

СЕЧЕНИЯ ОДНОЭЛЕКТРОННОГО ЗАХВАТА С ИОНИЗАЦИЕЙ ПРИ СТОЛКНОВЕНИЯХ АТОМОВ ГЕЛИЯ С ПРОТОНАМИ

А. П. Ковач, В. Ю. Лазур, Ю. Ю. Машижа

Рассмотрен процесс захвата с ионизацией $A^{Z_A^+} + B \rightarrow A^{(Z_A-1)^+} + B^{2+} + e^-$ в области больших и средних энергий. Для вычисления амплитуды перехода применяется метод искаженных волн непрерывного спектра, который до настоящего времени успешно использовался в расчетах полных и дифференциальных сечений процессов «чистой ионизации» и «чистой перезарядки». Окончательное выражение содержит два множителя, один из которых равен амплитуде рассеяния с перезарядкой и эквивалентен результату, полученному Гаеом в рамках метода искаженных волн. Второй множитель описывает связанно-свободный переход в ионе B^+ . Результат расчета сечений для процесса $He^+ + p \rightarrow He^{2+} + H + e^-$ сравнивается с экспериментальными данными.

Современные исследования по физике атомных столкновений предъявляют все более высокие требования к точности и надежности определения характеристик взаимодействия атомных частиц [1]. Данные о сечениях ион-атомных процессов перезарядки, ионизации, захвата с ионизацией, возбуждения и др. необходимы не только для развития атомно-молекулярной физики в целом, но и для решения важных прикладных задач в управляемом термоядерном синтезе и в физике низкотемпературной плазмы, в физике верхней атмосферы, физике и технике лазеров и в химии высоких энергий.

Точная постановка задачи о рассеянии в системе нескольких частиц была сформулирована Фаддеевым в 1960 г. [2]. В настоящее время разработан ряд методов решения уравнений Фаддеева, применяемых в ядерной задаче трех тел. Что касается ядерной задачи большего числа частиц, то расчеты, основанные на интегральных уравнениях Фаддеева—Якубовского [3], проводились для четырех частиц, однако возможность решения этих уравнений для 5, 6 и более частиц остается проблематичной.

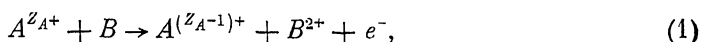
В задачах атомных столкновений ситуация усложняется, и там результатов, полученных при помощи уравнений Фаддеева, значительно меньше. Поэтому по-прежнему актуальным остается развитие приближенных теоретических методов описания перечисленных выше процессов, устанавливающих зависимость сечений от основных параметров столкновения и согласующихся с экспериментальными данными.

При больших энергиях налетающих частиц проблем нет. Налетающая частица пролетает мимо атома столь быстро, что не успевает значительно изменить состояние атома, и в этой области энергий хорошо работает высокоэнергетическое борновское приближение. Что касается области промежуточных энергий, как раз наиболее важной для приложений, то здесь ситуация весьма сложная. Методы, которые с успехом используются при малых и больших энергиях, здесь не применимы. Этот вывод относится и к методу сильной связи каналов, реализация которого в области промежуточных энергий затруднена необходимостью проведения трудоемких численных расчетов. Это относится и к асимптотическим по большому межъядерному расстоянию ме-

тодам теории атомных столкновений [4, 5], так как при относительных скоростях движения тяжелых частиц, близких к орбитальной скорости связанного электрона, рабочими являются межъядерные расстояния, близкие к размеру атома.

Физические особенности процессов рассеяния атомных частиц при промежуточных энергиях обусловлены сильным искажением волновых функций активных электронов из-за наличия дальнедействующего кулоновского взаимодействия между частицами, в результате которого реальные переходы электронов из начального в конечное состояние сопровождаются массой других, виртуальных, переходов. Для описания этих специфических особенностей кулоновского взаимодействия реально используют различные приближенные варианты предингеровского формализма, наиболее популярным из которых является метод искаженных волн непрерывного спектра (continuum distorted wave (CDW) approximation [6]). Привлекательной стороной CDW-метода является последовательное рассмотрение асимптотики электронных волновых функций, учитывающее дальнедействующую природу кулоновских взаимодействий.

До настоящего времени указанный метод успешно использовался в расчетах полных и дифференциальных сечений процессов «чистой» ионизации [7] и «чистой» перезарядки [6]. Однако до настоящего времени в теории не была изучена перезарядка (захват) с одновременной ионизацией



представляющая собой двухэлектронный переход, когда один из электронов атома-мишени B захватывается налетающей частицей $A^{Z,1+}$, а второй переходит в непрерывный спектр на исходном центре. Сечения процессов (1) довольно велики (порядка 10^{-18} — 10^{-16} см²), поэтому вклад процессов захвата с одновременной ионизацией в обдирку атомов при столкновениях с ионами, вообще говоря, необходимо учитывать наряду с одноэлектронной ионизацией и одноэлектронной перезарядкой, особенно в области промежуточных энергий сталкивающихся частиц, где сечения перезарядки и ионизации являются величинами одного порядка.

