УДК 658.562:621

В.В. Алексій, В.Ю. Лазур, М.В. Хома
Ужгородський національний університет, 88000, Ужгород, вул. Волошина, 54
e-mail: kaf-teorphys@uzhnu.edu.ua

ШРЕДІНГЕРІВСЬКИЙ ФОРМАЛІЗМ МЕТОДУ СПОТВОРЕНИХ ХВИЛЬ У ЗАДАЧІ ОДНОЕЛЕКТРОННОГО ЗАХОПЛЕННЯ З ОДНОЧАСНОЮ ІОНІЗАЦІЄЮ

Розроблено шредінгерівський формалізм методу спотворених хвиль неперервного спектру для аналізу та розрахунку процесу одноелектронного захоплення з одночасною іонізацією у високоенергетичних іон-атомних зіткненнях. На основі CDW-методу з коректним врахуванням кулонівських асимптотичних умов в обох каналах реакції, отримано аналітичний вираз для амплітуди процесу захоплення з іонізацією, який містить два множники. Один з них описує процес одноелектронного захоплення, а інший – зв'язано-вільний перехід в іоні-залишку мішені. Результати розрахунків перерізів перезарядки з одночасною іонізацією у зіткненнях атома He з протоном добре узгоджуються з наявними експериментальними даними.

Ключові слова: одноелектронна перезарядка, іонізація, спотворена хвиля, міжелектронна взаємодія, амплітуда.

Вступ

Останнім часом предметом інтенсивного експериментального і теоретичного вивчення стали процеси одноелектронної перезарядки та іонізації, двоелектронного захоплення, захоплення з одночасним збудженням чи іонізацією. Це пов'язано зі створенням і експлуатацією пристроїв для здійснення керованого термоядерного синтезу з магнітним утриманням плазми, розробкою нових типів лазерів, проектуванням і використанням прискорювачів важких іонів високих енергій [1]. Детальне вивчення процесів з перерозподілом необхідне також для розуміння механізмів взаємодії іонів з речовиною у конденсованому стані [1, 2].

В даній статті зупинимось на проблемах теоретичного описання процесів захоплення з одночасною іонізацією

$$A^{Z_\alpha +} + B \to A^{(Z_\alpha - 1)+} + B^{2+} + e^- \qquad (1)$$

у високоенергетичних зіткненнях атома B з багатозарядним іоном $A^{Z_\alpha +}$.

Як відомо, для визначення хвильових функцій та амплітуд переходів у багаточастинкових системах з парними потенціалами взаємодії можна використовувати різні інтегральні рівняння з компактними ядрами, яким задовольняють хвильові функції або T-матриці [2-4]. Оскільки точне розв'язання цих рівнянь є вельми складною задачею, часто використовуються наближені підходи, найбільш поширеним з яких є метод спотворених хвиль неперервного спектру [2, 4]. Використання вказаного методу в задачах одно- та двоелектронної перезарядки атомів на багатозарядних іонах приводить до доброго узгодження теорії з експериментальними даними [2, 4, 5]. Привабливою стороною формалізму спотворених хвиль неперервного спектру є акуратне врахування кулонівських ефектів у початковому та кінцевому каналах реакцій з перерозподілом [4-9]. Зазначимо також, що детально розвинуті асимптотичні (за великими прицільними параметрами) методи теорії іон-атомних зіткнень [10-17] незастосовні для обчислення перерізів реакції (1), так як в цьому випадку, навпаки, суттєві малі прицільні параметри.

В даній праці розвинуто шредінгерівський формалізм методу спотворених хвиль неперервного спектру для аналізу та розрахунку перерізів процесу захоплення з одночасною іонізацією (1). Цей процес будемо вивчати на найпростішому прикладі зіткнення атома гелію з протоном. Тим не менш, розвинуті нижче теоретичні представлення про фізичні особливості процесу захоплення з одночасною іонізацією носять загальний характер. Формальна побудова теорії буде подана у вигляді, придатному для опису зіткнення довільних атомних частинок.

Шредінгерівський формалізм методу спотворених хвиль неперервного спектру

Розгляд задачі будемо проводити на основі квазікласичного варіанту методу спотворених хвиль, коли відносний рух частинок, що зіштовхуються, описується класично. Повний електронний гамільтоніан системи (1), який включає і між'ядерне відштовхування, запишемо у вигляді суми:

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

де V – повна взаємодія частинок у системі:

$$V = -\sum_{\kappa=1}^{2}\left(\frac{Z_\alpha}{s_\kappa} + \frac{Z_\beta}{x_\kappa}\right) + \frac{1}{r_{12}} + \frac{Z_\alpha Z_\beta}{R}. \quad (3)$$

Тут радіус-вектори $\vec{x}_\kappa$, $\vec{s}_\kappa$, $\vec{r}_\kappa$ описують положення κ-го електрона ($\kappa = 1,2$) відносно центрів інерції атома-мішені B з ядерним зарядом Z_β, налітаючого іона $A^{Z_\alpha +}$ з ядерним зарядом Z_α і середини відрізка R відповідно; r_{12} – відстань між електронами; Δ_κ – тривимірний оператор Лапласа за координатами $\vec{r}_\kappa$.

