0	0	5.31E-20	5.22E-21	5.10E-22	1.61E-22	3.96E-24	4.24E-25
3	1		5.04E-20	3.01E-21	1.86E-22	4.71E-23	5.78E-25	4.09E-26
3	1	0	4.20E-20	2.52E-21	1.56E-22	3.95E-23	4.80E-25	3.37E-26
3	1	1	4.17E-21	2.42E-22	1.49E-23	3.82E-24	4.91E-26	3.63E-27
3	2		6.24E-21	2.35E-22	9.37E-24	1.92E-24	1.21E-26	5.72E-28

Табела 2 (наставак)

3	2	0	4.11E-21	1.58E-22	6.36E-24	1.31E-24	8.22E-27	3.89E-28
3	2	1	9.76E-22	3.55E-23	1.38E-24	2.82E-25	1.75E-27	8.33E-29
3	2	2	8.83E-23	3.12E-24	1.22E-25	2.51E-26	1.65E-28	8.29E-30
4			5.12E-20	3.82E-21	3.12E-22	9.22E-23	1.96E-24	1.99E-25
4	0	0	2.37E-20	2.29E-21	2.21E-22	6.97E-23	1.69E-24	1.80E-25
4	1		2.35E-20	1.38E-21	8.46E-23	2.14E-23	2.60E-25	1.83E-26
4	1	0	1.97E-20	1.17E-21	7.11E-23	1.79E-23	2.16E-25	1.51E-26
4	1	1	1.90E-21	1.10E-22	6.73E-24	1.72E-24	2.20E-26	1.62E-27
4	2		3.85E-21	1.44E-22	5.72E-24	1.17E-24	7.30E-27	3.46E-28
4	2	0	2.56E-21	9.75E-23	3.89E-24	7.99E-25	4.98E-27	2.35E-28
4	2	1	5.94E-22	2.15E-23	8.38E-25	1.71E-25	1.06E-27	5.02E-29
4	2	2	5.26E-23	1.87E-24	7.31E-26	1.51E-26	9.93E-29	4.98E-30
4	3		1.74E-22	4.15E-24	1.07E-25	1.77E-26	5.68E-29	1.81E-30
4	3	0	9.09E-23	2.22E-24	5.79E-26	9.65E-27	3.11E-29	9.92E-31
4	3	1	3.50E-23	8.22E-25	2.09E-26	3.46E-27	1.10E-29	3.50E-31
4	3	2	5.93E-24	1.32E-25	3.26E-27	5.35E-28	1.68E-30	5.37E-32
4	3	3	4.66E-25	1.02E-26	2.55E-28	4.23E-29	1.42E-31	4.81E-33
Сумирани			1.08E-18	1.13E-19	1.21E-20	4.00E-21	1.10E-22	1.24E-23

Табела 3. Ефикасни пресеци за електронски захват из атома $H(1s)$ од стране Li^{3+} јона

Финално стање			Енергија (keV/amu)					
n	l	m	20	40	60	80	100	150
1	0	0	2.39E-16	8.74E-17	4.40E-17	2.48E-17	1.52E-17	5.79E-18
2			2.02E-15	6.07E-16	2.48E-16	1.19E-16	6.28E-17	1.70E-17
2	0	0	2.93E-16	6.48E-17	2.44E-17	1.23E-17	7.36E-18	2.79E-18
2	1		1.73E-15	5.42E-16	2.24E-16	1.06E-16	5.55E-17	1.42E-17
2	1	0	1.04E-15	3.61E-16	1.57E-16	7.73E-17	4.13E-17	1.10E-17
2	1	1	3.40E-16	9.06E-17	3.33E-17	1.45E-17	7.08E-18	1.62E-18
3			8.06E-16	4.34E-16	1.94E-16	9.21E-17	4.70E-17	1.14E-17
3	0	0	5.59E-17	2.55E-17	1.08E-17	5.38E-18	3.11E-18	1.14E-18
3	1		2.16E-16	1.40E-16	7.58E-17	4.13E-17	2.32E-17	6.41E-18
3	1	0	1.62E-16	1.07E-16	5.85E-17	3.24E-17	1.84E-17	5.20E-18
3	1	1	2.68E-17	1.70E-17	8.64E-18	4.45E-18	2.38E-18	6.05E-19
3	2		5.34E-16	2.68E-16	1.08E-16	4.54E-17	2.06E-17	3.82E-18
3	2	0	2.58E-16	1.39E-16	5.89E-17	2.58E-17	1.21E-17	2.34E-18
3	2	1	1.20E-16	5.68E-17	2.17E-17	8.76E-18	3.84E-18	6.65E-19
3	2	2	1.82E-17	7.74E-18	2.73E-18	1.04E-18	4.39E-19	7.09E-20
4			1.86E-16	2.04E-16	1.07E-16	5.30E-17	2.72E-17	6.42E-18
4	0	0	1.22E-17	1.02E-17	5.02E-18	2.59E-18	1.50E-18	5.40E-19
4	1		4.40E-17	5.06E-17	3.18E-17	1.85E-17	1.08E-17	3.11E-18
4	1	0	3.49E-17	3.99E-17	2.53E-17	1.49E-17	8.76E-18	2.56E-18
4	1	1	4.55E-18	5.38E-18	3.28E-18	1.83E-18	1.03E-18	2.75E-19
4	2		7.94E-17	9.46E-17	5.01E-17	2.40E-17	1.17E-17	2.33E-18
4	2	0	4.30E-17	5.24E-17	2.89E-17	1.43E-17	7.11E-18	1.47E-18
4	2	1	1.62E-17	1.89E-17	9.57E-18	4.41E-18	2.08E-18	3.89E-19
4	2	2	2.01E-18	2.22E-18	1.07E-18	4.73E-19	2.16E-19	3.85E-20
4	3		5.04E-17	4.89E-17	2.02E-17	7.85E-18	3.20E-18	4.51E-19
4	3	0	2.00E-17	2.03E-17	8.83E-18	3.56E-18	1.49E-18	2.21E-19
4	3	1	1.18E-17	1.12E-17	4.56E-18	1.73E-18	6.95E-19	9.50E-20
4	3	2	3.12E-18	2.76E-18	1.05E-18	3.79E-19	1.46E-19	1.86E-20
4	3	3	3.23E-19	2.69E-19	9.84E-20	3.46E-20	1.31E-20	1.61E-21
Сумирани			3.54E-15	1.65E-15	7.61E-16	3.71E-16	1.95E-16	5.06E-17

Финално стање			Енергија (keV/amu)					
n	l	m	300	500	800	1000	2000	3000
1	0	0	8.51E-19	1.56E-19	2.57E-20	1.01E-20	4.11E-22	5.39E-23
2			1.17E-18	1.18E-19	1.18E-20	3.77E-21	9.50E-23	1.03E-23
2	0	0	3.59E-19	5.24E-20	6.79E-21	2.39E-21	7.43E-23	8.71E-24
2	1		8.09E-19	6.51E-20	5.00E-21	1.38E-21	2.07E-23	1.58E-24
2	1	0	6.52E-19	5.34E-20	4.13E-21	1.14E-21	1.70E-23	1.29E-24
2	1	1	7.84E-20	5.88E-21	4.39E-22	1.21E-22	1.85E-24	1.46E-25
3			6.09E-19	5.18E-20	4.60E-21	1.40E-21	3.18E-23	3.31E-24
3	0	0	1.40E-19	1.92E-20	2.35E-21	8.07E-22	2.37E-23	2.71E-24
3	1		3.62E-19	2.76E-20	2.02E-21	5.45E-22	7.73E-24	5.81E-25
3	1	0	3.00E-19	2.31E-20	1.68E-21	4.55E-22	6.39E-24	4.75E-25
3	1	1	3.07E-20	2.27E-21	1.65E-22	4.51E-23	6.72E-25	5.27E-26
3	2		1.08E-19	4.98E-21	2.30E-22	5.00E-23	3.59E-25	1.80E-26

Табела 3 (наставак)

3	2	0	7.01E-20	3.32E-21	1.55E-22	3.38E-23	2.43E-25	1.22E-26
3	2	1	1.71E-20	7.59E-22	3.42E-23	7.38E-24	5.24E-26	2.63E-27
3	2	2	1.66E-21	7.10E-23	3.18E-24	6.90E-25	5.17E-27	2.73E-28
4			3.16E-19	2.53E-20	2.14E-21	6.42E-22	1.40E-23	1.44E-24
4	0	0	6.53E-20	8.78E-21	1.05E-21	3.57E-22	1.02E-23	1.16E-24
4	1		1.76E-19	1.32E-20	9.42E-22	2.53E-22	3.52E-24	2.63E-25
4	1	0	1.47E-19	1.11E-20	7.91E-22	2.12E-22	2.92E-24	2.15E-25
4	1	1	1.42E-20	1.04E-21	7.55E-23	2.05E-23	3.02E-25	2.36E-26
4	2		6.79E-20	3.12E-21	1.42E-22	3.08E-23	2.19E-25	1.09E-26
4	2	0	4.50E-20	2.11E-21	9.69E-23	2.10E-23	1.49E-25	7.42E-27
4	2	1	1.05E-20	4.65E-22	2.09E-23	4.50E-24	3.18E-26	1.59E-27
4	2	2	9.74E-22	4.23E-23	1.91E-24	4.15E-25	3.11E-27	1.64E-28
4	3		7.09E-21	2.04E-22	5.97E-24	1.05E-24	3.79E-27	1.27E-28
4	3	0	3.69E-21	1.09E-22	3.23E-24	5.68E-25	2.08E-27	6.99E-29
4	3	1	1.43E-21	4.02E-23	1.17E-24	2.04E-25	7.34E-28	2.46E-29
4	3	2	2.52E-22	6.69E-24	1.87E-25	3.23E-26	1.15E-28	3.85E-30
4	3	3	2.07E-23	5.41E-25	1.52E-26	2.66E-27	1.01E-29	3.57E-31
Сумирани			3.44E-18	3.90E-19	4.75E-20	1.69E-20	5.74E-22	7.12E-23

Табела 4. Ефикасни пресеци за електронски захват из атома $H(1s)$ од стране Be^{4+} јона

Финално стање			Енергија (keV/amu)					
n	l	m	20	40	60	80	100	150
1	0	0	1.08E-16	4.50E-17	2.50E-17	1.59E-17	1.10E-17	4.89E-18
2			1.99E-15	6.26E-16	2.80E-16	1.47E-16	8.42E-17	2.70E-17
2	0	0	4.11E-16	9.36E-17	3.32E-17	1.49E-17	7.85E-18	2.56E-18
2	1		1.58E-15	5.32E-16	2.47E-16	1.32E-16	7.64E-17	2.44E-17
2	1	0	8.06E-16	3.13E-16	1.57E-16	8.82E-17	5.30E-17	1.79E-17
2	1	1	3.87E-16	1.09E-16	4.48E-17	2.17E-17	1.17E-17	3.26E-18
3			2.27E-15	8.92E-16	3.94E-16	1.93E-16	1.03E-16	2.77E-17
3	0	0	1.52E-16	5.74E-17	2.38E-17	1.07E-17	5.28E-18	1.36E-18
3	1		4.82E-16	1.75E-16	8.71E-17	5.08E-17	3.18E-17	1.14E-17
3	1	0	3.42E-16	1.30E-16	6.61E-17	3.91E-17	2.48E-17	9.10E-18
3	1	1	7.01E-17	2.24E-17	1.05E-17	5.84E-18	3.49E-18	1.14E-18
3	2		1.63E-15	6.60E-16	2.83E-16	1.32E-16	6.61E-17	1.50E-17
3	2	0	7.05E-16	3.16E-16	1.45E-16	7.12E-17	3.70E-17	8.91E-18
3	2	1	3.86E-16	1.48E-16	5.99E-17	2.67E-17	1.29E-17	2.71E-18
3	2	2	7.74E-17	2.48E-17	9.03E-18	3.72E-18	1.70E-18	3.25E-19
4			6.40E-16	5.22E-16	2.70E-16	1.37E-16	7.32E-17	1.88E-17
4	0	0	2.92E-17	2.27E-17	1.17E-17	5.76E-18	2.93E-18	7.28E-19
4	1		8.81E-17	6.78E-17	3.86E-17	2.34E-17	1.50E-17	5.60E-18
4	1	0	7.06E-17	5.43E-17	3.09E-17	1.88E-17	1.21E-17	4.59E-18
4	1	1	8.73E-18	6.71E-18	3.82E-18	2.29E-18	1.44E-18	5.06E-19
4	2		1.89E-16	1.87E-16	1.12E-16	6.24E-17	3.47E-17	8.92E-18
4	2	0	1.02E-16	1.02E-16	6.33E-17	3.63E-17	2.08E-17	5.58E-18
4	2	1	3.86E-17	3.77E-17	2.18E-17	1.17E-17	6.28E-18	1.51E-18
4	2	2	4.99E-18	4.79E-18	2.64E-18	1.36E-18	7.05E-19	1.60E-19
4	3		3.33E-16	2.44E-16	1.07E-16	4.59E-17	2.05E-17	3.51E-18
4	3	0	1.25E-16	9.69E-17	4.49E-17	2.01E-17	9.29E-18	1.68E-18
4	3	1	7.85E-17	5.68E-17	2.44E-17	1.03E-17	4.51E-18	7.44E-19
4	3	2	2.32E-17	1.53E-17	6.12E-18	2.42E-18	1.02E-18	1.55E-19
4	3	3	2.73E-18	1.67E-18	6.32E-19	2.41E-19	9.83E-20	1.43E-20
5			1.61E-16	2.67E-16	1.63E-16	8.74E-17	4.72E-17	1.20E-17
5	0	0	7.24E-18	1.01E-17	6.09E-18	3.21E-18	1.68E-18	4.18E-19
5	1		2.16E-17	3.05E-17	1.98E-17	1.24E-17	8.05E-18	3.08E-18
5	1	0	1.79E-17	2.51E-17	1.62E-17	1.01E-17	6.61E-18	2.55E-18
5	1	1	1.81E-18	2.68E-18	1.77E-18	1.12E-18	7.22E-19	2.64E-19
5	2		4.03E-17	7.41E-17	5.34E-17	3.25E-17	1.91E-17	5.22E-18
5	2	0	2.38E-17	4.29E-17	3.14E-17	1.96E-17	1.17E-17	3.34E-18
5	2	1	7.46E-18	1.40E-17	9.90E-18	5.84E-18	3.32E-18	8.56E-19
5	2	2	8.02E-19	1.57E-18	1.08E-18	6.23E-19	3.46E-19	8.55E-20
5	3		5.67E-17	1.03E-16	6.12E-17	3.03E-17	1.48E-17	2.79E-18
5	3	0	2.35E-17	4.34E-17	2.69E-17	1.38E-17	6.93E-18	1.38E-18
5	3	1	1.30E-17	2.35E-17	1.37E-17	6.66E-18	3.19E-18	5.81E-19
5	3	2	3.28E-18	5.71E-18	3.16E-18	1.46E-18	6.74E-19	1.15E-19
5	3	3	3.30E-19	5.56E-19	2.98E-19	1.35E-19	6.10E-20	1.01E-20
5	4		3.49E-17	4.97E-17	2.27E-17	9.00E-18	3.64E-18	4.81E-19
5	4	0	1.14E-17	1.69E-17	8.03E-18	3.30E-18	1.37E-18	1.90E-19
5	4	1	7.99E-18	1.14E-17	5.20E-18	2.05E-18	8.26E-19	1.08E-19
5	4	2	3.07E-18	4.14E-18	1.78E-18	6.69E-19	2.59E-19	3.16E-20

Табела 4 (наставак)

5 4 3	6.29E-19	8.02E-19	3.30E-19	1.20E-19	4.51E-20	5.22E-21
5 4 4	5.45E-20	6.69E-20	2.67E-20	9.53E-21	3.53E-21	3.99E-22
Сумирани	5.49E-15	2.90E-15	1.47E-15	7.60E-16	4.15E-16	1.15E-16

Финално стање			Енергија (keV/amu)					
<i>n</i>	<i>l</i>	<i>m</i>	300	500	800	1000	2000	3000
1	0	0	8.73E-19	1.97E-19	4.09E-20	1.80E-20	1.01E-21	1.53E-22
2			2.49E-18	3.05E-19	3.52E-20	1.19E-20	3.37E-22	3.83E-23
2	0	0	4.20E-19	8.56E-20	1.45E-20	5.66E-21	2.25E-22	2.89E-23
2	1		2.07E-18	2.19E-19	2.07E-20	6.22E-21	1.13E-22	9.36E-24
2	1	0	1.62E-18	1.76E-19	1.68E-20	5.06E-21	9.17E-23	7.56E-24
2	1	1	2.27E-19	2.17E-20	1.95E-21	5.80E-22	1.06E-23	9.01E-25
3			1.80E-18	1.71E-19	1.63E-20	5.12E-21	1.23E-22	1.31E-23
3	0	0	1.77E-19	3.42E-20	5.43E-21	2.06E-21	7.49E-23	9.38E-24
3	1		1.02E-18	1.02E-19	9.05E-21	2.63E-21	4.41E-23	3.54E-24
3	1	0	8.40E-19	8.51E-20	7.53E-21	2.19E-21	3.63E-23	2.89E-24
3	1	1	9.00E-20	8.65E-21	7.61E-22	2.23E-22	3.93E-24	3.29E-25
3	2		6.01E-19	3.46E-20	1.87E-21	4.34E-22	3.62E-24	1.93E-25
3	2	0	3.85E-19	2.28E-20	1.26E-21	2.92E-22	2.44E-24	1.30E-25
3	2	1	9.76E-20	5.34E-21	2.81E-22	6.45E-23	5.32E-25	2.84E-26
3	2	2	1.04E-20	5.40E-22	2.80E-23	6.44E-24	5.53E-26	3.09E-27
4			1.06E-18	9.17E-20	8.13E-21	2.48E-21	5.57E-23	5.78E-24
4	0	0	8.53E-20	1.61E-20	2.50E-21	9.34E-22	3.30E-23	4.04E-24
4	1		5.15E-19	5.07E-20	4.36E-21	1.25E-21	2.04E-23	1.62E-24
4	1	0	4.31E-19	4.26E-20	3.66E-21	1.05E-21	1.68E-23	1.32E-24
4	1	1	4.20E-20	4.04E-21	3.52E-22	1.03E-22	1.78E-24	1.48E-25
4	2		3.86E-19	2.22E-20	1.19E-21	2.73E-22	2.23E-24	1.18E-25
4	2	0	2.55E-19	1.50E-20	8.06E-22	1.86E-22	1.52E-24	8.00E-26
4	2	1	5.97E-20	3.30E-21	1.73E-22	3.97E-23	3.25E-25	1.73E-26
4	2	2	5.88E-21	3.17E-22	1.67E-23	3.85E-24	3.32E-26	1.86E-27
4	3		7.57E-20	2.64E-21	8.91E-23	1.65E-23	6.84E-26	2.43E-27
4	3	0	3.90E-20	1.40E-21	4.82E-23	8.96E-24	3.75E-26	1.33E-27
4	3	1	1.53E-20	5.20E-22	1.73E-23	3.20E-24	1.32E-26	4.68E-28
4	3	2	2.82E-21	8.99E-23	2.88E-24	5.23E-25	2.11E-27	7.49E-29
4	3	3	2.45E-22	7.63E-24	2.45E-25	4.50E-26	1.93E-28	7.22E-30
5			6.38E-19	5.25E-20	4.50E-21	1.35E-21	2.95E-23	3.03E-24
5	0	0	4.66E-20	8.70E-21	1.33E-21	4.95E-22	1.72E-23	2.10E-24
5	1		2.86E-19	2.80E-20	2.38E-21	6.79E-22	1.09E-23	8.60E-25
5	1	0	2.41E-19	2.36E-20	2.00E-21	5.69E-22	9.01E-24	7.03E-25
5	1	1	2.25E-20	2.17E-21	1.88E-22	5.46E-23	9.43E-25	7.84E-26
5	2		2.35E-19	1.35E-20	7.14E-22	1.64E-22	1.33E-24	7.01E-26
5	2	0	1.57E-19	9.17E-21	4.89E-22	1.12E-22	9.03E-25	4.75E-26
5	2	1	3.54E-20	1.97E-21	1.03E-22	2.36E-23	1.92E-25	1.02E-26
5	2	2	3.36E-21	1.85E-22	9.76E-24	2.26E-24	1.95E-26	1.09E-27
5	3		6.46E-20	2.28E-21	7.71E-23	1.43E-23	5.91E-26	2.10E-27
5	3	0	3.39E-20	1.23E-21	4.21E-23	7.81E-24	3.25E-26	1.15E-27
5	3	1	1.28E-20	4.44E-22	1.49E-23	2.75E-24	1.13E-26	4.03E-28
5	3	2	2.30E-21	7.52E-23	2.44E-24	4.45E-25	1.81E-27	6.42E-29
5	3	3	1.94E-22	6.29E-24	2.06E-25	3.80E-26	1.65E-28	6.17E-30
5	4		5.91E-21	1.29E-22	2.81E-24	4.19E-25	8.86E-28	2.12E-29
5	4	0	2.49E-21	5.61E-23	1.23E-24	1.85E-25	3.94E-28	9.42E-30

Табела 4 (наставак)

5	4	1	1.31E-21	2.85E-23	6.17E-25	9.21E-26	1.95E-28	4.65E-30
5	4	2	3.45E-22	7.08E-24	1.47E-25	2.17E-26	4.47E-29	1.06E-30
5	4	3	5.21E-23	1.01E-24	2.03E-26	2.96E-27	5.99E-30	1.42E-31
5	4	4	3.86E-24	7.46E-26	1.52E-27	2.24E-28	4.84E-31	1.21E-32
Сумирани			8.17E-18	9.25E-19	1.14E-19	4.16E-20	1.61E-21	2.19E-22

Табела 5. Ефикасни пресеци за електронски захват из атома $H(1s)$ од стране B^{5+} јона

Финално стање			Енергија (keV/amu)					
n	l	m	20	40	60	80	100	150
1	0	0	5.00E-17	2.26E-17	1.36E-17	9.18E-18	6.61E-18	3.48E-18
2			1.56E-15	5.22E-16	2.48E-16	1.38E-16	8.40E-17	3.07E-17
2	0	0	4.03E-16	1.02E-16	3.84E-17	1.78E-17	9.36E-18	2.74E-18
2	1		1.15E-15	4.20E-16	2.09E-16	1.20E-16	7.46E-17	2.79E-17
2	1	0	4.79E-16	2.10E-16	1.17E-16	7.20E-17	4.71E-17	1.91E-17
2	1	1	3.37E-16	1.05E-16	4.62E-17	2.40E-17	1.37E-17	4.43E-18
3			3.47E-15	1.22E-15	5.50E-16	2.82E-16	1.58E-16	4.70E-17
3	0	0	2.59E-16	8.34E-17	3.71E-17	1.85E-17	9.83E-18	2.47E-18
3	1		9.41E-16	2.51E-16	1.00E-16	5.20E-17	3.18E-17	1.27E-17
3	1	0	5.91E-16	1.74E-16	7.30E-17	3.89E-17	2.41E-17	9.96E-18
3	1	1	1.75E-16	3.83E-17	1.37E-17	6.59E-18	3.81E-18	1.38E-18
3	2		2.27E-15	8.87E-16	4.13E-16	2.12E-16	1.16E-16	3.18E-17
3	2	0	8.67E-16	3.87E-16	1.97E-16	1.07E-16	6.17E-17	1.82E-17
3	2	1	5.54E-16	2.06E-16	9.12E-17	4.47E-17	2.35E-17	5.96E-18
3	2	2	1.47E-16	4.36E-17	1.68E-17	7.49E-18	3.67E-18	8.27E-19
4			1.76E-15	1.00E-15	4.97E-16	2.57E-16	1.41E-16	3.88E-17
4	0	0	6.56E-17	3.68E-17	1.95E-17	1.07E-17	6.01E-18	1.57E-18
4	1		2.11E-16	1.13E-16	5.41E-17	2.83E-17	1.67E-17	6.39E-18
4	1	0	1.63E-16	8.95E-17	4.34E-17	2.28E-17	1.35E-17	5.21E-18
4	1	1	2.39E-17	1.19E-17	5.38E-18	2.74E-18	1.60E-18	5.91E-19
4	2		3.98E-16	2.41E-16	1.44E-16	8.82E-17	5.48E-17	1.79E-17
4	2	0	2.05E-16	1.29E-16	7.96E-17	5.03E-17	3.21E-17	1.10E-17
4	2	1	8.44E-17	4.93E-17	2.85E-17	1.68E-17	1.01E-17	3.07E-18
4	2	2	1.21E-17	6.68E-18	3.74E-18	2.13E-18	1.24E-18	3.53E-19
4	3		1.09E-15	6.10E-16	2.79E-16	1.30E-16	6.34E-17	1.30E-17
4	3	0	3.75E-16	2.28E-16	1.11E-16	5.45E-17	2.77E-17	6.07E-18
4	3	1	2.56E-16	1.42E-16	6.41E-17	2.93E-17	1.40E-17	2.77E-18
4	3	2	8.83E-17	4.33E-17	1.78E-17	7.60E-18	3.45E-18	6.19E-19
4	3	3	1.27E-17	5.48E-18	2.08E-18	8.42E-19	3.68E-19	6.20E-20
5			4.53E-16	5.61E-16	3.34E-16	1.82E-16	1.01E-16	2.74E-17
5	0	0	1.41E-17	1.63E-17	1.03E-17	6.06E-18	3.55E-18	9.67E-19
5	1		4.31E-17	4.94E-17	2.90E-17	1.61E-17	9.55E-18	3.58E-18
5	1	0	3.58E-17	4.09E-17	2.41E-17	1.34E-17	7.93E-18	2.97E-18
5	1	1	3.69E-18	4.28E-18	2.47E-18	1.37E-18	8.12E-19	3.04E-19
5	2		7.48E-17	9.53E-17	6.68E-17	4.41E-17	2.89E-17	1.02E-17
5	2	0	4.48E-17	5.65E-17	3.97E-17	2.65E-17	1.77E-17	6.52E-18
5	2	1	1.36E-17	1.75E-17	1.22E-17	7.90E-18	5.05E-18	1.68E-18
5	2	2	1.40E-18	1.90E-18	1.35E-18	8.74E-19	5.51E-19	1.77E-19
5	3		1.32E-16	1.97E-16	1.31E-16	7.41E-17	4.07E-17	9.69E-18
5	3	0	5.40E-17	8.17E-17	5.63E-17	3.31E-17	1.88E-17	4.74E-18
5	3	1	3.02E-17	4.51E-17	2.94E-17	1.63E-17	8.81E-18	2.02E-18
5	3	2	7.87E-18	1.15E-17	7.16E-18	3.79E-18	1.97E-18	4.19E-19
5	3	3	8.32E-19	1.21E-18	7.25E-19	3.74E-19	1.89E-19	3.89E-20
5	4		1.89E-16	2.03E-16	9.70E-17	4.20E-17	1.85E-17	2.93E-18
5	4	0	5.88E-17	6.60E-17	3.32E-17	1.50E-17	6.81E-18	1.14E-18
5	4	1	4.30E-17	4.63E-17	2.22E-17	9.57E-18	4.20E-18	6.56E-19
5	4	2	1.77E-17	1.78E-17	8.01E-18	3.28E-18	1.38E-18	2.00E-19