Успехи, достигнутые в изучении процессов перезарядки и ионизации на основе CDW-метода, побудили нас разработать предингеровский формализм метода искаженных волн непрерывного спектра для описания процесса захвата с ионизацией (1) в области промежуточных и больших скоростей сталкивающихся частиц. Предложенный формализм опробован нами на примере расчета сечений захвата с ионизацией при столкновениях атомов гелия с протонами. Полученные результаты оказываются весьма обнадеживающими.

1. Амплитуда переходов в CDW-методе

Процесс захвата с ионизацией при столкновении атома с ионом будем изучать на простейшем примере столкновения атома гелия He с ядрами H^+ . Тем не менее развиваемые ниже теоретические представления о физических особенностях процесса захвата с ионизацией имеют общий характер. Формальное построение теории будет дано в виде, пригодном для описания столкновения произвольных атомных частиц.

Рассмотрение задачи будем проводить на основе квазиклассического приближения. При этом относительное движение центров инерции тяжелых частиц описывается соотношением $R(t) = \rho + vt$ (ρ — параметр удара, v — скорость движения налетающей частицы относительно ядра атома B). Полный электронный гамильтониан системы (1), включающий и межъядерное отталкивание, представим в виде суммы ($e = \hbar = m = 1$)

$$H = H_0 + V, \quad H_0 = -\frac{1}{2} \Delta_1 - \frac{1}{2} \Delta_2, \quad (2)$$

где V — полное взаимодействие частиц в системе

$$V = - \sum_{j=1}^2 \left(\frac{Z_A}{s_j} + \frac{Z_B}{x_j} \right) + \frac{1}{r_{12}} + \frac{Z_A Z_B}{R}. \quad (3)$$

Здесь x_j, s_j, r_j описывают положение j -го электрона ($j=1, 2$) по отношению к остаточному иону B^{2+} с ядерным зарядом Z_B , налетающему иону A^{Z_A} с ядерным зарядом Z_A и центру отрезка R соответственно; r_{12} — расстояние между активными электронами; Δ_j — трехмерный оператор Лапласа по координатам r_j .

Сущность используемого CDW-метода заключается в разбиении полного гамильтониана системы H на две части

$$H = H_i + v_i = H_f + v_f, \quad H_i = H_0 + V_i, \quad H_f = H_0 + V_f, \quad (4)$$

$$v_i = V - V_i, \quad v_f = V - V_f, \quad V_i = - \sum_{j=1}^2 \frac{Z_B}{x_j} + \frac{1}{r_{12}}, \quad V_f = - \frac{Z_A}{s_1}, \quad (5)$$

одна из которых H_i (H_f) (ее обычно называют канальным гамильтонианом) определяет связанные состояния в системе, а другая v_i (v_f) дает остаток, не содержащий вкладов от связанных состояний. Введем теперь две волновые функции $\Psi_i^+(t)$, $\Psi_f^-(t)$, которые являются точными решениями нестационарного уравнения Шредингера

$$\left(H - i \frac{\partial}{\partial t} \right) \Psi_{i,f}^{\pm}(t) = 0, \quad (6)$$

но удовлетворяют разным граничным условиям при больших $|t|$

$$\begin{aligned} \Psi_i^+(t) &\xrightarrow{t \rightarrow -\infty} \Phi_i^B(t) e^{i\sigma_i(t)} \equiv \varphi_i^B(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) e^{i\sigma_i(t)} \times \\ &\times \exp \left\{ -i \left(\frac{1}{4} v^2 t + \frac{1}{2} \mathbf{v} \mathbf{r}_1 + \frac{1}{2} \mathbf{v} \mathbf{r}_2 + E_i^B t \right) \right\} = \mathcal{E}_i \varphi_i^B e^{i\sigma_i(t)}, \end{aligned} \quad (7)$$

$$\begin{aligned} \Psi_f^-(t) &\xrightarrow{t \rightarrow +\infty} \Phi_f^A(t) e^{-i\sigma_f(t)} \equiv (2\pi)^{-3/2} \varphi_f^A(s_1) e^{-i\sigma_f(t)} \times \\ &\times \exp \left\{ -i \left(\frac{1}{4} v^2 t - \frac{1}{2} \mathbf{v} \mathbf{r}_1 + \frac{1}{2} \mathbf{v} \mathbf{r}_2 - k \mathbf{x}_2 + (E_f^A + E_k) t \right) \right\} \equiv \mathcal{E}_f \varphi_f^A e^{-i\sigma_f(t)}. \end{aligned} \quad (8)$$

