

УДК 658.562:621

PACS 03.65.-w, 34.50.-s, 34.80.Dp, 34.70.+e

DOI: 10.24144/2415-8038.2017.41.103-111

В. Ю. Лазур<sup>1</sup>, В. В. Алексій<sup>1</sup>, С.І. Мигалина<sup>2</sup><sup>1</sup>Ужгородський національний університет, 88000, Ужгород, вул. Волошина, 54<sup>2</sup>Ужгородський національний університет, 88000, Ужгород, вул. Університетська, 14а

e-mail: volodymyr.lazur@uzhnu.edu.ua

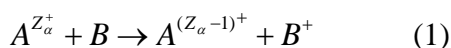
## ВРАХУВАННЯ ЕФЕКТІВ ПЕРЕРОЗСІЯННЯ ЕЛЕКТРОНА В РЕАКЦІЇ ОДНОЕЛЕКТРОННОЇ ПЕРЕЗАРЯДКИ

На основі інтегральних рівнянь Додда-Грайдера побудовано теорію реакції одноелектронної перезарядки при зіткненні воднеподібного атома та позитивно зарядженого іона з урахуванням ефектів перерозсіювання електрона на іоні-залишку мішені. Показано, що без врахування ефектів кулонівського перерозподілу захопленого електрона, неможливо відтворити пік Томаса в кутових розподілах продуктів цієї реакції. За рахунок достатньо повного врахування взаємодії після зіткнення і швидкої збіжності ряду теорії збурень Додда-Грайдера, запропонований метод забезпечує хорошу узгодженість з експериментальними даними.

**Ключові слова:** рівняння Додда-Грайдера, перезарядка, атом, іон, кулонівська взаємодія.

### Вступ

Процес одноелектронної перезарядки атомів  $B$  на іонах  $A^{Z_\alpha^+}$ :



при швидких іон-атомних зіткненнях привертає велику увагу як теоретиків [1, 2], так і експериментаторів [3, 4] протягом багатьох десятиліть. Інформація про процес (1) не обмежується інтегральними характеристиками (повним перерізом), але також містить деталі про енергетичні і кутові розподіли продуктів реакції. Це ставить високі вимоги до повноти і точності теоретичних розрахунків.

### Основна кінематика та динаміка

Складну задачу взаємодії атома та іона в реакції (1) будемо розглядати як іdealізовану задачу взаємодії трьох нерелятивістських безспінових частинок:  $\alpha$  (налітаюча частинка  $A^{Z_\alpha}$ ),  $\gamma$  (активний електрон  $e^-$ ) і  $\beta$  (іон-залишок мішені  $B^+$ ) з масами

$m_\alpha$ ,  $m_\gamma$  і  $m_\beta$  відповідно. Рух центра мас вважається відокремленим. Відповідно до можливості розбиття тричастинкової системи на фрагменти  $(\beta, \gamma) + \alpha$ ;  $(\alpha, \gamma) + \beta$ ;  $(\alpha, \beta) + \gamma$  введемо поряд з повним гамільтоніаном  $H = H_0 + V$ , каналні гамільтоніани  $H_j = H_0 + V_j$  ( $j = \alpha, \beta, \gamma$ ), де  $H_0$  - оператор кінетичної енергії системи трьох частинок в системі їх центра мас,  $V = \sum_{j=\alpha, \beta, \gamma} V_j$  - повна взаємодія. Нижній індекс  $j$  в  $V_j$  позначає частинку, яка не приймає участь в цій взаємодії (наприклад,  $V_\alpha$  - оператор парної взаємодії частинок  $\beta$  і  $\gamma$ ). Визначимо також каналну «взаємодію»  $v_j = V - V_j$ . Введемо координати Якобі:

$$\vec{s} = (\alpha / m_\gamma) \vec{x} - \vec{r}_\alpha, \quad \vec{x} = (\beta / m_\gamma) \vec{s} - \vec{r}_\beta, \\ \vec{R} = \vec{x} - \vec{s}, \quad (2)$$

де  $\alpha = m_\gamma m_\beta / (m_\gamma + m_\beta)$  і  $\beta = m_\gamma m_\alpha / (m_\gamma + m_\alpha)$  - приведені маси, а  $\vec{x}$  - радіус-

вектор електрона по відношенню до центра іона-залишку мішені  $B^+$  в реакції (1). В термінах цих координат оператор  $H_0$  може бути представлений у двох еквівалентних формах:

$$H_0 = -\frac{1}{2\mu_\alpha} \Delta_{\vec{r}_\alpha} - \frac{1}{2a} \Delta_{\vec{x}} = -\frac{1}{2\mu_\beta} \Delta_{\vec{r}_\beta} - \frac{1}{2b} \Delta_{\vec{s}}, \quad (3)$$

де використовується стандартне визначення оператора Лапласа і приведені маси:

$$\mu_\alpha = \frac{m_\alpha(m_\beta + m_\gamma)}{m_\alpha + m_\beta + m_\gamma}, \quad \mu_\beta = \frac{m_\beta(m_\alpha + m_\gamma)}{m_\alpha + m_\beta + m_\gamma}. \quad (4)$$

Проведемо розбиття каналних потенціалів  $v_j$  ( $j = \alpha, \beta$ ) на дві частини:

$$v_j = V - V_j = U_j + W_j, \quad (5)$$

одна з яких  $W_j$  (її зазвичай називають «спотворюючим потенціалом») – виділяє малий за величиною далекодіючий кулонівський фон, який визначає асимптотичну поведінку хвильових функцій задачі розсіювання на великих відстанях, а інша –  $U_j$  – дає залишок, породжений чисто короткодіючою частиною потенціалу  $v_j$ , який викликає переходи електронна і вважається збуренням.