Табела 5 (наставак)

5	4	3	3.98E-18	3.75E-18	1.60E-18	6.27E-19	2.55E-19	3.47E-20
5	4	4	3.83E-19	3.41E-19	1.39E-19	5.32E-20	2.12E-20	2.79E-21
6			1.20E-16	3.03E-16	2.14E-16	1.23E-16	6.98E-17	1.89E-17
6	0	0	3.83E-18	8.04E-18	5.84E-18	3.64E-18	2.19E-18	6.16E-19
6	1		1.14E-17	2.42E-17	1.66E-17	9.77E-18	5.87E-18	2.18E-18
6	1	0	9.73E-18	2.04E-17	1.40E-17	8.24E-18	4.94E-18	1.83E-18
6	1	1	8.46E-19	1.89E-18	1.30E-18	7.67E-19	4.66E-19	1.77E-19
6	2		1.90E-17	4.50E-17	3.60E-17	2.50E-17	1.69E-17	6.25E-18
6	2	0	1.22E-17	2.80E-17	2.22E-17	1.55E-17	1.06E-17	4.05E-18
6	2	1	3.15E-18	7.75E-18	6.26E-18	4.31E-18	2.85E-18	1.00E-18
6	2	2	2.79E-19	7.50E-19	6.33E-19	4.42E-19	2.92E-19	1.00E-19
6	3		2.88E-17	8.38E-17	6.85E-17	4.32E-17	2.53E-17	6.56E-18
6	3	0	1.30E-17	3.68E-17	3.07E-17	2.00E-17	1.20E-17	3.28E-18
6	3	1	6.37E-18	1.87E-17	1.51E-17	9.38E-18	5.40E-18	1.35E-18
6	3	2	1.43E-18	4.34E-18	3.42E-18	2.05E-18	1.14E-18	2.68E-19
6	3	3	1.30E-19	4.10E-19	3.20E-19	1.89E-19	1.04E-19	2.38E-20
6	4		3.56E-17	9.78E-17	6.47E-17	3.30E-17	1.60E-17	2.84E-18
6	4	0	1.20E-17	3.35E-17	2.30E-17	1.21E-17	6.06E-18	1.13E-18
6	4	1	8.15E-18	2.24E-17	1.48E-17	7.49E-18	3.61E-18	6.33E-19
6	4	2	3.00E-18	8.03E-18	5.04E-18	2.44E-18	1.13E-18	1.85E-19
6	4	3	5.93E-19	1.55E-18	9.39E-19	4.41E-19	1.99E-19	3.11E-20
6	4	4	5.02E-20	1.29E-19	7.65E-20	3.53E-20	1.58E-20	2.42E-21
6	5		2.11E-17	4.41E-17	2.21E-17	8.93E-18	3.57E-18	4.41E-19
6	5	0	5.94E-18	1.28E-17	6.66E-18	2.78E-18	1.14E-18	1.47E-19
6	5	1	4.60E-18	9.71E-18	4.90E-18	1.99E-18	7.97E-19	9.87E-20
6	5	2	2.20E-18	4.45E-18	2.14E-18	8.35E-19	3.24E-19	3.77E-20
6	5	3	6.52E-19	1.26E-18	5.80E-19	2.18E-19	8.20E-20	9.01E-21
6	5	4	1.10E-19	2.05E-19	9.14E-20	3.35E-20	1.23E-20	1.30E-21
6	5	5	8.23E-21	1.49E-20	6.50E-21	2.35E-21	8.55E-22	8.86E-23
Сумирани			7.72E-15	4.40E-15	2.40E-15	1.31E-15	7.38E-16	2.14E-16

Финално стање			Енергија (keV/amu)					
n	l	m	300	500	800	1000	2000	3000
1	0	0	8.14E-19	2.08E-19	4.98E-20	2.36E-20	1.73E-21	3.01E-22
2			3.69E-18	5.45E-19	7.29E-20	2.61E-20	8.50E-22	1.02E-22
2	0	0	3.88E-19	9.65E-20	2.09E-20	9.10E-21	4.69E-22	6.72E-23
2	1		3.30E-18	4.48E-19	5.20E-20	1.70E-20	3.80E-22	3.44E-23
2	1	0	2.47E-18	3.49E-19	4.13E-20	1.36E-20	3.05E-22	2.75E-23
2	1	1	4.15E-19	4.96E-20	5.36E-21	1.72E-21	3.78E-23	3.47E-24
3			3.69E-18	3.97E-19	4.13E-20	1.33E-20	3.41E-22	3.71E-23
3	0	0	1.89E-19	4.06E-20	8.36E-21	3.53E-21	1.65E-22	2.25E-23
3	1		1.71E-18	2.27E-19	2.47E-20	7.76E-21	1.56E-22	1.35E-23
3	1	0	1.39E-18	1.87E-19	2.04E-20	6.41E-21	1.28E-22	1.09E-23
3	1	1	1.59E-19	1.99E-20	2.14E-21	6.77E-22	1.43E-23	1.29E-24
3	2		1.79E-18	1.29E-19	8.27E-21	2.05E-21	2.01E-23	1.15E-24
3	2	0	1.13E-18	8.43E-20	5.50E-21	1.37E-21	1.35E-23	7.67E-25
3	2	1	2.98E-19	2.02E-20	1.25E-21	3.07E-22	2.97E-24	1.69E-25
3	2	2	3.55E-20	2.24E-21	1.35E-22	3.30E-23	3.27E-25	1.94E-26
4			2.53E-18	2.37E-19	2.22E-20	6.89E-21	1.61E-22	1.69E-23
4	0	0	1.00E-19	1.97E-20	3.94E-21	1.64E-21	7.38E-23	9.89E-24
4	1		8.80E-19	1.16E-19	1.23E-20	3.81E-21	7.37E-23	6.26E-24

Табела 5 (наставак)

4	1	0	7.34E-19	9.77E-20	1.03E-20	3.18E-21	6.06E-23	5.09E-24
4	1	1	7.33E-20	9.36E-21	9.99E-22	3.15E-22	6.55E-24	5.85E-25
4	2		1.16E-18	8.47E-20	5.35E-21	1.31E-21	1.25E-23	7.08E-25
4	2	0	7.64E-19	5.71E-20	3.64E-21	8.93E-22	8.49E-24	4.77E-25
4	2	1	1.79E-19	1.25E-20	7.79E-22	1.91E-22	1.82E-24	1.04E-25
4	2	2	1.90E-20	1.29E-21	7.96E-23	1.96E-23	1.97E-25	1.17E-26
4	3		3.84E-19	1.63E-20	6.39E-22	1.25E-22	6.00E-25	2.26E-26
4	3	0	1.96E-19	8.65E-21	3.45E-22	6.80E-23	3.28E-25	1.24E-26
4	3	1	7.74E-20	3.20E-21	1.24E-22	2.42E-23	1.15E-25	4.34E-27
4	3	2	1.51E-20	5.79E-22	2.13E-23	4.10E-24	1.89E-26	7.12E-28
4	3	3	1.40E-21	5.21E-23	1.92E-24	3.71E-25	1.81E-27	7.14E-29
5			1.63E-18	1.43E-19	1.28E-20	3.88E-21	8.66E-23	8.95E-24
5	0	0	5.74E-20	1.08E-20	2.13E-21	8.82E-22	3.89E-23	5.17E-24
5	1		4.95E-19	6.53E-20	6.79E-21	2.09E-21	3.97E-23	3.34E-24
5	1	0	4.17E-19	5.52E-20	5.72E-21	1.75E-21	3.27E-23	2.73E-24
5	1	1	3.91E-20	5.04E-21	5.36E-22	1.69E-22	3.48E-24	3.10E-25
5	2		7.10E-19	5.20E-20	3.26E-21	7.97E-22	7.50E-24	4.21E-25
5	2	0	4.77E-19	3.56E-20	2.24E-21	5.46E-22	5.10E-24	2.85E-25
5	2	1	1.06E-19	7.49E-21	4.66E-22	1.14E-22	1.08E-24	6.13E-26
5	2	2	1.06E-20	7.40E-22	4.64E-23	1.15E-23	1.15E-25	6.86E-27
5	3		3.23E-19	1.41E-20	5.54E-22	1.09E-22	5.19E-25	1.96E-26
5	3	0	1.70E-19	7.61E-21	3.03E-22	5.97E-23	2.86E-25	1.08E-26
5	3	1	6.37E-20	2.71E-21	1.06E-22	2.08E-23	9.91E-26	3.73E-27
5	3	2	1.18E-20	4.76E-22	1.79E-23	3.46E-24	1.62E-26	6.09E-28
5	3	3	1.05E-21	4.18E-23	1.58E-24	3.10E-25	1.54E-27	6.10E-29
5	4		4.86E-20	1.28E-21	3.19E-23	5.03E-24	1.22E-26	3.07E-28
5	4	0	2.04E-20	5.54E-22	1.40E-23	2.22E-24	5.41E-27	1.37E-28
5	4	1	1.07E-20	2.81E-22	6.97E-24	1.10E-24	2.67E-27	6.75E-29
5	4	2	2.90E-21	7.12E-23	1.69E-24	2.63E-25	6.17E-28	1.54E-29
5	4	3	4.57E-22	1.06E-23	2.41E-25	3.70E-26	8.49E-29	2.13E-30
5	4	4	3.53E-23	8.09E-25	1.87E-26	2.90E-27	7.11E-30	1.88E-31
6			1.08E-18	9.10E-20	7.88E-21	2.37E-21	5.15E-23	5.28E-24
6	0	0	3.55E-20	6.45E-21	1.27E-21	5.24E-22	2.29E-23	3.02E-24
6	1		3.02E-19	3.97E-20	4.10E-21	1.26E-21	2.36E-23	1.98E-24
6	1	0	2.56E-19	3.37E-20	3.46E-21	1.06E-21	1.95E-23	1.62E-24
6	1	1	2.31E-20	3.00E-21	3.18E-22	9.99E-23	2.05E-24	1.82E-25
6	2		4.50E-19	3.31E-20	2.06E-21	5.03E-22	4.70E-24	2.63E-25
6	2	0	3.06E-19	2.28E-20	1.42E-21	3.46E-22	3.20E-24	1.78E-25
6	2	1	6.59E-20	4.70E-21	2.92E-22	7.12E-23	6.75E-25	3.82E-26
6	2	2	6.39E-21	4.54E-22	2.87E-23	7.10E-24	7.16E-26	4.26E-27
6	3		2.33E-19	1.03E-20	4.05E-22	7.95E-23	3.79E-25	1.43E-26
6	3	0	1.24E-19	5.61E-21	2.23E-22	4.39E-23	2.09E-25	7.86E-27
6	3	1	4.53E-20	1.96E-21	7.70E-23	1.51E-23	7.21E-26	2.72E-27
6	3	2	8.21E-21	3.38E-22	1.28E-23	2.49E-24	1.17E-26	4.42E-28
6	3	3	7.14E-22	2.93E-23	1.13E-24	2.22E-25	1.11E-27	4.42E-29
6	4		5.19E-20	1.41E-21	3.54E-23	5.60E-24	1.36E-26	3.44E-28
6	4	0	2.21E-20	6.15E-22	1.57E-23	2.49E-24	6.07E-27	1.54E-28
6	4	1	1.14E-20	3.07E-22	7.71E-24	1.22E-24	2.98E-27	7.55E-29
6	4	2	3.00E-21	7.64E-23	1.85E-24	2.89E-25	6.85E-28	1.72E-29
6	4	3	4.65E-22	1.12E-23	2.62E-25	4.04E-26	9.41E-29	2.37E-30
6	4	4	3.53E-23	8.52E-25	2.02E-26	3.17E-27	7.88E-30	2.09E-31
6	5		4.24E-21	7.08E-23	1.13E-24	1.45E-25	1.79E-28	3.05E-30
6	5	0	1.50E-21	2.58E-23	4.19E-25	5.36E-26	6.68E-29	1.14E-30

Табела 5 (наставак)

6	5	1	9.53E-22	1.60E-23	2.57E-25	3.28E-26	4.07E-29	6.94E-31
6	5	2	3.32E-22	5.31E-24	8.29E-26	1.05E-26	1.27E-29	2.15E-31
6	5	3	7.19E-23	1.08E-24	1.61E-26	2.00E-27	2.35E-30	3.92E-32
6	5	4	9.65E-24	1.38E-25	1.99E-27	2.45E-28	2.83E-31	4.73E-33
6	5	5	6.45E-25	9.24E-27	1.36E-28	1.69E-29	2.09E-32	3.69E-34
Сумирани			1.62E-17	1.85E-18	2.27E-19	8.23E-20	3.35E-21	4.84E-22

Табела 6. Ефикасни пресеци за електронски захват из атома $H(1s)$ од стране C^{6+} јона

Финално стање			Енергија (keV/amu)					
n	l	m	20	40	60	80	100	150
1	0	0	2.47E-17	1.16E-17	7.25E-18	5.11E-18	3.84E-18	2.18E-18
2			1.09E-15	4.09E-16	2.05E-16	1.18E-16	7.48E-17	2.98E-17
2	0	0	3.11E-16	1.00E-16	4.05E-17	1.94E-17	1.04E-17	3.08E-18
2	1		7.79E-16	3.09E-16	1.65E-16	9.90E-17	6.44E-17	2.68E-17
2	1	0	2.60E-16	1.29E-16	7.85E-17	5.17E-17	3.60E-17	1.66E-17
2	1	1	2.60E-16	9.00E-17	4.31E-17	2.37E-17	1.42E-17	5.06E-18
3			3.72E-15	1.30E-15	6.10E-16	3.28E-16	1.92E-16	6.31E-17
3	0	0	3.14E-16	9.40E-17	4.32E-17	2.32E-17	1.34E-17	4.02E-18
3	1		1.21E-15	3.26E-16	1.25E-16	5.94E-17	3.31E-17	1.22E-17
3	1	0	6.87E-16	2.10E-16	8.59E-17	4.23E-17	2.42E-17	9.26E-18
3	1	1	2.64E-16	5.82E-17	1.97E-17	8.55E-18	4.47E-18	1.47E-18
3	2		2.20E-15	8.78E-16	4.41E-16	2.45E-16	1.45E-16	4.69E-17
3	2	0	7.44E-16	3.49E-16	1.94E-16	1.17E-16	7.30E-17	2.57E-17
3	2	1	5.38E-16	2.09E-16	1.01E-16	5.36E-17	3.05E-17	9.08E-18
3	2	2	1.87E-16	5.57E-17	2.28E-17	1.09E-17	5.71E-18	1.48E-18
4			3.40E-15	1.51E-15	7.33E-16	3.86E-16	2.17E-16	6.41E-17
4	0	0	1.28E-16	5.16E-17	2.54E-17	1.42E-17	8.60E-18	2.78E-18
4	1		4.22E-16	1.73E-16	8.12E-17	4.09E-17	2.22E-17	6.95E-18
4	1	0	3.07E-16	1.33E-16	6.40E-17	3.27E-17	1.79E-17	5.64E-18
4	1	1	5.75E-17	2.01E-17	8.62E-18	4.10E-18	2.15E-18	6.53E-19
4	2		8.75E-16	3.22E-16	1.60E-16	9.52E-17	6.20E-17	2.43E-17
4	2	0	3.98E-16	1.63E-16	8.53E-17	5.28E-17	3.55E-17	1.47E-17
4	2	1	2.00E-16	6.88E-17	3.25E-17	1.86E-17	1.17E-17	4.24E-18
4	2	2	3.82E-17	1.05E-17	4.63E-18	2.56E-18	1.56E-18	5.33E-19
4	3		1.97E-15	9.67E-16	4.67E-16	2.35E-16	1.24E-16	3.01E-17
4	3	0	6.20E-16	3.38E-16	1.76E-16	9.44E-17	5.22E-17	1.37E-17
4	3	1	4.57E-16	2.25E-16	1.07E-16	5.33E-17	2.76E-17	6.45E-18
4	3	2	1.85E-16	7.79E-17	3.34E-17	1.53E-17	7.46E-18	1.56E-18
4	3	3	3.35E-17	1.17E-17	4.52E-18	1.93E-18	8.93E-19	1.72E-19
5			1.18E-15	1.00E-15	5.68E-16	3.12E-16	1.77E-16	5.05E-17
5	0	0	2.99E-17	2.42E-17	1.41E-17	8.36E-18	5.20E-18	1.76E-18
5	1		9.22E-17	7.70E-17	4.48E-17	2.49E-17	1.41E-17	4.27E-18
5	1	0	7.52E-17	6.32E-17	3.70E-17	2.07E-17	1.18E-17	3.56E-18
5	1	1	8.54E-18	6.93E-18	3.90E-18	2.10E-18	1.16E-18	3.51E-19
5	2		1.65E-16	1.36E-16	8.00E-17	4.93E-17	3.26E-17	1.35E-17
5	2	0	9.50E-17	8.00E-17	4.78E-17	2.97E-17	1.99E-17	8.53E-18
5	2	1	3.14E-17	2.52E-17	1.45E-17	8.79E-18	5.70E-18	2.23E-18
5	2	2	3.55E-18	2.75E-18	1.59E-18	9.80E-19	6.39E-19	2.47E-19
5	3		2.68E-16	2.65E-16	1.81E-16	1.14E-16	6.96E-17	2.07E-17
5	3	0	1.06E-16	1.08E-16	7.64E-17	4.98E-17	3.16E-17	1.00E-17
5	3	1	6.20E-17	6.07E-17	4.08E-17	2.52E-17	1.51E-17	4.31E-18
5	3	2	1.71E-17	1.63E-17	1.05E-17	6.19E-18	3.56E-18	9.41E-19
5	3	3	1.94E-18	1.82E-18	1.15E-18	6.57E-19	3.69E-19	9.33E-20
5	4		6.28E-16	5.01E-16	2.48E-16	1.16E-16	5.52E-17	1.03E-17
5	4	0	1.84E-16	1.56E-16	8.16E-17	3.99E-17	1.98E-17	3.94E-18
5	4	1	1.40E-16	1.13E-16	5.62E-17	2.62E-17	1.25E-17	2.31E-18
5	4	2	6.36E-17	4.71E-17	2.17E-17	9.56E-18	4.33E-18	7.33E-19

Табела 6 (наставак)

5	4	3	1.63E-17	1.09E-17	4.71E-18	1.97E-18	8.57E-19	1.35E-19
5	4	4	1.84E-18	1.11E-18	4.52E-19	1.81E-19	7.66E-20	1.15E-20
6			2.97E-16	5.61E-16	3.84E-16	2.25E-16	1.30E-16	3.71E-17
6	0	0	6.89E-18	1.16E-17	8.09E-18	5.10E-18	3.25E-18	1.14E-18
6	1		2.08E-17	3.62E-17	2.54E-17	1.53E-17	9.00E-18	2.74E-18
6	1	0	1.77E-17	3.06E-17	2.15E-17	1.30E-17	7.65E-18	2.33E-18
6	1	1	1.55E-18	2.81E-18	1.97E-18	1.17E-18	6.78E-19	2.09E-19
6	2		3.52E-17	6.25E-17	4.44E-17	2.87E-17	1.92E-17	8.14E-18
6	2	0	2.25E-17	3.95E-17	2.81E-17	1.81E-17	1.22E-17	5.27E-18
6	2	1	5.82E-18	1.05E-17	7.46E-18	4.81E-18	3.19E-18	1.30E-18
6	2	2	5.11E-19	9.69E-19	7.11E-19	4.75E-19	3.24E-19	1.34E-19
6	3		5.18E-17	1.07E-16	8.89E-17	6.19E-17	4.07E-17	1.34E-17
6	3	0	2.36E-17	4.80E-17	4.00E-17	2.85E-17	1.92E-17	6.71E-18
6	3	1	1.14E-17	2.38E-17	1.95E-17	1.34E-17	8.66E-18	2.75E-18
6	3	2	2.48E-18	5.45E-18	4.49E-18	3.02E-18	1.90E-18	5.67E-19
6	3	3	2.21E-19	5.18E-19	4.34E-19	2.91E-19	1.81E-19	5.29E-20
6	4		8.19E-17	1.85E-16	1.35E-16	7.77E-17	4.21E-17	9.29E-18
6	4	0	2.73E-17	6.22E-17	4.71E-17	2.81E-17	1.57E-17	3.68E-18
6	4	1	1.87E-17	4.22E-17	3.07E-17	1.76E-17	9.49E-18	2.06E-18
6	4	2	7.04E-18	1.57E-17	1.09E-17	5.97E-18	3.09E-18	6.23E-19
6	4	3	1.45E-18	3.19E-18	2.14E-18	1.13E-18	5.71E-19	1.09E-19
6	4	4	1.30E-19	2.83E-19	1.85E-19	9.61E-20	4.76E-20	8.89E-21
6	5		1.01E-16	1.58E-16	8.26E-17	3.62E-17	1.57E-17	2.30E-18
6	5	0	2.74E-17	4.45E-17	2.42E-17	1.10E-17	4.92E-18	7.57E-19
6	5	1	2.17E-17	3.44E-17	1.81E-17	8.00E-18	3.49E-18	5.12E-19
6	5	2	1.09E-17	1.65E-17	8.26E-18	3.49E-18	1.46E-18	2.01E-19
6	5	3	3.45E-18	4.94E-18	2.35E-18	9.55E-19	3.88E-19	4.99E-20
6	5	4	6.33E-19	8.60E-19	3.94E-19	1.55E-19	6.12E-20	7.52E-21
6	5	5	5.17E-20	6.71E-20	2.98E-20	1.14E-20	4.45E-21	5.33E-22
7			8.16E-17	3.14E-16	2.56E-16	1.59E-16	9.39E-17	2.69E-17
7	0	0	1.96E-18	6.12E-18	4.94E-18	3.27E-18	2.13E-18	7.62E-19
7	1		5.84E-18	1.88E-17	1.54E-17	9.87E-18	5.97E-18	1.84E-18
7	1	0	5.07E-18	1.62E-17	1.32E-17	8.46E-18	5.12E-18	1.58E-18
7	1	1	3.86E-19	1.34E-18	1.11E-18	7.08E-19	4.26E-19	1.34E-19
7	2		9.59E-18	3.21E-17	2.66E-17	1.80E-17	1.22E-17	5.25E-18
7	2	0	6.46E-18	2.11E-17	1.74E-17	1.17E-17	7.93E-18	3.45E-18
7	2	1	1.46E-18	5.09E-18	4.26E-18	2.90E-18	1.97E-18	8.21E-19
7	2	2	1.12E-19	4.24E-19	3.73E-19	2.67E-19	1.87E-19	8.08E-20
7	3		1.34E-17	5.22E-17	5.00E-17	3.71E-17	2.55E-17	8.98E-18
7	3	0	6.60E-18	2.46E-17	2.34E-17	1.76E-17	1.23E-17	4.56E-18
7	3	1	2.83E-18	1.12E-17	1.08E-17	7.92E-18	5.35E-18	1.81E-18
7	3	2	5.43E-19	2.34E-18	2.30E-18	1.69E-18	1.12E-18	3.61E-19
7	3	3	4.26E-20	2.03E-19	2.07E-19	1.53E-19	1.01E-19	3.24E-20
7	4		1.83E-17	8.32E-17	7.66E-17	4.98E-17	2.91E-17	7.09E-18
7	4	0	6.61E-18	2.94E-17	2.77E-17	1.86E-17	1.12E-17	2.87E-18
7	4	1	4.16E-18	1.90E-17	1.74E-17	1.13E-17	6.54E-18	1.57E-18
7	4	2	1.39E-18	6.55E-18	5.86E-18	3.65E-18	2.05E-18	4.58E-19
7	4	3	2.54E-19	1.23E-18	1.08E-18	6.61E-19	3.63E-19	7.80E-20
7	4	4	2.00E-20	1.00E-19	8.80E-20	5.32E-20	2.90E-20	6.15E-21
7	5		2.07E-17	8.55E-17	6.27E-17	3.26E-17	1.57E-17	2.62E-18
7	5	0	6.00E-18	2.51E-17	1.90E-17	1.02E-17	5.04E-18	8.82E-19
7	5	1	4.54E-18	1.88E-17	1.39E-17	7.25E-18	3.50E-18	5.84E-19
7	5	2	2.10E-18	8.56E-18	6.05E-18	3.04E-18	1.42E-18	2.23E-19