Кулоновские фазы σ_i и σ_f даются эйкональными формулами, которые в данном случае принимают вид

$$\begin{aligned} \sigma_i(t) &= \frac{Z_A(Z_B - 2)}{v} \ln(vR - v^2 t), \\ \sigma_f(t) &= \frac{i(Z_A - 1)(Z_B - 1)}{v} \ln(vR + v^2 t) - \frac{Z_B}{k} \ln(kx_2 + kx_2). \end{aligned} \quad (9)$$

Физическая причина их появления обусловлена тем обстоятельством, что асимптотическое движение частиц в кулоновском поле никогда не бывает свободным и частицы слабо взаимодействуют при сколь угодно больших расстояниях между ними. В выражении (8) величина $E_k = k^2/2$ представляет собой кинетическую энергию свободного электрона, k — относительный импульс выбитого электрона и иона B^{2+} . Задача отыскания собственных функций φ_i^B и φ_f^A канальных гамильтонианов H_i и H_f связана с решением уравнений

$$(H_i - E_i^B) \varphi_i^B(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = 0, \quad (H_f - E_f^A) \varphi_f^A(s_1) = 0. \quad (10)$$

Введем волновую функцию $\chi_i^+(x_i^-)$ («искаженную волну»), являющуюся решением уравнения Шредингера в некотором потенциале U_i (U_f)

$$\left(H_i + U_i - i \frac{\partial}{\partial t} \right) \chi_i^+ = 0, \quad \left(H_f + U_f - i \frac{\partial}{\partial t} \right) \chi_f^- = 0. \quad (11)$$

Представим волновые функции χ_i^+ и χ_f^- в виде

$$\chi_i^+ = \Phi_i^B \mathcal{L}_i^+, \quad \chi_f^- = \Phi_f^A \mathcal{L}_f^-, \quad (12)$$

где \mathcal{L}_i^+ , \mathcal{L}_f^- — некоторые поправочные функции, которые учитывают наличие второго потенциального центра. Получим явный вид уравнений для расчета искажений во входном и в выходном каналах реакции. Подставляя функцию χ_i^+ в виде (12) в нестационарное уравнение Шредингера (11), получим уравнение относительно \mathcal{L}_i^+ , которое для дальнейшего удобно записать в виде

$$\Phi_i^B \left[T_0 - \frac{Z_A}{s_1} - \frac{Z_A(Z_B - 1)}{R} - i\omega_0^+ \right] \mathcal{L}_i^+ = \mathcal{F}_i^+, \quad (13)$$

где

$$T_0 = H_0 - i \frac{\partial}{\partial t}, \quad \omega_0^+ = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^2 \mathbf{v} \nabla_k, \quad W_i = v_i - U_i, \quad (14)$$

$$\mathcal{F}_i^+ = \left[W_i - Z_A \left(\frac{1}{R} - \frac{1}{s_2} \right) \right] \chi_i^+ + \mathcal{E}_i \sum_{k=1}^2 \nabla_k \varphi_i^B \nabla_k \mathcal{L}_i^+. \quad (15)$$

Аналогичное уравнение можно получить и для функции \mathcal{L}_f^- в выходном канале

$$\Phi_f^A \left[T_0 - \frac{Z_B - 1}{x_1} - \frac{Z_B}{x_2} - \frac{Z_A(Z_B - 1)}{R} + i\omega_k^- \right] \mathcal{L}_f^- = \mathcal{F}_f^-, \quad (16)$$

где

$$W_f = v_f - U_f, \quad \omega_k^- = -\frac{1}{2} \mathbf{v} \nabla_1 - \left(\mathbf{k} - \frac{1}{2} \mathbf{v} \right) \nabla_2, \quad (17)$$

$$\mathcal{F}_f^- = \left[W_f - Z_A \left(\frac{1}{R} - \frac{1}{s_2} \right) - \left(\frac{1}{x_{12}} - \frac{1}{x_1} \right) \right] \chi_f^- + \mathcal{E}_f \nabla_1 \varphi_f^A \nabla_1 \mathcal{L}_f^-. \quad (18)$$

Для успешной реализации CDW-метода потенциалы U_i и U_f , определяющие свойства искаженных волн χ_i^+ и χ_f^- , необходимо выбрать исходя из следующих соображений: 1) функция χ_i^+ (χ_f^-) должна сохранять основные аналитические свойства точной волновой функции полного гамильтониана Ψ_i^+ (Ψ_f^-), 2) потенциал U_i (U_f) должен быть таким, чтобы уравнение (13) ((16)) имело решения в классе специальных или элементарных функций, 3) функция χ_i^+ (χ_f^-) должна обладать правильным асимптотическим поведением, т. е.

$$\chi_i^+(t) \xrightarrow{t \rightarrow -\infty} \Phi_i^B e^{i\sigma_i(t)}, \quad \chi_f^-(t) \xrightarrow{t \rightarrow +\infty} \Phi_f^A e^{-i\sigma_f(t)}, \quad (19)$$

где σ_i и σ_f определяются выражением (9).

