

ПЕРШЕ БОРНІВСЬКЕ НАБЛИЖЕННЯ ІЗ СПОТВОРЕНИМИ ХВИЛЯМИ

В.Ю. Лазур, Л.М. Халус

Ужгородський державний університет, 88000, Ужгород, вул. Волошина, 32.

На основі трьохчастинкових інтегральних рівнянь Додда-Грайдера, модифікованих для кулонівських взаємодій, розвинуто метод врахування кулонівських ефектів в реакціях одноелектронної перезарядки. Амплітуда реакції отримана як перший член ітераційного ряду, що представляє розв'язок рівнянь Додда-Грайдера для квантово-механічного оператора трьохчастинкового розсіяння з перерозподілом. Показано, що в наближенні однократного розсіяння запропонований метод приводить до так званого кулон-борнівського наближення, в якому асимптотичний рух частинок у вхідному і вихідному каналах реакції перезарядки описується двочастинковими кулонівськими хвильовими функціями неперервного спектру.

Дослідження процесів захоплення електрона іонами $A^{Z_a^+}$ при зіткненні їх з атомами В:

$$A^{Z_a^+} + B \langle A^{(Z_a-1)^+} + B^+ \rangle \quad (1)$$

є актуальною областю фізики іон-атомних взаємодій, що представляє інтерес як для розвитку теорії зіткнень в цілому, так і для розв'язання багаточисельних прикладних задач.

Як правило, розрахунок реакцій перезарядки (1) ведеться на основі методу сильного зв'язку каналів [8], який, на жаль, потребує значної розрахункової роботи, що робить його непридатним для масових обчислень. Тому важливим завданням залишається розробка простих теоретичних підходів, які б враховували специфіку конкретної реакції, були б наочними і ефективними у використанні.

Починаючи з робіт [12, 13], в задачі про перезарядку почалося широке використання методів, що враховують ефекти багаторазового перерозсіяння електрону, в процесі (1). До останніх необхідно віднести різні варіанти методу спотворених хвиль, що використовуються при описанні симетричних зіткнень [5], та борнівське наближення сильного потенціалу (strong potential Born (SPB) approximation [9]), що враховує сильний парний потенціал взаємодії у всіх порядках теорії збурень, а слабкий потенціал – у першому порядку і, таким чином, використовується при

описанні несиметричних процесів. Зазначимо, однак, що всі ці наближення мають той очевидний недолік, що так само, як і стандартна нерелятивістська теорія розсіяння, використовують деякі припущення про короткодійний характер сил, які розглядаються. Варто наголосити, що таке припущення – не завжди обгрунтовано. На даний час вже з'явилися роботи, які підтверджують дану точку зору. В якості ілюстрації відзначимо роботу [10], в якій продемонстровано, що початкова версія SPB-наближення [9] не може бути надійною основою для побудови наближених теорій перезарядки, оскільки амплітуда розсіяння містить вклад від розбіжних членів. Причина вказаного недоліку – неакуратне врахування кулонівських ефектів у початковому і кінцевому станах реакції (1). Зазначена обставина підтверджує загальний результат роботи [6], згідно якого випадок далекодійних потенціалів вимагає особливого розгляду та модифікації різних підходів, розроблених для короткодійних потенціалів.

Підкреслимо те, що в наближенні одноразового розсіяння згадані вище теоретичні підходи відтворюють стандартні формули ОБК-наближення [5, 14]. Слід мати на увазі, що ОБК-наближення, власне кажучи, не є першим порядком теорії збурень за взаємодією. Ряд чисельних розрахунків, виконаних в області

застосовності теорії збурень, показує [5], що ОБК-наближення дає систематичне завищення перерізів порівняно з експериментальними даними і не дає правильного положення максимуму. Перший порядок теорії збурень (перше борнівське наближення (БІ)) з використанням в якості збурюючого потенціалу "повної" взаємодії (тобто взаємодії електрона з налітаючим ядром та міжядерного відштовхування) приводить до добре відомого результату Джексона-Шиффа [27]. Відомо, що правомірність використання борнівського наближення і взагалі теорії збурень для описання процесу перезарядки є неочевидною [5]. Якщо для збудження та іонізації можна вказати фізично і математично обгрунтовані умови використання теорії збурень, то для перезарядки це зробити не вдається. До цих пір ставиться під сумнів можливість використання перших членів борнівського ряду, тобто ітераційного розкладу рівняння Ліппмана-Швінгера, для знаходження асимптотики амплітуди розсіяння трьох частинок з перерозподілом при великих відносних швидкостях зіткнення. У ряді робіт [15, 16] показано, що в границі великих швидкостей другий борнівський член домінує над першим. Питання про асимптотичну поведінку перерізів перезарядки досліджувалось також в [12, 13] на основі рівнянь Фаддеева [2, 3]. Для резонансної перезарядки протона на атомі водню в основному стані результат [12, 13] має вигляд