Табела 6 (наставак)

7 5 3	6.03E-19	2.41E-18	1.64E-18	7.99E-19	3.62E-19	5.38E-20
7 5 4	9.95E-20	3.91E-19	2.60E-19	1.24E-19	5.51E-20	7.90E-21
7 5 5	7.29E-21	2.84E-20	1.86E-20	8.75E-21	3.86E-21	5.46E-22
7 6	1.18E-17	3.61E-17	1.98E-17	8.12E-18	3.21E-18	3.70E-19
7 6 0	2.96E-18	9.30E-18	5.26E-18	2.22E-18	8.99E-19	1.08E-19
7 6 1	2.42E-18	7.51E-18	4.16E-18	1.73E-18	6.88E-19	8.01E-20
7 6 2	1.34E-18	4.03E-18	2.15E-18	8.63E-19	3.34E-19	3.70E-20
7 6 3	5.02E-19	1.45E-18	7.46E-19	2.89E-19	1.09E-19	1.14E-20
7 6 4	1.23E-19	3.43E-19	1.70E-19	6.42E-20	2.36E-20	2.35E-21
7 6 5	1.78E-20	4.84E-20	2.35E-20	8.67E-21	3.13E-21	3.02E-22
7 6 6	1.17E-21	3.11E-21	1.48E-21	5.42E-22	1.94E-22	1.85E-23
Сумирани	1.00E-14	6.06E-15	3.54E-15	2.02E-15	1.17E-15	3.55E-16

Финално стање			Енергија (keV/amu)					
<i>n</i>	<i>l</i>	<i>m</i>	300	500	800	1000	2000	3000
1	0	0	7.09E-19	2.03E-19	5.38E-20	2.70E-20	2.41E-21	4.74E-22
2			4.42E-18	7.73E-19	1.20E-19	4.55E-20	1.71E-21	2.17E-22
2	0	0	3.62E-19	9.16E-20	2.39E-20	1.15E-20	7.72E-22	1.24E-22
2	1		4.05E-18	6.81E-19	9.57E-20	3.40E-20	9.40E-22	9.32E-23
2	1	0	2.87E-18	5.10E-19	7.39E-20	2.65E-20	7.41E-22	7.34E-23
2	1	1	5.92E-19	8.54E-20	1.09E-20	3.75E-21	9.94E-23	9.91E-24
3			5.98E-18	7.30E-19	8.32E-20	2.78E-20	7.68E-22	8.58E-23
3	0	0	2.67E-19	4.19E-20	9.93E-21	4.66E-21	2.84E-22	4.30E-23
3	1		2.09E-18	3.63E-19	4.87E-20	1.66E-20	4.08E-22	3.81E-23
3	1	0	1.67E-18	2.97E-19	3.99E-20	1.36E-20	3.31E-22	3.06E-23
3	1	1	2.08E-19	3.35E-20	4.38E-21	1.50E-21	3.85E-23	3.74E-24
3	2		3.62E-18	3.25E-19	2.47E-20	6.54E-21	7.58E-23	4.65E-24
3	2	0	2.23E-18	2.09E-19	1.62E-20	4.33E-21	5.05E-23	3.09E-24
3	2	1	6.16E-19	5.15E-20	3.77E-21	9.89E-22	1.13E-23	6.92E-25
3	2	2	8.32E-20	6.36E-21	4.44E-22	1.15E-22	1.33E-24	8.37E-26
4			4.79E-18	4.91E-19	4.89E-20	1.55E-20	3.77E-22	4.02E-23
4	0	0	1.72E-19	2.15E-20	4.78E-21	2.22E-21	1.30E-22	1.92E-23
4	1		1.08E-18	1.91E-19	2.50E-20	8.41E-21	1.96E-22	1.79E-23
4	1	0	8.96E-19	1.59E-19	2.09E-20	7.00E-21	1.61E-22	1.45E-23
4	1	1	9.33E-20	1.56E-20	2.06E-21	7.04E-22	1.77E-23	1.71E-24
4	2		2.32E-18	2.16E-19	1.63E-20	4.28E-21	4.81E-23	2.90E-24
4	2	0	1.52E-18	1.46E-19	1.11E-20	2.91E-21	3.25E-23	1.95E-24
4	2	1	3.59E-19	3.18E-20	2.36E-21	6.19E-22	6.99E-24	4.25E-25
4	2	2	4.12E-20	3.52E-21	2.58E-22	6.79E-23	7.96E-25	5.04E-26
4	3		1.21E-18	6.29E-20	2.87E-21	5.98E-22	3.32E-24	1.33E-25
4	3	0	6.14E-19	3.32E-20	1.55E-21	3.24E-22	1.82E-24	7.31E-26
4	3	1	2.44E-19	1.23E-20	5.52E-22	1.15E-22	6.34E-25	2.55E-26
4	3	2	5.06E-20	2.34E-21	9.92E-23	2.02E-23	1.08E-25	4.29E-27
4	3	3	5.05E-21	2.25E-22	9.46E-24	1.94E-24	1.08E-26	4.50E-28
5			3.36E-18	3.16E-19	2.94E-20	9.07E-21	2.08E-22	2.16E-23
5	0	0	1.08E-19	1.21E-20	2.61E-21	1.20E-21	6.90E-23	1.01E-23
5	1		6.13E-19	1.08E-19	1.40E-20	4.69E-21	1.07E-22	9.66E-24
5	1	0	5.14E-19	9.14E-20	1.18E-20	3.93E-21	8.78E-23	7.84E-24
5	1	1	4.91E-20	8.37E-21	1.11E-21	3.78E-22	9.46E-24	9.09E-25
5	2		1.41E-18	1.34E-19	1.00E-20	2.63E-21	2.90E-23	1.73E-24
5	2	0	9.52E-19	9.21E-20	6.92E-21	1.81E-21	1.97E-23	1.17E-24

Табела 6 (наставак)

5	2	1	2.09E-19	1.90E-20	1.41E-21	3.71E-22	4.16E-24	2.52E-25
5	2	2	2.22E-20	1.99E-21	1.49E-22	3.95E-23	4.67E-25	2.96E-26
5	3		9.97E-19	5.40E-20	2.49E-21	5.20E-22	2.88E-24	1.16E-25
5	3	0	5.25E-19	2.94E-20	1.37E-21	2.87E-22	1.59E-24	6.36E-26
5	3	1	1.95E-19	1.03E-20	4.71E-22	9.82E-23	5.45E-25	2.19E-26
5	3	2	3.78E-20	1.87E-21	8.23E-23	1.69E-23	9.16E-26	3.67E-27
5	3	3	3.56E-21	1.74E-22	7.68E-24	1.60E-24	9.12E-27	3.83E-28
5	4		2.30E-19	7.32E-21	2.10E-22	3.50E-23	9.74E-26	2.61E-27
5	4	0	9.59E-20	3.16E-21	9.23E-23	1.55E-23	4.34E-26	1.17E-27
5	4	1	5.05E-20	1.59E-21	4.56E-23	7.63E-24	2.13E-26	5.72E-28
5	4	2	1.41E-20	4.13E-22	1.13E-23	1.85E-24	4.97E-27	1.32E-28
5	4	3	2.33E-21	6.41E-23	1.67E-24	2.70E-25	7.05E-28	1.86E-29
5	4	4	1.89E-22	5.12E-24	1.35E-25	2.20E-26	6.13E-29	1.70E-30
6			2.32E-18	2.07E-19	1.86E-20	5.65E-21	1.25E-22	1.29E-23
6	0	0	7.03E-20	7.44E-21	1.56E-21	7.18E-22	4.08E-23	5.94E-24
6	1		3.75E-19	6.62E-20	8.54E-21	2.84E-21	6.38E-23	5.74E-24
6	1	0	3.17E-19	5.63E-20	7.22E-21	2.39E-21	5.26E-23	4.67E-24
6	1	1	2.89E-20	4.97E-21	6.58E-22	2.25E-22	5.60E-24	5.36E-25
6	2		8.97E-19	8.59E-20	6.41E-21	1.67E-21	1.82E-23	1.09E-24
6	2	0	6.12E-19	5.96E-20	4.45E-21	1.15E-21	1.24E-23	7.36E-25
6	2	1	1.29E-19	1.19E-20	8.89E-22	2.33E-22	2.60E-24	1.57E-25
6	2	2	1.31E-20	1.21E-21	9.20E-23	2.44E-23	2.90E-25	1.84E-26
6	3		7.12E-19	3.94E-20	1.82E-21	3.81E-22	2.11E-24	8.42E-26
6	3	0	3.83E-19	2.17E-20	1.01E-21	2.12E-22	1.17E-24	4.65E-26
6	3	1	1.36E-19	7.40E-21	3.41E-22	7.14E-23	3.97E-25	1.59E-26
6	3	2	2.56E-20	1.32E-21	5.87E-23	1.21E-23	6.62E-26	2.65E-27
6	3	3	2.33E-21	1.20E-22	5.42E-24	1.13E-24	6.57E-27	2.77E-28
6	4		2.39E-19	7.93E-21	2.31E-22	3.88E-23	1.09E-25	2.92E-27
6	4	0	1.02E-19	3.49E-21	1.03E-22	1.73E-23	4.87E-26	1.31E-27
6	4	1	5.20E-20	1.72E-21	5.01E-23	8.42E-24	2.37E-26	6.39E-28
6	4	2	1.40E-20	4.34E-22	1.22E-23	2.01E-24	5.49E-27	1.46E-28
6	4	3	2.26E-21	6.63E-23	1.79E-24	2.92E-25	7.77E-28	2.07E-29
6	4	4	1.79E-22	5.24E-24	1.43E-25	2.37E-26	6.75E-29	1.89E-30
6	5		2.95E-20	5.90E-22	1.08E-23	1.46E-24	2.07E-27	3.72E-29
6	5	0	1.04E-20	2.15E-22	4.00E-24	5.42E-25	7.72E-28	1.39E-29
6	5	1	6.60E-21	1.33E-22	2.45E-24	3.30E-25	4.69E-28	8.47E-30
6	5	2	2.34E-21	4.46E-23	7.95E-25	1.06E-25	1.47E-28	2.64E-30
6	5	3	5.22E-22	9.28E-24	1.57E-25	2.06E-26	2.75E-29	4.84E-31
6	5	4	7.26E-23	1.23E-24	2.01E-26	2.60E-27	3.39E-30	5.99E-32
6	5	5	5.01E-24	8.48E-26	1.41E-27	1.85E-28	2.59E-31	4.81E-33
7			1.63E-18	1.41E-19	1.23E-20	3.72E-21	8.06E-23	8.23E-24
7	0	0	4.75E-20	4.85E-21	1.01E-21	4.61E-22	2.60E-23	3.78E-24
7	1		2.45E-19	4.32E-20	5.54E-21	1.84E-21	4.10E-23	3.67E-24
7	1	0	2.08E-19	3.68E-20	4.70E-21	1.55E-21	3.39E-23	2.99E-24
7	1	1	1.84E-20	3.18E-21	4.22E-22	1.44E-22	3.57E-24	3.42E-25
7	2		5.96E-19	5.74E-20	4.27E-21	1.11E-21	1.21E-23	7.17E-25
7	2	0	4.10E-19	4.01E-20	2.98E-21	7.71E-22	8.24E-24	4.86E-25
7	2	1	8.47E-20	7.88E-21	5.87E-22	1.54E-22	1.72E-24	1.04E-25
7	2	2	8.34E-21	7.86E-22	6.00E-23	1.60E-23	1.90E-25	1.21E-26
7	3		5.03E-19	2.82E-20	1.31E-21	2.73E-22	1.51E-24	6.03E-26
7	3	0	2.74E-19	1.57E-20	7.32E-22	1.53E-22	8.37E-25	3.34E-26
7	3	1	9.55E-20	5.25E-21	2.43E-22	5.09E-23	2.84E-25	1.14E-26
7	3	2	1.75E-20	9.20E-22	4.15E-23	8.59E-24	4.71E-26	1.89E-27

Табела 6 (наставак)

7 3 3	1.56E-21	8.27E-23	3.80E-24	7.98E-25	4.66E-27	1.97E-28
7 4	1.98E-19	6.74E-21	1.98E-22	3.34E-23	9.39E-26	2.53E-27
7 4 0	8.61E-20	2.99E-21	8.89E-23	1.50E-23	4.22E-26	1.13E-27
7 4 1	4.29E-20	1.45E-21	4.28E-23	7.22E-24	2.04E-26	5.51E-28
7 4 2	1.13E-20	3.62E-22	1.03E-23	1.71E-24	4.72E-27	1.26E-28
7 4 3	1.80E-21	5.47E-23	1.50E-24	2.47E-25	6.66E-28	1.78E-29
7 4 4	1.40E-22	4.29E-24	1.20E-25	2.00E-26	5.78E-29	1.63E-30
7 5	3.77E-20	7.84E-22	1.47E-23	1.99E-24	2.84E-27	5.14E-29
7 5 0	1.35E-20	2.88E-22	5.45E-24	7.41E-25	1.06E-27	1.93E-29
7 5 1	8.43E-21	1.76E-22	3.31E-24	4.49E-25	6.45E-28	1.17E-29
7 5 2	2.93E-21	5.83E-23	1.06E-24	1.43E-25	2.01E-28	3.62E-30
7 5 3	6.43E-22	1.20E-23	2.09E-25	2.76E-26	3.74E-29	6.64E-31
7 5 4	8.85E-23	1.58E-24	2.66E-26	3.47E-27	4.63E-30	8.22E-32
7 5 5	6.05E-24	1.09E-25	1.87E-27	2.48E-28	3.53E-31	6.61E-33
7 6	2.78E-21	3.54E-23	4.21E-25	4.58E-26	3.32E-29	4.03E-31
7 6 0	8.55E-22	1.12E-23	1.35E-25	1.47E-26	1.08E-29	1.31E-31
7 6 1	6.11E-22	7.86E-24	9.38E-26	1.02E-26	7.46E-30	9.05E-32
7 6 2	2.61E-22	3.23E-24	3.77E-26	4.09E-27	2.93E-30	3.54E-32
7 6 3	7.32E-23	8.57E-25	9.62E-27	1.03E-27	7.16E-31	8.56E-33
7 6 4	1.38E-23	1.52E-25	1.63E-27	1.71E-28	1.14E-31	1.34E-33
7 6 5	1.67E-24	1.77E-26	1.83E-28	1.91E-29	1.25E-32	1.48E-34
7 6 6	1.01E-25	1.08E-27	1.14E-29	1.21E-30	8.49E-34	1.05E-35
Сумирани	2.82E-17	3.29E-18	4.03E-19	1.46E-19	5.92E-21	8.84E-22

Табела 7. Ефикасни пресеци за електронски захват из атома $H(1s)$ од стране N^{7+} јона

Финално стање			Енергија (keV/amu)					
n	l	m	20	40	60	80	100	150
1	0	0	1.30E-17	6.21E-18	3.97E-18	2.86E-18	2.20E-18	1.33E-18
2			7.78E-16	3.01E-16	1.63E-16	9.90E-17	6.42E-17	2.71E-17
2	0	0	2.29E-16	8.20E-17	3.98E-17	2.04E-17	1.13E-17	3.43E-18
2	1		5.49E-16	2.19E-16	1.23E-16	7.86E-17	5.30E-17	2.37E-17
2	1	0	1.67E-16	7.71E-17	5.02E-17	3.54E-17	2.57E-17	1.31E-17
2	1	1	1.91E-16	7.11E-17	3.66E-17	2.16E-17	1.36E-17	5.29E-18
3			3.47E-15	1.22E-15	5.93E-16	3.33E-16	2.03E-16	7.28E-17
3	0	0	3.23E-16	9.18E-17	4.28E-17	2.41E-17	1.48E-17	5.22E-18
3	1		1.29E-15	3.62E-16	1.45E-16	6.89E-17	3.72E-17	1.20E-17
3	1	0	6.64E-16	2.17E-16	9.40E-17	4.69E-17	2.61E-17	8.81E-18
3	1	1	3.11E-16	7.25E-17	2.54E-17	1.10E-17	5.55E-18	1.60E-18
3	2		1.86E-15	7.62E-16	4.05E-16	2.40E-16	1.51E-16	5.55E-17
3	2	0	5.64E-16	2.74E-16	1.64E-16	1.06E-16	7.10E-17	2.91E-17
3	2	1	4.46E-16	1.82E-16	9.39E-17	5.36E-17	3.25E-17	1.11E-17
3	2	2	2.01E-16	6.15E-17	2.65E-17	1.33E-17	7.35E-18	2.14E-18
4			4.74E-15	1.89E-15	9.16E-16	4.93E-16	2.85E-16	9.02E-17
4	0	0	2.03E-16	6.74E-17	3.05E-17	1.65E-17	1.00E-17	3.70E-18
4	1		6.70E-16	2.27E-16	1.06E-16	5.55E-17	3.09E-17	8.85E-18
4	1	0	4.46E-16	1.67E-16	8.14E-17	4.37E-17	2.47E-17	7.19E-18
4	1	1	1.12E-16	3.00E-17	1.23E-17	5.91E-18	3.10E-18	8.32E-19
4	2		1.44E-15	4.48E-16	1.90E-16	1.01E-16	6.31E-17	2.63E-17
4	2	0	5.82E-16	2.09E-16	9.60E-17	5.38E-17	3.47E-17	1.55E-17
4	2	1	3.43E-16	1.01E-16	4.05E-17	2.07E-17	1.24E-17	4.74E-18
4	2	2	8.45E-17	1.88E-17	6.54E-18	3.11E-18	1.79E-18	6.48E-19
4	3		2.43E-15	1.15E-15	5.89E-16	3.20E-16	1.81E-16	5.13E-17
4	3	0	7.01E-16	3.75E-16	2.10E-16	1.22E-16	7.33E-17	2.28E-17
4	3	1	5.49E-16	2.65E-16	1.35E-16	7.23E-17	4.04E-17	1.10E-17
4	3	2	2.57E-16	1.04E-16	4.70E-17	2.30E-17	1.20E-17	2.91E-18
4	3	3	5.77E-17	1.86E-17	7.40E-18	3.33E-18	1.63E-18	3.57E-19
5			2.52E-15	1.55E-15	8.38E-16	4.62E-16	2.66E-16	8.00E-17
5	0	0	5.99E-17	3.48E-17	1.86E-17	1.05E-17	6.42E-18	2.38E-18
5	1		1.87E-16	1.09E-16	6.07E-17	3.49E-17	2.06E-17	6.13E-18
5	1	0	1.47E-16	8.84E-17	4.97E-17	2.89E-17	1.72E-17	5.16E-18
5	1	1	1.98E-17	1.05E-17	5.49E-18	3.02E-18	1.71E-18	4.85E-19
5	2		3.45E-16	2.01E-16	1.07E-16	5.93E-17	3.61E-17	1.46E-17
5	2	0	1.84E-16	1.14E-16	6.27E-17	3.56E-17	2.19E-17	9.11E-18
5	2	1	7.07E-17	3.88E-17	1.97E-17	1.07E-17	6.37E-18	2.44E-18
5	2	2	9.61E-18	4.60E-18	2.22E-18	1.19E-18	7.16E-19	2.80E-19
5	3		5.96E-16	3.38E-16	2.06E-16	1.34E-16	8.81E-17	3.18E-17
5	3	0	2.16E-16	1.33E-16	8.49E-17	5.73E-17	3.92E-17	1.52E-17
5	3	1	1.39E-16	7.78E-17	4.66E-17	2.96E-17	1.91E-17	6.61E-18
5	3	2	4.49E-17	2.22E-17	1.27E-17	7.73E-18	4.80E-18	1.53E-18
5	3	3	6.18E-18	2.67E-18	1.48E-18	8.81E-19	5.34E-19	1.63E-19
5	4		1.33E-15	8.70E-16	4.46E-16	2.23E-16	1.15E-16	2.51E-17
5	4	0	3.63E-16	2.58E-16	1.41E-16	7.44E-17	3.98E-17	9.40E-18
5	4	1	2.89E-16	1.94E-16	1.00E-16	5.02E-17	2.57E-17	5.57E-18
5	4	2	1.45E-16	8.72E-17	4.14E-17	1.95E-17	9.46E-18	1.86E-18

Табела 7 (наставак)

5	4	3	4.30E-17	2.26E-17	9.87E-18	4.36E-18	2.02E-18	3.67E-19
5	4	4	5.84E-18	2.64E-18	1.06E-18	4.42E-19	1.97E-19	3.35E-20
6			7.34E-16	9.45E-16	6.13E-16	3.59E-16	2.11E-16	6.28E-17
6	0	0	1.37E-17	1.68E-17	1.10E-17	6.65E-18	4.15E-18	1.56E-18
6	1		4.18E-17	5.16E-17	3.48E-17	2.17E-17	1.34E-17	4.17E-18
6	1	0	3.52E-17	4.35E-17	2.94E-17	1.84E-17	1.14E-17	3.57E-18
6	1	1	3.30E-18	4.06E-18	2.70E-18	1.65E-18	9.96E-19	3.00E-19
6	2		7.20E-17	9.13E-17	6.06E-17	3.65E-17	2.26E-17	8.91E-18
6	2	0	4.50E-17	5.72E-17	3.84E-17	2.33E-17	1.45E-17	5.77E-18
6	2	1	1.24E-17	1.56E-17	1.02E-17	6.03E-18	3.70E-18	1.42E-18
6	2	2	1.16E-18	1.46E-18	9.49E-19	5.70E-19	3.59E-19	1.47E-19
6	3		1.08E-16	1.41E-16	1.02E-16	7.07E-17	4.91E-17	1.97E-17
6	3	0	4.77E-17	6.30E-17	4.62E-17	3.25E-17	2.31E-17	9.80E-18
6	3	1	2.40E-17	3.12E-17	2.24E-17	1.53E-17	1.04E-17	4.02E-18
6	3	2	5.52E-18	7.14E-18	5.15E-18	3.51E-18	2.36E-18	8.60E-19
6	3	3	5.17E-19	6.77E-19	5.03E-19	3.47E-19	2.34E-19	8.43E-20
6	4		1.64E-16	2.58E-16	1.98E-16	1.26E-16	7.58E-17	2.06E-17
6	4	0	5.35E-17	8.53E-17	6.76E-17	4.48E-17	2.79E-17	8.11E-18
6	4	1	3.74E-17	5.87E-17	4.48E-17	2.85E-17	1.70E-17	4.55E-18
6	4	2	1.46E-17	2.26E-17	1.66E-17	1.00E-17	5.75E-18	1.42E-18
6	4	3	3.16E-18	4.84E-18	3.44E-18	2.02E-18	1.12E-18	2.62E-19
6	4	4	2.99E-19	4.57E-19	3.18E-19	1.82E-19	9.92E-20	2.24E-20
6	5		3.35E-16	3.86E-16	2.07E-16	9.74E-17	4.56E-17	7.81E-18
6	5	0	8.67E-17	1.05E-16	5.89E-17	2.88E-17	1.39E-17	2.53E-18
6	5	1	7.03E-17	8.27E-17	4.49E-17	2.13E-17	1.00E-17	1.73E-18
6	5	2	3.77E-17	4.17E-17	2.14E-17	9.67E-18	4.36E-18	6.98E-19
6	5	3	1.31E-17	1.34E-17	6.48E-18	2.79E-18	1.21E-18	1.81E-19
6	5	4	2.68E-18	2.54E-18	1.16E-18	4.82E-19	2.03E-19	2.86E-20
6	5	5	2.48E-19	2.17E-19	9.46E-20	3.79E-20	1.56E-20	2.12E-21
7			1.85E-16	5.33E-16	4.21E-16	2.64E-16	1.59E-16	4.75E-17
7	0	0	3.34E-18	8.49E-18	6.68E-18	4.33E-18	2.77E-18	1.05E-18
7	1		1.00E-17	2.59E-17	2.09E-17	1.39E-17	8.91E-18	2.88E-18
7	1	0	8.70E-18	2.23E-17	1.79E-17	1.20E-17	7.67E-18	2.49E-18
7	1	1	6.63E-19	1.80E-18	1.47E-18	9.80E-19	6.19E-19	1.96E-19
7	2		1.68E-17	4.48E-17	3.61E-17	2.35E-17	1.49E-17	5.84E-18
7	2	0	1.13E-17	2.96E-17	2.38E-17	1.55E-17	9.87E-18	3.86E-18
7	2	1	2.55E-18	7.03E-18	5.66E-18	3.66E-18	2.32E-18	9.00E-19
7	2	2	1.95E-19	5.73E-19	4.74E-19	3.14E-19	2.06E-19	8.68E-20
7	3		2.37E-17	6.69E-17	5.78E-17	4.22E-17	3.02E-17	1.28E-17
7	3	0	1.17E-17	3.22E-17	2.77E-17	2.03E-17	1.47E-17	6.52E-18
7	3	1	4.99E-18	1.42E-17	1.23E-17	8.90E-18	6.29E-18	2.58E-18
7	3	2	9.44E-19	2.85E-18	2.54E-18	1.88E-18	1.33E-18	5.26E-19
7	3	3	7.25E-20	2.36E-19	2.23E-19	1.70E-19	1.23E-19	4.90E-20
7	4		3.24E-17	1.08E-16	1.03E-16	7.44E-17	4.87E-17	1.50E-17
7	4	0	1.18E-17	3.84E-17	3.71E-17	2.75E-17	1.85E-17	6.05E-18
7	4	1	7.37E-18	2.45E-17	2.33E-17	1.68E-17	1.09E-17	3.29E-18
7	4	2	2.43E-18	8.45E-18	7.97E-18	5.56E-18	3.50E-18	9.84E-19
7	4	3	4.36E-19	1.60E-18	1.52E-18	1.04E-18	6.44E-19	1.74E-19
7	4	4	3.41E-20	1.34E-19	1.28E-19	8.76E-20	5.36E-20	1.43E-20
7	5		4.75E-17	1.61E-16	1.29E-16	7.54E-17	4.03E-17	8.24E-18
7	5	0	1.36E-17	4.62E-17	3.83E-17	2.31E-17	1.27E-17	2.75E-18
7	5	1	1.03E-17	3.51E-17	2.83E-17	1.66E-17	8.91E-18	1.83E-18
7	5	2	4.89E-18	1.64E-17	1.27E-17	7.18E-18	3.71E-18	7.10E-19