Суть використовуваного тут методу полягає в розбитті повного гамільтоніана системи H на дві частини:

$$H = H_i + \upsilon_i = H_f + \upsilon_f, \quad H_i = H_0 + V_i, \quad H_f = H_0 + V_f, \quad (4)$$

$$\upsilon_i = V - V_i, \quad \upsilon_f = V - V_f,$$
$$V_i = -\sum_{\kappa=1}^{2}\frac{Z_\beta}{x_\kappa} + \frac{1}{r_{12}}, \quad V_f = -\frac{Z_\alpha}{s_1}, \quad (5)$$

одна з яких – H_i (H_f) (її зазвичай називають канальним гамільтоніаном) – визначає зв'язані стани в системі, а інша – υ_i (υ_f), – дає залишок, який не містить внесків від зв'язаних станів. Уведемо тепер дві хвильові функції $\Psi_i^+(t)$, $\Psi_f^-(t)$, які є точними розв'язками нестаціонарного рівняння Шредінгера

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

але задовольняють різним граничним умовам при великих $|t|$:

$$\Psi_i^+(t) \xrightarrow[t\to-\infty]{} \Phi_i^B(t)\,\exp[i\sigma_i(t)] \equiv \varphi_i^B(\vec{x}_1,\vec{x}_2)\,\exp[i\sigma_i(t)]\exp\left\{-i\left[\frac{1}{4}\upsilon^2 t + \frac{1}{2}\vec{\upsilon}(\vec{r}_1+\vec{r}_2) + E_i^B t\right]\right\} = \mathscr{E}_i\varphi_i^B\,\exp[i\sigma_i(t)], \quad (7)$$

$$\Psi_f^-(t) \xrightarrow[t\to\infty]{} \Phi_f^A(t)\,\exp[-i\sigma_f(t)] \equiv (2\pi)^{-3/2}\varphi_f^A(\vec{s}_1)\exp[-i\sigma_f(t)]\times$$
$$\times\exp\left\{-i\left[\frac{1}{4}\upsilon^2 t + \frac{1}{2}\vec{\upsilon}(\vec{r}_2-\vec{r}_1) - \vec{k}\vec{x}_2 + \left(E_f^A + E_k\right)t\right]\right\} = \mathscr{E}_f\varphi_f^A\,\exp[-i\sigma_f(t)]. \quad (8)$$

Тут використані позначення: $\varphi_i^B(\vec{x}_1,\vec{x}_2)$ – незбурена двоелектронна хвильова функція початкового стану, яка враховує і міжелектронні кореляції; $\varphi_f^A(\vec{s}_1)$ – хвильова функція захоплюваного електрона в атомній частинці $A^{(Z_\alpha-1)+}$; $E = k^2/2$ – кінетична енергія вільного електрона; $\vec{k}$ – відносний імпульс вибитого електрона та іона-залишку $B^{Z_\beta +}$. Кулонівські фази σ_i і σ_f задаються ейкональними формулами, які у даному випадку набувають вигляду:

$$\sigma_i(t)=\frac{Z_\alpha(Z_\beta-2)}{\upsilon}\ln(\upsilon R-\upsilon^2 t),$$
$$\sigma_f(t)=\frac{(Z_\alpha-1)(Z_\beta-1)}{\upsilon}\ln(\upsilon R+\upsilon^2 t)-$$
$$-(Z_\beta/k)\ln(kx_2+\vec{k}\vec{x}_2). \qquad (9)$$

Зазначимо, що у фазі $\sigma_f(t)$ замість доданків

$$\frac{(Z_\alpha-1)Z_\beta}{\upsilon}\ln(\upsilon R+\upsilon^2 t)-\frac{(Z_\alpha-1)}{p}\times$$
$$\times\ln(ps_2+\vec{p}\vec{s}_2), \qquad (10)$$

де $\vec{p}=\vec{k}-\vec{\upsilon}$, які відповідають взаємодії системи $A^{(Z_\alpha-1)+}$ із залишковим іоном $B^{Z_\beta+}$ та вилітаючим електроном e^-, записано один, асимптотично рівний їм (див., наприклад, [21]) доданок $((Z_\alpha-1)\times\times(Z_\beta-1)/\upsilon)\ln(\upsilon R+\upsilon^2 t)$.

Уведемо хвильову функцію $\chi_i^+(\chi_f^-)$ ("спотворену хвилю"), яка є розв'язком нестаціонарного рівняння Шредінгера в деякому потенціалі $U_i(U_f)$:

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

Будемо шукати розв'язки рівнянь (11) у вигляді:

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

де $\mathscr{L}_i^+,\mathscr{L}_f^-$ – поправкові функції, які враховують наявність "чужого" потенціального центру. Отримаємо явний вигляд рівнянь для розрахунку спотворень у вхідному $(\mathscr{L}_i^+)$ і вихідному $(\mathscr{L}_f^-)$ каналах реакції. Підставляючи функцію χ_i^+ у вигляді (12) в нестаціонарне рівняння Шредінгера (11), отримаємо рівняння для $\mathscr{L}_i^+$, яке для подальшого використання зручно записати у вигляді:

$$\Phi_i^B\left[T_0-\frac{Z_\alpha}{s_1}-\frac{Z_\alpha(Z_\beta-1)}{R}-i\omega_0^+\right]\mathscr{L}_i^+=\mathscr{F}_i^+, \qquad (13)$$

де

$$T_0=H_0-i\frac{\partial}{\partial t};\quad \omega_0^+=\frac{1}{2}\sum_{\kappa=1}^{2}\vec{\upsilon}\vec{\nabla}_\kappa;$$
$$W_i=\upsilon_i-U_i, \qquad (14)$$

$$\mathscr{F}_i^+=\left[W_i-Z_\alpha\left(\frac{1}{R}-\frac{1}{s_2}\right)\right]\chi_i^+ +$$
$$+\mathscr{E}_i\sum_{\kappa=1}^{2}\vec{\nabla}_\kappa\varphi_i^B\vec{\nabla}_\kappa\mathscr{L}_i^+. \qquad (15)$$

Аналогічне рівняння можна отримати і для функції $\mathscr{L}_f^-$ у вихідному каналі:

$$\Phi_f^A\left[T_0-\frac{Z_\beta-1}{x_1}-\frac{Z_\beta}{x_2}-\frac{Z_\alpha(Z_\beta-1)}{R}+i\omega_{\vec{k}}^-\right]\mathscr{L}_f^-=\mathscr{F}_f^- \qquad (16)$$

де

$$\omega_{\vec{k}}^-=-\frac{1}{2}\vec{\upsilon}\vec{\nabla}_1-\left(\vec{k}-\frac{1}{2}\vec{\upsilon}\right)\vec{\nabla}_2,$$
$$W_f=\upsilon_f-U_f, \qquad (17)$$

$$\mathscr{F}_f^-=\left[W_f-Z_\alpha\left(\frac{1}{R}-\frac{1}{s_2}\right)-\left(\frac{1}{x_{12}}-\frac{1}{x_1}\right)\right]\chi_f^- +$$
$$+\mathscr{E}_f\vec{\nabla}_1\varphi_f^A\vec{\nabla}_1\mathscr{L}_f^-. \qquad (18)$$