З означення каналного гамільтоніана  $H_\alpha$  ( $H_\beta$ ) безпосередньо впливають його власні функції  $|\Phi_i^\alpha\rangle$  ( $|\Phi_f^\beta\rangle$ ):

$$\begin{aligned} |\Phi_i^\alpha\rangle &= |\varphi_i(\vec{x}) \exp(i\vec{k}_\alpha \vec{r}_\alpha)\rangle, \\ |\Phi_f^\beta\rangle &= |\varphi_f(\vec{s}) \exp(i\vec{k}_\beta \vec{r}_\beta)\rangle, \end{aligned} \quad (6)$$

де  $\varphi_i$  ( $\varphi_f$ ) – хвильова функція зв'язаного стану пари  $(\beta, \gamma)$  ( $(\alpha, \gamma)$ ),  $\exp(i\vec{k}_\alpha \vec{r}_\alpha)$  ( $\exp(i\vec{k}_\beta \vec{r}_\beta)$ ) – плоска хвиля, що описує відносний рух вільних частинок  $\alpha$  ( $\beta$ ) і

$(\beta, \gamma)$  ( $(\alpha, \gamma)$ ) у початковому (кінцевому) стані з відносним імпульсом  $\vec{k}_\alpha$  ( $\vec{k}_\beta$ ). Строго кажучи, у випадку заряджених частинок в (6) плоскі хвилі в початковому та кінцевому станах повинні спотворюватись фазовими множниками, логарифмічно залежними від відстані між частинками. Це спотворення обумовлене асимптотичним рухом частинок в кулонівському полі ніколи не буває вільним, і частинки слабо взаємодіють при як завгодно великих відстанях між ними.

З урахування зроблених зауважень, згідно [5], введемо в розгляд модифіковані каналні асимптотичні стани  $|\Phi_i^{\alpha+}\rangle$  та  $|\Phi_f^{\beta-}\rangle$ , які на відміну від  $|\Phi_i^\alpha\rangle$  та  $|\Phi_f^\beta\rangle$ , правильно описують ефекти далекодіючого кулонівського поля в процесах перезарядки. Нехай  $\xi_\alpha = r_\alpha - \hat{k}_\alpha \vec{r}_\alpha$  ( $\xi_\beta = r_\beta + \hat{k}_\beta \vec{r}_\beta$ ) – параболічні координати частинки  $\alpha$  ( $\beta$ ) до (після) зіткнення;  $\hat{k}_j$  ( $j = \alpha, \beta$ ) – одиничний вектор у напрямку вектора  $\vec{k}_j$ :  $\hat{k}_j = \vec{k}_j / k_j$ . Функції  $\Phi_i^{\alpha+}$  ( $\Phi_f^{\beta-}$ ) є добутком хвильової функції зв'язаного стану пари  $(\beta, \gamma)$  ( $(\alpha, \gamma)$ ) і спотвореної плоскої хвилі  $f_\alpha^+$  ( $f_\beta^-$ ) з одиничною амплітудою:

$$\begin{aligned} \Phi_i^{\alpha+} &= \varphi_i(\vec{x}) f_\alpha^+(\vec{r}_\alpha) \equiv \\ &\equiv \varphi_i(\vec{x}) \exp\{i\vec{k}_\alpha \vec{r}_\alpha + i\sigma_\alpha\}, \end{aligned} \quad (7)$$

$$\begin{aligned} \Phi_f^{\beta-} &= \varphi_f(\vec{s}) f_\beta^-(\vec{r}_\beta) \equiv \\ &\equiv \varphi_f(\vec{s}) \exp\{i\vec{k}_\beta \vec{r}_\beta + i\sigma_\beta\}, \end{aligned} \quad (8)$$

кулонівські фази  $\sigma_\alpha$  і  $\sigma_\beta$  даються рівностями:

$$\begin{aligned} \sigma_\alpha &= v_\alpha \ln(k_\alpha \xi_\alpha), \quad v_\alpha = n_\alpha / v, \\ \sigma_\beta &= v_\beta \ln(k_\beta \xi_\beta), \quad v_\beta = n_\beta / v', \\ n_\alpha &= Z_\alpha(Z_\beta + Z_\gamma), \quad n_\beta = Z_\beta(Z_\alpha + Z_\gamma), \\ \vec{v} &= \vec{k}_\alpha / \mu_\alpha, \quad \vec{v}' = \vec{k}_\beta / \mu_\beta, \quad Z_\gamma = -1, \end{aligned} \quad (9)$$

$Z_j$  - заряд  $j$ -частинки ( $j = \alpha, \beta, \gamma$ ).