Табела 7 (наставак)

7 5 3	1.45E-18	4.81E-18	3.60E-18	1.96E-18	9.83E-19	1.77E-19
7 5 4	2.50E-19	8.21E-19	5.99E-19	3.18E-19	1.56E-19	2.71E-20
7 5 5	1.93E-20	6.30E-20	4.51E-20	2.35E-20	1.14E-20	1.94E-21
7 6	5.17E-17	1.18E-16	6.74E-17	2.99E-17	1.28E-17	1.74E-18
7 6 0	1.26E-17	2.98E-17	1.75E-17	8.02E-18	3.52E-18	5.00E-19
7 6 1	1.05E-17	2.43E-17	1.40E-17	6.30E-18	2.72E-18	3.73E-19
7 6 2	6.00E-18	1.35E-17	7.46E-18	3.23E-18	1.35E-18	1.75E-19
7 6 3	2.36E-18	5.07E-18	2.69E-18	1.12E-18	4.56E-19	5.56E-20
7 6 4	6.14E-19	1.26E-18	6.45E-19	2.61E-19	1.03E-19	1.19E-20
7 6 5	9.56E-20	1.89E-19	9.33E-20	3.68E-20	1.42E-20	1.58E-21
7 6 6	6.78E-21	1.29E-20	6.21E-21	2.40E-21	9.15E-22	1.00E-22
Сумирани	1.30E-14	8.06E-15	4.82E-15	2.81E-15	1.67E-15	5.26E-16

Финално стање			Енергија (keV/amu)					
<i>n</i>	<i>l</i>	<i>m</i>	300	500	800	1000	2000	3000
1	0	0	4.97E-19	1.88E-19	5.45E-20	2.86E-20	2.97E-21	6.47E-22
2			4.68E-18	9.45E-19	1.67E-19	6.74E-20	2.94E-21	3.97E-22
2	0	0	3.63E-19	8.26E-20	2.37E-20	1.24E-20	1.07E-21	1.93E-22
2	1		4.32E-18	8.62E-19	1.43E-19	5.50E-20	1.87E-21	2.04E-22
2	1	0	2.85E-18	6.16E-19	1.07E-19	4.16E-20	1.45E-21	1.58E-22
2	1	1	7.35E-19	1.23E-19	1.82E-20	6.70E-21	2.12E-22	2.30E-23
3			8.22E-18	1.14E-18	1.43E-19	4.97E-20	1.49E-21	1.71E-22
3	0	0	4.30E-19	4.88E-20	1.03E-20	5.18E-21	4.12E-22	6.98E-23
3	1		2.13E-18	4.66E-19	7.67E-20	2.86E-20	8.57E-22	8.71E-23
3	1	0	1.66E-18	3.75E-19	6.23E-20	2.32E-20	6.90E-22	6.95E-23
3	1	1	2.32E-19	4.56E-20	7.22E-21	2.68E-21	8.36E-23	8.83E-24
3	2		5.67E-18	6.24E-19	5.60E-20	1.59E-20	2.19E-22	1.45E-23
3	2	0	3.39E-18	3.95E-19	3.65E-20	1.05E-20	1.45E-22	9.58E-24
3	2	1	9.85E-19	1.00E-19	8.65E-21	2.43E-21	3.29E-23	2.17E-24
3	2	2	1.53E-19	1.39E-20	1.13E-21	3.11E-22	4.15E-24	2.79E-25
4			7.72E-18	8.68E-19	9.24E-20	3.00E-20	7.68E-22	8.31E-23
4	0	0	3.19E-19	2.93E-20	5.08E-21	2.50E-21	1.91E-22	3.17E-23
4	1		1.12E-18	2.47E-19	4.03E-20	1.48E-20	4.21E-22	4.17E-23
4	1	0	9.19E-19	2.05E-19	3.36E-20	1.23E-20	3.44E-22	3.36E-23
4	1	1	1.01E-19	2.08E-20	3.38E-21	1.26E-21	3.88E-23	4.06E-24
4	2		3.51E-18	4.18E-19	3.77E-20	1.06E-20	1.41E-22	9.15E-24
4	2	0	2.28E-18	2.81E-19	2.56E-20	7.23E-21	9.53E-23	6.13E-24
4	2	1	5.47E-19	6.12E-20	5.42E-21	1.53E-21	2.05E-23	1.34E-24
4	2	2	6.83E-20	7.33E-21	6.39E-22	1.80E-22	2.48E-24	1.68E-25
4	3		2.77E-18	1.75E-19	9.30E-21	2.06E-21	1.33E-23	5.73E-25
4	3	0	1.39E-18	9.22E-20	5.01E-21	1.12E-21	7.30E-24	3.13E-25
4	3	1	5.55E-19	3.39E-20	1.78E-21	3.93E-22	2.53E-24	1.09E-25
4	3	2	1.23E-19	6.84E-21	3.35E-22	7.24E-23	4.45E-25	1.89E-26
4	3	3	1.34E-20	7.06E-22	3.41E-23	7.36E-24	4.69E-26	2.07E-27
5			5.92E-18	5.97E-19	5.83E-20	1.83E-20	4.32E-22	4.54E-23
5	0	0	2.13E-19	1.80E-20	2.82E-21	1.37E-21	1.03E-22	1.68E-23
5	1		6.52E-19	1.41E-19	2.29E-20	8.36E-21	2.32E-22	2.26E-23
5	1	0	5.46E-19	1.19E-19	1.93E-20	7.00E-21	1.90E-22	1.83E-23
5	1	1	5.31E-20	1.10E-20	1.82E-21	6.78E-22	2.08E-23	2.16E-24
5	2		2.11E-18	2.60E-19	2.35E-20	6.60E-21	8.59E-23	5.51E-24
5	2	0	1.42E-18	1.79E-19	1.63E-20	4.55E-21	5.84E-23	3.71E-24

Табела 7 (наставак)

5	2	1	3.12E-19	3.64E-20	3.26E-21	9.19E-22	1.23E-23	8.00E-25
5	2	2	3.50E-20	4.06E-21	3.66E-22	1.04E-22	1.46E-24	9.86E-26
5	3		2.20E-18	1.49E-19	8.08E-21	1.80E-21	1.16E-23	4.97E-25
5	3	0	1.16E-18	8.15E-20	4.47E-21	9.95E-22	6.42E-24	2.74E-25
5	3	1	4.24E-19	2.79E-20	1.50E-21	3.35E-22	2.18E-24	9.36E-26
5	3	2	8.65E-20	5.32E-21	2.73E-22	5.99E-23	3.77E-25	1.61E-26
5	3	3	8.68E-21	5.24E-22	2.70E-23	5.96E-24	3.94E-26	1.75E-27
5	4		7.45E-19	2.86E-20	9.45E-22	1.67E-22	5.37E-25	1.53E-26
5	4	0	3.09E-19	1.23E-20	4.16E-22	7.41E-23	2.39E-25	6.84E-27
5	4	1	1.62E-19	6.18E-21	2.04E-22	3.62E-23	1.17E-25	3.34E-27
5	4	2	4.68E-20	1.64E-21	5.14E-23	8.93E-24	2.75E-26	7.76E-28
5	4	3	8.18E-21	2.67E-22	7.95E-24	1.35E-24	4.04E-27	1.13E-28
5	4	4	6.98E-22	2.24E-23	6.71E-25	1.16E-25	3.65E-28	1.07E-29
6			4.31E-18	4.07E-19	3.79E-20	1.17E-20	2.64E-22	2.72E-23
6	0	0	1.42E-19	1.16E-20	1.71E-21	8.21E-22	6.09E-23	9.90E-24
6	1		4.08E-19	8.64E-20	1.40E-20	5.10E-21	1.39E-22	1.35E-23
6	1	0	3.45E-19	7.33E-20	1.19E-20	4.30E-21	1.15E-22	1.09E-23
6	1	1	3.13E-20	6.52E-21	1.08E-21	4.03E-22	1.23E-23	1.28E-24
6	2		1.33E-18	1.67E-19	1.51E-20	4.22E-21	5.43E-23	3.46E-24
6	2	0	9.09E-19	1.17E-19	1.05E-20	2.94E-21	3.71E-23	2.34E-24
6	2	1	1.91E-19	2.28E-20	2.05E-21	5.78E-22	7.69E-24	5.00E-25
6	2	2	2.02E-20	2.44E-21	2.24E-22	6.41E-23	9.02E-25	6.12E-26
6	3		1.55E-18	1.08E-19	5.92E-21	1.32E-21	8.50E-24	3.63E-25
6	3	0	8.39E-19	6.04E-20	3.32E-21	7.39E-22	4.73E-24	2.01E-25
6	3	1	2.92E-19	1.99E-20	1.09E-21	2.43E-22	1.59E-24	6.82E-26
6	3	2	5.68E-20	3.68E-21	1.94E-22	4.27E-23	2.72E-25	1.17E-26
6	3	3	5.44E-21	3.53E-22	1.88E-23	4.20E-24	2.83E-26	1.27E-27
6	4		7.48E-19	3.05E-20	1.04E-21	1.84E-22	5.98E-25	1.71E-26
6	4	0	3.21E-19	1.35E-20	4.64E-22	8.28E-23	2.69E-25	7.68E-27
6	4	1	1.61E-19	6.53E-21	2.22E-22	3.97E-23	1.30E-25	3.73E-27
6	4	2	4.44E-20	1.68E-21	5.47E-23	9.61E-24	3.03E-26	8.59E-28
6	4	3	7.49E-21	2.68E-22	8.35E-24	1.44E-24	4.43E-27	1.25E-28
6	4	4	6.20E-22	2.21E-23	7.00E-25	1.23E-25	4.00E-28	1.18E-29
6	5		1.33E-19	3.19E-21	6.72E-23	9.57E-24	1.55E-26	2.97E-28
6	5	0	4.66E-20	1.16E-21	2.48E-23	3.55E-24	5.81E-27	1.11E-28
6	5	1	2.95E-20	7.13E-22	1.51E-23	2.16E-24	3.52E-27	6.75E-29
6	5	2	1.07E-20	2.42E-22	4.94E-24	6.97E-25	1.11E-27	2.11E-29
6	5	3	2.46E-21	5.18E-23	1.00E-24	1.38E-25	2.09E-28	3.91E-30
6	5	4	3.56E-22	7.11E-24	1.32E-25	1.80E-26	2.67E-29	4.97E-31
6	5	5	2.55E-23	5.08E-25	9.60E-27	1.33E-27	2.10E-30	4.11E-32
7			3.12E-18	2.84E-19	2.56E-20	7.79E-21	1.71E-22	1.75E-23
7	0	0	9.77E-20	7.78E-21	1.11E-21	5.29E-22	3.89E-23	6.31E-24
7	1		2.70E-19	5.64E-20	9.16E-21	3.32E-21	8.99E-23	8.66E-24
7	1	0	2.30E-19	4.81E-20	7.78E-21	2.80E-21	7.41E-23	7.03E-24
7	1	1	2.00E-20	4.16E-21	6.91E-22	2.58E-22	7.87E-24	8.15E-25
7	2		8.81E-19	1.12E-19	1.01E-20	2.82E-21	3.60E-23	2.29E-24
7	2	0	6.08E-19	7.89E-20	7.10E-21	1.97E-21	2.47E-23	1.55E-24
7	2	1	1.24E-19	1.50E-20	1.36E-21	3.82E-22	5.08E-24	3.29E-25
7	2	2	1.26E-20	1.57E-21	1.46E-22	4.18E-23	5.91E-25	4.01E-26
7	3		1.08E-18	7.75E-20	4.25E-21	9.47E-22	6.11E-24	2.60E-25
7	3	0	5.97E-19	4.37E-20	2.41E-21	5.34E-22	3.41E-24	1.44E-25
7	3	1	2.02E-19	1.41E-20	7.75E-22	1.73E-22	1.14E-24	4.87E-26
7	3	2	3.81E-20	2.55E-21	1.36E-22	3.01E-23	1.94E-25	8.31E-27

Табела 7 (наставак)

7	3	3	3.55E-21	2.40E-22	1.31E-23	2.94E-24	2.01E-26	9.00E-28
7	4		6.09E-19	2.57E-20	8.84E-22	1.58E-22	5.16E-25	1.48E-26
7	4	0	2.67E-19	1.15E-20	4.00E-22	7.15E-23	2.33E-25	6.65E-27
7	4	1	1.30E-19	5.46E-21	1.89E-22	3.39E-23	1.12E-25	3.21E-27
7	4	2	3.49E-20	1.38E-21	4.58E-23	8.11E-24	2.59E-26	7.38E-28
7	4	3	5.76E-21	2.17E-22	6.95E-24	1.21E-24	3.78E-27	1.07E-28
7	4	4	4.67E-22	1.77E-23	5.79E-25	1.03E-25	3.41E-28	1.01E-29
7	5		1.64E-19	4.16E-21	9.01E-23	1.29E-23	2.13E-26	4.09E-28
7	5	0	5.89E-20	1.53E-21	3.36E-23	4.84E-24	8.00E-27	1.54E-28
7	5	1	3.65E-20	9.29E-22	2.02E-23	2.91E-24	4.82E-27	9.29E-29
7	5	2	1.28E-20	3.10E-22	6.53E-24	9.30E-25	1.51E-27	2.88E-29
7	5	3	2.90E-21	6.53E-23	1.31E-24	1.83E-25	2.84E-28	5.34E-30
7	5	4	4.14E-22	8.90E-24	1.72E-25	2.38E-26	3.61E-29	6.79E-31
7	5	5	2.92E-23	6.33E-25	1.25E-26	1.75E-27	2.85E-30	5.62E-32
7	6		1.72E-20	2.62E-22	3.57E-24	4.11E-25	3.40E-28	4.37E-30
7	6	0	5.28E-21	8.28E-23	1.14E-24	1.32E-25	1.10E-28	1.42E-30
7	6	1	3.77E-21	5.80E-23	7.94E-25	9.16E-26	7.63E-29	9.82E-31
7	6	2	1.63E-21	2.40E-23	3.20E-25	3.67E-26	3.00E-29	3.85E-31
7	6	3	4.67E-22	6.47E-24	8.26E-26	9.30E-27	7.37E-30	9.33E-32
7	6	4	9.06E-23	1.17E-24	1.42E-26	1.57E-27	1.19E-30	1.48E-32
7	6	5	1.13E-23	1.41E-25	1.65E-27	1.81E-28	1.34E-31	1.67E-33
7	6	6	7.04E-25	8.79E-27	1.06E-28	1.17E-29	9.33E-33	1.22E-34
Сумирани			4.40E-17	5.29E-18	6.57E-19	2.37E-19	9.56E-21	1.44E-21

Табела 8. Ефикасни пресеци за електронски захват из атома $H(1s)$ од стране O^{8+} јона

Финално стање			Енергија (keV/amu)					
n	l	m	20	40	60	80	100	150
1	0	0	7.23E-18	3.50E-18	2.26E-18	1.65E-18	1.29E-18	8.07E-19
2			5.63E-16	2.24E-16	1.24E-16	7.92E-17	5.41E-17	2.40E-17
2	0	0	1.72E-16	6.33E-17	3.31E-17	1.97E-17	1.19E-17	3.78E-18
2	1		3.90E-16	1.61E-16	9.06E-17	5.95E-17	4.22E-17	2.02E-17
2	1	0	1.20E-16	5.29E-17	3.22E-17	2.34E-17	1.80E-17	9.87E-18
2	1	1	1.35E-16	5.41E-17	2.92E-17	1.81E-17	1.21E-17	5.17E-18
3			2.99E-15	1.08E-15	5.40E-16	3.13E-16	1.97E-16	7.61E-17
3	0	0	3.02E-16	8.45E-17	3.88E-17	2.24E-17	1.43E-17	5.72E-18
3	1		1.22E-15	3.68E-16	1.55E-16	7.61E-17	4.15E-17	1.27E-17
3	1	0	5.83E-16	2.05E-16	9.48E-17	4.96E-17	2.81E-17	9.01E-18
3	1	1	3.17E-16	8.16E-17	2.99E-17	1.33E-17	6.72E-18	1.82E-18
3	2		1.48E-15	6.26E-16	3.46E-16	2.14E-16	1.41E-16	5.77E-17
3	2	0	4.05E-16	2.05E-16	1.29E-16	8.75E-17	6.19E-17	2.87E-17
3	2	1	3.40E-16	1.47E-16	8.04E-17	4.85E-17	3.10E-17	1.18E-17
3	2	2	1.96E-16	6.31E-17	2.83E-17	1.48E-17	8.53E-18	2.72E-18
4			5.37E-15	2.06E-15	1.01E-15	5.61E-16	3.34E-16	1.13E-16
4	0	0	2.62E-16	8.13E-17	3.54E-17	1.84E-17	1.09E-17	4.12E-18
4	1		8.61E-16	2.65E-16	1.22E-16	6.64E-17	3.87E-17	1.18E-17
4	1	0	5.25E-16	1.84E-16	9.04E-17	5.09E-17	3.05E-17	9.59E-18
4	1	1	1.68E-16	4.06E-17	1.60E-17	7.72E-18	4.14E-18	1.12E-18
4	2		1.81E-15	5.63E-16	2.31E-16	1.15E-16	6.63E-17	2.60E-17
4	2	0	6.66E-16	2.43E-16	1.10E-16	5.77E-17	3.48E-17	1.48E-17
4	2	1	4.38E-16	1.30E-16	5.11E-17	2.43E-17	1.36E-17	4.88E-18
4	2	2	1.33E-16	2.93E-17	9.66E-18	4.13E-18	2.16E-18	7.24E-19
4	3		2.44E-15	1.15E-15	6.24E-16	3.61E-16	2.18E-16	7.09E-17
4	3	0	6.50E-16	3.52E-16	2.11E-16	1.32E-16	8.47E-17	3.06E-17
4	3	1	5.33E-16	2.60E-16	1.42E-16	8.12E-17	4.85E-17	1.52E-17
4	3	2	2.83E-16	1.15E-16	5.50E-17	2.87E-17	1.59E-17	4.38E-18
4	3	3	7.75E-17	2.44E-17	1.01E-17	4.78E-18	2.46E-18	6.03E-19
5			4.20E-15	2.11E-15	1.10E-15	6.10E-16	3.57E-16	1.13E-16
5	0	0	1.04E-16	4.70E-17	2.39E-17	1.31E-17	7.72E-18	2.77E-18
5	1		3.32E-16	1.46E-16	7.52E-17	4.31E-17	2.64E-17	8.76E-18
5	1	0	2.49E-16	1.16E-16	6.07E-17	3.53E-17	2.19E-17	7.38E-18
5	1	1	4.18E-17	1.53E-17	7.22E-18	3.90E-18	2.27E-18	6.87E-19
5	2		6.33E-16	2.76E-16	1.40E-16	7.59E-17	4.38E-17	1.54E-17
5	2	0	3.05E-16	1.49E-16	8.01E-17	4.48E-17	2.64E-17	9.51E-18
5	2	1	1.39E-16	5.59E-17	2.68E-17	1.39E-17	7.82E-18	2.63E-18
5	2	2	2.43E-17	7.53E-18	3.25E-18	1.61E-18	8.87E-19	3.03E-19
5	3		1.15E-15	4.64E-16	2.34E-16	1.42E-16	9.49E-17	3.92E-17
5	3	0	3.77E-16	1.72E-16	9.27E-17	5.91E-17	4.11E-17	1.85E-17
5	3	1	2.66E-16	1.07E-16	5.33E-17	3.17E-17	2.07E-17	8.15E-18
5	3	2	1.02E-16	3.42E-17	1.55E-17	8.78E-18	5.51E-18	2.00E-18
5	3	3	1.78E-17	4.66E-18	1.94E-18	1.07E-18	6.57E-19	2.28E-19
5	4		1.98E-15	1.17E-15	6.27E-16	3.36E-16	1.84E-16	4.67E-17
5	4	0	5.06E-16	3.30E-16	1.90E-16	1.08E-16	6.21E-17	1.72E-17
5	4	1	4.17E-16	2.56E-16	1.39E-16	7.47E-17	4.10E-17	1.03E-17
5	4	2	2.30E-16	1.25E-16	6.16E-17	3.09E-17	1.60E-17	3.61E-18

Табела 8 (наставак)

5	4	3	7.85E-17	3.62E-17	1.62E-17	7.56E-18	3.71E-18	7.65E-19
5	4	4	1.28E-17	4.85E-18	1.95E-18	8.48E-19	3.96E-19	7.56E-20
6			1.62E-15	1.45E-15	8.89E-16	5.18E-16	3.07E-16	9.53E-17
6	0	0	2.74E-17	2.35E-17	1.45E-17	8.64E-18	5.26E-18	1.88E-18
6	1		8.40E-17	7.22E-17	4.47E-17	2.74E-17	1.74E-17	6.09E-18
6	1	0	6.93E-17	6.03E-17	3.76E-17	2.32E-17	1.48E-17	5.23E-18
6	1	1	7.32E-18	5.92E-18	3.54E-18	2.12E-18	1.31E-18	4.29E-19
6	2		1.47E-16	1.28E-16	8.08E-17	4.85E-17	2.93E-17	1.00E-17
6	2	0	8.75E-17	7.88E-17	5.06E-17	3.09E-17	1.89E-17	6.54E-18
6	2	1	2.69E-17	2.25E-17	1.38E-17	8.04E-18	4.76E-18	1.60E-18
6	2	2	2.85E-18	2.23E-18	1.32E-18	7.60E-19	4.50E-19	1.58E-19
6	3		2.27E-16	1.98E-16	1.24E-16	7.85E-17	5.30E-17	2.33E-17
6	3	0	9.43E-17	8.63E-17	5.57E-17	3.59E-17	2.47E-17	1.15E-17
6	3	1	5.17E-17	4.43E-17	2.72E-17	1.70E-17	1.13E-17	4.75E-18
6	3	2	1.33E-17	1.06E-17	6.35E-18	3.93E-18	2.60E-18	1.06E-18
6	3	3	1.42E-18	1.05E-18	6.23E-19	3.93E-19	2.63E-19	1.08E-19
6	4		3.55E-16	3.26E-16	2.36E-16	1.60E-16	1.05E-16	3.45E-17
6	4	0	1.09E-16	1.05E-16	7.91E-17	5.58E-17	3.78E-17	1.34E-17
6	4	1	7.97E-17	7.36E-17	5.33E-17	3.59E-17	2.33E-17	7.57E-18
6	4	2	3.41E-17	2.95E-17	2.04E-17	1.32E-17	8.21E-18	2.44E-18
6	4	3	8.26E-18	6.64E-18	4.48E-18	2.81E-18	1.70E-18	4.76E-19
6	4	4	8.91E-19	6.64E-19	4.40E-19	2.70E-19	1.59E-19	4.31E-20
6	5		7.80E-16	7.07E-16	3.88E-16	1.95E-16	9.77E-17	1.95E-17
6	5	0	1.91E-16	1.85E-16	1.07E-16	5.61E-17	2.92E-17	6.22E-18
6	5	1	1.59E-16	1.49E-16	8.30E-17	4.22E-17	2.13E-17	4.27E-18
6	5	2	9.13E-17	7.90E-17	4.14E-17	1.99E-17	9.62E-18	1.78E-18
6	5	3	3.50E-17	2.74E-17	1.34E-17	6.12E-18	2.83E-18	4.83E-19
6	5	4	8.16E-18	5.71E-18	2.60E-18	1.13E-18	5.03E-19	8.06E-20
6	5	5	8.82E-19	5.43E-19	2.31E-19	9.57E-20	4.13E-20	6.30E-21
7			4.35E-16	8.55E-16	6.37E-16	3.99E-16	2.42E-16	7.55E-17
7	0	0	6.36E-18	1.17E-17	8.84E-18	5.70E-18	3.60E-18	1.30E-18
7	1		1.92E-17	3.57E-17	2.70E-17	1.78E-17	1.17E-17	4.25E-18
7	1	0	1.66E-17	3.07E-17	2.33E-17	1.53E-17	1.01E-17	3.69E-18
7	1	1	1.33E-18	2.50E-18	1.89E-18	1.24E-18	8.02E-19	2.81E-19
7	2		3.25E-17	6.18E-17	4.78E-17	3.14E-17	1.98E-17	6.88E-18
7	2	0	2.15E-17	4.07E-17	3.16E-17	2.08E-17	1.33E-17	4.62E-18
7	2	1	5.09E-18	9.75E-18	7.49E-18	4.85E-18	3.03E-18	1.04E-18
7	2	2	4.07E-19	8.02E-19	6.24E-19	4.06E-19	2.56E-19	9.41E-20
7	3		4.70E-17	9.20E-17	7.16E-17	4.84E-17	3.32E-17	1.49E-17
7	3	0	2.27E-17	4.42E-17	3.47E-17	2.36E-17	1.63E-17	7.57E-18
7	3	1	1.00E-17	1.96E-17	1.51E-17	1.01E-17	6.88E-18	2.99E-18
7	3	2	1.98E-18	3.94E-18	3.07E-18	2.09E-18	1.44E-18	6.23E-19
7	3	3	1.59E-19	3.25E-19	2.61E-19	1.84E-19	1.31E-19	5.93E-20
7	4		6.45E-17	1.36E-16	1.19E-16	8.90E-17	6.28E-17	2.37E-17
7	4	0	2.31E-17	4.84E-17	4.28E-17	3.27E-17	2.37E-17	9.55E-18
7	4	1	1.47E-17	3.08E-17	2.68E-17	2.00E-17	1.40E-17	5.17E-18
7	4	2	5.00E-18	1.06E-17	9.25E-18	6.76E-18	4.61E-18	1.59E-18
7	4	3	9.25E-19	2.02E-18	1.79E-18	1.31E-18	8.81E-19	2.93E-19
7	4	4	7.44E-20	1.69E-19	1.54E-19	1.14E-19	7.63E-20	2.51E-20
7	5		9.49E-17	2.32E-16	1.97E-16	1.27E-16	7.51E-17	1.87E-17
7	5	0	2.66E-17	6.57E-17	5.74E-17	3.85E-17	2.34E-17	6.21E-18
7	5	1	2.05E-17	5.04E-17	4.30E-17	2.79E-17	1.65E-17	4.13E-18
7	5	2	9.97E-18	2.42E-17	1.99E-17	1.24E-17	7.06E-18	1.64E-18