Для успішної реалізації CDW-методу потенціали U_i і U_f, що визначають властивості спотворених хвиль χ_i^+ і χ_f^-, необхідно вибрати виходячи із наступних міркувань:

1. Функція $\chi_i^+(\chi_f^-)$ повинна зберігати основні аналітичні властивості точної хвильової функції повного гамільтоніана $\Psi_i^+(\Psi_f^-)$;
2. Потенціал $U_i(U_f)$ має бути таким, щоб рівняння (13) ((16)) мало розв'язок в класі спеціальних або елементарних функцій;
3. Функція $\chi_i^+(\chi_f^-)$ повинна володіти правильною асимптотичною поведінкою при великих $|t|$, тобто:

$$\chi_i^+(t)\xrightarrow[t\to-\infty]{}\Phi_i^B\exp[i\sigma_i(t)],$$
$$\chi_f^-(t)\xrightarrow[t\to\infty]{}\Phi_f^A\exp[-i\sigma_f(t)], \qquad (19)$$

де фази σ_i і σ_f визначаються виразами (9).

Ґрунтуючись на цих міркуваннях, вибираємо потенціали U_i і U_f в наступному вигляді:

$$W_i = \upsilon_i - U_i = Z_\alpha\left(\frac{1}{R}-\frac{1}{s_2}\right) - \sum_{\kappa=1}^{2}\varphi_i^B(\vec{x}_1,\vec{x}_2)\times \times\vec{\nabla}_\kappa\left[\varphi_i^B(\vec{x}_1,\vec{x}_2)\right]^{-1}, \quad (20)$$

$$W_f = \upsilon_f - U_f = Z_\alpha\left(\frac{1}{R}-\frac{1}{s_2}\right) - \frac{1}{x_{12}} - \frac{1}{x_1} - -\vec{\nabla}_1\,\varphi_f^A(\vec{s}_1)\vec{\nabla}_1\left[\varphi_f^A(\vec{s}_1)\right]^{-1}, \quad (21)$$

При такому виборі спотворюючих потенціалів рівняння (13), (16) допускають відокремлення змінних і їх розв'язки виражаються через вироджені гіпергеометричні функції:

$$\mathscr{L}_i^+ = N(\nu_A)\,\exp\left\{i\,\frac{Z_\alpha(Z_\beta-1)}{\upsilon}\ln\left(\upsilon R-\upsilon^2 t\right)\right\}\times \times F\left(i\nu_A,1,i\upsilon s_1 + i\vec{\upsilon}\vec{s}_1\right), \quad (22)$$

$$\mathscr{L}_f^- = N^*(\nu_B)\,\exp\left\{-i\,\frac{Z_\alpha(Z_\beta-1)}{\upsilon}\ln\left(\upsilon R+\upsilon^2 t\right)\right\}\times \times\varphi_{\vec{k}}^-(\vec{x}_2)\,F\left(i\nu_B,1,i\upsilon x_1 + i\vec{\upsilon}\vec{x}_1\right), \quad (23)$$

де

$$\varphi_{\vec{k}}^-(\vec{x}_2) = (2\pi)^{-3/2}N^*(\xi_B)\exp\left(i\vec{k}\,\vec{x}_2\right)\times \times F\left(-i\xi_B,1,-ikx_2 - i\vec{k}\,\vec{x}_2\right), \quad (24)$$

$$N(\nu_j) = \exp\left(\frac{\pi\nu_j}{2}\right)\Gamma(1-i\nu_j),\quad j=(A,B),$$
$$\nu_A = \frac{Z_\alpha}{\upsilon},\ \nu_B = \frac{Z_\beta - 1}{\upsilon}, \quad (25)$$

$$N(\xi_B) = \exp(\pi\xi_B/2)\,\Gamma(1-i\xi_B),$$
$$\xi_B = Z_\beta/k\,. \quad (26)$$

Беручи до уваги умову

$$\lim_{t\to\infty}\left\langle\Phi_f^A\exp\left[-i\sigma_f(t)\right]\right\|\chi_i^+\right\rangle = \lim_{t\to\infty}\left\langle\Psi_f^-\middle|\chi_i^+\right\rangle = 0, \quad (27)$$

що накладається на U_i, представимо шукану амплітуду переходу (тобто захоплення з іонізацією) в prior-формалізмі в наступному вигляді:

$$\mathcal{A}_{if}^-(\vec{\rho}) = \lim_{t\to-\infty}\left\langle\Psi_f^-\middle|\Phi_i^B\exp\left[i\sigma_i(t)\right]\right\rangle = \lim_{t\to-\infty}\left\langle\Psi_f^-\middle|\chi_i^+\right\rangle = = -i\int_{-\infty}^{\infty}dt\iint d\vec{r}_1\,d\vec{r}_2\,\Psi_f^{-*}\,W_i\,\chi_i^+, \quad (28)$$

Тепер введемо основне припущення розглядуваного методу, приймаючи в якості точної хвильової функції в кінцевому стані Ψ_f^- спотворену хвилю χ_f^- : $\Psi_f^- \cong \chi_f^- = \Phi_f^A\,\mathscr{L}_f^-$. Використовуючи даний вибір Ψ_f^-, а також формули (12), (22) і (23), амплітуду (28) можна записати у вигляді суми двох доданків:

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

де

$$a_{if}^{(1)}(\vec{\rho}) = -i\int_{-\infty}^{\infty}dt\iint d\vec{r}_1\,d\vec{r}_2\,\Phi_f^{A*}\,\mathscr{L}_f^{-*}\times \times\left\{Z_\alpha\left(\frac{1}{s_2}-\frac{1}{R}\right)\chi_i^+\right\}, \quad (30)$$

$$a_{if}^{(2)}(\vec{\rho}) = -i\int_{-\infty}^{\infty}dt\iint d\vec{r}_1\,d\vec{r}_2\,\Phi_f^{A*}\,\mathscr{L}_f^{-*}\,\mathscr{E}_i\,\vec{\nabla}_1\times \times\varphi_i^B(\vec{x}_1,\vec{x}_2)\vec{\nabla}_1\,\mathscr{L}_i^+. \quad (31)$$