Основываясь на этих соображениях, выбираем потенциалы U_i и U_f в следующем виде:

$$W_i = v_i - U_i = Z_A^{\#} \left(\frac{1}{R} - \frac{1}{s_2} \right) - \sum_{k=1}^2 \nabla_k \varphi_i^B(x_1, x_2) \nabla_k \left[\frac{1}{\varphi_i^B(x_1, x_2)} \right], \quad (20)$$

$$W_f = v_f - U_f = Z_A \left(\frac{1}{R} - \frac{1}{s_2} \right) - \left(\frac{1}{x_{12}} - \frac{1}{x_1} \right) - \nabla_1 \varphi_f^A(s_1) \nabla_1 \left[\frac{1}{\varphi_f^A(s_1)} \right]. \quad (21)$$

При таком выборе искажающих потенциалов уравнение (13) ((16)) допускает разделение переменных и его решение выражается через вырожденные гипергеометрические функции

$$\mathcal{L}_i^+ = N(v_A) \exp \left\{ i \frac{Z_A(Z_B - 1)}{v} \ln(vR - v^2 t) \right\} F(i v_A, 1, i v s_1 + i v s_1), \quad (22)$$

$$\mathcal{L}_f^- = N^*(v_B) \exp \left\{ -i \frac{Z_A(Z_B - 1)}{v} \ln(vR + v^2 t) \right\} \varphi_k^-(\mathbf{x}_2) F(-iv_B, 1, -iv\mathbf{x}_1 - ivx_1), \quad (23)$$

где

$$\varphi_k^-(\mathbf{x}_2) = (2\pi)^{-3/2} N^*(\xi_B) e^{ik \cdot \mathbf{x}_2} F(-i\xi_B, 1, -ik\mathbf{x}_2 - ikx_2), \quad (24)$$

$$N(v_j) = \exp(\pi v_j/2) \Gamma(1 - iv_j), \quad j = (A, B), \quad v_A = \frac{Z_A}{v}, \quad v_B = \frac{Z_B - 1}{v}, \quad (25)$$

$$N(\xi_B) = \exp(\pi \xi_B/2) \Gamma(1 - i\xi_B), \quad \xi_B = \frac{Z_B}{k}. \quad (26)$$

Принимая во внимание соотношения [6]

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} \ln \left(\frac{vR + v^2 t}{v\mathbf{x}_1 + vx_1} \right) = 0, \quad \lim_{t \rightarrow -\infty} \ln \left(\frac{vR - v^2 t}{v\mathbf{s}_1 + vs_1} \right) = 0, \quad (27)$$

легко проверить, что функции χ_i^+ и χ_f^- удовлетворяют необходимым граничным условиям.

Искомая амплитуда перехода (т. е. захвата с ионизацией) в «prior»-формализме дается интегралом

$$\mathcal{A}_{if}^-(\rho) = \lim_{t \rightarrow -\infty} \langle \Psi_f^- | \Phi_i^B \rangle = -i \int_{-\infty}^{\infty} dt \iint d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \Psi_f^- * W_i \chi_i^+. \quad (28)$$

Введем теперь основное допущение рассматриваемого метода, приняв в качестве точной волновой функции в конечном состоянии Ψ_f^- искаженную волну $\chi_f^-: \Psi_f^- \simeq \chi_f^- = \Phi_f^A \mathcal{L}_f^-$. Используя этот выбор Ψ_f^- , а также формулы (12), (22) и (23), амплитуду (28) можно записать в виде двух слагаемых

$$\mathcal{A}_{if}^-(\rho) = a_{if}^{(1)} + a_{if}^{(2)}, \quad (29)$$

где

$$a_{if}^{(1)} = i \int_{-\infty}^{\infty} dt \iint d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \Phi_f^{A*} \mathcal{L}_f^{-*} \left\{ Z_A \left(\frac{1}{s_2} - \frac{1}{R} \right) \chi_i^+ \right\}, \quad (30a)$$

$$a_{if}^{(2)} = i \int_{-\infty}^{\infty} dt \iint d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \Phi_f^{A*} \mathcal{L}_f^{-*} \mathcal{E} \nabla_1 \varphi_i^B(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) \nabla_1 \mathcal{L}_i^+. \quad (30b)$$