Табела 8 (наставак)

7 5 3	3.06E-18	7.39E-18	5.88E-18	3.53E-18	1.95E-18	4.25E-19
7 5 4	5.52E-19	1.33E-18	1.03E-18	6.03E-19	3.25E-19	6.78E-20
7 5 5	4.51E-20	1.08E-19	8.20E-20	4.70E-20	2.49E-20	5.07E-21
7 6	1.70E-16	2.85E-16	1.66E-16	7.89E-17	3.63E-17	5.72E-18
7 6 0	3.99E-17	6.96E-17	4.21E-17	2.07E-17	9.78E-18	1.63E-18
7 6 1	3.37E-17	5.76E-17	3.41E-17	1.64E-17	7.62E-18	1.22E-18
7 6 2	2.02E-17	3.30E-17	1.87E-17	8.67E-18	3.89E-18	5.86E-19
7 6 3	8.48E-18	1.31E-17	7.07E-18	3.14E-18	1.36E-18	1.92E-19
7 6 4	2.39E-18	3.48E-18	1.79E-18	7.63E-19	3.20E-19	4.26E-20
7 6 5	4.10E-19	5.58E-19	2.74E-19	1.13E-19	4.64E-20	5.90E-21
7 6 6	3.23E-20	4.12E-20	1.94E-20	7.80E-21	3.13E-21	3.87E-22
Сумирани	1.65E-14	1.04E-14	6.24E-15	3.69E-15	2.23E-15	7.27E-16

Финално стање			Енергија (keV/amu)					
<i>n</i>	<i>l</i>	<i>m</i>	300	500	800	1000	2000	3000
1	0	0	3.29E-19	1.63E-19	5.29E-20	2.88E-20	3.39E-21	8.04E-22
2			4.63E-18	1.05E-18	2.09E-19	8.90E-20	4.51E-21	6.48E-22
2	0	0	3.90E-19	7.60E-20	2.18E-20	1.21E-20	1.32E-21	2.67E-22
2	1		4.24E-18	9.74E-19	1.87E-19	7.69E-20	3.19E-21	3.81E-22
2	1	0	2.56E-18	6.55E-19	1.34E-19	5.61E-20	2.41E-21	2.90E-22
2	1	1	8.36E-19	1.59E-19	2.66E-20	1.04E-20	3.90E-22	4.57E-23
3			1.01E-17	1.57E-18	2.18E-19	7.87E-20	2.58E-21	3.07E-22
3	0	0	6.32E-19	6.86E-20	1.05E-20	5.24E-21	5.23E-22	1.00E-22
3	1		1.99E-18	5.14E-19	1.03E-19	4.16E-20	1.54E-21	1.70E-22
3	1	0	1.51E-18	4.06E-19	8.24E-20	3.34E-20	1.23E-21	1.35E-22
3	1	1	2.38E-19	5.40E-20	1.02E-20	4.10E-21	1.55E-22	1.78E-23
3	2		7.45E-18	9.91E-19	1.05E-19	3.19E-20	5.22E-22	3.71E-23
3	2	0	4.32E-18	6.16E-19	6.73E-20	2.07E-20	3.43E-22	2.44E-23
3	2	1	1.32E-18	1.62E-19	1.63E-20	4.90E-21	7.89E-23	5.61E-24
3	2	2	2.38E-19	2.55E-20	2.36E-21	6.92E-22	1.07E-23	7.67E-25
4			1.10E-17	1.36E-18	1.56E-19	5.19E-20	1.40E-21	1.55E-22
4	0	0	4.98E-19	4.92E-20	5.67E-21	2.61E-21	2.46E-22	4.60E-23
4	1		1.15E-18	2.71E-19	5.48E-20	2.20E-20	7.72E-22	8.29E-23
4	1	0	9.37E-19	2.24E-19	4.54E-20	1.82E-20	6.27E-22	6.64E-23
4	1	1	1.06E-19	2.39E-20	4.71E-21	1.91E-21	7.25E-23	8.25E-24
4	2		4.37E-18	6.58E-19	7.13E-20	2.16E-20	3.42E-22	2.38E-23
4	2	0	2.80E-18	4.40E-19	4.84E-20	1.47E-20	2.30E-22	1.59E-23
4	2	1	6.92E-19	9.63E-20	1.02E-20	3.08E-21	4.95E-23	3.49E-24
4	2	2	9.42E-20	1.26E-20	1.30E-21	3.92E-22	6.38E-24	4.61E-25
4	3		5.02E-18	3.84E-19	2.38E-20	5.61E-21	4.24E-23	1.95E-24
4	3	0	2.48E-18	2.02E-19	1.28E-20	3.04E-21	2.32E-23	1.06E-24
4	3	1	1.00E-18	7.38E-20	4.49E-21	1.06E-21	7.99E-24	3.67E-25
4	3	2	2.38E-19	1.58E-20	8.94E-22	2.05E-22	1.46E-24	6.60E-26
4	3	3	2.83E-20	1.77E-21	9.73E-23	2.22E-23	1.62E-25	7.57E-27
5			9.28E-18	1.00E-18	1.03E-19	3.31E-20	8.10E-22	8.61E-23
5	0	0	3.40E-19	3.28E-20	3.31E-21	1.46E-21	1.33E-22	2.45E-23
5	1		7.32E-19	1.55E-19	3.14E-20	1.26E-20	4.29E-22	4.54E-23
5	1	0	6.16E-19	1.30E-19	2.63E-20	1.05E-20	3.51E-22	3.65E-23
5	1	1	5.83E-20	1.25E-20	2.52E-21	1.03E-21	3.89E-23	4.41E-24
5	2		2.58E-18	4.10E-19	4.49E-20	1.35E-20	2.09E-22	1.44E-23
5	2	0	1.72E-18	2.83E-19	3.11E-20	9.38E-21	1.42E-22	9.69E-24

Табела 8 (наставак)

5	2	1	3.85E-19	5.68E-20	6.12E-21	1.86E-21	2.97E-23	2.09E-24
5	2	2	4.56E-20	6.73E-21	7.34E-22	2.25E-22	3.73E-24	2.71E-25
5	3		3.80E-18	3.22E-19	2.06E-20	4.89E-21	3.70E-23	1.69E-24
5	3	0	2.01E-18	1.77E-19	1.15E-20	2.73E-21	2.05E-23	9.34E-25
5	3	1	7.25E-19	5.94E-20	3.77E-21	8.97E-22	6.87E-24	3.16E-25
5	3	2	1.56E-19	1.18E-20	7.16E-22	1.67E-22	1.23E-24	5.61E-26
5	3	3	1.67E-20	1.25E-21	7.51E-23	1.76E-23	1.35E-25	6.39E-27
5	4		1.83E-18	8.44E-20	3.23E-21	6.05E-22	2.25E-24	6.83E-26
5	4	0	7.54E-19	3.65E-20	1.42E-21	2.69E-22	1.00E-24	3.05E-26
5	4	1	3.95E-19	1.81E-20	6.92E-22	1.30E-22	4.86E-25	1.48E-26
5	4	2	1.18E-19	4.94E-21	1.78E-22	3.26E-23	1.16E-25	3.48E-27
5	4	3	2.19E-20	8.46E-22	2.88E-23	5.18E-24	1.76E-26	5.23E-28
5	4	4	1.98E-21	7.47E-23	2.54E-24	4.62E-25	1.66E-27	5.13E-29
6			7.14E-18	7.15E-19	6.92E-20	2.16E-20	5.02E-22	5.22E-23
6	0	0	2.30E-19	2.20E-20	2.07E-21	8.85E-22	7.93E-23	1.45E-23
6	1		4.88E-19	9.59E-20	1.93E-20	7.71E-21	2.60E-22	2.72E-23
6	1	0	4.17E-19	8.12E-20	1.63E-20	6.49E-21	2.13E-22	2.20E-23
6	1	1	3.55E-20	7.33E-21	1.49E-21	6.09E-22	2.31E-23	2.61E-24
6	2		1.61E-18	2.63E-19	2.89E-20	8.72E-21	1.33E-22	9.09E-24
6	2	0	1.09E-18	1.85E-19	2.03E-20	6.10E-21	9.10E-23	6.14E-24
6	2	1	2.32E-19	3.54E-20	3.85E-21	1.17E-21	1.87E-23	1.31E-24
6	2	2	2.53E-20	3.97E-21	4.45E-22	1.37E-22	2.31E-24	1.68E-25
6	3		2.62E-18	2.33E-19	1.51E-20	3.59E-21	2.71E-23	1.24E-24
6	3	0	1.43E-18	1.31E-19	8.56E-21	2.03E-21	1.52E-23	6.88E-25
6	3	1	4.87E-19	4.20E-20	2.71E-21	6.49E-22	5.00E-24	2.30E-25
6	3	2	9.85E-20	8.04E-21	5.02E-22	1.18E-22	8.87E-25	4.06E-26
6	3	3	9.95E-21	8.15E-22	5.16E-23	1.23E-23	9.67E-26	4.61E-27
6	4		1.76E-18	8.84E-20	3.50E-21	6.63E-22	2.50E-24	7.62E-26
6	4	0	7.58E-19	3.94E-20	1.58E-21	2.99E-22	1.13E-24	3.43E-26
6	4	1	3.75E-19	1.87E-20	7.42E-22	1.41E-22	5.38E-25	1.65E-26
6	4	2	1.06E-19	4.90E-21	1.86E-22	3.46E-23	1.27E-25	3.84E-27
6	4	3	1.87E-20	8.18E-22	2.96E-23	5.43E-24	1.92E-26	5.76E-28
6	4	4	1.63E-21	7.08E-23	2.59E-24	4.82E-25	1.80E-27	5.65E-29
6	5		4.35E-19	1.25E-20	3.03E-22	4.57E-23	8.54E-26	1.73E-27
6	5	0	1.52E-19	4.54E-21	1.12E-22	1.70E-23	3.19E-26	6.50E-28
6	5	1	9.62E-20	2.78E-21	6.78E-23	1.02E-23	1.93E-26	3.93E-28
6	5	2	3.54E-20	9.57E-22	2.24E-23	3.33E-24	6.09E-27	1.23E-28
6	5	3	8.45E-21	2.11E-22	4.63E-24	6.74E-25	1.17E-27	2.31E-29
6	5	4	1.28E-21	3.01E-23	6.35E-25	9.11E-26	1.53E-28	3.02E-30
6	5	5	9.54E-23	2.23E-24	4.78E-26	6.94E-27	1.25E-29	2.57E-31
7			5.36E-18	5.12E-19	4.77E-20	1.47E-20	3.29E-22	3.38E-23
7	0	0	1.59E-19	1.52E-20	1.36E-21	5.74E-22	5.08E-23	9.28E-24
7	1		3.36E-19	6.29E-20	1.26E-20	5.03E-21	1.68E-22	1.75E-23
7	1	0	2.90E-19	5.36E-20	1.07E-20	4.25E-21	1.38E-22	1.42E-23
7	1	1	2.32E-20	4.66E-21	9.51E-22	3.90E-22	1.48E-23	1.67E-24
7	2		1.06E-18	1.76E-19	1.94E-20	5.85E-21	8.85E-23	6.02E-24
7	2	0	7.30E-19	1.25E-19	1.38E-20	4.12E-21	6.08E-23	4.08E-24
7	2	1	1.50E-19	2.33E-20	2.55E-21	7.76E-22	1.23E-23	8.62E-25
7	2	2	1.55E-20	2.53E-21	2.88E-22	8.94E-23	1.51E-24	1.10E-25
7	3		1.81E-18	1.66E-19	1.09E-20	2.58E-21	1.95E-23	8.88E-25
7	3	0	1.01E-18	9.52E-20	6.22E-21	1.47E-21	1.09E-23	4.94E-25
7	3	1	3.33E-19	2.95E-20	1.93E-21	4.62E-22	3.57E-24	1.65E-25
7	3	2	6.48E-20	5.52E-21	3.51E-22	8.33E-23	6.29E-25	2.89E-26

Табела 8 (наставак)

7	3	3	6.29E-21	5.46E-22	3.56E-23	8.55E-24	6.83E-26	3.27E-27
7	4		1.40E-18	7.37E-20	2.97E-21	5.66E-22	2.15E-24	6.58E-26
7	4	0	6.19E-19	3.35E-20	1.36E-21	2.59E-22	9.75E-25	2.97E-26
7	4	1	2.95E-19	1.54E-20	6.27E-22	1.20E-22	4.62E-25	1.42E-26
7	4	2	8.07E-20	3.96E-21	1.54E-22	2.90E-23	1.08E-25	3.29E-27
7	4	3	1.39E-20	6.50E-22	2.43E-23	4.52E-24	1.63E-26	4.93E-28
7	4	4	1.17E-21	5.54E-23	2.12E-24	3.99E-25	1.53E-27	4.84E-29
7	5		5.18E-19	1.60E-20	4.01E-22	6.12E-23	1.17E-25	2.38E-27
7	5	0	1.86E-19	5.92E-21	1.50E-22	2.30E-23	4.38E-26	8.95E-28
7	5	1	1.14E-19	3.55E-21	8.96E-23	1.37E-23	2.63E-26	5.39E-28
7	5	2	4.06E-20	1.19E-21	2.91E-23	4.39E-24	8.24E-27	1.68E-28
7	5	3	9.45E-21	2.58E-22	5.95E-24	8.80E-25	1.57E-27	3.14E-29
7	5	4	1.40E-21	3.65E-23	8.13E-25	1.19E-25	2.06E-28	4.11E-30
7	5	5	1.03E-22	2.69E-24	6.11E-26	9.04E-27	1.68E-29	3.51E-31
7	6		7.46E-20	1.36E-21	2.11E-23	2.57E-24	2.44E-27	3.33E-29
7	6	0	2.28E-20	4.27E-22	6.76E-24	8.26E-25	7.92E-28	1.08E-29
7	6	1	1.62E-20	2.99E-22	4.69E-24	5.72E-25	5.47E-28	7.48E-30
7	6	2	7.10E-21	1.25E-22	1.90E-24	2.30E-25	2.16E-28	2.93E-30
7	6	3	2.08E-21	3.41E-23	4.96E-25	5.89E-26	5.33E-29	7.14E-31
7	6	4	4.17E-22	6.36E-24	8.74E-26	1.02E-26	8.72E-30	1.15E-31
7	6	5	5.39E-23	7.86E-25	1.05E-26	1.20E-27	1.01E-30	1.33E-32
7	6	6	3.44E-24	5.05E-26	6.87E-28	8.01E-29	7.22E-32	9.95E-34
Сумирани			6.41E-17	7.93E-18	1.00E-18	3.62E-19	1.45E-20	2.19E-21

Табела 9. Ефикасни пресеци за електронски захват из атома $H(1s)$ од стране F^{9+} јона

Финално стање			Енергија (keV/amu)					
n	l	m	20	40	60	80	100	150
1	0	0	4.22E-18	2.06E-18	1.35E-18	9.91E-19	7.79E-19	4.98E-19
2			4.07E-16	1.69E-16	9.49E-17	6.13E-17	4.32E-17	2.09E-17
2	0	0	1.32E-16	4.97E-17	2.63E-17	1.64E-17	1.10E-17	4.11E-18
2	1		2.75E-16	1.19E-16	6.86E-17	4.49E-17	3.22E-17	1.68E-17
2	1	0	8.74E-17	3.95E-17	2.35E-17	1.61E-17	1.22E-17	7.35E-18
2	1	1	9.38E-17	3.98E-17	2.26E-17	1.44E-17	9.97E-18	4.73E-18
3			2.44E-15	9.34E-16	4.77E-16	2.83E-16	1.82E-16	7.48E-17
3	0	0	2.57E-16	7.77E-17	3.43E-17	1.96E-17	1.28E-17	5.60E-18
3	1		1.04E-15	3.56E-16	1.57E-16	8.02E-17	4.49E-17	1.38E-17
3	1	0	4.56E-16	1.85E-16	9.00E-17	4.95E-17	2.92E-17	9.58E-18
3	1	1	2.94E-16	8.56E-17	3.34E-17	1.53E-17	7.87E-18	2.10E-18
3	2		1.14E-15	5.00E-16	2.86E-16	1.83E-16	1.25E-16	5.54E-17
3	2	0	2.81E-16	1.50E-16	9.77E-17	6.91E-17	5.09E-17	2.59E-17
3	2	1	2.51E-16	1.14E-16	6.55E-17	4.13E-17	2.76E-17	1.15E-17
3	2	2	1.78E-16	6.09E-17	2.87E-17	1.56E-17	9.30E-18	3.20E-18
4			5.43E-15	2.06E-15	1.03E-15	5.87E-16	3.60E-16	1.29E-16
4	0	0	2.93E-16	9.00E-17	3.96E-17	2.04E-17	1.17E-17	4.26E-18
4	1		9.68E-16	2.85E-16	1.30E-16	7.18E-17	4.36E-17	1.48E-17
4	1	0	5.45E-16	1.85E-16	9.13E-17	5.31E-17	3.34E-17	1.19E-17
4	1	1	2.12E-16	4.97E-17	1.92E-17	9.34E-18	5.11E-18	1.47E-18
4	2		1.96E-15	6.30E-16	2.67E-16	1.31E-16	7.29E-17	2.56E-17
4	2	0	6.64E-16	2.55E-16	1.20E-16	6.32E-17	3.67E-17	1.39E-17
4	2	1	4.74E-16	1.48E-16	6.02E-17	2.86E-17	1.54E-17	5.04E-18
4	2	2	1.72E-16	3.94E-17	1.33E-17	5.55E-18	2.74E-18	8.07E-19
4	3		2.21E-15	1.05E-15	5.97E-16	3.64E-16	2.32E-16	8.48E-17
4	3	0	5.46E-16	3.01E-16	1.91E-16	1.26E-16	8.61E-17	3.54E-17
4	3	1	4.65E-16	2.32E-16	1.33E-16	8.10E-17	5.11E-17	1.81E-17
4	3	2	2.75E-16	1.14E-16	5.75E-17	3.17E-17	1.85E-17	5.70E-18
4	3	3	9.15E-17	2.88E-17	1.23E-17	6.09E-18	3.28E-18	8.86E-19
5			5.70E-15	2.55E-15	1.31E-15	7.37E-16	4.39E-16	1.46E-16
5	0	0	1.57E-16	5.88E-17	2.89E-17	1.59E-17	9.29E-18	3.14E-18
5	1		5.05E-16	1.85E-16	8.92E-17	4.97E-17	3.06E-17	1.11E-17
5	1	0	3.54E-16	1.42E-16	7.07E-17	4.01E-17	2.50E-17	9.35E-18
5	1	1	7.55E-17	2.17E-17	9.26E-18	4.78E-18	2.77E-18	8.98E-19
5	2		9.74E-16	3.52E-16	1.72E-16	9.39E-17	5.44E-17	1.74E-17
5	2	0	4.23E-16	1.78E-16	9.43E-17	5.41E-17	3.24E-17	1.07E-17
5	2	1	2.25E-16	7.49E-17	3.41E-17	1.77E-17	9.87E-18	3.01E-18
5	2	2	4.99E-17	1.19E-17	4.62E-18	2.20E-18	1.17E-18	3.46E-19
5	3		1.73E-15	6.24E-16	2.80E-16	1.54E-16	9.77E-17	4.21E-17
5	3	0	5.20E-16	2.16E-16	1.06E-16	6.14E-17	4.09E-17	1.94E-17
5	3	1	3.93E-16	1.44E-16	6.42E-17	3.46E-17	2.15E-17	8.81E-18
5	3	2	1.73E-16	5.17E-17	2.04E-17	1.03E-17	6.11E-18	2.30E-18
5	3	3	3.67E-17	8.28E-18	2.84E-18	1.34E-18	7.74E-19	2.80E-19
5	4		2.34E-15	1.33E-15	7.44E-16	4.24E-16	2.47E-16	7.17E-17
5	4	0	5.61E-16	3.55E-16	2.16E-16	1.31E-16	8.08E-17	2.58E-17
5	4	1	4.76E-16	2.83E-16	1.62E-16	9.30E-17	5.44E-17	1.57E-17
5	4	2	2.84E-16	1.48E-16	7.68E-17	4.09E-17	2.25E-17	5.78E-18

Табела 9 (наставак)

5	4	3	1.10E-16	4.80E-17	2.23E-17	1.10E-17	5.68E-18	1.32E-18
5	4	4	2.14E-17	7.41E-18	3.03E-18	1.37E-18	6.68E-19	1.42E-19
6			3.01E-15	2.04E-15	1.19E-15	6.89E-16	4.13E-16	1.33E-16
6	0	0	5.04E-17	3.17E-17	1.83E-17	1.09E-17	6.63E-18	2.25E-18
6	1		1.56E-16	9.77E-17	5.62E-17	3.33E-17	2.08E-17	7.81E-18
6	1	0	1.25E-16	8.06E-17	4.69E-17	2.80E-17	1.76E-17	6.70E-18
6	1	1	1.55E-17	8.57E-18	4.63E-18	2.63E-18	1.60E-18	5.57E-19
6	2		2.79E-16	1.73E-16	1.01E-16	6.10E-17	3.76E-17	1.24E-17
6	2	0	1.55E-16	1.03E-16	6.24E-17	3.84E-17	2.41E-17	8.16E-18
6	2	1	5.49E-17	3.16E-17	1.77E-17	1.03E-17	6.15E-18	1.95E-18
6	2	2	6.98E-18	3.40E-18	1.79E-18	1.00E-18	5.87E-19	1.87E-19
6	3		4.46E-16	2.74E-16	1.57E-16	9.23E-17	5.83E-17	2.47E-17
6	3	0	1.70E-16	1.14E-16	6.89E-17	4.18E-17	2.70E-17	1.20E-17
6	3	1	1.03E-16	6.20E-17	3.47E-17	2.01E-17	1.25E-17	5.06E-18
6	3	2	3.11E-17	1.60E-17	8.42E-18	4.73E-18	2.91E-18	1.16E-18
6	3	3	4.06E-18	1.72E-18	8.59E-19	4.78E-19	2.97E-19	1.22E-19
6	4		7.41E-16	4.29E-16	2.65E-16	1.77E-16	1.21E-16	4.71E-17
6	4	0	2.10E-16	1.33E-16	8.63E-17	6.04E-17	4.31E-17	1.81E-17
6	4	1	1.62E-16	9.62E-17	5.93E-17	3.96E-17	2.69E-17	1.03E-17
6	4	2	7.81E-17	4.09E-17	2.38E-17	1.51E-17	9.88E-18	3.43E-18
6	4	3	2.22E-17	9.90E-18	5.48E-18	3.39E-18	2.15E-18	7.06E-19
6	4	4	2.92E-18	1.07E-18	5.68E-19	3.45E-19	2.15E-19	6.78E-20
6	5		1.34E-15	1.04E-15	5.88E-16	3.14E-16	1.68E-16	3.85E-17
6	5	0	3.10E-16	2.60E-16	1.56E-16	8.77E-17	4.88E-17	1.21E-17
6	5	1	2.64E-16	2.13E-16	1.24E-16	6.70E-17	3.61E-17	8.37E-18
6	5	2	1.62E-16	1.20E-16	6.46E-17	3.30E-17	1.70E-17	3.59E-18
6	5	3	6.84E-17	4.49E-17	2.24E-17	1.08E-17	5.27E-18	1.02E-18
6	5	4	1.82E-17	1.03E-17	4.73E-18	2.14E-18	1.00E-18	1.81E-19
6	5	5	2.31E-18	1.10E-18	4.61E-19	1.97E-19	8.85E-20	1.50E-20
7			9.65E-16	1.29E-15	9.02E-16	5.60E-16	3.43E-16	1.10E-16
7	0	0	1.25E-17	1.60E-17	1.13E-17	7.27E-18	4.62E-18	1.62E-18
7	1		3.79E-17	4.88E-17	3.45E-17	2.21E-17	1.43E-17	5.49E-18
7	1	0	3.23E-17	4.17E-17	2.96E-17	1.90E-17	1.23E-17	4.77E-18
7	1	1	2.82E-18	3.53E-18	2.44E-18	1.54E-18	9.81E-19	3.61E-19
7	2		6.49E-17	8.43E-17	6.06E-17	3.97E-17	2.56E-17	8.90E-18
7	2	0	4.16E-17	5.49E-17	3.98E-17	2.63E-17	1.72E-17	6.05E-18
7	2	1	1.07E-17	1.36E-17	9.58E-18	6.16E-18	3.90E-18	1.31E-18
7	2	2	9.39E-19	1.16E-18	8.10E-19	5.18E-19	3.27E-19	1.12E-19
7	3		9.55E-17	1.27E-16	9.15E-17	5.91E-17	3.83E-17	1.60E-17
7	3	0	4.40E-17	5.97E-17	4.40E-17	2.89E-17	1.89E-17	8.08E-18
7	3	1	2.09E-17	2.73E-17	1.94E-17	1.24E-17	7.91E-18	3.20E-18
7	3	2	4.50E-18	5.67E-18	3.97E-18	2.51E-18	1.62E-18	6.72E-19
7	3	3	3.96E-19	4.83E-19	3.39E-19	2.18E-19	1.45E-19	6.40E-20
7	4		1.35E-16	1.81E-16	1.37E-16	9.75E-17	7.01E-17	3.06E-17
7	4	0	4.59E-17	6.37E-17	4.91E-17	3.57E-17	2.63E-17	1.23E-17
7	4	1	3.07E-17	4.12E-17	3.09E-17	2.18E-17	1.56E-17	6.64E-18
7	4	2	1.12E-17	1.45E-17	1.07E-17	7.49E-18	5.24E-18	2.10E-18
7	4	3	2.27E-18	2.82E-18	2.10E-18	1.48E-18	1.03E-18	4.02E-19
7	4	4	2.01E-19	2.41E-19	1.82E-19	1.31E-19	9.20E-20	3.58E-20
7	5		1.98E-16	2.96E-16	2.48E-16	1.72E-16	1.11E-16	3.34E-17
7	5	0	5.32E-17	8.21E-17	7.08E-17	5.11E-17	3.40E-17	1.10E-17
7	5	1	4.21E-17	6.36E-17	5.35E-17	3.74E-17	2.42E-17	7.29E-18
7	5	2	2.16E-17	3.14E-17	2.55E-17	1.71E-17	1.06E-17	2.96E-18