Чисельні оцінки матричних елементів $a_{if}^{(1)}$ і $a_{if}^{(2)}$, показали, що при великих енергіях зіткнення в широкій області прицільних параметрів і зарядів взаємодіючих частинок виконується співвідношення $\left|a_{if}^{(1)}\right| \ll \left|a_{if}^{(2)}\right|$. Внесок в амплітуду (29) від доданку $a_{if}^{(1)}$ стає істотним лише при малих енергіях зіткнення. Розглянемо амплітуду переходу $\mathcal{A}_{if}^-(\vec{\rho})$ з врахуванням лише одного доданку $a_{if}^{(2)}$ і, використовуючи явні вирази для $\mathscr{L}_i^+$, $\mathscr{L}_f^-$, перетворимо її до вигляду:

$$\mathcal{A}_{if}^-(\vec{\rho}) = -i(2\pi)^{-3/2}(\rho\upsilon)^{2i\nu}N(\nu_A)N(\nu_B)N(\xi_B)\times \times\int_{-\infty}^{\infty}dt\iint d\vec{r}_1\,d\vec{r}_2\,\exp\left\{-i\left(\vec{\upsilon}\,\vec{r}_1 + \vec{k}\vec{x}_2 - \Delta E\,t\right)\right\}\times \times\Im_i\,\Im_f\,, \quad (32)$$

де

$$\Im_i = \vec{\nabla}_{\vec{x}_1} \varphi_i^B(\vec{x}_1, \vec{x}_2) \vec{\nabla}_{\vec{s}_1} F(i v_A, 1, i \upsilon s_1 + i \vec{\upsilon} \vec{s}_1);$$
$$\Delta E = E_k + E_f^A - E_i^B, \quad (33)$$

$$\Im_f = \varphi_f^{A*}(\vec{s}_1) F(i v_B, 1, i \upsilon x_1 + i \vec{\upsilon} \vec{x}_1) \times$$
$$\times F\left(i \xi_B, 1, ik\, x_2 + i\vec{k}\, \vec{x}_2\right); \; v = Z_\alpha (Z_\beta - 1)/\upsilon \, .(34)$$

Зауважимо, що використаний нами варіант потенціалів U_i і U_f, очевидно не є єдино можливим. При використанні інших варіантів потенціалу U_f необхідно стежити за тим, щоб функція χ_f^- задовольняла кулонівським граничним умовам (19). Що ж стосується U_i, то будь-яка зміна цього потенціалу викликає зміну оператора переходу. Однак у нашому випадку ця зміна спричинить появу в амплітуді переходу членів, які матимуть різний порядок по $1/\upsilon$, і у відповідності з [18] фізичний зміст має тільки старший із них, який відповідає другому доданку в правій частині рівняння (20). Важливо, що вибір потенціалів U_i і U_f у вигляді (20), (21) не тільки дозволяє найкращим чином описати хід перерізу в області проміжних швидкостей зіткнення, але також дозволяє отримати аналітичні вирази для амплітуди переходу, що особливо зручно для проведення систематичних розрахунків перерізів різних процесів.

Фізичний зміст наближення, зробленого при отриманні хвильових функцій χ_i^+ і $\Psi_f^- \cong \chi_f^-$ таких, що визначаються рівняннями (12), (22)-(26), обговорювалося вище. Зазначимо ряд властивостей, які можна встановити із аналізу їх структури:

1. Хоча спотворені хвильові функції χ_i^+ і χ_f^-, що визначаються як розв'язки рівнянь (11), взагалі-то, не є ортогональними при скінченних значеннях між'ядерної відстані $R(t)$, для них виконується умова асимптотичної ортогональності (27).

2. Хвильові функції початкового і кінцевого станів χ_i^+ і χ_f^- не є нормованими для довільних ρ і t, і отримані за їх допомогою перерізи потребують додаткового перенормування [22]. Часто замість функцій χ_i^+ і χ_f^- використовують нормовані функції $\tilde{\chi}_j^{\pm} = \left(s_{jj}^{\pm}\right)^{-1/2} \chi_j^{\pm}$, де $s_{jj}^{\pm} = \left\langle \chi_j^{\pm} \middle| \chi_j^{\pm} \right\rangle$, $j = i, f$. Однак у випадку розглянутих нами швидких зіткнень чисельні оцінки матричних елементів $s_{jj}^{\pm}$, отримані в [22], показали, що в широкій області значень ρ і t виконується відношення $\left|s_{jj}^{\pm}\right| \approx I$. Дана обставина й обумовлює використання тут формул (12), (22) і (23).

3. Беручи до уваги співвідношення [18]:

$$\lim_{t\to\infty} \ln\left(\frac{\upsilon R + \upsilon^2 t}{\upsilon x_1 + \vec{\upsilon}\,\vec{x}_1}\right) = 0,$$
$$\lim_{t\to-\infty} \ln\left(\frac{\upsilon R - \upsilon^2 t}{\upsilon s_1 + \vec{\upsilon}\,\vec{s}_1}\right) = 0, \quad (35)$$

легко перевірити те, що функції χ_i^+ і χ_f^- мають правильну асимптотичну поведінку (19) при великих $|t|$. Як показано нижче, порушення вказаних асимптотик веде до суттєвого завищення перерізів в області середніх енергій зіткнення.