Подальші побудови ми будемо проводити на основі розбиття спотворюючих потенціалів  $W_\alpha$  і  $W_\beta$  на дві частини:

$$W_\alpha = w_\alpha + W_{ad}, \quad W_\beta = w_\beta + W_{\beta d}, \quad (10)$$

де  $w_\alpha$  і  $w_\beta$  – довільні короткодійчі потенціали, що залежать тільки від відносних координат  $\vec{r}_\alpha$  і  $\vec{r}_\beta$  відповідно. Спотворюючі потенціали  $W_\alpha$  і  $W_\beta$  в асимптотичних межах матимуть чисто кулонівську поведінку:

$$\begin{aligned} W_{ad} &\xrightarrow{r_\alpha \rightarrow \infty} W_{ad}^c \equiv n_\alpha / r_\alpha, \\ W_{\beta d} &\xrightarrow{r_\beta \rightarrow \infty} W_{\beta d}^c \equiv n_\beta / r_\beta. \end{aligned} \quad (11)$$

Позначимо через  $H_{ad}$  ( $H_{\beta d}$ ) модифікований каналний гамільтоніан:

$$H_{ad} = H_\alpha + W_{ad}, \quad H_{\beta d} = H_\beta + W_{\beta d} \quad (12)$$

і будемо будувати  $W_{ad}$  ( $W_{\beta d}$ ) з таким розрахунком, щоб задовольнити рівнянню Шредінгера:

$$\begin{aligned} (H_{ad} - E)\Phi_i^{\alpha+} &= 0, \quad E = E_i + k_\alpha^2 / 2\mu_\alpha, \\ (H_{\beta d} - E)\Phi_f^{\beta-} &= 0, \quad E = E_f + k_\beta^2 / 2\mu_\beta, \end{aligned} \quad (13)$$

Тут  $E_i$  ( $E_f$ ) – енергія зв'язаного стану пари  $(\beta, \gamma)$  ( $(\alpha, \gamma)$ ),  $E$  – повна енергія тричастинкової системи. Введення гамільтоніана  $H_{ad}$  ( $H_{\beta d}$ ) має глибокі фізичні причини. Електрон в будь-якій точці зазнає впливу кулонівського поля кожного центра, тому збурення  $W_{ad}$ ,  $W_{\beta d}$ , що апроксимують потенціал віддаленого кулонівського центра, повинні враховуватись в каналному (тобто нульовому) гамільтоніані.

Визначимо повну функцію Гріна (резольвенту) системи трьох частинок:

$$G^\pm(E) = (E - H \pm i\varepsilon)^{-1}, \quad (14)$$

де  $\varepsilon$  – як завгодно мале додатне число. Позначимо через  $G_{ad}^+$  ( $G_{\beta d}^-$ ) функцію Гріна модельного каналного гамільтоніана  $H_{ad}$  ( $H_{\beta d}$ ):

$$\begin{aligned} G_{ad}^+ &= (E - H_{ad} + i\varepsilon)^{-1}, \\ G_{\beta d}^- &= (E - H_{\beta d} - i\varepsilon)^{-1}. \end{aligned} \quad (15)$$

Введемо в розгляд хвильовий оператор Меллера  $\omega_\alpha^+$  ( $\omega_\beta^-$ ):

$$\begin{aligned} \omega_\alpha^+ &= 1 + g_{ad}^+ w_\alpha \equiv \\ &\equiv 1 + (E - H_{ad} - w_\alpha + i\varepsilon)^{-1} w_\alpha, \end{aligned} \quad (16)$$

$$\begin{aligned} \omega_\beta^- &= 1 + g_{\beta d}^- w_\beta \equiv \\ &\equiv 1 + (E - H_{\beta d} - w_\beta - i\varepsilon)^{-1} w_\beta, \end{aligned} \quad (17)$$

який перетворює каналну власну функцію  $\Phi_i^{\alpha+}$  ( $\Phi_f^{\beta-}$ ) у спотворену хвилю  $\chi_i^{\alpha+}$  ( $\chi_f^{\beta-}$ ) у вхідному (вихідному) каналі реакції (1)

$$|\chi_i^{\alpha+}\rangle = \omega_\alpha^+ |\Phi_i^{\alpha+}\rangle, \quad |\chi_f^{\beta-}\rangle = \omega_\beta^- |\Phi_f^{\beta-}\rangle. \quad (18)$$

Введемо тепер оператори  $U_{\alpha\beta}^\pm$  [6, 7]:

$$U_{\alpha\beta}^+ = \omega_\beta^{*+} (\nu_\beta - W_\beta) [1 + G^+ (\nu_\alpha - W_\alpha)] \omega_\alpha^+, \quad (19)$$

$$U_{\alpha\beta}^- = \omega_\beta^{-*} [1 + (\nu_\beta - W_\beta) G^+] (\nu_\alpha - W_\alpha) \omega_\alpha^+, \quad (20)$$