Табела 9 (наставак)

7 5 3	7.11E-18	9.97E-18	7.85E-18	5.09E-18	3.06E-18	7.98E-19
7 5 4	1.39E-18	1.88E-18	1.45E-18	9.14E-19	5.36E-19	1.33E-19
7 5 5	1.24E-19	1.61E-19	1.22E-19	7.54E-20	4.33E-20	1.04E-20
7 6	4.21E-16	5.40E-16	3.20E-16	1.62E-16	7.93E-17	1.45E-17
7 6 0	9.44E-17	1.27E-16	7.89E-17	4.14E-17	2.10E-17	4.06E-18
7 6 1	8.10E-17	1.07E-16	6.47E-17	3.32E-17	1.65E-17	3.07E-18
7 6 2	5.09E-17	6.37E-17	3.67E-17	1.80E-17	8.64E-18	1.50E-18
7 6 3	2.30E-17	2.67E-17	1.45E-17	6.82E-18	3.14E-18	5.07E-19
7 6 4	7.14E-18	7.60E-18	3.90E-18	1.75E-18	7.77E-19	1.17E-19
7 6 5	1.37E-18	1.32E-18	6.39E-19	2.75E-19	1.19E-19	1.70E-20
7 6 6	1.23E-19	1.06E-19	4.85E-20	2.01E-20	8.43E-21	1.16E-21
Сумирани	2.09E-14	1.30E-14	7.75E-15	4.62E-15	2.82E-15	9.49E-16

Финално стање			Енергија (keV/amu)					
<i>n</i>	<i>l</i>	<i>m</i>	300	500	800	1000	2000	3000
1	0	0	2.18E-19	1.11E-19	4.96E-20	2.80E-20	3.69E-21	9.37E-22
2			4.40E-18	1.09E-18	2.41E-19	1.08E-19	6.31E-21	9.69E-22
2	0	0	4.37E-19	7.43E-20	1.95E-20	1.11E-20	1.48E-21	3.36E-22
2	1		3.96E-18	1.02E-18	2.22E-19	9.70E-20	4.83E-21	6.33E-22
2	1	0	2.18E-18	6.41E-19	1.51E-19	6.78E-20	3.55E-21	4.71E-22
2	1	1	8.93E-19	1.90E-19	3.54E-20	1.46E-20	6.40E-22	8.09E-23
3			1.13E-17	1.98E-18	3.03E-19	1.14E-19	4.10E-21	5.07E-22
3	0	0	8.13E-19	1.01E-19	1.21E-20	5.33E-21	5.99E-22	1.30E-22
3	1		1.83E-18	5.11E-19	1.22E-19	5.36E-20	2.44E-21	2.95E-22
3	1	0	1.35E-18	3.95E-19	9.63E-20	4.25E-20	1.93E-21	2.31E-22
3	1	1	2.38E-19	5.82E-20	1.28E-20	5.56E-21	2.56E-22	3.20E-23
3	2		8.70E-18	1.37E-18	1.69E-19	5.49E-20	1.07E-21	8.20E-23
3	2	0	4.88E-18	8.34E-19	1.07E-19	3.52E-20	6.95E-22	5.34E-23
3	2	1	1.58E-18	2.28E-19	2.66E-20	8.52E-21	1.63E-22	1.25E-23
3	2	2	3.31E-19	4.09E-20	4.31E-21	1.33E-21	2.39E-23	1.83E-24
4			1.44E-17	1.95E-18	2.39E-19	8.20E-20	2.36E-21	2.65E-22
4	0	0	6.47E-19	8.12E-20	7.65E-21	2.89E-21	2.85E-22	6.04E-23
4	1		1.30E-18	2.72E-19	6.52E-20	2.87E-20	1.25E-21	1.46E-22
4	1	0	1.07E-18	2.22E-19	5.36E-20	2.36E-20	1.01E-21	1.16E-22
4	1	1	1.18E-19	2.49E-20	5.78E-21	2.56E-21	1.20E-22	1.49E-23
4	2		4.76E-18	8.90E-19	1.16E-19	3.77E-20	7.10E-22	5.32E-23
4	2	0	2.98E-18	5.91E-19	7.82E-20	2.56E-20	4.77E-22	3.54E-23
4	2	1	7.75E-19	1.31E-19	1.64E-20	5.34E-21	1.03E-22	7.82E-24
4	2	2	1.15E-19	1.86E-20	2.27E-21	7.35E-22	1.41E-23	1.09E-24
4	3		7.67E-18	7.06E-19	5.07E-20	1.27E-20	1.12E-22	5.53E-24
4	3	0	3.75E-18	3.69E-19	2.73E-20	6.91E-21	6.15E-23	3.02E-24
4	3	1	1.52E-18	1.34E-19	9.47E-21	2.37E-21	2.10E-23	1.04E-24
4	3	2	3.90E-19	3.07E-20	2.00E-21	4.85E-22	4.01E-24	1.93E-25
4	3	3	5.12E-20	3.73E-21	2.34E-22	5.63E-23	4.70E-25	2.32E-26
5			1.33E-17	1.55E-18	1.68E-19	5.48E-20	1.40E-21	1.51E-22
5	0	0	4.44E-19	5.65E-20	4.86E-21	1.70E-21	1.55E-22	3.24E-23
5	1		9.55E-19	1.60E-19	3.74E-20	1.65E-20	7.01E-22	8.07E-23
5	1	0	8.12E-19	1.34E-19	3.13E-20	1.37E-20	5.73E-22	6.48E-23
5	1	1	7.12E-20	1.30E-20	3.05E-21	1.36E-21	6.44E-23	7.96E-24
5	2		2.75E-18	5.49E-19	7.31E-20	2.38E-20	4.39E-22	3.25E-23
5	2	0	1.81E-18	3.78E-19	5.09E-20	1.65E-20	2.99E-22	2.18E-23

Табела 9 (наставак)

5	2	1	4.22E-19	7.61E-20	9.85E-21	3.22E-21	6.19E-23	4.69E-24
5	2	2	5.19E-20	9.56E-21	1.26E-21	4.15E-22	8.24E-24	6.42E-25
5	3		5.48E-18	5.79E-19	4.36E-20	1.11E-20	9.83E-23	4.82E-24
5	3	0	2.89E-18	3.20E-19	2.45E-20	6.22E-21	5.47E-23	2.67E-24
5	3	1	1.03E-18	1.05E-19	7.83E-21	1.99E-21	1.80E-23	8.93E-25
5	3	2	2.35E-19	2.20E-20	1.56E-21	3.89E-22	3.36E-24	1.64E-25
5	3	3	2.70E-20	2.47E-21	1.74E-22	4.36E-23	3.88E-25	1.95E-26
5	4		3.64E-18	2.02E-19	8.90E-21	1.77E-21	7.62E-24	2.47E-25
5	4	0	1.49E-18	8.73E-20	3.94E-21	7.88E-22	3.41E-24	1.11E-25
5	4	1	7.80E-19	4.28E-20	1.89E-21	3.77E-22	1.64E-24	5.34E-26
5	4	2	2.42E-19	1.20E-20	4.96E-22	9.66E-23	3.96E-25	1.26E-26
5	4	3	4.77E-20	2.18E-21	8.45E-23	1.61E-23	6.27E-26	1.97E-27
5	4	4	4.60E-21	2.03E-22	7.85E-24	1.50E-24	6.13E-27	2.01E-28
6			1.08E-17	1.15E-18	1.16E-19	3.68E-20	8.81E-22	9.23E-23
6	0	0	3.01E-19	3.87E-20	3.18E-21	1.06E-21	9.26E-23	1.93E-23
6	1		6.85E-19	1.01E-19	2.31E-20	1.01E-20	4.27E-22	4.86E-23
6	1	0	5.93E-19	8.54E-20	1.95E-20	8.53E-21	3.51E-22	3.92E-23
6	1	1	4.59E-20	7.67E-21	1.80E-21	8.05E-22	3.83E-23	4.72E-24
6	2		1.72E-18	3.51E-19	4.73E-20	1.54E-20	2.80E-22	2.06E-23
6	2	0	1.16E-18	2.46E-19	3.34E-20	1.08E-20	1.92E-22	1.39E-23
6	2	1	2.53E-19	4.70E-20	6.19E-21	2.03E-21	3.89E-23	2.94E-24
6	2	2	2.79E-20	5.51E-21	7.55E-22	2.52E-22	5.09E-24	3.98E-25
6	3		3.67E-18	4.15E-19	3.20E-20	8.14E-21	7.22E-23	3.53E-24
6	3	0	2.00E-18	2.37E-19	1.84E-20	4.66E-21	4.06E-23	1.97E-24
6	3	1	6.76E-19	7.31E-20	5.62E-21	1.44E-21	1.31E-23	6.50E-25
6	3	2	1.43E-19	1.46E-20	1.08E-21	2.74E-22	2.41E-24	1.18E-25
6	3	3	1.51E-20	1.56E-21	1.18E-22	3.00E-23	2.76E-25	1.40E-26
6	4		3.33E-18	2.06E-19	9.54E-21	1.92E-21	8.45E-24	2.75E-25
6	4	0	1.44E-18	9.29E-20	4.34E-21	8.76E-22	3.82E-24	1.24E-25
6	4	1	7.01E-19	4.30E-20	2.00E-21	4.05E-22	1.81E-24	5.93E-26
6	4	2	2.03E-19	1.15E-20	5.08E-22	1.01E-22	4.30E-25	1.39E-26
6	4	3	3.79E-20	2.02E-21	8.49E-23	1.65E-23	6.77E-26	2.16E-27
6	4	4	3.47E-21	1.83E-22	7.79E-24	1.53E-24	6.61E-27	2.20E-28
6	5		1.12E-18	3.84E-20	1.07E-21	1.71E-22	3.68E-25	7.96E-27
6	5	0	3.90E-19	1.40E-20	3.96E-22	6.36E-23	1.38E-25	2.98E-27
6	5	1	2.46E-19	8.49E-21	2.38E-22	3.81E-23	8.30E-26	1.80E-27
6	5	2	9.21E-20	2.96E-21	7.93E-23	1.25E-23	2.63E-26	5.64E-28
6	5	3	2.29E-20	6.73E-22	1.69E-23	2.59E-24	5.12E-27	1.07E-28
6	5	4	3.63E-21	1.00E-22	2.41E-24	3.63E-25	6.95E-28	1.45E-29
6	5	5	2.83E-22	7.73E-24	1.88E-25	2.87E-26	5.83E-29	1.27E-30
7			8.45E-18	8.47E-19	8.17E-20	2.54E-20	5.83E-22	6.02E-23
7	0	0	2.09E-19	2.70E-20	2.16E-21	7.05E-22	5.95E-23	1.23E-23
7	1		4.93E-19	6.72E-20	1.51E-20	6.63E-21	2.77E-22	3.14E-23
7	1	0	4.31E-19	5.74E-20	1.28E-20	5.60E-21	2.28E-22	2.54E-23
7	1	1	3.09E-20	4.90E-21	1.14E-21	5.14E-22	2.45E-23	3.02E-24
7	2		1.14E-18	2.34E-19	3.19E-20	1.04E-20	1.87E-22	1.37E-23
7	2	0	7.80E-19	1.66E-19	2.27E-20	7.35E-21	1.29E-22	9.26E-24
7	2	1	1.63E-19	3.07E-20	4.09E-21	1.35E-21	2.58E-23	1.94E-24
7	2	2	1.68E-20	3.45E-21	4.85E-22	1.63E-22	3.33E-24	2.61E-25
7	3		2.50E-18	2.95E-19	2.30E-20	5.86E-21	5.19E-23	2.53E-24
7	3	0	1.39E-18	1.71E-19	1.34E-20	3.39E-21	2.94E-23	1.42E-24
7	3	1	4.54E-19	5.11E-20	3.98E-21	1.02E-21	9.37E-24	4.64E-25
7	3	2	9.14E-20	9.90E-21	7.53E-22	1.91E-22	1.71E-24	8.41E-26

Табела 9 (наставак)

7 3 3	9.20E-21	1.03E-21	8.03E-23	2.07E-23	1.95E-25	9.94E-27
7 4	2.58E-18	1.70E-19	8.06E-21	1.64E-21	7.26E-24	2.38E-25
7 4 0	1.15E-18	7.84E-20	3.73E-21	7.55E-22	3.31E-24	1.08E-25
7 4 1	5.37E-19	3.50E-20	1.67E-21	3.42E-22	1.55E-24	5.11E-26
7 4 2	1.50E-19	9.11E-21	4.17E-22	8.37E-23	3.65E-25	1.19E-26
7 4 3	2.69E-20	1.57E-21	6.89E-23	1.36E-23	5.73E-26	1.84E-27
7 4 4	2.37E-21	1.39E-22	6.26E-24	1.26E-24	5.59E-27	1.88E-28
7 5	1.27E-18	4.80E-20	1.40E-21	2.26E-22	5.00E-25	1.09E-26
7 5 0	4.59E-19	1.79E-20	5.27E-22	8.54E-23	1.89E-25	4.10E-27
7 5 1	2.79E-19	1.06E-20	3.10E-22	5.04E-23	1.13E-25	2.46E-27
7 5 2	1.00E-19	3.57E-21	1.01E-22	1.62E-23	3.53E-26	7.67E-28
7 5 3	2.41E-20	7.96E-22	2.12E-23	3.32E-24	6.83E-27	1.45E-28
7 5 4	3.74E-21	1.18E-22	3.02E-24	4.65E-25	9.29E-28	1.96E-29
7 5 5	2.84E-22	8.96E-24	2.35E-25	3.67E-26	7.81E-29	1.73E-30
7 6	2.46E-19	5.33E-21	9.51E-23	1.22E-23	1.34E-26	1.94E-28
7 6 0	7.47E-20	1.68E-21	3.04E-23	3.93E-24	4.33E-27	6.29E-29
7 6 1	5.33E-20	1.17E-21	2.10E-23	2.72E-24	2.99E-27	4.34E-29
7 6 2	2.35E-20	4.91E-22	8.57E-24	1.09E-24	1.18E-27	1.71E-29
7 6 3	7.07E-21	1.37E-22	2.27E-24	2.84E-25	2.93E-28	4.17E-30
7 6 4	1.47E-21	2.63E-23	4.09E-25	5.00E-26	4.88E-29	6.78E-31
7 6 5	1.96E-22	3.36E-24	5.06E-26	6.11E-27	5.83E-30	8.08E-32
7 6 6	1.29E-23	2.22E-25	3.41E-27	4.19E-28	4.27E-31	6.20E-33
Сумирани	8.85E-17	1.13E-17	1.45E-18	5.26E-19	2.11E-20	3.16E-21

Г.2 Ефикасни пресеци за једноструки електронски захват из атома $\text{He}(1s^2)$ од стране огољених јона

Табела 10. Ефикасни пресеци за једноструки електронски захват из атома $\text{He}(1s^2)$ од стране H^+ јона у оквиру BCIS-3В метода

Финално стање			Енергија (keV/amu)					
			20	40	60	80	100	150
n	l	m						
1	0	0	5.49E-17	8.26E-17	5.82E-17	3.64E-17	2.26E-17	7.58E-18
2			2.19E-18	6.53E-18	6.70E-18	5.04E-18	3.45E-18	1.27E-18
2	0	0	1.74E-18	5.43E-18	5.54E-18	4.16E-18	2.86E-18	1.07E-18
2	1		4.52E-19	1.10E-18	1.16E-18	8.81E-19	5.94E-19	2.03E-19
2	1	0	3.88E-19	8.07E-19	8.70E-19	6.71E-19	4.59E-19	1.60E-19
2	1	1	3.18E-20	1.44E-19	1.47E-19	1.05E-19	6.76E-20	2.13E-20
3			5.51E-19	1.72E-18	1.91E-18	1.50E-18	1.05E-18	3.96E-19
3	0	0	4.12E-19	1.39E-18	1.53E-18	1.20E-18	8.40E-19	3.22E-19
3	1		1.34E-19	3.19E-19	3.64E-19	2.89E-19	2.01E-19	7.10E-20
3	1	0	1.18E-19	2.37E-19	2.73E-19	2.21E-19	1.56E-19	5.63E-20
3	1	1	7.85E-21	4.11E-20	4.56E-20	3.41E-20	2.26E-20	7.36E-21
3	2		5.78E-21	1.22E-20	1.36E-20	1.06E-20	7.10E-21	2.26E-21
3	2	0	4.82E-21	7.44E-21	7.56E-21	5.90E-21	4.04E-21	1.34E-21
3	2	1	4.40E-22	2.10E-21	2.67E-21	2.09E-21	1.38E-21	4.19E-22
3	2	2	4.16E-23	2.84E-22	3.27E-22	2.40E-22	1.53E-22	4.36E-23
4			2.21E-19	6.97E-19	7.93E-19	6.30E-19	4.45E-19	1.70E-19
4	0	0	1.61E-19	5.57E-19	6.29E-19	4.99E-19	3.53E-19	1.37E-19
4	1		5.63E-20	1.33E-19	1.56E-19	1.25E-19	8.81E-20	3.16E-20
4	1	0	5.01E-20	9.90E-20	1.17E-19	9.60E-20	6.83E-20	2.50E-20
4	1	1	3.10E-21	1.70E-20	1.94E-20	1.48E-20	9.87E-21	3.26E-21
4	2		3.27E-21	6.81E-21	7.71E-21	6.11E-21	4.16E-21	1.34E-21
4	2	0	2.74E-21	4.21E-21	4.32E-21	3.43E-21	2.37E-21	7.96E-22
4	2	1	2.42E-22	1.14E-21	1.51E-21	1.20E-21	8.06E-22	2.49E-22
4	2	2	2.15E-23	1.55E-22	1.84E-22	1.38E-22	8.87E-23	2.57E-23
4	3		4.24E-23	9.56E-23	1.08E-22	8.40E-23	5.53E-23	1.60E-23
4	3	0	3.16E-23	5.54E-23	5.15E-23	3.82E-23	2.50E-23	7.42E-24
4	3	1	4.90E-24	1.56E-23	2.22E-23	1.82E-23	1.21E-23	3.50E-24
4	3	2	4.42E-25	4.03E-24	5.55E-24	4.31E-24	2.76E-24	7.39E-25
4	3	3	4.64E-26	4.35E-25	5.43E-25	4.03E-25	2.51E-25	6.44E-26
Сумирани			5.82E-17	9.26E-17	6.89E-17	4.45E-17	2.82E-17	9.68E-18

Финално стање			Енергија (keV/amu)					
			300	500	800	1000	2000	3000
n	l	m						
1	0	0	6.56E-19	7.39E-20	7.97E-21	2.62E-21	6.94E-23	7.62E-24
2			1.10E-19	1.16E-20	1.18E-21	3.77E-22	9.38E-24	1.00E-24
2	0	0	9.62E-20	1.06E-20	1.10E-21	3.56E-22	9.10E-24	9.84E-25
2	1		1.34E-20	1.05E-21	7.67E-23	2.06E-23	2.84E-25	2.10E-26
2	1	0	1.09E-20	8.70E-22	6.41E-23	1.73E-23	2.40E-25	1.76E-26

Табела 10 (наставак)

2	1	1	1.24E-21	9.08E-23	6.29E-24	1.66E-24	2.24E-26	1.67E-27
3			3.42E-20	3.59E-21	3.60E-22	1.15E-22	2.82E-24	3.00E-25
3	0	0	2.93E-20	3.20E-21	3.32E-22	1.07E-22	2.72E-24	2.92E-25
3	1		4.77E-21	3.76E-22	2.73E-23	7.33E-24	1.01E-25	7.40E-27
3	1	0	3.90E-21	3.12E-22	2.29E-23	6.15E-24	8.48E-26	6.22E-27
3	1	1	4.39E-22	3.22E-23	2.23E-24	5.88E-25	7.91E-27	5.87E-28
3	2		1.10E-22	6.20E-24	3.14E-25	7.00E-26	5.20E-28	2.61E-29
3	2	0	6.91E-23	4.03E-24	2.09E-25	4.70E-26	3.55E-28	1.79E-29
3	2	1	1.87E-23	9.94E-25	4.83E-26	1.06E-26	7.64E-29	3.80E-30
3	2	2	1.77E-24	8.87E-26	4.12E-27	8.92E-28	6.32E-30	3.20E-31
4			1.47E-20	1.54E-21	1.53E-22	4.88E-23	1.20E-24	1.27E-25
4	0	0	1.25E-20	1.36E-21	1.41E-22	4.55E-23	1.15E-24	1.24E-25
4	1		2.14E-21	1.68E-22	1.22E-23	3.28E-24	4.49E-26	3.29E-27
4	1	0	1.75E-21	1.40E-22	1.02E-23	2.75E-24	3.78E-26	2.77E-27
4	1	1	1.96E-22	1.44E-23	9.94E-25	2.62E-25	3.53E-27	2.61E-28
4	2		6.61E-23	3.73E-24	1.89E-25	4.22E-26	3.13E-28	1.57E-29
4	2	0	4.16E-23	2.43E-24	1.26E-25	2.83E-26	2.13E-28	1.08E-29
4	2	1	1.12E-23	5.98E-25	2.91E-26	6.39E-27	4.59E-29	2.29E-30
4	2	2	1.06E-24	5.32E-26	2.48E-27	5.36E-28	3.80E-30	1.92E-31
4	3		5.66E-25	2.27E-26	8.00E-28	1.48E-28	5.93E-31	2.04E-32
4	3	0	2.79E-25	1.17E-26	4.21E-28	7.87E-29	3.21E-31	1.11E-32
4	3	1	1.19E-25	4.67E-27	1.61E-28	2.96E-29	1.17E-31	3.99E-33
4	3	2	2.24E-26	8.11E-28	2.63E-29	4.73E-30	1.77E-32	5.97E-34
4	3	3	1.83E-27	6.36E-29	2.00E-30	3.54E-31	1.32E-33	4.52E-35
Сумирани			8.38E-19	9.30E-20	9.90E-21	3.23E-21	8.46E-23	9.25E-24

Табела 11. Ефикасни пресеци за једноструки електронски захват из атома $\text{He}(1s^2)$ од стране H^+ јона у оквиру BCIS-4В метода