Розрахунок перерізів реакції перезарядки з одночасною іонізацією у високоенергетичних іон-атомних зіткненнях

Розрахунок перерізів захоплення з іонізацією зручніше проводити з допомогою відомого методу перетворень Фур'є [18]. Квантово-механічна амплітуда розсіяння $\Re_{if}^-(\vec{\eta})$ в границі $\mu \to \infty$ (μ – приведена маса важких часток) є перетворенням Фур'є квазікласичної амплітуди ймовірності $\mathcal{A}_{if}^-(\vec{\rho})$ [18]:

$$\Re_{if}^-(\vec{\eta}) = (2\pi)^{-1} \int d\vec{\rho}\, \exp(-i\vec{\eta}\,\vec{\rho}) \mathcal{A}_{if}^-(\vec{\rho}), \quad (36)$$

(де $\vec{\eta}$ – двокомпонентний вектор, перпендикулярний вектору $\vec{\upsilon}$: $\vec{\eta}\vec{\upsilon} = 0$), звідки за формулою Парсеваля випливає рівність:

$$\sigma_{if}^-(\vec{k}) \equiv \frac{d^2\sigma_{if}^-}{k\, dE_k\, d\Omega_{\vec{k}}} = \int d\vec{\eta} \left|\Re_{if}^-(\vec{\eta})\right|^2,$$

$$\sigma_{if}^{-}\left(\vec{k}\right) \equiv \int d\vec{\eta}\left|\Re_{if}^{-}(\vec{\eta})\right|^{2} = \int d\vec{\rho}\left|\mathcal{A}_{if}^{-}(\vec{\rho})\right|^{2}. \quad (37)$$

Тут $\sigma_{if}^{-}\left(\vec{k}\right)$ – двічі диференційований (за енергією і кутом вильоту електрона) переріз процесу захоплення з іонізацією; $d\Omega_{\vec{k}}$ – елемент тілесного кута в напрямку вильоту ежектованого електрона. З врахуванням результату (32), вираз (36) для $\Re_{if}^{-}(\vec{\eta})$ перетвориться до вигляду:

$$\Re_{if}^{-}(\vec{\eta}) = N_{AB}\left(\vec{I}\cdot\vec{J}\right), \quad (38)$$

де

$$\vec{I} = \int d\,\vec{s}_1\, \exp(i\vec{q}\,\vec{s}_1)\varphi_f^{A*}(\vec{s}_1)\vec{\nabla}_{\vec{s}_1}\times$$
$$\times F\left(i\nu_A, 1, i\upsilon s_1 + i\vec{\upsilon}\,\vec{s}_1\right), \quad (39)$$

$$N_{AB} = \frac{(2\pi)^{-3/2}}{2\pi i\,\upsilon} N(\nu_A)N(\nu_B)N(\xi_B),$$

$$\vec{J} = \iint d\,\vec{x}_1\, d\,\vec{x}_2\, \exp\left\{i\left(\vec{p}\vec{x}_1 - \vec{k}\vec{x}_2\right)\right\}\times$$
$$\times F\left(i\nu_B, 1, i\upsilon x_1 + i\vec{\upsilon}\,\vec{x}_1\right)F\left(i\xi_B, 1, ik\,x_2 + i\vec{k}\,\vec{x}_2\right)\times$$
$$\times \vec{\nabla}_{\vec{x}_1}\, \varphi_i^{B}(\vec{x}_1, \vec{x}_2); \quad (40)$$

$$\vec{p} = -\vec{\eta} + \left(\frac{\Delta E}{\upsilon} - \frac{\upsilon}{2}\right)\hat{\vec{\upsilon}},\ \ \vec{q} = \vec{\eta} - \left(\frac{\Delta E}{\upsilon} + \frac{\upsilon}{2}\right)\hat{\vec{\upsilon}},$$
$$\hat{\vec{\upsilon}} = \vec{\upsilon}/\upsilon. \quad (41)$$

Подальші розрахунки можливі тільки для конкретної моделі атома-мішені. Надалі, для опису зв'язаних станів "активних" електронів в атомі He приймемо наближення незалежних електронів. В даному наближені атомний гамільтоніан H_i (див. формули (4), (5)) набуває вигляду:

$$H_i \cong \sum_{\kappa=1}^{2}\left[-\frac{\Delta_\kappa}{2} - \frac{Z_\beta}{x_\kappa} + \overline{V}_\kappa(\vec{x}_\kappa)\right] \equiv \sum_{\kappa=1}^{2} H_\kappa^{(i)}, \quad (42)$$

де $H_\kappa^{(i)}$ – одноелектронний гамільтоніан; $\overline{V}_\kappa(\vec{x}_\kappa)$ – деякий усереднений потенціал, який діє на κ-й електрон атома He. Потенціал $\overline{V}_\kappa(\vec{x}_\kappa)$ враховує зміну кулонівського потенціалу ядра, в якому рухається κ-й електрон атома He і його поява обумовлена присутністю в атомі He "чужого" електрона.

В наближенні незалежних електронів незбурена хвильова функція початкового стану може бути представлена як добуток двох одноелектронних функцій:

$$\varphi_i^B(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = \varphi_i^B(\vec{x}_1)\,\varphi_i^B(\vec{x}_2). \quad (43)$$

Викладена вище постановка задачі призводить до факторизації матричного елемента (40), причому інтегрування за $\vec{x}_1$ і $\vec{x}_2$ виконується незалежно:

$$\vec{J} = \vec{J}_1 \cdot J_2, \quad (44)$$

де

$$\vec{J}_1 = \int d\,\vec{x}_1\, \exp(i\vec{p}\,\vec{x}_1)F\left(i\nu_B, 1, i\upsilon\, x_1 + i\vec{\upsilon}\,\vec{x}_1\right)\times$$
$$\times \vec{\nabla}_{\vec{x}_1}\, \varphi_i^B(\vec{x}_1), \quad (45)$$

$$J_2 = \int d\,\vec{x}_2\, \exp\left(-i\vec{k}\,\vec{x}_2\right)F\left(i\xi_B, 1, ik\,x_2 + i\vec{k}\,\vec{x}_2\right)\times$$
$$\times \varphi_i^B(\vec{x}_2). \quad (46)$$