$$\sigma_{B_2}(1s \rightarrow 1s) = (0,295 + 2^{-12} \cdot 5\pi\mathcal{G})\sigma_{OBR}(1s \rightarrow 1s),$$

$$\sigma_{OBR} = 2^{18} \cdot 5^{-1} \mathcal{G}^{-12} (\pi a_0^2), \quad (2)$$

де σ_{OBR} - переріз перезарядки в ОБК-наближенні, \mathcal{G} - відносна швидкість частинок, що стикаються в атомних одиницях, a_0 - борнівський радіус. Цей вираз повністю визначається першими двома членами ряду теорії збурень. Включення членів третього порядку приводить до невеликої зміни чисельного доданку в (2), а врахування членів четвертого порядку вже не повинно змінити результат. Таку зміну числового доданку було отримано в роботі [17], воно

відповідає заміні числа 0,295 у формулі (2) на 0,319. Ця обставина іноді трактується як вказівка на розбіжність ряду теорії збурень для процесів з перерозподілом частинок (див. [5] та наведені там посилання). Приймавши виклик, автор [18] привів детальне доведення збіжності борнівського ряду рівняння Ліппмана-Швінгера для трьох частинок при достатньо великих, але ще, звичайно, нерелятивістських енергіях. Він також дав оцінку енергії, вище якої згаданий ряд збігається. Слід відмітити, що при невисоких енергіях (тобто менших вказаної оцінки) питання про збіжність борнівського ряду в задачі розсіяння з перерозподілом трьох частинок до цих пір залишається відкритим.

Окрім загальної проблеми придатності борнівського наближення, існує питання про вибір збурюючого потенціалу. Неортогональність хвильових функцій початкового та кінцевого станів приводить до того, що різні форми потенціалу дають різні результати для перерізів перезарядки. Формальний вивід амплітуди перезарядки в першому борнівському наближенні, виходячи з загальних рівнянь теорії розсіяння, приводить до потенціалу взаємодії, що включає міжядерний потенціал. У найпростішій одноелектронній моделі збурюючий потенціал має вигляд:

$$U_{\alpha}^{(пв)} = -\frac{Z_{\alpha}}{s} + \frac{Z_{\alpha}Z_{\beta}}{R}, \quad (3)$$

де \vec{s} - радіус-вектор електрона відраховується від ядра іона $A^{Z_{\alpha^+}}$, R - міжядерна відстань. Перший доданок описує взаємодію активного електрона з іоном $A^{Z_{\alpha^+}}$ (з зарядом ядра Z_{α}), а другий - міжядерну взаємодію. Ми виписали так звану взаємодію у вхідному каналі. Наближення з потенціалом (3) називають іноді повним борнівським наближенням. Для прямої іонізації міжядерна взаємодія не дає внесок в амплітуду переходу через ортогональність початкової і кінцевої хвильових функцій. У випадку перезарядки другий доданок в (3) дає ненульовий внесок в амплітуду. Потенціал (3) використовувався в роботах [11, 19] для борнівського розрахунку повних перерізів реакцій перезарядки протона на атомі

водню, який на великих міжядерних відстанях не містить кулонівської взаємодії у вхідному і вихідному каналах. При чому було отримано добре узгодження з експериментом. Але спроби використати борнівське наближення з потенціалом (3) для розрахунку перерізів захоплення електрона ядрами H^+ і He^{2+} із внутрішньої оболонки багатоелектронних атомів (вуглецю, неону та аргону) привели до нефізичних результатів, які на порядок відрізняються від експерименту.