Численные оценки матричных элементов $a_{if}^{(1)}$ и $a_{if}^{(2)}$, проведенные с помощью метода [8], показали, что при больших энергиях столкновения в широкой области прицельных параметров и зарядов взаимодействующих частиц выполняется соотношение $|a_{if}^{(1)}| \ll |a_{if}^{(2)}|$. Вклад в амплитуду (29) от слагаемого $a_{if}^{(1)}$ становится существенным лишь при малых энергиях столкновения. Рассмотрим амплитуду перехода $\mathcal{A}_{if}^-(\rho)$ с учетом одного лишь слагаемого $a_{if}^{(2)}$ и, используя явные выражения для \mathcal{L}_i^+ , \mathcal{L}_f^- , преобразуем ее к виду

$$\mathcal{A}_{if}^-(\rho) = i (2\pi)^{-3/2} (\rho v)^{2iv} N(v_A) N(v_B) N(\xi_B) \int_{-\infty}^{\infty} dt \iint d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \exp \{ - (v\mathbf{r}_1 + k\mathbf{x}_2 - \Delta E t) \} \mathcal{S}_i \mathcal{S}_f, \quad (31)$$

где

$$\mathcal{S}_i = \nabla_{\mathbf{x}_1} \varphi_i^B(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) \nabla_1 F(iv_A, 1, ivs_1 + ivs_1), \quad (32)$$

$$\mathcal{S}_f = \varphi_f^{A*}(s_1) F(iv_B, 1, iv\mathbf{x}_1 + ivx_1) F(i\xi_B, 1, ik\mathbf{x}_2 + ikx_2), \quad (33)$$

$$\Delta E = (E_k + E_f^A) - E_i^B, \quad v = Z_A(Z_B - 1)/v. \quad (34)$$

В заключение следует отметить, что используемый нами вариант потенциалов U_i и U_f , очевидно, не является единственно возможным. При исполь-

зовании других вариантов потенциала U_f , необходимо следить за тем, чтобы функция χ_f^- имела правильную асимптотику. При этом вид оператора перехода W_i в «rigor»-формализме не изменяется. Что касается U_i , то любое изменение этого потенциала вызывает, вообще говоря, изменение оператора перехода. Однако в нашем случае это изменение приводит к появлению в амплитуде перехода членов, которые будут иметь разный порядок по $1/v$, и в соответствии с [6] физический смысл нужно придать только старшему из них, который отвечает второму слагаемому в правой части равенства (20).

Важно, что выбор потенциалов U_i и U_f в виде (20) и (21) не только позволяет наилучшим образом описать ход сечения в области промежуточных скоростей сталкивающихся частиц, но и позволяет получить аналитическое выражение для амплитуды рассеяния, что особенно удобно для проведения систематических расчетов сечений различных процессов. Далее используемый нами вариант потенциалов U_i и U_f обеспечивает выполнение асимптотических условий (19) для волновых функций χ_i^+ и χ_f^- . Как показано ниже, нарушение указанных асимптотик приводит к существенному завышению сечения в области средних энергий столкновения. Отметим, наконец, что волновая функция χ_f^- , соответствующая потенциалу (21), особенно удобна при изучении влияния взаимодействия в конечном состоянии на сечения захвата с ионизацией, поскольку одинаковым образом учитывает взаимодействие захватываемого электрона и эжектурируемого электрона с остаточным ионом B^{2+} .

2. Сечения процесса захвата с ионизацией

Вычисление сечений захвата с ионизацией удобнее всего провести с помощью известного метода преобразований Фурье [6]. В пределе $\mu \rightarrow \infty$ (μ — приведенная масса тяжелых частиц) квантовомеханическая амплитуда рассеяния $\mathcal{R}_{if}^-(\eta)$ является преобразованием Фурье квазиклассической амплитуды перехода $\mathcal{A}_{if}^-(\rho)$ [6]

$$\mathcal{R}_{if}^-(\eta) = (2\pi)^{-1} \int d\rho \exp(-i\eta\rho) \mathcal{A}_{if}^-(\rho) \quad (35)$$

(где η — двухкомпонентный вектор, перпендикулярный \mathbf{v} : $\eta \cdot \mathbf{v} = 0$), откуда по формуле Планшереля следует равенство

$$\sigma_{if}^-(\mathbf{k}) \equiv \frac{d\sigma_{if}^-}{k dE_k d\Omega_k} \equiv \int d\eta |\mathcal{R}_{if}^-(\eta)|^2 \equiv \int d\rho |\mathcal{A}_{if}^-(\rho)|^2, \quad (36)$$

где $\sigma_{if}^-(\mathbf{k})$ — дважды дифференциальное (по энергии и углу вылета электрона) сечение процесса захвата с ионизацией, $d\Omega_k$ — элемент телесного угла в направлении вылета эжектурируемого электрона.