де зірочка «\*» означає ермітове спряження. Оператори  $U_{\alpha\beta}^\pm$  мають ту властивість, що їх матричні елементи між кулонівськими асимптотичними станами  $|\Phi_i^{\alpha+}\rangle$  і  $|\Phi_f^{\beta-}\rangle$  на масовій поверхні є фізичними амплітудами переходу  $T_{\alpha\beta}^\pm$  з каналу  $\alpha$  в канал  $\beta$  в «post» і «prior»-формалізмах відповідно:

$$T_{\alpha\beta}^\pm = \langle \Phi_f^{\beta-} | U_{\alpha\beta}^\pm | \Phi_i^{\alpha+} \rangle. \quad (21)$$

Для операторів переходу  $U_{\alpha\beta}^\pm$  можуть бути записані інтегральні рівняння, отримані Доддом і Грайдером [6]. Запишемо для ілюстрації рівняння для оператора  $U_{\alpha\beta}^-$ :

$$U_{\alpha\beta}^- = \omega_{\beta}^{-*} (\nu_{\alpha} - W_{\alpha}) \omega_{\alpha}^+ + \omega_{\beta}^{-*} (\nu_{\beta} - W_{\beta}) G_{\beta d}^- U_{\alpha\beta}^-. \quad (22)$$

В ргіор-формалізмі даної теорії потенціал  $W_{\beta}$ -довільний, а потенціал  $W_{\alpha}$  не повинен приводити до перебудови в каналі  $\beta$ , тобто  $\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} i\varepsilon \langle \Phi_f^{\beta-} | \omega_{\alpha\beta}^+ | \Phi_i^{\alpha+} \rangle = 0$ . Перший член в правій частині (22) приводить до амплітуди в борнівському наближенні зі спотвореними хвилями:

$$T_{\alpha\beta}^-(DWB) = \langle \Phi_f^{\beta-} | \omega_{\beta}^{-*} (\nu_{\alpha} - W_{\alpha}) | \Phi_i^{\alpha+} \rangle \equiv \langle \chi_f^{\beta-} | (\nu_{\alpha} - W_{\alpha}) | \chi_i^{\alpha+} \rangle. \quad (23)$$

Хоча формально рівняння (22) є точним, його розв'язок не можна отримати, ґрунтуючись на підході, пов'язаному з використанням стандартних методів знаходження розв'язків інтегральних рівнянь. Справа в тому, що ядро інтегрального рівняння (22) містить незв'язні діаграми, що відповідають процесам, в яких одна з частинок не взаємодіє з двома іншими. Тому аргументи, приведені в роботі [6], ставлять під сумнів збіжність борнівського ряду методу спотворених хвиль, тобто ітераційного розкладу рівняння (22).

Ця обставина диктує необхідність певної перебудови рівняння (22), подібної тій, яка здійснюється при виведенні рівнянь теорії багатократного розсіяння та рівнянь Фаддєєва [8]. Отримані в результаті перебудови інтегральні рівняння, на відміну від (22), не містять в своїх ядрах незв'язних діаграм і можуть бути розв'язані стандартними методами. Ми не описуватимемо тут громіздкі конструкції [7], що відповідають такій перебудові рівняння (22). Приведемо тільки остаточний результат. З цією метою введемо в розгляд допоміжний потенціал  $\nu_g$ , що відповідає віртуальному проміжному каналу  $g$ , а також відповідний йому грінівський оператор  $g_g^+ = (E - H + \nu_g + i\varepsilon)^{-1}$ . У цих позначеннях модифіковане (з урахуванням далекодійної природи кулонівських взаємодій) рівняння Додда-Грайдера для квантовомеханічного оператора  $U_{\alpha\beta}^-$  тричастинкового розсіяння

з перебудовою набуває остаточного вигляду:

$$U_{\alpha\beta}^- = I + KU_{\alpha\beta}^-, \quad (24)$$

де

$$K = \omega_{\beta}^{-*} (\nu_{\beta} - W_{\beta}) g_g^+ \nu_g G_{\beta d}^+; \\ I = \omega_{\beta}^{-*} [1 + (\nu_{\beta} - W_{\beta}) g_g^+] (\nu_{\alpha} - W_{\alpha}) \omega_{\alpha}^+. \quad (25)$$

Основна перевага рівняння (24) перед рівнянням (22) полягає в тому, що довільність у виборі потенціалів  $\nu_g$  і  $W_{\beta}$  можна використати для того, щоб одержати рівняння з наперед заданими властивостями так, що ядро  $K$  перебудованого рівняння (24) не міститиме незв'язних діаграм. А всі функції Гріна, що входять в це рівняння, є розв'язками рівнянь з відокремлюваними змінними і можуть бути обчислені явно. Неоднорідний член  $I$  рівняння (24) при цьому відрізняється від неоднорідного члена рівняння (22) і є нульовим наближенням для збіжного, взагалі кажучи, ітераційного ряду, що представляє розв'язок рівняння (24). Використовуючи (24). Амплітуду переходу  $T_{\alpha\beta}^-$  (21) можна представити у вигляді:

$$T_{\alpha\beta}^- = \langle \Phi_f^{\beta-} | U_{\alpha\beta}^- | \Phi_i^{\alpha+} \rangle = \langle \Phi_f^{\beta-} | I | \Phi_i^{\alpha+} \rangle + \langle \Phi_f^{\beta-} | KU_{\alpha\beta}^- | \Phi_i^{\alpha+} \rangle = \langle \Phi_f^{\beta-} | I | \Phi_i^{\alpha+} \rangle + RS, \quad (26)$$