Досліджуючи проблему неортогональності, Бейтс показав, що ортогоналізація хвильових функцій початкового та кінцевого станів приводить до модифікації збурюючого потенціалу. Точніше кажучи, вказана ортогоналізація функцій веде ефективно до того, що внесок в амплітуду перезарядки від другого доданку в операторі переходу (3) обертається в нуль, а додатковий член, що при цьому з'являється подібний до міжядерної взаємодії. На великих відстанях цей доданок має вигляд Z_α / R . Результируючий збурюючий потенціал, що наближено враховує ортогоналізацію функцій, є таким:

$$U_\alpha = -\frac{Z_\alpha}{s} + \frac{Z_\alpha}{R}. \quad (4)$$

У роботах [21, 24] використання потенціалу (4) аргументувалось повним екрануванням електронами ядра атома В. Хоча ця аргументація викликає критику [20, 25], особливо для захоплення електрону з внутрішньої оболонки, тим не менш, результати розрахунків перерізів у борнівському наближенні з потенціалом (4) добре відповідають експериментальним даним, в тому числі і при захопленні електрона із К-оболонки багатоелектронного атома. У зв'язку з цим, важливо розглянути проблему вибору збурюючого потенціалу на основі послідовних мікроскопічних підходів хоча б для того, щоб зрозуміти, з яких причин для різних атомів і різних моделей U_α отримуються настільки різні результати. Один з таких підходів полягає у використанні апарату інтегральних рівнянь

задачі декількох тіл, модифікованих для кулонівської взаємодії.

Проведене вище коротке обговорення переваг та недоліків різних форм наближень теорії збурень першого порядку дозволяє зробити висновок, що проблема врахування впливу кулонівських сил на результат конкретних реакцій перезарядки досі не має переконливого розв'язку. У той же час методи фізики систем декількох заряджених тіл дозволяють коректно врахувати кулонівські ефекти і перевірити точність врахування кулонівських ефектів в рамках традиційних моделей наближення спотворених хвиль [5].

У даній роботі на основі інтегральних рівнянь Додда-Грайдера [4] для трьох частинок, модифікованих для кулонівських взаємодій, розвинуто метод врахування кулонівських ефектів в реакціях одноелектронної перезарядки (1). Амплітуда реакції отримана як перший член ітераційного ряду, що представляє розв'язок рівнянь Додда-Грайдера для квантово-механічного оператора розсіяння з перерозподілом в системі трьох кулонівських частинок. Показано, що в наближенні однократного розсіяння, запропонований метод приводить до так званого кулон-борнівського наближення, в якому асимптотичний рух частинок у вхідному і вихідному каналах реакції перезарядки описується двочастинковими кулонівськими хвильовими функціями розсіяння. При цьому короткодіюче поле, пов'язане з неповним екрануванням ядра атомними електронами, враховується у збурюючому потенціалі.

Розрахунок вкладу прямого одноступеневого механізму в переріз реакції (1) проведемо на основі першого борнівського наближення із спотвореними хвилями, в рамках якого амплітуда процесу (з використанням post- і prior-формалізмів) задається виразами:

$$T_{\alpha\beta}^-(DWB) = \langle \Phi_f^{\beta-} | \omega_\beta^- (G_\alpha - W_\alpha) \omega_\alpha^+ | \Phi_i^{\alpha+} \rangle = \langle \chi_f^{\beta-} | U_\alpha | \chi_i^{\alpha+} \rangle \quad (5)$$

$$T_{\alpha\beta}^+(DWB) = \langle \Phi_f^{\beta-} | \omega_\beta^- (G_\alpha - W_\alpha) \omega_\alpha^+ | \Phi_i^{\alpha+} \rangle \langle \dots | U_\alpha | \dots \rangle \quad (6)$$

Отримаємо явний вигляд диференціальних рівнянь для розрахунку спотворених хвиль у вхідному і вихідному каналах реакції (1). З цією метою подіємо на обидві частини рівнянь

$$|\chi_i^{\alpha+}\rangle = \omega_\alpha^+ |\Phi_i^{\alpha+}\rangle, \quad (7)$$

$$|\chi_f^{\beta-}\rangle = \omega_\beta^- |\Phi_f^{\beta-}\rangle. \quad (8)$$

операторами

$$(E - H_\alpha - W_\alpha + i\varepsilon) \quad i \quad (E - H_\beta - W_\beta - i\varepsilon)$$

відповідно і перейдемо до границі $\varepsilon \rightarrow 0^+$.