Учитывая результат (31), выражение (35) для $\mathcal{R}_{if}^-(\eta)$ удобно представить в следующем виде:

$$\mathcal{R}_{if}^-(\eta) = N_{AB} (\mathbf{I} \cdot \mathbf{J}), \quad (37)$$

где

$$\mathbf{I} = \int ds_1 e^{i\mathbf{q}s_1} \varphi_f^A(s_1) \nabla_{s_1} F(iv_A, 1, ivs_1 + is_1), \quad (38)$$

$$\mathbf{J} = \int \int dx_1 dx_2 e^{i(\mathbf{p}\mathbf{x}_1 - \mathbf{k}\mathbf{x}_2)} F(iv_B, 1, iv\mathbf{x}_1 + ivx_1) F(i\xi_B, 1, ik\mathbf{x}_2 + ikx_2) \nabla_{\mathbf{x}_1} \varphi_i^B(\mathbf{x}_1, x_2), \quad (39)$$

$$\mathbf{p} = -\eta - \left(\frac{\Delta E}{v} - \frac{v}{2} \right) \hat{\mathbf{v}}, \quad \mathbf{q} = \eta - \left(\frac{\Delta E}{v} + \frac{v}{2} \right) \hat{\mathbf{v}},$$

$$N_{AB} = \frac{(2\pi)^{-3/2}}{2\pi i v} N(v_A) N(v_B) N(\xi_B), \quad \hat{\mathbf{v}} = \frac{\mathbf{v}}{v}.$$

Заметим, что в выражении (37) опущен фактор $(\rho v)^{2i\nu}$, который обусловлен межъядерным взаимодействием, поскольку в приближении прямолинейных

траекторий движение происходит с постоянным вектором скорости, поэтому межъядерное взаимодействие не дает вклада в полное сечение процесса (1).

Дальнейшие вычисления возможны только для конкретной модели атома-мишени. Ниже мы примем при описании связанных состояний «активных электронов» в атомах гелия He приближение независимых электронов. В этом приближении атомный гамильтониан H_i (см. формулы (4), (5)) имеет вид

$$H = \sum_{j=1}^2 H_j = \sum_{j=1}^2 \left[-\frac{\Delta_j}{2} - \frac{Z_B}{x_j} + \bar{V}(x_j) \right], \quad (40)$$

где H_j — одноэлектронный гамильтониан; $\bar{V}(x_j)$ — некоторое усредненное поле, действующее на j -тый электрон атома He. Потенциал $\bar{V}(x_j)$ учитывает изменение кулоновского потенциала ядра, в котором движется j -тый электрон атома He, и его появление обусловлено присутствием в атоме He другого электрона.

В приближении независимых электронов волновая функция начального состояния строится в виде произведения одноэлектронных функций

$$\varphi_i^B(x_1, x_2) = \varphi_i^B(x_1) \varphi_i^B(x_2). \quad (41)$$

Изложенная выше постановка задачи приводит к факторизации матричного элемента (39), и интегрирование по x_1 и x_2 выполняется независимо

$$\mathbf{J} = \mathbf{J}_1 \cdot \mathbf{J}_2, \quad (42)$$

где

$$\mathbf{J}_1 = \int dx_1 [\nabla_{x_1} \varphi_i^B(x_1)] e^{i\mathbf{p}x_1} F(iv_B, 1, ivx_1 + ix_1), \quad (43)$$

$$\mathbf{J} = \int dx_2 \varphi_i^B(x_2) e^{-i\mathbf{k}x_2} F(i\bar{v}_B, 1, ikx_2 + ikx_2). \quad (44)$$

В этом случае амплитуду рассеяния $\mathcal{R}_{if}^-(\eta)$ можно представить в виде произведения двух сомножителей, один из которых $\mathcal{R}_{if}^{-B(\text{Ion})}$ описывает процесс прямой ионизации, а второй $\mathcal{R}_{if}^{-\text{CDW}(\text{C.E.})}$ — двухступенчатый процесс захвата электрона через непрерывный спектр из атома-мишени в состоянии, связанные относительно быстрой частицы

$$\mathcal{R}_{if}^-(\eta) = \lim_{q \rightarrow 0} \left\{ \frac{q^2}{2iv_A} \mathcal{R}_{if}^{-B(\text{Ion})}(\mathbf{q}) \right\} \mathcal{R}_{if}^{-\text{CDW}(\text{C.E.})}(\eta), \quad (45)$$

где

$$\mathcal{R}_{if}^{-B(\text{Ion})}(\mathbf{q}) = -\frac{4\pi Z_A}{2i\pi v q^2} \int dx_2 \varphi_{\mathbf{k}}^{-*}(x_2) e^{i\mathbf{q}x_2} \varphi_i^B(x_2), \quad (46)$$

$$\mathcal{R}_{if}^{-\text{CDW}(\text{C.E.})}(\eta) = \frac{1}{2\pi iv} N(v_A) N(v_B) (\mathbf{I} \cdot \mathbf{J}_1). \quad (47)$$

Здесь $\mathcal{R}_{if}^{-B(\text{Ion})}(\mathbf{q})$ — амплитуда ионизации в первом борновском приближении, $\mathcal{R}_{if}^{-\text{CDW}(\text{C.E.})}(\eta)$ — амплитуда перезарядки в CDW-методе. При этом выражение (47) совпадает с соответствующим выражением для амплитуды одноэлектронной перезарядки, полученным Гаефом [9] на основе трехчастичных интегральных уравнений Додда и Грайдера [10] для оператора рассеяния с перестройкой.