де  $RS$ -члени, які враховують багатократні перерозсіяння, а залишок  $\langle \Phi_f^{\beta-} | KU_{\alpha\beta}^- | \Phi_i^{\alpha+} \rangle$  містить члени, як мінімум, з трьома послідовними перерозсіяннями. Якщо вважати, що процеси з багатократними перерозсіяннями не впливають на форму кутового розподілу, то другий член в (26) можна опустити. В цьому випадку амплітуда реакції (1) в ргіор-формалізмі дається виразом:

$$T_{\alpha\beta}^- = \langle \Phi_f^{\beta-} | \omega_{\beta}^{-*} [1 + g_g^+ (\nu_{\beta} - W_{\beta})] (\nu_{\alpha} - W_{\alpha}) \times \omega_{\alpha}^+ | \Phi_i^{\alpha+} \rangle = T_{\alpha\beta}^-(DWB) + \langle \Phi_f^{\beta-} | \omega_{\beta}^{-*} [g_g^+ \times (\nu_{\beta} - W_{\beta})] (\nu_{\alpha} - W_{\alpha}) \omega_{\alpha}^+ | \Phi_i^{\alpha+} \rangle. \quad (27)$$

Порівняння (23) і (27) показує, що перший член  $T_{\alpha\beta}^-(DWB)$  у правій частині (27) віді-

ляє амплітуду прямого одноступеневого механізму перезарядки в рамках борнівського наближення із спотвореними хвилями. Другий член в (27) безпосередньо описує двоступеневий механізм захоплення електрона через проміжний стан, що знаходиться в дискретному або неперервному спектрі. Аналогічний результат має місце і для амплітуди переходу  $T_{\alpha\beta}^+$  у post-формалізмі:

$$T_{\alpha\beta}^+ = \left\langle \Phi_f^{\beta-} \left| \omega_{\beta}^{-*} (v_{\beta} - W_{\beta}) \times \right. \right. \\ \left. \left. \times [1 + g_{\beta}^+(v_{\alpha} - W_{\alpha})] \omega_{\alpha}^+ \left| \Phi_i^{\alpha+} \right. \right\rangle. \quad (28)$$

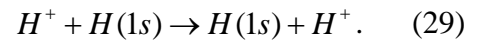
Перетворення рівняння (22) до рівняння (24) типу методу спотворених хвиль дозволяє отримати ітераційні ряди (зазвичай їх називають кулон-борнівськими рядами) для оператора переходу, які, як показано в [1, 9], швидко збігаються, тобто вже перші ітерації відповідних інтегральних рівнянь дозволяють отримати результат, який практично співпадає з точним розв'язком.

### Кутові та енергетичні залежності перерізів перезарядки

Як видно з проведеного вище розгляду, універсальною математичною основою для побудови наближених теорій перезарядки можуть слугувати рівняння квантової теорії розсіяння в системах декількох частинок, причому ітерації цих рівнянь утворюють представлення для амплітуд у вигляді ряду (26), а кількість доданків, що враховуються, визначає порядок перерозсінення. Оскільки одержані представлення (27), (28) для амплітуд реакції, базуються на врахуванні тільки перших членів ітераційного ряду інтегрального рівняння Додда-Грайдера, то такий підхід справедливий при певних обмеженнях на енергії налітаючих частинок. Ці енергії, з одного боку, повинні значно перевищувати енергії зв'язку складних частинок у вхідному і вихідному каналах, оскільки при менших енергіях сильними є ефекти поляризації атома в процесі зіткнення. З іншого боку, енергія налітаючої частинки не може бути дуже великою, оскільки при великих енергіях істотну роль можуть відіграти процеси

багатократного перерозсінення електрона. Вплив наступних членів ітераційного ряду для оператора тричастинкового розсіяння з перебудовою (механізмів реакції, що враховують ефекти три-, чотирикратного перерозсінення і т. д.) проаналізований в роботах [10, 11]. Якісні оцінки вкладу таких механізмів в переріз реакції перезарядки показали, що цей вклад невеликий у порівнянні з перерізом одно- і двоступеневих механізмів і повинен враховуватися тільки при релятивістських енергіях.