В результаті отримаємо рівняння:

$$(E - H_0 - V_\alpha - W_\alpha) |\chi_i^{\alpha+}\rangle = 0, \quad (9)$$

$$(E - H_0 - V_\beta - W_\beta) |\chi_f^{\beta-}\rangle = 0. \quad (10)$$

З урахуванням далекодіючої природи кулонівських взаємодій граничні умови для функцій $\chi_i^{\alpha+}$ і $\chi_f^{\beta-}$ мають наступний вигляд

$$\chi_i^{\alpha+} \xrightarrow{r_\alpha \rightarrow \infty} \Phi_i^{\alpha+}, \quad \chi_f^{\beta-} \xrightarrow{r_\beta \rightarrow \infty} \Phi_f^{\beta-}, \quad (11)$$

де кулонівські асимптотичні стани $\Phi_i^{\alpha+}$ і $\Phi_f^{\beta-}$ представляються у вигляді добутку:

$$|\Phi_i^\alpha\rangle = |\varphi_i(\vec{x}) \exp(i\vec{k}_\alpha \vec{r}_\alpha)\rangle, \quad (12)$$

$$|\Phi_f^\beta\rangle = |\varphi_f(\vec{s}) \exp(i\vec{k}_\beta \vec{r}_\beta)\rangle,$$

де $\varphi_i(\varphi_f)$ - хвильова функція зв'язаного стану пари

$$(\beta, \gamma)((\alpha, \gamma)), \quad \exp(i\vec{k}_\alpha \vec{r}_\alpha) \left(\exp(i\vec{k}_\beta \vec{r}_\beta) \right) -$$

плоска хвиля, що описує відносний рух вільних частинок $\alpha(\beta)$ та $(\beta, \gamma)((\alpha, \gamma))$ в початковому (кінцевому) стані з відносним імпульсом $\vec{k}_\alpha(\vec{k}_\beta)$.

Для подальшого розгляду важливим є явний вигляд каналних взаємодій \mathcal{G}_α і \mathcal{G}_β :

$$\mathcal{G}_\alpha = V_\beta + V_\gamma = -\frac{Z_\alpha}{s} + \frac{Z_\alpha Z_\beta}{R}, \quad (13)$$

$$\mathcal{G}_\beta = V_\alpha + V_\gamma = -\frac{Z_\beta}{x} + \frac{Z_\alpha Z_\beta}{R}.$$

Математично можна розглядати і більш загальний тип потенціалів парної взаємодії

$V_j (j = \alpha, \beta, \gamma)$, але кулонівський випадок найбільш цікавий, і ми ним обмежимося.

Вибір конкретних короткодійчих потенціалів w_α і w_β приводить до тієї чи іншої моделі борнівського наближення спотворених хвиль. В подальшому будемо використовувати симетричний вибір цих потенціалів, тобто визначимо w_α та w_β виразами:

$$w_\alpha = W_{\alpha d}^c - W_{\alpha d}, \quad w_\beta = W_{\beta d}^c - W_{\beta d}; \quad (14)$$

оскільки тільки при такому виборі спотворення у вхідному і в вихідному каналах реакції трактуються однаково. Використовуючи цей вибір w_α та w_β , розпишемо розбиття каналних взаємодій \mathcal{G}_α і \mathcal{G}_β на далекодіючу і короткодійчу частини. Отримаємо

$$W_\alpha = \frac{n_\alpha}{R} = \frac{Z_\alpha(Z_\beta - 1)}{R}, \quad (15)$$

$$U_\alpha = \mathcal{G}_\alpha - W_\alpha = \frac{Z_\alpha}{R} - \frac{Z_\alpha}{s}$$

$$W_\beta = \frac{n_\beta}{R} = \frac{Z_\beta(Z_\alpha - 1)}{R}, \quad (16)$$

$$U_\beta = \mathcal{G}_\beta - W_\beta = \frac{Z_\beta}{R} - \frac{Z_\beta}{x}.$$