Обобщение теории, на котором мы здесь не будем останавливаться, показывает, что вид окончательного результата для $\mathcal{R}_{if}^-(\eta)$ сохраняется и при учете неразличимости электронов (т. е. при симметризации волновых функций), а также при учете спинов атомных остовов. Уточнение теории приводит к тому, что во входящих в формулу (37) матричных элементах под φ_i^B и φ_f^A следует понимать уже многоэлектронные волновые функции систем B и $A^{(Z_A-1)+}$ соответственно.

Для описания связанных $1s$ -состояний электронов используются простейшие вариационные функции с эффективными зарядами $Z_B^* = \lambda$ и Z_A

$$\varphi_i^B(\mathbf{x}_j) = \left(\frac{\lambda^3}{\pi}\right)^{1/2} e^{-\lambda x_j} \equiv N_\lambda e^{-\lambda x_j}, \quad \varphi_j^A = \left(\frac{Z_A^3}{\pi}\right)^{1/2} e^{-Z_A r_j} \equiv N_{Z_A} e^{-Z_A r_j}. \quad (48)$$

Матричные элементы J_1 , J_2 и I с этими функциями можно вычислить точно, используя метод контурного интегрирования Нордсика [11]. Приведем окончательные результаты

$$J_1 = -\frac{8\pi i \lambda N_\lambda}{(\lambda^2 + p^2)^2} (1 - x_1)^{-i\nu_B} [(1 - i\nu_B) \mathbf{p} - i\nu_B \mathbf{q} (1 - x_1)^{-1}], \quad (49)$$

$$J_2 = \frac{8\pi N_\lambda}{(\lambda^2 + k^2)^2} (1 - x_2)^{-i\tilde{\nu}_B} [\lambda(1 - i\tilde{\nu}_B) + i\tilde{\nu}_B(\lambda - ik)(1 - x_2)^{-1}], \quad (50)$$

$$I = -\frac{8\pi \nu_A N_{Z_A}}{(Z_A^2 + q^2)^2} (1 - x)^{-i\nu_A} (\nu_A \mathbf{v} + i\mathbf{q}), \quad (51)$$

$$x_1 = 2 \frac{i\lambda\nu - p\nu}{\lambda^2 + p^2}, \quad x_2 = 2 \frac{i\lambda k + k^2}{\lambda^2 + k^2}, \quad x = 2 \frac{iZ_A \nu - q\nu}{Z_A^2 + q^2}. \quad (52)$$

Наличие предэкспоненциальных полиномов в волновых функциях $\varphi_i^B(\mathbf{x}_i)$ и $\varphi_j^A(\mathbf{s}_1)$ может быть учтено дифференцированием окончательных выражений (49)—(51) для J_1 , J_2 и I по параметрам λ и Z_A .

В заключение приведем результаты решения задачи о полном сечении процесса захвата с ионизацией. Проще всего их можно получить интегрированием (36) по всем направлениям вылета и энергиям эжектурируемого электрона. Полученный результат удобно представить в виде

$$\sigma_{if}^- = 8\pi^2 \int_0^\infty dk k^2 |N_{AB}(\mathbf{k})|^2 \int_0^\infty d\eta \cdot \eta |(\mathbf{I} \cdot \mathbf{J}_1) J_2|^2. \quad (53)$$

Матричные элементы J_1 , J_2 и I определяются формулами (49)—(51).

3. Обсуждение результатов и сравнение с экспериментом

Результаты расчетов полных сечений реакции $p + \text{He}(1s^2) \rightarrow H(1s) + \text{He}^{++} + e^-$ представлены на рисунке в сравнении с имеющимися экспериментальными данными, полученными методом пересекающихся пучков и методом совпадений (одновременный анализ зарядовых состояний обеих сталкивающихся частиц). Учет захвата электрона протонами в возбужденные состояния приводит к незначительным изменениям результатов. Кроме расчетов по формуле (53), на рисунке представлены полные сечения захвата с ионизацией, вычисленные в первом борновском приближении (ПБП). Для получения амплитуды захвата с ионизацией в ПБП необходимо заменить в формуле (45) $\mathcal{R}_{if}^{\text{CDW}}(\text{С. Е.})(\eta)$ на амплитуду простейшего одноступенчатого механизма передачи электрона $\mathcal{R}_{if}^{\text{BK}}(\text{С. Е.})(\eta)$, где $\mathcal{R}_{if}^{\text{BK}}(\text{С. Е.})(\eta)$ — амплитуда перезарядки в приближении Бринкмана—Крамерса [6].