Розглянемо застосування викладеного вище формалізму до обчислення кутових і енергетичних залежностей перерізів реакції перезарядки протона на атомі водню:



Ця реакція представляє особливий інтерес та служить еталоном для перевірки різних теорій процесів з перебудовою, оскільки в цьому випадку точно відомі потенціали взаємодії в каналах і хвильові функції зв'язаних станів. Для процесу (1) амплітуда розсіяння  $T_{\alpha\beta}^-$  має різкий максимум (фактично їх два) в області малих кутів  $\theta \leq m_{\gamma} / \mu \ll 1$ ,  $\mu = m_{\alpha} m_{\beta} / (m_{\alpha} + m_{\beta})$ .

У диференціальних перерізах перезарядки двоступеневий механізм захоплення електрона виявляється у вигляді характерного різкого максимуму при куті розсіяння Томаса  $\theta_T$  – пік Томаса. Експериментально пік Томаса вперше спостерігався в кутових розподілах атомів водню, що утворилися при перезарядці протонів на гелії при енергії в декілька мегаелектронвольт під кутом 0,5 мілірадіана.

Результати обчислення диференціальних перерізів захоплення електрона протонами у водні для двох значень енергії порівнюються на рис. 1 з експериментом [12], результатами CDW-методу [5] і ОБК-наближення. Найбільший інтерес становлять розрахунки кутових розподілів простого одноступеневого механізму перезарядки і розрахунки, коли в аналіз реакції (29), крім одноступеневого, включається також і двоступеневий (томасівський) механізм електронного захоплення. Видно,

що врахування двоступеневих ефектів приводить до появи виразного максимуму (піка Томаса) на місці джексон-шиффівського провалу, отриманого в рамках простого одноступеневого механізму.

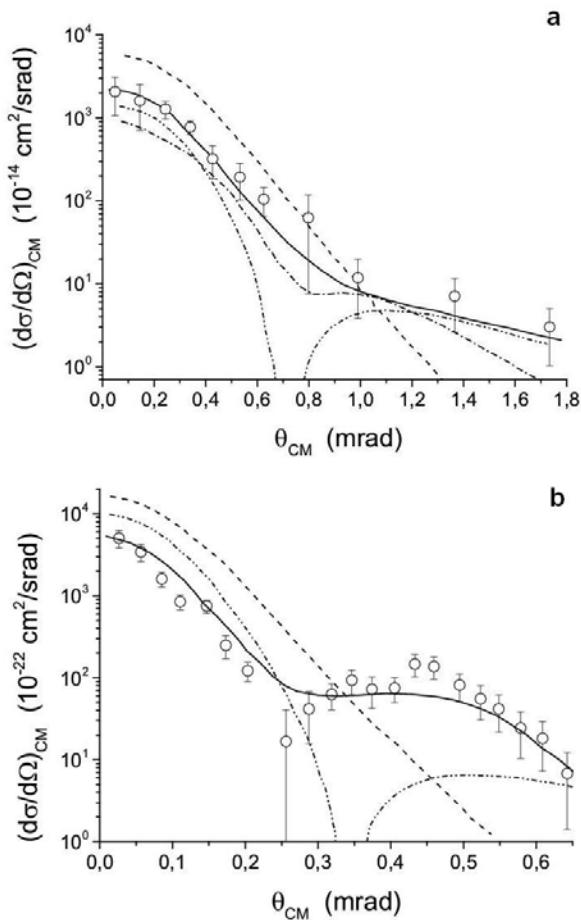


Рис. 1. Диференціальні перерізи перезарядки протонів на водні в залежності від кута розсіювання в координатах системи центра мас. Енергія протонів 125 кеВ (а) і 500 кеВ (б). Теорія: суцільна крива – наші розрахунки із врахуванням кулонівської взаємодії у вихідному каналі, штрих-пунктир-пунктирна – наші розрахунки в першому борнівському наближенні із коректними граничними умовами, штрих-пунктирна – розрахунок в CDW-наближенні, штрихова – ОБК-наближення. Експериментальні дані – з [12].

При великих кутах розсіювання важливу роль відіграє взаємодія важких частинок, яка, проте, в CDW-наближенні не враховується. У нашому розгляді врахування цієї взаємодії в хвильовій функції кінцевого стану приводить до більш плавного спадання перерізів із зростанням кута розсіювання, що відповідає спостережуваній експериментальній поведінці перерізів.

## Висновки

Підсумовуючи результати теоретичних досліджень піку Томаса в диференціальних перерізах, слід перш за все відзначити, що найбільш сильно на форму кутових розподілів впливає кулонівське перерозсіювання електрона на іоні-залишку мішені в кінцевому стані, що рівнозначно достатньо повному врахуванню взаємодії після зіткнення. Якщо ж перерізи перезарядки обчислюються без врахування кулонівської взаємодії в кінцевому стані або в одноступеневому наближенні, то пік Томаса в кутових розподілах не відтворюється, а між теоретичними і експериментальними перерізами виникають якісні відмінності. На рис. 1 приведено приклад такого «прямого» аналізу експериментального перерізу реакції (29) на базі формул ОБК-наближення, яке приводить до завищення перерізів при малих і дуже швидкого їх спадання при великих кутах розсіювання.