Після цього, використавши формули (44)-(46), амплітуду розсіяння $\Re_{if}^{-}(\vec{\eta})$ можна представити у вигляді добутку двох співмножників. Один з них $\Re_{if}^{-B(Ion)}$ описує процес прямої іонізації, а інший $\Re_{if}^{-CDW(C.E.)}$ – процес електронного захоплення з врахуванням прямого і двоступеневого (томасівського) механізмів перезарядки:

$$\Re_{if}^{-}(\vec{\eta}) = \lim_{q\to 0}\left\{\frac{q^2}{2i\nu_A}\Re_{if}^{-B(Ion)}(\vec{q})\right\}\Re_{if}^{-CDW(C.E.)}(\vec{\eta}), \quad (47)$$

де

$$\Re_{if}^{-B(Ion)}(\vec{q}) = -\frac{4\pi Z_\alpha}{2i\pi\upsilon q^2}\int d\,\vec{x}_2\, \varphi_{\vec{k}}^{-*}(\vec{x}_2)\exp(i\vec{q}\,\vec{x}_2)\times$$
$$\times \varphi_i^B(\vec{x}_2), \quad (48)$$

$$\Re_{if}^{-CDW(C.E.)}(\vec{\eta}) = (2i\pi\upsilon)^{-1}N(\nu_A)\times$$
$$\times N(\nu_B)\left(\vec{I}\cdot\vec{J}\right). \quad (49)$$

Тут $\Re_{if}^{-B(Ion)}(\vec{q})$ – амплітуда іонізації в першому борнівському наближенні, $\Re_{if}^{-CDW(C.E.)}(\vec{\eta})$ – амплітуда одноелектронного захоплення в CDW-методі. При цьому вираз (49) співпадає з відповідним виразом для амплітуди одноелектронної перезарядки, отриманий Гаєтом [20] на основі інтегральних рівнянь Додда-Грайдера для квантово-механічного оператора тричастинкового розсіяння з перебудовою.

Узагальнення теорії, на якому тут не будемо зупинятись, показує, що вигляд кінцевого результату для $\Re_{if}^{-}(\vec{\eta})$ зберігається і при врахуванні тотожності (тобто при симетризації хвильових функцій), а також при врахуванні спінових атомних остовів. Уточнення теорії призводить до того, що у матричних елементах, які входять у формулу (38), під φ_i^B і φ_f^A слід розуміти вже багатоелектронні хвильові функції систем B і $A^{(Z_\alpha-1)+}$, відповідно.

Хвильові функції $\varphi_i^B(\vec{x}_\kappa)$ $(\kappa=1,2)$ і φ_f^A, що входять в (39), (45), (46), вибираємо у вигляді найпростіших водневих орбіталей з ефективними зарядами $\lambda = Z_\beta^*$ і Z_α, відповідно. Матричні елементи $\vec{J}_1$, J_2 і $\vec{I}$ з даними функціями можна точно обчислити, використовуючи метод контурного інтегрування Нордсіка [19]. Запишемо кінцеві результати:

$$\vec{J}_1 = -8\pi i\lambda N_\lambda \left(\lambda^2+p^2\right)^{-2}\left(1-\mathscr{X}_1\right)^{-i\nu_B} \times \times\left[\left(1-i\nu_B\right)\vec{p} - i\nu_B\,\vec{q}\left(1-\mathscr{X}_1\right)^{-1}\right], \quad (50)$$

$$J_2 = 8\pi N_\lambda\left(\lambda^2+k^2\right)^{-2}\left(1-\mathscr{X}_2\right)^{-i\xi_B} \times \left[\lambda\left(1-i\xi_B\right)+i\xi_B\left(\lambda-ik\right)\left(1-\mathscr{X}_2\right)^{-1}\right], \quad (51)$$

$$\vec{I} = -8\pi\nu_A\,\upsilon\,N_{Z_\alpha}\left(Z_\alpha^2+q^2\right)^{-2}\left(1-\mathscr{X}\right)^{-i\nu_A-1}\times \times\left(\nu_A\vec{\upsilon}+i\vec{q}\right), \quad (52)$$

$$\mathscr{X} = 2\frac{iZ_\alpha\upsilon - \vec{q}\,\vec{\upsilon}}{Z_\alpha^2+q^2}, \quad \mathscr{X}_1 = 2\frac{i\lambda\upsilon - \vec{p}\,\vec{\upsilon}}{\lambda^2+p^2},$$

$$\mathscr{X}_2 = 2\frac{i\lambda k + k^2}{\lambda^2+k^2} \quad N_\lambda = \frac{\lambda^{3/2}}{\pi^{1/2}}, \; N_{Z_\alpha} = \frac{Z_\alpha^{3/2}}{\pi^{1/2}}. \quad (53)$$

Наведемо результати розв'язку задачі про повний переріз процесу захоплення з іонізацією. Найпростіше їх можна одержати інтегруванням (37) за всіма напрямками вильоту і енергіями ежектованого електрона. Отриманий результат зручно представити у вигляді:

$$\sigma_{if}^{-} = 8\pi^2\int_0^\infty dk\cdot k^2\left|N_{AB}(k)\right|^2\int_0^\infty d\eta\cdot\eta\left|\left(\vec{I}\cdot\vec{J}_1\right)J_2\right|^2. \quad (54)$$

Результати розрахунків

Результати розрахунків повних перерізів реакції

$$\mathrm{p} + \mathrm{He}\left(1\mathrm{s}^2\right) \to \mathrm{H}(1\mathrm{s}) + \mathrm{He}^{++} + \mathrm{e}^{-} \quad (55)$$

зображені на рис. 1 в порівнянні з експериментальними даними, отриманими за допомогою методу пучків, що перетинаються, і методу збігів (одночасний аналіз зарядових станів обох частинок, що зіштовхуються). Врахування захоплення електрона протонами у збуджені стани призводить до незначної зміни результатів. Крім розрахунків за формулою (54), на рис. 1 представлені повні перерізи захоплення з іонізацією, обчислені в першому борнівському наближенні (ПБН). Для отримання амплітуди захоплення з іонізацією в ПБН необхідно замінити у формулі (47) $\Re_{if}^{-CDW(C.E.)}(\vec{\eta})$ на амплітуду найпростішого одноступеневого механізму захоплення електрона $\Re_{if}^{-ОБК(C.E.)}(\vec{\eta})$ в ОБК-наближенні [18]. При цьому електронні хвильові функції, що використовуються в ПБН, мають істотно неправильну асимптотику, тобто не задовольняють кулонівські асимптотичні умови (7) і (8).