При такому розбитті рівняння (9), (10) приймають вигляд:

$$\left(E + \frac{1}{2\mu_\alpha} \Delta_{\vec{r}_\alpha} + \frac{1}{2a} \Delta_{\vec{x}} + \frac{Z_\beta}{x} - \frac{n_\alpha}{R} \right) \chi_i^{\alpha+} = 0, \quad (17)$$

$$\left(E + \frac{1}{2\mu_\beta} \Delta_{\vec{r}_\beta} + \frac{1}{2b} \Delta_{\vec{s}} + \frac{Z_\alpha}{s} - \frac{n_\beta}{R} \right) \chi_f^{\beta-} = 0. \quad (18)$$

Основні математичні труднощі, що виникають при розв'язанні рівнянь (17) ((18)), пов'язані з тим, що наявні в цьому рівнянні спотворюючий потенціал W_α (W_β) і оператор Лапласа $\Delta_{\vec{r}_\alpha}$ ($\Delta_{\vec{r}_\beta}$) залежать від різних відносних змінних, які використовуються в задачі. Зв'язок між ними встановлюється співвідношеннями:

$$\vec{r}_\alpha = \vec{R} - (a/m_\beta)\vec{x}, \quad \vec{r}_\beta = \vec{R} + (b/m_\alpha)\vec{s}. \quad (19)$$

Те, що відношення маси електрона до мас частинок α і β є малим - сприятлива

обставина, яка дозволяє розв'язати рівняння (17) і (18) у термінах спеціальних функцій. У відповідності з цією обставиною доданками, пропорційними a/m_β і b/m_α в координатах \vec{r}_α і \vec{r}_β у формулах (19), можна знехтувати ($a/m_\beta, b/m_\alpha \ll 1$):

$$\vec{r}_\alpha = \vec{R}, \quad \vec{r}_\beta = \vec{R}. \quad (20)$$

При заміні $R \rightarrow r_\alpha$ ($R \rightarrow r_\beta$) змінні в рівнянні (17) ((18)) відокремлюються в базисі $\{\vec{x}, \vec{r}_\alpha\}$ ($\{\vec{s}, \vec{r}_\beta\}$), що відображає зображення для $|\chi_i^{\alpha+}\rangle$ ($|\chi_j^{\beta-}\rangle$) у факторизованому вигляді:

$$|\chi_i^{\alpha+}\rangle = |\varphi_i(\vec{x})F_\alpha^+(\vec{r}_\alpha)\rangle, \quad |\chi_j^{\beta-}\rangle = |\varphi_j(\vec{s})F_\beta^-(\vec{r}_\beta)\rangle, \quad (21)$$

де F_α^+ (F_β^-) - кулонівська хвильова функція неперервного спектру, яка описує

відносний рух частинок α (β) і центра мас пари (β, γ) ((α, γ)) в початковому (кінцевому) стані з відносною кінетичною енергією

$$k_\alpha^2 / 2\mu_\alpha \quad (k_\beta^2 / 2\mu_\beta):$$

$$F_\alpha^+(\vec{r}_\alpha) = N^{(+)}(\nu_\alpha) \exp(i\vec{k}_\alpha \vec{r}_\alpha) F(-i\nu_\alpha, 1, ik_\alpha \xi_\alpha), \quad (22)$$

$$F_\beta^-(\vec{r}_\beta) = N^{(-)}(\nu_\beta) \exp(i\vec{k}_\beta \vec{r}_\beta) F(i\nu_\beta, 1, -ik_\beta \xi_\beta), \quad (23)$$

$$N^{(\pm)}(\nu_j) = \Gamma(1 \pm i\nu_j) \exp(-\pi\nu_j / 2), \quad j = \alpha, \beta. \quad (24)$$

Тут $F(a, b, x)$ - вироджена гіпергеометрична функція.

Підставляючи явні вирази для $\chi_i^{\alpha+}$, $\chi_j^{\beta-}$ і $U_{\alpha, \beta}$ в (5) і (6), отримуємо:

$$T_{\alpha\beta}^-(DWB) = \int \int d\vec{r}_\alpha d\vec{x} \varphi_f^*(\vec{s}) \left[\frac{Z_\alpha}{R} - \frac{Z_\alpha}{s} \right] \varphi_i(\vec{x}) e^{i\vec{k}_\alpha \vec{r}_\alpha - i\vec{k}_\beta \vec{r}_\beta} L_{\alpha\beta}(\vec{r}_\alpha, \vec{r}_\beta), \quad (25)$$

$$T_{\alpha\beta}^+(DWB) = \int \int d\vec{r}_\beta d\vec{s} \varphi_f^*(\vec{s}) \left[\frac{Z_\beta}{R} - \frac{Z_\beta}{x} \right] \varphi_i(\vec{x}) e^{i\vec{k}_\alpha \vec{r}_\alpha - i\vec{k}_\beta \vec{r}_\beta} L_{\alpha\beta}(\vec{r}_\alpha, \vec{r}_\beta), \quad (26)$$