В цілому одержана відповідність теоретичних і експериментальних даних дозволяє зробити висновок про адекватність в широкій області енергій і кутів розсіювання протонів методу розрахунку диференціальних перерізів перезарядки, заснованого на використанні при обчисленні амплітуди першого квазіборнівського члена ітераційного ряду рівняння Додда-Грайдера, модифікованого для кулонівської взаємодії. Разом з тим не можна вважати, що в рамках розвиненого тут методу вирішені всі проблеми теорії електронного захоплення. Одним з головних недоліків цього методу є обмеження рамками задачі трьох тіл, коли в розгляд вводяться степені свободи тільки одного електрона. Тому дана теорія, строго кажучи, застосовна для дослідження процесів перезарядки при зіткненні голого ядра (але не частково обідраного іона) з атомами водню та з водневоподібними іонами, що мають тільки один електрон. Хоча найбільший практичний інтерес становлять саме багатоелектронні системи, проте в деяких випадках задачу можна розглядати як тричастинкову, а всі ефекти, обумовлені наявністю у атома та іона невалентних електронів можна приблизно врахувати, вводячи нелокальний або

ефективний локальний потенціал взаємодії електрона з іоном. Розгляду цих випадків і

будуть присвячені наші наступні публікації.

#### СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1. Lazur V.Yu., Khoma M.V. Distorted wave theories for one- and two- electron capture in fast atomic collisions // *Advances in Quantum Chemistry*. – 2013. – V. 65. – P. 363-405.
2. Belkic Dz., Mancev I., Hanssen J. Four body methods for high-energy ion-atom collisions // *Rev. Mod. Phys.* – 2008. – V. 80. – P. 249-314.
3. Fischer D., Gudmundsson M. et al. Importance of Thomas single-electron transfer in fast *p*-He collisions // *Phys. Rev. A*. – 2010. – V. 81. – P. 012714-(1-4).
4. Schoffler M.S., Titze J.N. et al. Collision dynamics in electron-capture processes with excitation // *Phys. Rev. A*. – 2009. – V. 80. – P. 042702-(1-6).
5. Belkic Dz., Gayet R., Salin A. Electron capture in high-energy ion-atom collisions // *Phys. Rep.* – 1979. – V.56. – №6. – P. 279-369.
6. Greider K.R., Dodd L.R. Divergence of the Distorted-Wave Born Series for Rearrangement Scattering // *Phys. Rev. A*. – 1966. – V. 146. – P. 671-675.
7. Dodd L.R., Greider K.R. Rigorous Solution of Three-Body Scattering Processes in the Distorted-Wave Formalism // *Phys. Rev. A*. – 1966. – V. 146. – P. 675-686.
8. Faddeev L.D. Scattering theory for a three-particle system // *Sov. Phys. JETP*. – 1961. – V. 12. – №5 – P. 1014-1019.
9. Лендьел В.И., Лазур В.Ю., Карбованец М.И., Янев Р.К. Введение в теорию атомных столкновений. – Львов: Вища школа, 1989. – 192 с.
10. Shakeshaft R. Asymptotic form of the third Born amplitude for forward electron capture by a bare ion incident on a hydrogenlike ion // *Phys. Rev. A*. – 1978. – V. 17. – №3. – P. 1011-1017.
11. Brodskii A. M., Potapov V.S., Tolmachev V.V. Asymptotic behavior of the cross section for charge exchange // *Sov. Phys. JETP*. – 1970. – V. 31. – P. 144-152.
12. Martin P.J., Blankenship D.M., Klave T.J. et al. Electron capture at very small scattering angles from atomic hydrogen by 25-125 keV protons // *Phys. Rev. A*. – 1981. – V. 23. – P. 3357-3360.

Стаття надійшла до редакції 04.09.2017

В. Ю. Лазур<sup>1</sup>, В. В. Алексий<sup>1</sup>, С.И. Мигалина<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Ужгородский национальный университет, 88000, Ужгород, ул. Волошина, 54

<sup>2</sup>Ужгородский национальный университет, 88000, Ужгород, ул. Университетская, 14а  
e-mail: volodymyr.lazur@uzhnu.edu.ua

## УЧЕТ ЭФФЕКТОВ ПЕРЕРАССЕЯНИЯ ЭЛЕКТРОНА В РЕАКЦИИ ОДНОЭЛЕКТРОННОЙ ПЕРЕЗАРЯДКИ

На основе интегральных уравнений Додда-Грайдера построена теория реакции одноэлектронной перезарядки при столкновении водородоподобного атома и позитивно заряженного иона с учетом эффектов перерассеяния электрона на ионе-остатке мишени. Показано, что без учета эффектов кулоновского перераспределения захваченного электрона, невозможно воспроизвести пик Томаса в угловых распределениях продуктов этой реакции. За счет достаточно полного учета взаимодействия после столкновения и быстрой сходимости ряда теории возмущений Додда-Грайдера, предложенный метод обеспечивает хорошую согласованность с экспериментальными данными.