Як і слід було очікувати, при середніх енергіях протонів результати розрахунків за формулою (54) добре узгоджуються з експериментальними даними [23, 24]. Отримана відповідність теоретичних і експериментальних даних досить переконливо говорить на користь розвинутої в даній праці теорії. При цьому розрахунок перерізів за допомогою формули (54) не набагато складніший, ніж в першому борнівському наближенні. Що ж стосується останнього, то воно як випливає із рис. 1, призводить до значень перерізів, які істотно перевищують експериментальні дані при середніх енергіях протонів. Різниця між двома варіантами теоретичних розрахунків прямо підтверджує важливість врахування спотворення хвильових функцій захоплюваного електрона як у вхідному, так і у вихідному каналах реакції.

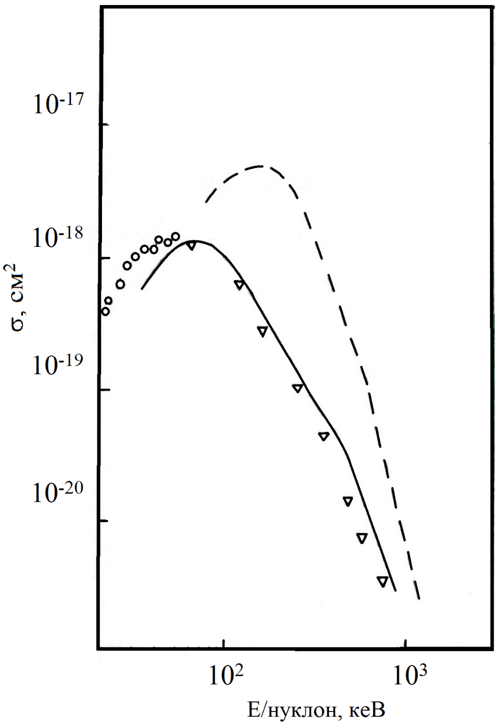

Рис. 1. Перерізи захоплення з іонізацією при зіткненні атома He з протоном. Теорія: суцільна крива – CDW-метод (формула (54)); штрихована крива – перше борнівське наближення. Експериментальні дані: ∇ – [23], o – [24].

Підбиваючи загальні підсумки, слід відмітити, що на основі CDW-методу з врахуванням кулонівських асимптотичних умов вдається отримати аналітичний вираз для амплітуди процесу захоплення з іонізацією, який містить два множники. Один з них описує процес електронного захоплення за допомогою прямого й двоступеневого (томасівського) механізмів перезарядки. Другий множник описує зв'язано-вільний перехід в іоні B^{+}. Задовільне узгодження розрахунків з експериментальними даними досягається тільки при врахуванні спотворень хвильових функцій захоплюваного електрона в обох каналах реакції. Якщо ж перерізи обчислюються без врахування спотворень хвильових функцій, що рівнозначно повному нехтуванню ефектами перерозсіяння, то між теоретичними і експериментальними перерізами виникають значні розбіжності.

Висновки

Розроблено шредінгерівський формалізм методу спотворених хвиль неперервного спектру для аналізу процесу захоплення з іонізацією в області великих та середніх енергій. Амплітуда реакції, отримана в першому порядку теорії збурень формалізму спотворених хвиль, містить два множники, один з яких рівний амплітуді розсіяння з перезарядкою і еквівалентний результату, який отримав Гаєт в рамках CDW-методу. Другий множник описує зв'язано-вільний перехід в іонізалишку мішені. Запропонований формалізм випробуваний на прикладі розрахунків перерізів захоплення з іонізацією при зіткненні атома гелію з протонами. Результати обчислень на проміжку 3-10^3 кеВ/нуклон перебувають в кількісній відповідності з експериментальними даними. Показано, що ефект кулонівського спотворення асимптотичної поведінки хвильових функцій у обох каналах реакції є досить істотним і його коректне врахування при розрахунках перерізів захоплення з іонізацією дозволяє описати основні характеристики спостережуваних явищ.

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1. Фортов В.Е., Шарков Б.Ю., Штокер Х. Научная программа в новом международном центре фундаментальной физики – Европейском центре антипротонных и ионных исследований FAIR // УФН. – 2012. – Т.182. – №6. – С. 621-644.
2. Лендьел В.И., Лазур В.Ю., Карбованец М.И., Янев Р.К. Введение в теорию атомных столкновений. – Львов: Высш. шк., 1989. – С. 192.
3. Меркурьев С.П., Фадеев Л.Д. Квантовая теория рассеяния для систем нескольких частиц. – Москва: Наука, 1985. – 399 с.
4. Lazur V.Yu., Khoma M.V. Distorted wave theories for one-and two-electron capture in fast atomic collisions // Advances in Quantum Chemistry, Elsevier Academic Press INC: Theory of heavy ion collision physics in hadron therapy. – 2013. – Vol. 65. – P. 363-405.