При этом электронные волновые функции, используемые в ПБП, имеют существенно неправильную асимптотику, т. е. не удовлетворяют граничным условиям задачи о рассеянии.

Как и следовало ожидать, при средних энергиях протонов результаты расчетов по формуле (53) хорошо согласуются с экспериментальными данными [12, 13]. Полученное соответствие теоретических и экспериментальных данных достаточно убедительно говорит в пользу развитой в настоящей работе теории. При этом расчет сечений с помощью формулы (53) не намного сложнее, чем в первом борновском приближении. Что касается последнего, то оно, как следует из рисунка, приводит к значениям сечений, существенно

превышающим экспериментальные данные при средних энергиях протонов. Различие между двумя вариантами теоретических расчетов прямо подтверждает важность учета искажения волновых функций захватываемого электрона как во входном, так и в выходном каналах реакции.

Подводя общие итоги работы, следует отметить, что на основе CDW-метода с учетом кулоновских асимптотических условий удается получить аналитическое выражение для амплитуды процесса захвата с ионизацией, которое содержит два сомножителя, один из которых описывает двухступенчатый механизм захвата электрона. Второй сомножитель описывает связанно-свободный переход в ионе B^+ .

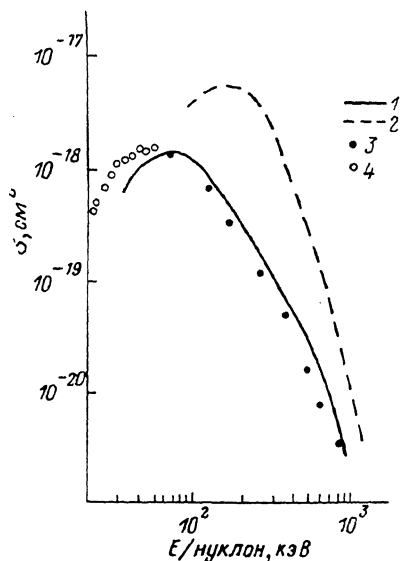


Рис. 1. Сечения захвата с ионизацией при столкновении атома He с протоном.

Сплошная кривая — CWD-метод (формула (50)), штриховая кривая — первое борновское приближение. Экспериментальные данные: 1 — [12], 2 — [13].

Удовлетворительное согласие расчетов с экспериментальными данными достигается только при учете искажений волновых функций захватываемого электрона в обоих каналах реакции. Если же сечения вычисляются без учета искажений волновых функций, что равнозначно полному пренебрежению эффектами перерассеяния, то между теоретическими и экспериментальными сечениями возникают значительные расхождения.

Литература

- [1] Janev R. K., Presnyakov L. P., Shevelko V. P. Physics of highly charged ions. Berlin—Heidelberg—N. Y.—Tokyo: Springer—Verlag, 1985. 330 p.
- [2] Фаддеев Л. Д. ЖЭТФ, 1960, т. 39, № 5 (11), с. 1459—1467.
- [3] Якубовский О. А. Ядерная физика, 1967, т. 5, № 6, с. 1312—1320.
- [4] Галицкий В. М., Никитин Е. Е., Смирнов Б. М. Теория столкновения атомных частиц. М.: Наука, 1981. 254 с.
- [5] Демков Ю. Н., Островский В. Н. ЖЭТФ, 1975, т. 69, № 5 (11), с. 1582—1586.
- [6] Belkic Dz., Gayet R., Salin A. Phys. Rep., 1979, v. 56, N 6, p. 279—370.
- [7] Belkic Dz. J. Phys. B, 1978, v. 11, N 20, p. 3529—3552.
- [8] Sin Fai Lam L. T. Proc. Phys. Soc., 1967, v. 92, N 1, p. 67—74.
- [9] Gayet R. J. Phys. B, 1972, v. 5, N 3, p. 483—491.
- [10] Dodd L. R., Greider K. R. Phys. Rev., 1966, v. 146, N 3, p. 675—686.
- [11] Nord sieck A. Phys. Rev., 1954, v. 93, N 4, p. 785—788.
- [12] Shah M. B., Gilbody H. B. J. Phys. B, 1985, v. 18, N 6, p. 899—913.
- [13] Афросимов В. В., Мамаев Ю. А., Панов М. Н., Федоренко Н. В. ЖТФ, 1969, т. 39, № 1, с. 159—165.

Ужгородский государственный университет

Поступило в Редакцию
24 марта 1987 г.