Финално стање			Енергија (keV/amu)					
n	l	m	20	40	60	80	100	150
1	0	0	2.65E-16	1.39E-16	6.45E-17	3.24E-17	1.78E-17	5.21E-18
2			1.57E-17	1.72E-17	1.07E-17	5.95E-18	3.36E-18	9.73E-19
2	0	0	1.05E-17	1.21E-17	7.67E-18	4.38E-18	2.53E-18	7.63E-19
2	1		5.19E-18	5.08E-18	2.98E-18	1.57E-18	8.37E-19	2.10E-19
2	1	0	4.45E-18	4.02E-18	2.34E-18	1.23E-18	6.57E-19	1.65E-19
2	1	1	3.72E-19	5.32E-19	3.22E-19	1.69E-19	8.99E-20	2.23E-20
3			4.13E-18	4.89E-18	3.24E-18	1.86E-18	1.07E-18	3.10E-19
3	0	0	2.54E-18	3.25E-18	2.21E-18	1.30E-18	7.62E-19	2.33E-19
3	1		1.50E-18	1.54E-18	9.72E-19	5.32E-19	2.90E-19	7.40E-20
3	1	0	1.32E-18	1.24E-18	7.70E-19	4.21E-19	2.29E-19	5.87E-20
3	1	1	9.11E-20	1.52E-19	1.01E-19	5.56E-20	3.02E-20	7.70E-21
3	2		9.24E-20	9.96E-20	6.10E-20	3.14E-20	1.59E-20	3.42E-21
3	2	0	7.34E-20	6.54E-20	3.81E-20	1.95E-20	9.86E-21	2.13E-21
3	2	1	8.61E-21	1.53E-20	1.03E-20	5.39E-21	2.74E-21	5.87E-22
3	2	2	8.51E-22	1.78E-21	1.15E-21	5.89E-22	2.96E-22	6.20E-23
4			1.68E-18	2.03E-18	1.38E-18	8.01E-19	4.61E-19	1.34E-19
4	0	0	1.00E-18	1.32E-18	9.20E-19	5.49E-19	3.23E-19	9.91E-20
4	1		6.25E-19	6.51E-19	4.21E-19	2.34E-19	1.28E-19	3.30E-20
4	1	0	5.53E-19	5.25E-19	3.34E-19	1.85E-19	1.02E-19	2.62E-20
4	1	1	3.60E-20	6.29E-20	4.32E-20	2.42E-20	1.32E-20	3.40E-21
4	2		5.11E-20	5.56E-20	3.50E-20	1.83E-20	9.39E-21	2.04E-21
4	2	0	4.11E-20	3.70E-20	2.20E-20	1.14E-20	5.84E-21	1.27E-21
4	2	1	4.57E-21	8.32E-21	5.83E-21	3.12E-21	1.60E-21	3.48E-22
4	2	2	4.29E-22	9.62E-22	6.44E-22	3.38E-22	1.72E-22	3.64E-23
4	3		9.31E-22	1.19E-21	7.52E-22	3.74E-22	1.79E-22	3.24E-23
4	3	0	6.74E-22	6.66E-22	3.83E-22	1.86E-22	8.82E-23	1.60E-23
4	3	1	1.10E-22	2.11E-22	1.49E-22	7.61E-23	3.67E-23	6.69E-24
4	3	2	1.68E-23	4.82E-23	3.29E-23	1.64E-23	7.80E-24	1.39E-24
4	3	3	1.72E-24	4.64E-24	3.01E-24	1.47E-24	6.93E-25	1.21E-25
Сумирани			2.89E-16	1.66E-16	8.19E-17	4.23E-17	2.34E-17	6.83E-18

Финално стање			Енергија (keV/amu)					
n	l	m	300	500	800	1000	2000	3000
1	0	0	4.56E-19	5.87E-20	7.31E-21	2.55E-21	7.74E-23	8.87E-24
2			7.67E-20	9.10E-21	1.07E-21	3.63E-22	1.04E-23	1.17E-24
2	0	0	6.50E-20	8.11E-21	9.85E-22	3.40E-22	1.00E-23	1.14E-24
2	1		1.17E-20	9.90E-22	8.04E-23	2.27E-23	3.48E-25	2.66E-26
2	1	0	9.31E-21	7.96E-22	6.53E-23	1.85E-23	2.87E-25	2.20E-26
2	1	1	1.20E-21	9.67E-23	7.53E-24	2.09E-24	3.08E-26	2.32E-27
3			2.40E-20	2.81E-21	3.25E-22	1.10E-22	3.13E-24	3.49E-25
3	0	0	1.97E-20	2.45E-21	2.96E-22	1.02E-22	3.00E-24	3.39E-25
3	1		4.15E-21	3.51E-22	2.85E-23	8.03E-24	1.23E-25	9.37E-27
3	1	0	3.32E-21	2.83E-22	2.32E-23	6.56E-24	1.01E-25	7.74E-27
3	1	1	4.19E-22	3.40E-23	2.65E-24	7.35E-25	1.08E-26	8.16E-28
3	2		1.26E-22	7.24E-24	3.92E-25	9.03E-26	7.12E-28	3.63E-29

Табела 11 (наставак)

3	2	0	7.94E-23	4.61E-24	2.53E-25	5.85E-26	4.66E-28	2.38E-29
3	2	1	2.13E-23	1.20E-24	6.41E-26	1.46E-26	1.14E-28	5.78E-30
3	2	2	2.11E-24	1.12E-25	5.61E-27	1.25E-27	9.24E-30	4.61E-31
4			1.03E-20	1.20E-21	1.38E-22	4.68E-23	1.33E-24	1.47E-25
4	0	0	8.39E-21	1.04E-21	1.25E-22	4.32E-23	1.27E-24	1.43E-25
4	1		1.86E-21	1.57E-22	1.27E-23	3.59E-24	5.48E-26	4.18E-27
4	1	0	1.48E-21	1.27E-22	1.04E-23	2.93E-24	4.52E-26	3.45E-27
4	1	1	1.86E-22	1.51E-23	1.18E-24	3.28E-25	4.83E-27	3.63E-28
4	2		7.57E-23	4.35E-24	2.36E-25	5.43E-26	4.28E-28	2.18E-29
4	2	0	4.77E-23	2.77E-24	1.52E-25	3.52E-26	2.81E-28	1.43E-29
4	2	1	1.28E-23	7.21E-25	3.85E-26	8.79E-27	6.84E-29	3.47E-30
4	2	2	1.26E-24	6.67E-26	3.36E-27	7.51E-28	5.55E-30	2.77E-31
4	3		7.86E-25	3.07E-26	1.12E-27	2.12E-28	8.69E-31	2.97E-32
4	3	0	3.91E-25	1.55E-26	5.75E-28	1.09E-28	4.55E-31	1.56E-32
4	3	1	1.62E-25	6.31E-27	2.29E-28	4.31E-29	1.75E-31	5.97E-33
4	3	2	3.22E-26	1.19E-27	4.15E-29	7.66E-30	2.99E-32	1.01E-33
4	3	3	2.64E-27	9.17E-29	3.02E-30	5.45E-31	2.03E-33	6.74E-35
Сумирани			5.84E-19	7.37E-20	9.05E-21	3.14E-21	9.43E-23	1.08E-23

Литература

- [1] Dž. Belkić, *Principles of Quantum Scattering Theory*, Bristol: Institute of Physics, 2004.
- [2] A. Einstein, *Ann. Phys. (Berl.)* 17 (1905), 549.
- [3] D. Dollard, *J. Math. Phys.* 5 (1964), 729.
- [4] I. M. Cheshire, *Proc. Phys. Soc. London* 84 (1964), 89.
- [5] Dž. Belkić, R. Gayet, A. Salin, *Phys. Rep.* 56 (1979), 279.
- [6] R. C. Isler, *Plasma Phys. Control. Fusion* 36 (1994), 171.
- [7] D. M. Thomas, *Phys. Plasmas* 19 (2012), 056118.
- [8] R. Hemsworth, H. Decamps, J. Graceffa, B. Schunke, M. Tanaka, M. Dremel, A. Tanga, H. P. L. De Esch, F. Geli, J. Milnes, T. Inoue, D. Marcuzzi, P. Sonato, P. Zaccaria, *Nucl. Fusion* 49 (2009), 045006.
- [9] H. Anderson, M. G. von Hellermann, R. Hoekstra, L. D. Horton, A. C. Howman, R. W. T. Konig, R. Martin, R. E. Olson, H. P. Summers, *Plasma Phys. Control. Fusion* 42 (2000), 781.
- [10] D. R. Bates, I. Mendaš, *Proc. R. Soc. A* 402 (1985), 245.
- [11] A. Dalgarno, R. McCray, *Ann. Rev. Astron. Astrophys.* 10 (1972), 375.
- [12] W. D. Watson, *Astrophys. J.* 206 (1975), 842.
- [13] W. D. Watson, *Rev. Mod. Phys.* 48 (1976), 513.
- [14] Dž. Belkić, R. McCarroll, *J. Phys. B* 10 (1977), 1933.
- [15] Dž. Belkić, *J. Math. Chem.* 47 (2010), 1366.
- [16] Dž. Belkić, *Z. Med. Phys.* 31 (2) (2021), 122.
- [17] L. F. Errea, C. Illescas, P. M. M. Gabás, L. Méndez, I. Rabadán, A. Riera, B. Pons, *Fast Ion-Atom and Ion-Molecule Collisions*, ed. by Dž. Belkić, Singapore: World Scientific Publishing, 2013, 231.
- [18] R. Garcia-Molina, I. Abril, P. de Vera, *Fast Ion-Atom and Ion-Molecule Collisions*, ed. by Dž. Belkić, Singapore: World Scientific Publishing, 2013, 271.

- [19] M. A. Rodríguez-Bernal, J. A. Liendo, *Theory of Heavy Ion Collision Physics in Hadron Therapy*, ed. by Dž. Belkić, Amsterdam: Elsevier, 2013, 203.
- [20] R. D. Rivarola, M. E. Galassi, P. D. Fainstein, C. Champion, *Theory of Heavy Ion Collision Physics in Hadron Therapy*, ed. by Dž. Belkić, Amsterdam: Elsevier, 2013, 231.
- [21] C. Champion, J. Hanssen, R. D. Rivarola, *Theory of Heavy Ion Collision Physics in Hadron Therapy*, ed. by Dž. Belkić, Amsterdam: Elsevier, 2013, 269.
- [22] J. J. Bailey, I. B. Abdurakhmanov, A. S. Kadyrov, I. Bray, *State-of-the-Art-Reviews on Energetic Ion-Atom and Ion-Molecule Collisions*, ed. by Dž. Belkić, I. Bray, A. Kadyrov, Singapore: World Scientific Publishing, 2019, 227.
- [23] S. Guatelli, D. Bolst, Z. Francis, S. Inerti, V. Ivanchenko, A. B. Rosenfeld, *State-of-the-Art-Reviews on Energetic Ion-Atom and Ion-Molecule Collisions*, ed. by Dž. Belkić, I. Bray, A. Kadyrov, Singapore: World Scientific Publishing, 2019, 255.
- [24] Dž. Belkić, *State-of-the-Art-Reviews on Energetic Ion-Atom and Ion-Molecule Collisions*, ed. by Dž. Belkić, I. Bray, A. Kadyrov, Singapore: World Scientific Publishing, 2019, 285.
- [25] J. R. Oppenheimer, *Phys. Rev.* 31 (1928), 349.
- [26] H. C. Brinkman, H. A. Kramers, *Proc. Acad. Sci. Amsterdam* 33 (1930), 973.
- [27] Dž. Belkić, *Quantum Theory of High-Energy Ion-Atom Collisions*, Oxford: Taylor & Francis, 2008.
- [28] R. K. Janev, L. P. Presnyakov, V. P. Shevelko, *Physics of Highly Charged Ions*, Berlin: Springer, 1985.
- [29] Dž. Belkić (ed.), *Fast Ion-Atom and Ion-Molecule Collisions*, Singapore: World Scientific, 2013.
- [30] Dž. Belkić (ed.), *Theory of Heavy Ion Collisions in Hadron Therapy (Vol. 65)*, Amsterdam: Elsevier, 2013.
- [31] Dž. Belkić, I. Bray, A. Kadyrov (eds.), *State-of-the-Art Reviews on Energetic Ion-Atom and Ion-Molecule Collisions (Vol. 2)*, Singapore: World Scientific, 2019.
- [32] Dž. Belkić, I. Mančev, J. Hanssen, *Rev. Mod. Phys.* 80 (2008), 249.
- [33] Dž. Belkić (ed.), *J. Math. Chem.* 47 (2010), 1420.
- [34] Dž. Belkić, *J. Math. Chem.* 57 (2019), 1.
- [35] Dž. Belkić, R. Gayet, J. Hanssen, A. Salin, *J. Phys. B* 19 (1986), 2945.

- [36] Dž. Belkić, H. S. Taylor, *Phys. Rev. A* 35 (1987), 1991.
- [37] Dž. Belkić, *Phys. Rev. A* 37 (1988), 55.
- [38] Dž. Belkić, H. S. Taylor, *Phys. Scr.* 39 (1989), 226.
- [39] Dž. Belkić, *Phys. Rev. A* 47 (1993), 189.
- [40] Dž. Belkić, *Phys. Rev. A* 47 (1993), 3824.
- [41] Dž. Belkić, *J. Phys. B* 26 (1993), 497.
- [42] Dž. Belkić, *Phys. Scr.* 53 (1996), 414.
- [43] E. Ghanbari-Adivi, M. A. Bolorizadeh, *J. Phys. B* 37 (2004), 3321.
- [44] E. Ghanbari-Adivi, A. N. Velayati, *Cent. Eur. J. Phys.* 11 (2013), 423.
- [45] S. K. Datta, D. S. F. Crothers, R. McCarroll, *J. Phys. B* 23 (1990), 479.
- [46] S. K. Datta, *J. Phys. B* 25 (1990), 1001.
- [47] I. Mančev, N. Milojević, Dž. Belkić, *At. Data Nucl. Data Tables* 129-130 (2019), 101282.
- [48] A. M. Ermolaev, *J. Phys. B* 17 (1984), 1069.
- [49] A. M. Ermolaev, B. H. Bransden, *J. Phys. B* 17 (1984), 1083.
- [50] A. M. Ermolaev, R. N. Hewittt, M. R. C. McDowell, *J. Phys. B* 20 (1987), 3125.
- [51] T. Kirchner, H. J. Lüdde, R. M. Dreizler, *Phys. Rev. A* 61 (1999), 012705.
- [52] T. Kirchner, M. Horbatsch, M. Keim, H. J. Lüdde, *Phys. Rev. A* 69 (1999), 012708.
- [53] A. E. Martinez, G. R. Deco, R. D. Rivarola, P. D. Fainstein, *Nucl. Inst. Meth. Phys. Res. B* 34 (1988), 32.
- [54] P. N. Abufager, A. E. Martinez, R. D. Rivarola, P. D. Fainstein, *Nucl. Inst. Meth. Phys. Res. B* 233 (2005), 255.
- [55] M. S. Gravielle, J. E. Miraglia, *Phys. Rev. A* 38 (1988), 5034.
- [56] M. Ghosh, C. R. Mandal, S. C. Mukherjee, *Phys. Rev. A* 35 (1987), 2815.
- [57] C. R. Mandal, M. Mandal, S. C. Mukherjee, *Phys. Rev. A* 42 (1990), 1803.
- [58] T. G. Winter, *Phys. Rev. A* 47 (1993), 264.
- [59] T. G. Winter, *Phys. Rev. A* 48 (1993), 3706.
- [60] S. Houamer, Yu. V. Popov, C. Dal Cappello, *Phys. Lett. A* 373 (2009), 4447.
- [61] D. S. F. Crothers, K. M. Dunseath, *J. Phys. B* 20 (1987), 4115.
- [62] H. Marxer, J. S. Briggs, *J. Phys. B* 25 (1992), 3823.

- [63] Y. R. Kuang, *Phys. Rev. A* 44 (1991), 1613.
- [64] C. D. Lin, *J. Phys. B* 11 (1978), L185.
- [65] V. P. Shevelko, *Z. Phys. A* 287 (1978), 19.
- [66] R. K. Janev, L. P. Presnyakov, V. P. Shevelko, *Phys. Lett. A* 76 (1980), 121.
- [67] I. Mančev, N. Milojević, Dž. Belkić, *Phys. Rev. A* 86 (2012), 022704.
- [68] I. Mančev, N. Milojević, Dž. Belkić, *Eur. Phys. J. D* 72 (2018), 209.
- [69] E. Ghanbari-Adivi, H. Ghavaminia, *Int. J. Mod. Phys. E* 24 (2015), 1550093.
- [70] E. Ghanbari-Adivi, *J. Phys. B* 44 (2011), 165204.
- [71] I. Mančev, N. Milojević, *Phys. Rev. A* 81 (2010), 022710.
- [72] I. Mančev, N. Milojević, Dž. Belkić, *Phys. Rev. A* 88 (2013), 052706.
- [73] I. Mančev, N. Milojević, Dž. Belkić, *EPL* 103 (2013), 23001.
- [74] I. Mančev, N. Milojević, Dž. Belkić, *Few-Body Syst.* 54 (2013), 1889.
- [75] N. Milojević, *J. Phys. Conf. Ser.* 565 (2014), 012004.
- [76] I. Mančev, N. Milojević, Dž. Belkić, *At. Data Nucl. Data Tables* 102 (2015), 6.
- [77] N. Milojević, I. Mančev, Dž. Belkić, *Phys. Rev. A* 96 (3) (2017), 032709.
- [78] N. Milojević, I. Mančev, *FU Phys. Chem. Tech.* 16 (2) (2018), 239.
- [79] R. Shakeshaft, *Phys. Rev. A* 18 (1978), 1930.
- [80] X. M. Tong, D. Kato, T. Watanabe, S. Ohtani, *Phys. Rev.* 62 (2000), 052701.
- [81] S. K. Avazbaev, A. S. Kadyrov, I. B. Abdurakhmanov, D. V. Fursa, I. Bray, *Phys. Rev. A* 93 (2016), 022710.
- [82] A. S. Kadyrov, I. B. Abdurakhmanov, I. Bray, A. T. Stelbovics, *Phys. Rev. A* 80 (2009), 022704.
- [83] A. S. Kadyrov, I. Bray, A. T. Stelbovics, *Phys. Rev. A* 73 (2006), 012710.
- [84] I. B. Abdurakhmanov, J. J. Bailey, A. S. Kadyrov, I. Bray, *Phys. Rev. A* 97 (2018), 032707.
- [85] M. Zapukhlyak, T. Kirchner, *Phys. Rev. A* 80 (2009), 062705.
- [86] M. Baxter, T. Kirchner, *Phys. Rev. A* 93 (2016), 012502.
- [87] A. Igarashi, C. D. Lin, *Phys. Rev. Lett.* 83 (1999), 4041.
- [88] I. B. Abdurakhmanov, A. S. Kadyrov, S. K. Avazbaev, I. Bray, *J. Phys. B* 49 (2016), 115203.

- [89] J. Faulkner, I. B. Abdurakhmanov, S. U. Alladustov, A. S. Kadyrov, I. Bray, *Plasma Phys. Control. Fusion* 61 (2019), 095005.
- [90] J. H. McGuire, O. L. Weaver, *Phys. Rev. A* 16 (1977), 41.
- [91] J. M. Hansteen, O. P. Mosebekk, *Phys. Rev. Lett.* 29 (1972), 1361.
- [92] Dž. Belkić, S. Saini, H. S. Taylor, *Phys. Rev. A* 36 (1987), 1601.
- [93] I. Mančev, *Kvantna teorija brzih jon-atomskih sudara*, Niš: Prirodno-matematički fakultet, Univerzitet u Nišu, 2004.
- [94] N. Milojević, *Preraspodelni procesi u brzim jon-atomskim sudarima*, Niš: Prirodno-matematički fakultet, Univerzitet u Nišu (doktorska disertacija), 2013.
- [95] P. Löwdin, *Phys. Rev.* 90 (1953), 120.
- [96] J. N. Silverman, O. Platas, F. A. Matsen, *J. Chem. Phys.* 32 (1960), 1402.
- [97] C. Eckart, *Phys. Rev.* 36 (1930), 878.
- [98] R. N. Hill, *Phys. Rev. Lett.* 38 (1977), 643.
- [99] E. A. Hylleraas, *Z. Phys.* 54 (1929), 347.
- [100] E. A. Hylleraas, *Z. Phys.* 65 (1930), 209.
- [101] P. Pluvinage, *Ann. Phys. NY* 5 (1950), 145.
- [102] P. Pluvinage, *J. Phys. Radium* 12 (1951), 789.
- [103] T. Kato, *Trans. Amer. Math. Soc.* 70 (1951), 212.
- [104] T. Kato, *Phys. Rev.* 77 (1950), 413.
- [105] N. Bazley, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* 40 (1959), 850.
- [106] S. Huzinaga, *Rev. Phys.* 122 (1961), 131.
- [107] E. Clementi, C. Roetti, *At. Data Nucl. Data Tables* 14 (1974), 177.
- [108] L. C. Green, M. M. Mulder, M. N. Lewis, J. W. J. Woll, *Phys. Rev.* 93 (1954), 757.
- [109] A. W. Weiss, *Phys. Rev.* 162 (1969), 71.
- [110] A. W. Weiss, *Adv. At. Mol. Phys.* 9 (1973), 1.
- [111] C. C. J. Roothan, *Rev. Mod. Phys.* 23 (1951), 69.
- [112] C. C. J. Roothan, *Rev. Mod. Phys.* 32 (1960), 179.
- [113] H. Bethe, E. Salpeter, *Quantum Mechanics of One- and Two-Electron Atoms*, New York: Plenum, 1977.
- [114] R. J. Tweed, *J. Phys. B* 5 (1972), 810.

- [115] F. W. J. Byron, C. J. Joachain, *Phys. Rev. Lett.* 16 (1966), 1139.
- [116] F. W. J. Byron, C. J. Joachain, *Phys. Rev.* 146 (1966), 1.
- [117] C. J. Joachain, R. Vanderpoorten, *Physica* 46 (1970), 333.
- [118] M. Rotenberg, J. Stein, *Phys. Rev.* 182 (1969), 1.
- [119] H. Bachau, *J. Phys. B* 17 (1984), 1771.
- [120] G. W. F. Drake, *Nucl. Inst. Meth. Phys. Res. B* 31 (1988), 7.
- [121] G. Taner, K. Richter, J.-M. Rost, *Rev. Mod. Phys.* 72 (2000), 497.
- [122] K. R. Greider, L. R. Dodd, *Phys. Rev.* 146 (1966), 671.
- [123] L. R. Dodd, K. R. Greider, *Phys. Rev.* 146 (1966), 675.
- [124] R. Aaron, R. Amado, B. Lee, *Phys. Rev.* 121 (1961), 319.
- [125] R. Gayet, *J. Phys. B* 5 (1972), 483.
- [126] J. Burgdörfer, K. Taulbjerg, *Phys. Rev. A* 33 (1986), 2959.
- [127] D. S. F. Crothers, L. J. Dube, *Adv. At. Mol. Opt. Phys.* 30 (1993), 287.
- [128] Dž. Belkić, I. Mančev, *Phys. Scr.* 45 (1992), 35.
- [129] Dž. Belkić, I. Mančev, *Phys. Scr.* 46 (1993), 18.
- [130] Dž. Belkić, R. Gayet, J. Hanssen, I. Mančev, A. Nuñez, *Phys. Rev. A* 56 (1997), 3675.
- [131] I. Mančev, *Phys. Rev. A* 60 (1999), 351.
- [132] N. Milojević, I. Mančev, D. Delibašić, Dž. Belkić, *Phys. Rev. A* 102 (1) (2020), 012816.
- [133] A. Erdélyi, W. Magnus, F. Oberhettinger, F. G. Tricomi, *Higher Transcendental Functions*, New York: McGraw-Hill, 1954.
- [134] E. Filter, E. O. Steinborn, *Phys. Rev. A* 18 (1978), 1.
- [135] I. S. Gradshteyn, I. M. Ryzhik, *Tables of Integrals, Series and Products (6th ed.)* New York: Academic, 2000.
- [136] P. Appell, J. Kampe de Fériet, *Functions Hypergeometriques et Hyperspheriques*, Paris: Gauthier-Villars, 1926.
- [137] M. Abramowitz, I. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions*, New York: Dower, 1956.
- [138] W. Press, S. Teukolsky, W. Vetterling, B. Flannery, *Numerical Recipes in Fortran 77: The Art of Scientific Computing (Vol. 1)*, Cambridge: Cambridge University Press, 1992.

- [139] P. Holoborodko, *Numerical Integration*, <http://www.holoborodko.com/pavel/numerical-methods/numerical-integration/>.
- [140] I. Mančev, N. Milojević, D. Delibašić, Dž. Belkić, *Phys. Scr.* 95 (6) (2020), 065403.
- [141] T. Koga, H. Tatewaki, A. J. Thakkar, *Theor. Chim. Acta* 88 (1994), 273.
- [142] T. Koga, S. Watanabe, K. Kanayama, R. Yasuda, A. J. Thakkar, *J. Chem. Phys.* 103 (1995), 3000.
- [143] T. Koga, K. Kanayama, S. Watanabe, A. J. Thakkar, *Int. J. Quantum Chem.* 71 (1999), 491.
- [144] D. Delibašić, M. Milojević, I. Mančev, Dž. Belkić, *At. Data Nucl. Data Tables* 139 (2021), 101417.
- [145] D. Delibašić, M. Milojević, I. Mančev, Dž. Belkić, *Eur. Phys. J. D* 75:115 (2021).
- [146] G. Ryding, A. B. Wittkower, H. B. Gilbody, *Proc. Phys. Soc. London* 89 (1966), 547.
- [147] J. E. Bayfield, *Phys. Rev.* 185 (1969), 105.
- [148] T. J. Morgan, J. Stone, R. Mayo, *Phys. Rev. A* 22 (1980), 1460.
- [149] R. F. Stebbings, R. A. Young, C. L. Oxley, H. Ehrhardt, *Phys. Rev.* 138 (1965), A1312.
- [150] T. J. Morgan, J. Geddes, H. B. Gilbody, *J. Phys. B* 6 (1973), 2118.
- [151] T. Kondow, R. J. Girnius, Y. P. Chong, W. L. Fite, *Phys. Rev. A* 10 (1974), 1167.
- [152] E. P. Andreev, V. A. Ankudinov, S. V. Bobashev, *Proceedings of the 5th International Conference on Photonic, Electronic, and Atomic Collisions (ICPEAC)*, Book of Abstracts (Nauka, Leningrad, 1967), 309.
- [153] J. E. Bayfield, *Phys. Rev.* 182 (1969), 115.
- [154] R. H. Hughes, E. D. Stokes, C. Song-Sik, T. J. King, *Phys. Rev. A* 4 (1971), 1453.
- [155] M. P. Hughes, J. Geddes, R. W. McCullough, H. B. Gilbody, *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B* 79 (1993), 50.
- [156] R. H. Hughes, H. R. Dawson, B. M. Doughty, *Phys. Rev.* 164 (1967), 166.
- [157] R. H. Hughes, C. A. Stigers, B. M. Doughty, E. D. Stokes, *Phys. Rev. A* 1 (1970), 1424.
- [158] J. C. Ford, E. W. Thomas, *Phys. Rev. A* 5 (1972), 1694.
- [159] Dž. Belkić, R. Gayet, *J. Phys. B* 10 (1977), 1911.