5. Лазур В.Ю., Машика Ю.Ю. Учет кулоновских эффектов в реакциях двухэлектронной перезарядки в рамках метода искаженных волн непрерывного спектра // ЖТФ. – 1991. – Т.61. – №10. – С. 25-37.
6. Belkić Dž., Lazur V.Yu. Sum rules for the bound-free transition form factors in hydrogenlike atoms // Zeitschrift für Physik A Hadrons and Nuclei. – 1984. – Vol. 319. – № 3. – P. 261-267.
7. Ковач А.П., Лазур В.Ю., Машика Ю.Ю. Сечение процесса с ионизацией при столкновениях атома гелия с протонами. Расчет методом искаженных волн непрерывного спектра // Известия вузов. Физика. – 1989. – №8. – С. 78-84.
8. Ковач А.П., Лазур В.Ю., Машика Ю.Ю. Расчет сечения процесса захвата с ионизацией при столкновениях атомов гелия с ядрами H^+ и He^{++} в области больших и средних энергий // Препринт КИЯИ-8719, Киев, 1987. – 29 с.
9. Карбованец М.И., Лазур В.Ю., Лендьел В.И. Одноэлектронный захват при столкновении многозарядных ионов с атомами водорода // ДАН УССР . – 1985. – Серия А. – С. 58-62.
10. Lazur V.Yu., Khoma M.V., Janev R.K. Asymptotic properties of the three-Coulomb-center problem eZ_1ZZ // Physical Review A. – 2006. – Vol. 73. – № 3. – P. 032723.
11. Lazur V.Yu., Khoma M.V., Janev R.K. Asymptotic theory of the one-and two-electron processes in slow collisions of atomic ions with diatomic molecules // Physical Review A. – 2009. – Vol. 80. – №3. – P. 032706.
12. Grozdanov T.P., Janev R.K., Lazur V.Yu. Asymptotic theory of the strongly asymmetric two-Coulomb-center problem // Physical Review A. – 1985. – Vol. 32. – №6. – P. 58-62.
13. Карбованец М.И., Лазур В.Ю., Чибисов М.И. Нерезонансный обмен двумя электронами // ЖЭТФ. – 1984. – Т. 86. – С. 84-93.
14. Lazur V.Yu., Mashika Yu.Yu., Yanev R.K., Grozdanov T.P. Quasicrossing of rydberg terms in the problem of two Coulomb centers with strongly differing charges // Theoretical and Mathematical Physics. – 1991. – Vol. 87. – № 1. – P. 401-410.
15. Горват П.П., Лазур В.Ю. Асимптотическое поведение амплитуды перезарядки при релятивистских скоростях и энергиях связи // ТМФ. – 1993. – Т.95. – № 3. – С. 451-477.
16. Горват П.П., Лазур В.Ю., Усков Д.Б. Асимптотическое поведение амплитуды перезарядки // ТМФ. – 1992. – Т. 91. – №1. – С. 66-82.
17. Gorzdanov T.P., Janev R.K., Lazur V.Yu. Two-electron exchange in slow ion-atom collisions // Physica Scripta. – 1984. – Vol. 32. – № 1. – P. 64-68.
18. Belkic Dz., Gayet R., Salin A. Electron capture in hight-energy ion–atom collisions // Phys. Rep. – 1979. – Vol. 56. – № 6. – P. 279–369.
19. Nordsieck A. Reduction of an integral in the theory of Brems-stranhlung // Phys. Rev. – 1954. – V.93. – №3. – P. 785-787.
20. Gayet R. Charge exchange scattering amplitude to first order of a three body expansion // J. Phys. B. – 1972. – Vol. 5. – № 3. – P. 483–491.
21. Афанасьев В.И., Басалаев А.А., Кисляков А.И. Состояние работ по диагностике быстрых α-частиц с использованием перезарядки на мегаэлектронвольтных пучках атомов // Препринт ФТИ РАН–1369, Л., 1989. – 37 с.
22. Crothers D.S.F., McCann J.F. Exact two-channel variational continuum distorted wave theory: results for symmetric resonant exchange // J. Phys. B. – 1985. – Vol. 18. – №14. – P. 2907-2913.
23. Shah M.B., Gilbody H.B. Single and double ionization of helium by H^+, He^{2+} and Li^{3+} ions // J.Phys.B. – 1985. – Vol. 18. – №6. – P. 899–913.
24. Афросимов В.В., Мамаев Ю.А., Панов М.Н., Федоренко Н.В. Исследование методом совпадений элементарных процессов изменения зарядовых состояний при взаимодействии протонов с атомами инертных газов // ЖТФ. – 1969. – Т. 39. – Вып. 1. – С. 159–165.

Стаття надійшла до редакції 16.12.2013

V.V. Aleksiy, V.Yu. Lazur, M.V. Khoma
Uzhhorod National University, 88000, Uzhhorod, Voloshin Str., 54

SCHRODINGER'S FORMALISM OF DISTORTED-WAVE METHOD IN THE PROBLEM OF SINGLE-ELECTRON CAPTURE WITH SIMULTANEOUS IONIZATION

Schrodinger's formalism of the distorted-wave method of continuous spectrum for analysis and calculation of the single-electron capture process with simultaneous ionization in high-energy ion-atom collisions has been developed. Based on CDW-method with the correct Coulomb asymptotic conditions in both channels of the reaction, an analytical expression for the capture process with ionization has been received. The expression is containing two factors, one of which describes the process of single-electron capture, and the second one – bound-free transitions in the ion-residual target. The results of calculations exchange cross sections with simultaneous ionization in collisions of the He atom with a proton are in good agreement with the available experimental data.

Keywords: single-electron charge exchange, ionization, distorted wave, interelectron interaction, amplitude.

В.В. Алексий, В.Ю. Лазур, М.В. Хома
Ужгородский национальный университет, 88000, Ужгород, ул. Волошина, 54

ШРЕДИНГЕРОВСКИЙ ФОРМАЛИЗМ МЕТОДА ИСКАЖЕННЫХ ВОЛН В ЗАДАЧЕ ОДНОЭЛЕКТРОН-НОГО ЗАХВАТА С ОДНОВРЕМЕННОЙ ИОНИЗАЦИЕЙ

Разработан шредингеровский формализм метода искаженных волн непрерывного спектра для анализа и расчета процесса одноэлектронного захвата с одновременной ионизацией в высокоэнергетических ион-атомных столкновениях. На основе CDW-метода с корректным учетом кулоновских асимптотических условий в обоих каналах реакции, получено аналитическое выражение для амплитуды процесса захвата с ионизацией, содержащее два множителя. Один из которых описывает процесс одноэлектронного захвата, а второй – связано-свободный переход в ионе-остатке мишени. Результаты расчетов сечений перезарядки с одновременной ионизацией при столкновении атома He с протоном хорошо согласуются с имеющимися эксперименталь-ными данными.

Ключевые слова: одноэлектронная перезарядка, ионизация, искаженная волна, межэлектронное взаимодействие, амплитуда.