**Ключевые слова:** уравнение Додда-Грайдера, перезарядка, атом, ион, кулоновское взаимодействие.

PACS 03.65.-w, 34.50.-s, 34.80.Dp, 34.70.+e

DOI: 10.24144/2415-8038.2017.41.103-111

V.Yu. Lazur<sup>1</sup>, V.V. Aleksiy<sup>1</sup>, S.I. Myhalyna<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Uzhhorod National University, 88000, Uzhhorod, Voloshin Str., 54,

<sup>2</sup>Uzhhorod National University, 88000 Uzhhorod, 14A Universytetska Str.

e-mail: volodymyr.lazur@uzhnu.edu.ua

## ACCOUNTING THE EFFECTS OF ELECTRON RE-SCATTERING IN THE SINGLE-ELECTRON CHARGE-EXCHANGE REACTION

**Purpose:** In our work, the three-body Dodd-Greider integral equations have been reviewed by focusing on the correct Coulomb asymptotic forms of the wave functions for the problem of rearrangement scattering. On the basis of the Dodd-Greider integral equations with Coulomb interactions, the theory of one-electron capture in collisions of hydrogen-like atoms and positively charged ions with taken to account for electron re-scattering effects are reviewed. Specifically, distorted wave theories for one-electron capture reactions in energetic collisions of hydrogen-like atoms with positive ions are recapitulated.

**Methods:** In particular, the reaction amplitude is highlighted as a first iteration term of the solution of the Dodd-Greider equations for the three-body scattering operator. It is emphasized that to reproduce the Thomas peak in the angular distribution of the reaction products, it is necessary to account for the effects of Coulomb re-scattering of the captured electron. In approximation of the “single-step” collision, this method reduces to the version of the well-known boundary-corrected first Born approximation, where the asymptotic behavior of the particles in the entrance and exit reaction channels is described by two-body Coulomb wave functions. The short-range interaction due to incomplete screening of the nucleus by atomic electrons is taken into account in the perturbing potential.

**Results:** This theory was applied to study the influence of Coulomb interactions in the final state on angular and energy distributions of the products of the charge-



transfer reactions at intermediate collision energies. Due to the sufficiently complete allowance for the interaction after the collision and the fast convergence of the Dodd-Greider perturbation theory series, the proposed method provides good consistency with the experimental data.

**Conclusions:** An important feature of this method is a consistent preservation of the proper asymptotic limits of the wave functions of a colliding system in the entrance and exit reaction channels that takes into account the long-range nature of the Coulomb interactions.

**Keywords:** eikonal approximation, Green's function, single-electron charge exchange, atom, ion.

PACS NUMBER: 03.65.-w, 34.50.-s, 34.80.Dp, 34.70.+e

## REFERENCES

1. Lazur, V.Yu., Khoma, M.V. (2013), "Distorted wave theories for one- and two-electron capture in fast atomic collisions", *Advances in Quantum Chemistry*, V. 65, pp. 363-405.
2. Belkic, Dz., Mancev, I., Hanssen, J. (2008), "Four body methods for high-energy ion-atom collisions", *Rev. Mod. Phys.*, V. 80, pp. 249-314.
3. Fischer, D., Gudmundsson, M. et al. (2010), "Importance of Thomas single-electron transfer in fast  $p$ -He collisions", *Phys. Rev. A*, V. 81, pp. 012714-(1-4).
4. Schoffler, M.S., Titze, J.N. et al. (2009), "Collision dynamics in electron-capture processes with excitation", *Phys. Rev. A*, V. 80, pp. 042702-(1-6).
5. Belkic, Dz., Gayet, R., Salin, A. (1979), "Electron capture in high-energy ion-atom collisions", *Phys. Rep.*, V. 56, No. 6, pp. 279-369.
6. Greider, K.R., Dodd, L.R. (1966), "Divergence of the Distorted-Wave Born Series for Rearrangement Scattering", *Phys. Rev. A*, V. 146, pp. 671-675.
7. Dodd, L.R., Greider, K.R. (1966), "Rigorous Solution of Three-Body Scattering Processes in the Distorted-Wave Formalism", *Phys. Rev. A*, V. 146, pp. 675-686.
8. Faddeev, L.D. (1961), "Scattering theory for a three-particle system", *Sov. Phys. JETP*, V. 12, No. 5, pp. 1014-1019.
9. Lendyel, V.I., Lazur, V.Yu., Karbovanets, M.I., Janev, R.K. (1989), *Introduction to the Theory of Atomic Collisions [Vvedeniie v teoriuu atomnykh stolknovenii]*, Vyscha shkola, Lviv, 192 p.
10. Shakeshaft, R. (1978), "Asymptotic form of the third Born amplitude for forward electron capture by a bare ion incident on a hydrogenlike ion", *Phys. Rev. A*, V. 17, No. 3, pp. 1011-1017.
11. Brodskii, A. M., Potapov, V.S., Tolmachev, V.V. (1970), "Asymptotic behavior of the cross section for charge exchange", *Sov. Phys. JETP*, V. 31, pp. 144-152.
12. Martin, P.J., Blankenship, D.M., Klave, T.J. et al. (1981), "Electron capture at very small scattering angles from atomic hydrogen by 25-125 keV protons", *Phys. Rev. A*, V. 23, pp. 3357-3360.