де використано позначення

$$L_{\alpha\beta}(\vec{r}_\alpha, \vec{r}_\beta) = N^{(+)}(\nu_\alpha) N^{(-)}(\nu_\beta) F(-i\nu_\alpha, 1, ik_\alpha \xi_\alpha) F(i\nu_\beta, 1, -ik_\beta \xi_\beta). \quad (27)$$

Враховуючи, що $m_\gamma \ll m_\alpha \approx m_\beta$ (m_γ - маса електрона), для показника експоненти в (25) і (26) легко отримати наступні кінематичні співвідношення:

$$\vec{k}_\alpha \vec{r}_\alpha - \vec{k}_\beta \vec{r}_\beta = -a\vec{\partial}\vec{x} - \vec{\alpha}\vec{R} = -b\vec{\partial}\vec{s} + \vec{\beta}\vec{R} = \vec{\beta}\vec{x} + \vec{\alpha}\vec{s} \quad (28)$$

$$\vec{\alpha} = (b/m_\gamma)\vec{k}_\beta - \vec{k}_\alpha = \alpha_z \hat{\mathcal{G}} + \vec{\eta}, \quad (29a)$$

$$\alpha_z = -\mathcal{G}/2 - \Delta E/\mathcal{G}$$

$$\vec{\beta} = (a/m_\gamma)\vec{k}_\alpha - \vec{k}_\beta = \beta_z \hat{\mathcal{G}} - \vec{\eta}, \quad (29b)$$

$$\beta_z = -\mathcal{G}/2 + \Delta E/\mathcal{G}$$

$$\vec{\alpha} + \vec{\beta} + \vec{\mathcal{G}} = 0, \quad \Delta E = E_f - E_i, \quad \vec{\mathcal{G}}' \equiv \vec{\mathcal{G}}, \quad (29b)$$

$$\vec{\eta} = (\eta \cos \Phi_{\vec{\eta}}, \eta \sin \Phi_{\vec{\eta}}, \mathbf{0}),$$

$$\eta^2 = 4\mu_\alpha \mu_\beta \mathcal{G}^2 \sin^2 \frac{\theta}{2}, \quad (29g)$$

де $\vec{\eta}$ - ортогональна відносно вектора $\vec{\mathcal{G}}$ компонента переданого імпульсу ($\vec{\eta} \cdot \vec{\mathcal{G}} = 0$), θ - кут розсіяння в системі центра інерції (кут між векторами \vec{k}_α і \vec{k}_β).

При цьому амплітуда реакції $T_{\alpha\beta}^\pm(DWB)$ з урахуванням (20) має вигляд:

$$T_{\alpha\beta}^-(DWB) = N_1 Z_\alpha \int \int d\vec{R} d\vec{s} \varphi_f^*(\vec{s}) \left(\frac{\mathbf{1}}{R} - \frac{\mathbf{1}}{s} \right) \varphi_i(\vec{x}) e^{-ib\vec{g}\vec{s} + i\vec{\beta}\vec{R}} \cdot F(\vec{R}), \quad (30)$$

$$T_{\alpha\beta}^+(DWB) = N_1 Z_\beta \int \int d\vec{R} d\vec{x} \varphi_f^*(\vec{s}) \left(\frac{\mathbf{1}}{R} - \frac{\mathbf{1}}{x} \right) \varphi_i(\vec{x}) e^{-ia\vec{g}\vec{x} - i\vec{\alpha}\vec{R}} \cdot F(\vec{R}), \quad (31)$$