- [160] L. W. Fite, R. F. Stebbings, D. G. Hummer, R. T. Brackman, *Phys. Rev.* 119 (1960), 663.
- [161] G. W. McClure, *Phys. Rev.* 148 (1966), 47.
- [162] H. B. Gilbody, G. Ryding, *Proc. R. Soc. London, Ser. A* 291 (1966), 438.
- [163] A. B. Wittkower, G. Ryding, H. B. Gilbody, *Proc. R. Soc. London, Ser. A* 89 (1966), 541.
- [164] P. Hvelplund, A. Andersen, *Phys. Scr.* 26 (1982), 375.
- [165] P. M. Stier, C. F. Barnett, *Phys. Rev.* 103 (1956), 896.
- [166] C. F. Barnet, H. K. Reynolds, *Phys. Rev.* 109 (1958), 355.
- [167] L. M. Welsh, K. H. Berkner, S. N. Kaplan, R. V. Pyle, *Phys. Rev.* 158 (1967), 85.
- [168] U. Schryber, *Helv. Phys. Acta* 40 (1967), 1023.
- [169] L. H. Toburen, M. Y. Nakai, R. A. Langley, *Phys. Rev.* 171 (1968), 114.
- [170] P. J. Martin, D. M. Blankenship, T. J. Kvale, I. Redd, J. L. Peacher, J. T. Park, *Phys. Rev. A* 23 (1981), 3357.
- [171] J. T. Park, *Proceedings of the 12th International Conference on Photonic, Electronic, and Atomic Collisions (ICPEAC)*, Book of Abstracts (North-Holland, Amsterdam, 1982).
- [172] H. Vogt, R. Schuch, E. Justiniano, M. Shulz, W. Schwab, *Phys. Rev. Lett.* 57 (1986), 2256.
- [173] I. Mančev, N. Milojević, Dž. Belkić, *Phys. Rev. A* 91 (2015), 062705.
- [174] Dž. Belkić, S. Saini, H. S. Taylor, *Z. Phys. D* 3 (1986), 59.
- [175] Dž. Belkić, *Europhys. Lett.* 7 (1988), 323.
- [176] M. B. Shah, H. B. Gilbody, *J. Phys. B* 11 (1978), 121.
- [177] G. J. Frieling, R. Hoekstra, E. Smulder, W. J. Dickson, A. N. Zinoviev, S. J. Kuppens, F. J. de Heer, *J. Phys. B* 25 (1992), 1245.
- [178] J. E. Bayfield, G. A. Khayrallah, *Phys. Rev. A* 12 (1975), 869.
- [179] R. E. Olson, A. Salop, R. A. Phaneuf, F. W. Meyer, *Phys. Rev. A* 16 (1977), 1867.
- [180] M. M. Sant'Anna, W. S. Melo, A. C. F. Santos, V. L. B. de Jesus, M. B. Shah, G. M. Sigaud, E. C. Montenegro, H. F. Busnengo, S. E. Corchs, R. D. Rivarola, L. Gulyás, *Phys. Rev. A* 161 (2000), 052717.
- [181] S. K. Allison, *Rev. Mod. Phys.* 30 (1958), 1137.

- [182] L. I. Pivovarov, M. T. Novikov, V. M. Tubaev, *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* 42 (1962), 1490.
- [183] J. E. Bayfield, G. A. Khayrallah, *Phys. Rev. A* 11 (1975), 920.
- [184] P. Hvelplund, J. Heinemeier, E. Horsdal-Pedersen, F. R. Simpson, *J. Phys. B* 9 (1976), 491.
- [185] M. B. Shah, T. V. Goffe, H. B. Gilbody, *J. Phys. B* 11 (1978), L233.
- [186] L. I. Pivovarov, Y. Z. Levchenko, G. A. Krivonosov, *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* 59 (1970), 19.
- [187] Dž. Belkić, *Phys. Scr.* 43 (1991), 561.
- [188] Dž. Belkić, R. Gayet, A. Salin, *At. Data Nucl. Data Tables* 51 (1992), 59.
- [189] T. V. Goffe, M. B. Shah, H. B. Gilbody, *J. Phys. B* 12 (1979), 3763.
- [190] I. S. Dmitriev, Ya. A. Teplova, Yu. A. Belkova, Yu. A. Faĭnberg, *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* 125 (5) (2004), 1052.
- [191] W. G. Graham, K. H. Berkner, R. V. Pyle, A. S. Schlachter, J. W. Stearns, J. A. Tanis, *Phys. Rev. A* 30 (1984), 722.
- [192] R. Anholt, X.-Y. Xu, Ch. Stoller, J. D. Molitoris, W. E. Meyerhof, B. S. Rude, R. J. McDonald, *Phys. Rev. A* 37 (1988), 1105.
- [193] H. F. Busnengo, S. E. Corchs, E. Martinez, R. D. Rivarola, *Phys. Scr. T* 73 (1997), 242.
- [194] F. W. Meyer, R. A. Phaneuf, H. J. Kim, P. Hvelplund, P. H. Stelson, *Phys. Rev. A* 19 (1979), 515.
- [195] S. Cheng, C. L. Cocke, E. Y. Kamber, C. C. Hsu, S. L. Varghese, *Phys. Rev. A* 42 (1990), 214.
- [196] H. F. Busnengo, A. E. Martinez, R. D. Rivarola, *Phys. Scr.* 51 (1995), 190.
- [197] P. Richard, J. Hall, J. L. Shinpaugh, J. M. Sanders, T. N. Tipping, T. J. M. Zouros, D. H. Lee, H. Schmidt-Bocking, *Nucl. Inst. Meth. Phys. Res. A* 262 (1987), 69.
- [198] D. Delibašić, M. Milojević, I. Mančev, *FU Phys. Chem. Tech.* 18 (2) (2020), 131.
- [199] D. Delibašić, M. Milojević, I. Mančev, *Book of Contributed Papers, 30th Summer School and International Symposium on the Physics of Ionized Gases (SPIG)* (2020), 71.
- [200] B. Peart, K. Rinn, K. Dolder, *J. Phys. B* 16 (1983), 1461.
- [201] K. Rinn, F. Melchert, E. Salzborn, *J. Phys. B* 18 (1985), 3783.
- [202] M. F. Watts, K. F. Dunn, H. B. Gilbody, *J. Phys. B* 19 (1986), L355.

- [203] F. Melchert, S. Krudener, R. Schulze, S. Petri, S. Pfaff, E. Salzborn, *J. Phys. B* 28 (1995), L355.
- [204] H. Brauning, R. Trassl, A. Theiß, A. Diehl, E. Salzborn, M. Keim, A. Achenbach, H. J. Lüdde, T. Kirchner, *J. Phys. B* 38 (2005), 2311.
- [205] S. Mukherjee, N. C. Sil, *J. Phys. B* 13 (1980), 3421.
- [206] R. Samanta, M. Purkait, C. R. Mandal, *Phys. Scr.* 82 (2010), 065303.
- [207] T. Grozdanov, E. Solov'ev, *Eur. Phys. J. D* 72 (2018), 64.
- [208] R. Cline, P. J. M. van der Burgt, W. B. Westerveld, J. S. Risley, *Phys. Rev. A* 49 (1994), 2613.
- [209] R. Hippler, W. Harbich, M. Faust, H. O. Lutz, L. J. Dubé, *J. Phys. B* 19 (1986), 1507.
- [210] R. Hippler, W. Harbich, H. Madeheim, H. Kleinpoppen, H. O. Lutz, *Phys. Rev. A* 35 (1987), 3139.
- [211] R. J. Conrads, T. W. Nichols, J. C. Ford, E. W. Thomas, *Phys. Rev. A* 7 (1973), 1928.
- [212] M. C. Brower, F. M. Pipkin, *Phys. Rev. A* 39 (1989), 3323.
- [213] R. A. Cline, W. B. Westerveld, J. S. Risley, *Phys. Rev. A* 43 (1991), 1611.
- [214] B. M. Doughty, M. L. Goad, R. W. Cernosek, *Phys. Rev. A* 18 (1978), 29.
- [215] J. L. Edwards, E. W. Thomas, *Phys. Rev. A* 2 (1970), 2346.
- [216] J. F. Williams, *Phys. Rev.* 157 (1967), 97.
- [217] 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, J. H. McGuire, *Phys. Rev. A* 23 (1981), 2858.
- [218] E. Horsdal-Pedersen, C. Cocke, M. Stockli, *Phys. Rev. Lett.* 50 (1983), 1910.
- [219] M. B. Shah, H. B. Gilbody, *J. Phys. B* 18 (1985), 899.
- [220] M. B. Shah, P. McCallion, H. B. Gilbody, *J. Phys. B* 22 (1989), 3037.
- [221] M. S. Schöffler, J. Titze, L. Ph. H. Schmidt, T. Jehnke, N. Neumann, O. Jagutzki, H. Schmidt-Böcking, R. Dörner, I. Mančev, *Phys. Rev. A* 79 (2009), 064701.
- [222] D. L. Guo, X. Ma, S. F. Zhang, X. L. Zhu, W. T. Feng, R. T. Zhang, B. Li, H. P. Liu, S. C. Yan, P. J. Zhang, Q. Wang, *Phys. Rev. A* 86 (2012), 052707.
- [223] P. Loftager, *приватна комуникација* (2002).

- [224] D. Fischer, M. Gudmundsson, Z. Berényi, N. Haag, H. A. B. Johansson, D. Misra, P. Reinhard, A. Kállberg, A. Simonsson, K. Stöckel, H. Cederquist, H. T. Schmidt, *Phys. Rev. A* 81 (2010), 012714.
- [225] L. I. Pivovarov, V. M. Tabuev, M. T. Novikov, *JETP* 14 (1962), 20.
- [226] M. E. Rudd, T. V. Goffe, A. Itoh, *Phys. Rev. A* 32 (1985), 2128.
- [227] R. D. DuBois, *Phys. Rev. A* 36 (1987), 2585.
- [228] N. V. de Castro Faria, Jr. F. L. Freire, A. G. de Pinho, *Phys. Rev. A* 37 (1988), 280.
- [229] 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, H. Schmidt-Böcking, *Phys. Rev. Lett.* 74 (1995), 2200.
- [230] M. Alessi, S. Otranto, P. Focke, *Phys. Rev. A* 83 (2011), 014701.
- [231] V. S. Nikolaev, I. S. Dmitriev, L. N. Fateyeva, Ya. A. Teplova, *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* 40 (1961), 989.
- [232] O. Voitke, P. A. Závodszky, S. M. Ferguson, J. H. Houck, J. A. Tanis, *Phys. Rev. A* 57 (1998), 2692.
- [233] M. M. Sant'Anna, A. C. F. Santos, L. F. S. Coelho, G. Jalbert, N. V. de Castro Faria, F. Zappa, P. Focke, Dž. Belkić, *Phys. Rev. A* 80 (2009), 042707.
- [234] I. S. Dmitriev, Ya. A. Teplova, Yu. A. Belkova, N. V. Novikov, Yu. A. Faĭnberg, *At. Data Nucl. Data Tables* 96 (2010), 85.
- [235] R. Hippler, S. Datz, P. D. Miller, P. L. Pepmiller, P. F. Dittner, *Phys. Rev. A* 35 (1987), 585.
- [236] T. R. Dillingham, J. R. Macdonald, P. Richard, *Phys. Rev. A* 24 (1981), 1237.
- [237] J. R. Macdonald, F. W. Martin, *Phys. Rev. A* 4 (1971), 1965.
- [238] H. Knudsen, H. K. Haugen, P. Hvelplund, *Phys. Rev.* 23 (1981), 597.
- [239] S. A. Boman, E. M. Bernstein, J. A. Tanis, *Phys. Rev. A* 39 (1989), 4423.
- [240] J. N. Houck, P. A. Závodszky, J. A. Tanis, *Phys. Rev. A* 56 (1997), 1954.
- [241] J. L. Shinpaugh, J. M. Sanders, J. M. Hall, D. H. Lee, H. Schmidt-Böcking, T. N. Tipping, T. Zouros, P. Richard, *Phys. Rev. A* 45 (1992), 2922.
- [242] R. Ünal, P. Richard, I. Ben-Itzhak, C. L. Cocke, M. J. Singh, H. Tawara, N. Woody, *Phys. Rev. A* 76 (2007), 012710.
- [243] E. C. Sewell, G. C. Angel, K. F. Dunn, H. B. Gilbody, *J. Phys. B* 13 (1980), 2269.

- [244] I. Mančev, N. Milojević, *Book of Contributed Papers, 27th Summer School and International Symposium on the Physics of Ionized Gases (SPIG)* (2014), 98.
- [245] R. N. Il'in, V. A. Oparin, E. S. Solov'ev, N. V. Fedorenko, *Sov. Phys.-JETP Lett.* 2 (1965), 197.
- [246] R. D. DuBois, L. H. Toburen, *Phys. Rev. A* 31 (1985), 3603.
- [247] M. B. Shah, D. S. Elliott, H. B. Gilbody, *J. Phys. B* 18 (1985), 4245.
- [248] W. Grüebler, P. A. Schmelzbach, V. König, P. Marmier, *Helv. Phys. Acta* 43 (1970), 254.
- [249] B. A. D'yachkov, *Zh. Tekhn. Fiz.* 38 (1968), 1259.
- [250] M. Sasao, K. Sato, A. Matsumoto, S. Takagi, S. Amemiya, T. Masuda, Y. Tsurita, F. Fukuzawa, Y. Haruyama, Y. Kanamori, *J. Phys. Soc. Japan* 55 (1986), 102.
- [251] R. W. McCullough, T. V. Goffe, M. B. Shah, N. Lemon, H. B. Gilbody, *J. Phys. B* 15 (1982), 111.
- [252] G. A. Murray, J. Stone, M. Mayo, T. J. Morgan, *Phys. Rev. A* 25 (1982), 1805.
- [253] Dž. Belkić, I. Mančev, *Phys. Scr.* 42 (1990), 285.
- [254] M. Rødbro, E. Horsdal-Pedersen, C. L. Cocke, J. R. Macdonald, *Phys. Rev. A* 19 (1979), 1936.
- [255] C. L. Cocke, R. K. Gardner, B. Curnutte, T. Bratton, T. K. Saylor, *Phys. Rev. A* 16 (1977), 2248.
- [256] E. Acerbi, M. Castiglioni, G. Dutto, F. Resmini, C. Succi, G. Tagliaferri, *N. Cim. B* 50 (1967), 176.
- [257] E. Acerbi, B. Candoni, M. Castiglioni, G. Dutto, G. Fait, F. Resmini, C. Succi, *N. Cim. A* 64 (1969), 1068.
- [258] K. H. Berkner, S. N. Kaplan, G. A. Paulikas, R. V. Pyle, *Phys. Rev.* 140 (1965), A729.
- [259] S. L. Varghese, G. Bissinger, J. M. Joyce, R. Laubert, *Phys. Rev. A* 31 (1985), 2202.
- [260] I. Katayama, G. P. A. Berg, W. Hürlimann, S. A. Martin, J. Meissburger, W. Oelert, M. Rogge, J. G. M. Römer, J. L. Tain, L. Zemlo, G. Gaul, *J. Phys. B* 17 (1984), L23.
- [261] Л. Л. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика*, Москва: Наука, 1989.

Биографија

Данило Делибашић је рођен 26.12.1991. год. у Београду, општина Савски венац. Завршио је основну школу „Свети Сава“ у Нишу, као вуковац и ђак генерације. Завршио је гимназију „Светозар Марковић“ у Нишу, у којој је похађао „Специјализовано одељење за ученике са посебним способностима за физику“, такође као вуковац. Током школовања се успешно такмичио у области природних наука, као и из енглеског језика. Међу наградама се издвајају две треће награде и једна похвала на републичким такмичењима из физике. Два пута је учествовао на републичком такмичењу из енглеског језика.

Основне академске студије Физике уписао је на Департману за физику, Природно-математичког факултета у Нишу 2010. године. Завршио их је 2013. године, са просечном оценом 10.00. Мастер академске студије Опште физике уписао је 2013. године на истом Департману. Завршио их је 2015. године, са просечном оценом 10.00. Мастер рад под називом „Полукласични модели квантних интерферентних ефеката у интеракцији атома са електромагнетним пољем“ одбранио је са оценом 10. Докторске студије Физике уписао је на Департману за физику, Природно-математичког факултета у Нишу 2015. године. Положио је све испите предвиђене планом и програмом студија, са просечном оценом 10.00 и остварио 195 ЕСПБ бодова.

Добитник је стипендије Фонда за младе таленте „Доситеја“ Министарства омладине и спорта Републике Србије на завршним годинама основних и мастер студија (2012/13, 2014/15), стипендије Министарства просвете, науке и технолошког развоја Републике Србије за изузетно надарене студенте (2013/14), као и стипендије града Ниша (2008-2012). Награђен је „Светосавском плакетом“ од стране града Ниша за изузетан успех током студија (2017). Од 2018. године је на пројекту Министарства просвете, науке и технолошког развоја Републике Србије, под називом „Видљива и невидљива материја у блиским галаксијама: теорија и посматрања“ (ОИ176021).

Од октобра 2016. године је запослен као асистент на Департману за физику, Природно-математичког факултета у Нишу. Претходно је у периоду октобар 2014. године - септембар 2016. године био запослен као сарадник у настави,

на истом Департману. Током седам година рада на факултету изводи рачунске и/или лабораторијске вежбе из следећих предмета: Термодинамика и молекуларна физика, Математичка физика, Основе атомске и молекуларне физике, Нуклеарна физика, Физика (за студенте Биологије). У школској 2020/21. години био је ангажован у гимназији „Бора Станковић“ у Нишу, за извођење наставе из предмета Физика за ученике трећег разреда билингвалног одељења природно-математичког усмерења.

Био је учесник бројних школа за студенте, како основних и мастер, тако и докторских студија, као и више научних конференција. Био је члан локалног организационог одбора SEENET-MTP PhD Training Program школе, под називом *High Energy and Particle Physics: Theory and Phenomenology - BS2018* (Ниш, 2018), као и конференција *Beyond the Standard Models - BW2013* (Врњачка бања, 2013) и *Field Theory and the Early Universe - BW2018* (Ниш, 2018).

Члан је Друштва физичара Ниш и Мреже Југоисточне Европе за математичку и теоријску физику (SEENET-MTP). Учесник је бројних активности везаних за промоцију науке, попут „Европске ноћи истраживача“, фестивала науке „Наук није баук“, локалне организације међународног семинара *International Masterclasses* за ученике средњих школа, под покровитељством CERN и IPPOG, затим „Смотре ученичких радова“, као и других манифестација. Годинама уназад укључен је у припрему ученика средњих школа за такмичења из физике, као и у раду комисија за прегледавање на општинском и окружном нивоу.

Бави се истраживањима у области квантне теорије расејања, конкретно јон-атомским сударним процесима. Део докторских студија је провео у области космологије.

Матерњи језик му је српски. Поседује изузетно познавање енглеског језика, као и основно познавање немачког језика.

Библиографија

Радови у врхунским међународним часописима [M21]:

1. N. Milojević, I. Mančev, D. Delibašić, Dž. Belkić, *Three-body boundary-corrected continuum-intermediate-state method for single charge exchange with the general transition amplitude ($1s \rightarrow nlm$) applied to the $p - H(1s)$, $\alpha - H(1s)$, and $p - He(1s^2)$ collisions with $n \leq 4$* , Physical Review A 102 (1), 012816 (2020) DOI: 10.1103/PhysRevA.102.012816 [IF = 2.907]

Радови у истакнутим међународним часописима [M22]:

1. D. Delibašić, N. Milojević, I. Mančev, Dž. Belkić, *Electron transfer from atomic hydrogen to multiply-charged nuclei at intermediate and high energies*, Atomic Data and Nuclear Data Tables 139, 101417 (2021) DOI: 10.1016/j.adt.2021.101417 [IF = 2.407]
2. I. Mančev, N. Milojević, D. Delibašić, Dž. Belkić, *Electron capture by fast projectiles from lithium, carbon, nitrogen, oxygen and neon*, Physica Scripta 95 (6), 065403 (2020) DOI: 10.1088/1402-4896/ab725e [IF = 2.151]

Радови у међународним часописима [M23]:

1. D. Delibašić, N. Milojević, I. Mančev, Dž. Belkić, *Electron removal from hydrogen atoms by impact of multiply charged nuclei*, European Physical Journal D 75:115 (2021) DOI: 10.1140/epjd/s10053-021-00123-6 [IF = 1.366]

Радови у водећим часописима националног значаја [M51]:

1. D. Delibašić, N. Milojević, I. Mančev, *Single-electron capture in ion-ion collisions*, Facta Universitatis, Series: Physics, Chemistry and Technology 18 (2), 131 (2020)

Предавања по позиву са међународних скупова штампана у изводу [M32]:

1. D. Dimitrijević, G. Djordjević, M. Milošević, M. Dimitrijević, D. Delibašić, M. Stojanović, *Tachyon Field as a Constrained System*, TIM-17, Timisoara, Romania, Abstract Booklet (2017)

Саопштења са међународних скупова штампана у целини [M33]:

1. D. Delibašić, N. Milojević, I. Mančev, *Single-Electron Capture in $p - \text{He}^+$ Collisions*, SPIG 2020, Publications of the Astronomical Observatory Belgrade 99, pp. 71-74 (2020)

Саопштења са међународних скупова штампана у изводу [M34]:

1. V. Pavlović, D. Delibašić, Lj. Stevanović, *Double-double electromagnetically induced transparency in the four-level Y-type atom with spontaneously generated coherence*, Photonica 2015, Belgrade, Serbia, Book of Abstracts, pp. 50-51 (2015)
2. D. Delibašić, D. Dimitrijević, G. Djordjević, M. Milošević, M. Stojanović, *Numerical Computation of Observational Parameters for Inflationary Cosmological Models*, TIM-17, Timisoara, Romania, Abstract Booklet (2017)
3. D. Delibašić, D. Dimitrijević, G. Djordjević, *DBI and Locally-Equivalent Standard-Type Lagrangians in a FLRW Spacetime*, BPU10, Sofia, Bulgaria, Book of Abstracts, p. 246 (2018)

Саопштења са скупова националног значаја штампана у изводу [M64]:

1. D. Delibašić, D. Dimitrijević, G. Djordjević, M. Milošević, M. Stojanović, *Braneworld Cosmology and Tachyon Inflation - RSII Numerical Models*, XVIII Serbian Astronomical Conference, Belgrade, Serbia, Book of Abstracts, p. 35 (2017)

Изјаве аутора

ИЗЈАВА О АУТОРСТВУ

Изјављујем да је докторска дисертација, под насловом:

Једноструки електронски захват у сударима брзих пројектила са водонику и хелијуму сличним метама

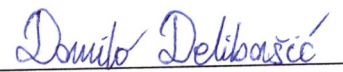
која је одбрањена на Природно-математичком факултету Универзитета у Нишу:

- резултат сопственог истраживачког рада;
- да ову дисертацију, ни у целини, нити у деловима, нисам пријављивао на другим факултетима, нити универзитетима;
- да нисам повредио ауторска права, нити злоупотребио интелектуалну својину других лица.

Дозвољавам да се објаве моји лични подаци, који су у вези са ауторством и добијањем академског звања доктора наука, као што су име и презиме, година и место рођења и датум одбране рада, и то у каталогу Библиотеке, Дигиталном репозиторијуму Универзитета у Нишу, као и у публикацијама Универзитета у Нишу.

У Нишу, 30.6.2021. год.

Потпис аутора дисертације:



Данило Делибашић

**ИЗЈАВА О ИСТОВЕТНОСТИ ЕЛЕКТРОНСКОГ И ШТАМПАНОГ ОБЛИКА
ДОКТОРСКЕ ДИСЕРТАЦИЈЕ**


Наслов дисертације:

**Једноструки електронски захват у сударима брзих пројектила са
водонику и хелијуму сличним метама**

Изјављујем да је електронски облик моје докторске дисертације, коју сам предао за уношење у Дигитални репозиторијум Универзитета у Нишу, истоветан штампаном облику.

У Нишу, 30.6.2021. год.

Потпис аутора дисертације:


Данило Делибашић

ИЗЈАВА О КОРИШЋЕЊУ

Овлашћујем Универзитетску библиотеку „Никола Тесла“ да у Дигитални репозиторијум Универзитета у Нишу унесе моју докторску дисертацију, под насловом:

Једноструки електронски захват у сударима брзих пројектила са водонику и хелијуму сличним метама

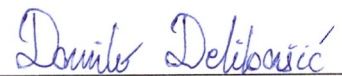
Дисертацију са свим прилозима предао сам у електронском облику, погодном за трајно архивирање.

Моју докторску дисертацију, унету у Дигитални репозиторијум Универзитета у Нишу, могу користити сви који поштују одредбе садржане у одабраном типу лиценце Креативне заједнице (Creative Commons), за коју сам се одлучио.

1. Ауторство (CC BY)
2. Ауторство – некомерцијално (CC BY-NC)
3. Ауторство – некомерцијално – без прераде (CC BY-NC-ND)
- 4. Ауторство – некомерцијално – делити под истим условима (CC BY-NC-SA)**
5. Ауторство – без прераде (CC BY-ND)
6. Ауторство – делити под истим условима (CC BY-SA)

У Нишу, 30.6.2021. год.

Потпис аутора дисертације:



Данило Делибашић