де

$$F(\vec{R}) = F(-iv_\alpha, \mathbf{1}, ik_\alpha R - i\vec{k}_\alpha \vec{R}) F(-iv_\beta, \mathbf{1}, ik_\beta R + i\vec{k}_\beta \vec{R}), \quad (32)$$

$$N_1 = N^{(+)}(v_\alpha) N^{(+)}(v_\beta) = \Gamma(\mathbf{1} + iv_\alpha) \Gamma(\mathbf{1} + iv_\beta) \exp\left[-\frac{\pi}{2}(v_\alpha + v_\beta)\right]. \quad (33)$$

В подальшому ми вважаємо, що в початковому і кінцевому станах атоми мають нульовий орбітальний момент і відповідно до цього нормовані хвильові функції і енергії визначаються виразами:

$$\begin{aligned} \varphi_i(\vec{x}) &= Z_\beta^{3/2} \pi^{-1/2} e^{-Z_\beta x}, \\ \varphi_f(\vec{s}) &= Z_\alpha^{3/2} \pi^{-1/2} e^{-Z_\alpha s}, \\ E_{i,f} &= -Z_{\beta,\alpha}^2 / 2. \end{aligned} \quad (34)$$

Перейдемо до обчислення інтегралів, які фігурують у формулах (30) та (31) для амплітуди перезарядки. Покажемо, як це можна зробити на прикладі $T_{\alpha\beta}^-(DWB)$. У формулу (30) входять інтеграли типу амплітуди у ріог-формалізмі:

$$K^{(-)}(Z_\alpha, Z_\beta) = \int d\vec{R} R^{-1} \exp(i\vec{\beta}\vec{R}) F(\vec{R}) I_{\alpha\beta}^{(-)}(\vec{R}), \quad (35)$$

де

$$I_{\alpha\beta}^{(-)}(\vec{R}) = \int d\vec{s} (xs)^{-1} \exp(-Z_\alpha s - Z_\beta x - ib\vec{g}\vec{s}). \quad (36)$$

Зображаючи $\exp(-Z_\beta x)/x$ інтегралом Фур'є

$$\frac{\exp(-Z_\beta x)}{x} = \frac{1}{2\pi^2} \int d\vec{q} \frac{\exp(-i\vec{q}\vec{x})}{q^2 + Z_\beta^2}, \quad (37)$$

де $\vec{x} = \vec{s} + \vec{R}$, проінтегруємо в (36) по \vec{s} . Отримаємо

$$I_{\alpha\beta}^{(-)}(\vec{R}) = \frac{2}{\pi b^2} \int d\vec{q} \frac{\exp(-i\vec{q}\vec{R})}{(q^2 + Z_\beta^2) \left[|\vec{q} + \vec{g}|^2 + (Z_\alpha/b)^2 \right]} \quad (38)$$

Скориставшись відомою тотожністю

$$\frac{1}{\mathcal{G}u} = \int_0^1 dt [ut + (1-t)\mathcal{G}]^{-2}, \quad (39)$$

перетворимо $I_{\alpha\beta}^{(-)}(\vec{R})$ до вигляду

$$I_{\alpha\beta}^{(-)}(\vec{R}) = \frac{2}{\pi b^2} \int_0^1 dt \int d\vec{q} \frac{\exp(-i\vec{q}\vec{R})}{\left[|\vec{q} - \vec{Q}|^2 + \Delta_{(-)}^2 \right]^2}, \quad (40)$$

де ми ввели допоміжний вектор

$$\begin{aligned} \vec{Q} &= (t-1)\vec{g}, \\ \Delta_{(-)}^2 &= \mathcal{G}^2 t(1-t) + tZ_\beta^2 + (1-t)(Z_\alpha/b)^2 \end{aligned} \quad (41)$$

При обчисленні інтегралу по \vec{q} в (40) використаємо теорему про лишки. Елементарні обчислення дають:

$$I_{\alpha\beta}^{(-)}(\vec{R}) = 2\pi b^{-2} \int_0^1 dt [\Delta_{(-)}]^{-1} \exp(-i\vec{Q}\vec{R} - R\Delta_{(-)}). \quad (42)$$

Звернемося тепер до інтегрування по \vec{R} в (35), після підстановки туди виразу (42) для $I_{\alpha\beta}^{(-)}(\vec{R})$. Найбільш простий і загальний метод обчислення інтегралів типу (35), розроблений Нордсіком [23], полягає у представленні кожної із вироджених гіпергеометричних функцій їх виразами у вигляді контурних інтегралів. Результат для інтегралу по \vec{R} в (35), має наступний вигляд:

$$K^{(-)}(\Delta_{(-)}(Z_\alpha, Z_\beta)) = 2\pi b^{-2} \int_0^1 dt \mathcal{G}^{(-)}(\Delta_{(-)}(Z_\alpha, Z_\beta)), \quad (43)$$

де

$$\wp^{(-)}(\Delta_{(-)}(Z_\alpha, Z_\beta)) = \frac{4\pi}{\Delta_{(-)}^2 + p^2} \left[1 - 2\mu_\alpha \wp \frac{p_z + i\Delta_{(-)}}{p^2 + \Delta_{(-)}^2} \right]^{i\nu_\alpha} \times (44)$$

$$\times \left[1 + 2\mu_\beta \wp \frac{p_z - i\Delta_{(-)}}{p^2 + \Delta_{(-)}^2} \right]^{i\nu_\beta} F(-i\nu_\beta, -i\nu_\alpha, 1, \tau_{(-)}),$$

$$\tau_{(-)} = \frac{4\mu_\alpha \mu_\beta p_\perp^2 \wp^2}{\left[p^2 + \Delta_{(-)}^2 - 2\mu_\alpha \wp (i\Delta_{(-)} + p_z) \right] \left[p^2 + \Delta_{(-)}^2 - 2\mu_\beta \wp (i\Delta_{(-)} - p_z) \right]} \quad (45)$$

Тут проведено розбиття вектора $\vec{p} = \vec{\beta} - \vec{Q}$ на поздовжню p_z та поперечну \vec{p}_\perp складові відносно вектора \vec{Q} :

$$\vec{p} = (p_z, \vec{p}_\perp), (\vec{p}_\perp \cdot \vec{Q}) = 0, \quad (46)$$

$$p_z = \vec{p} \hat{Q} = \wp \left(\frac{1}{2} - t \right) + \frac{\Delta E}{\wp} \vec{p}_\perp = \vec{\eta}$$

Використовуючи отриману формулу (43), амплітуду реакції $T_{\alpha\beta}^{(-)}(DWB)$ можна записати у вигляді однократного інтегралу

$$T_{\alpha\beta}^{(-)}(DWB) = Z_\alpha N_1 N_2^{(-)} \int_0^1 dt \frac{\partial}{\partial Z_\beta} \left(-\frac{1}{\Delta_{(-)}} \frac{\partial}{\partial \Delta_{(-)}} + \frac{\partial}{\partial Z_\alpha} \frac{1}{\Delta_{(-)}} \right) \wp^{(-)}(\Delta_{(-)}(Z_\alpha, Z_\beta)), \quad (47)$$

де

$$N_2^{(-)} = (2\pi/b^2) (Z_\beta^3/\pi)^{1/2} (Z_\alpha^3/\pi)^{1/2}. \quad (48)$$

Тепер потрібно спочатку виконати у (47) диференціювання по параметрам Z_α , Z_β і $\Delta_{(-)}$ і на кінцевому етапі обчислень

по t . Формальний перехід від (43) до кінцевого виразу для $T_{\alpha\beta}^{(-)}(DWB)$ здійснюється шляхом диференціювання $K^{(-)}(\Delta_{(-)}(Z_\alpha, Z_\beta))$ по зарядам Z_α , Z_β і параметру $\Delta_{(-)}$. Строго цю процедуру слід виконувати за такою схемою. Будемо тимчасово вважати, що параметри ν_α і ν_β хвильових функцій (див. (32)-(33)) не залежать від Z_α і Z_β . Інакше кажучи, вся залежність амплітуди $T_{\alpha\beta}^{(-)}(DWB)$ від зарядів Z_α і Z_β визначається тільки виразами (див. (34)) для внутрішніх хвильових функцій атома та іона. З огляду на такі допущення, амплітуду реакції $T_{\alpha\beta}^{(-)}(DWB)$ можна зобразити у вигляді:

провести заміни $\nu_\alpha \rightarrow Z_\alpha(Z_\beta - 1)/\wp$ і $\nu_\beta \rightarrow Z_\beta(Z_\alpha - 1)/\wp$.

Аналогічним чином визначається і амплітуда реакції $T_{\alpha\beta}^{+}(DWB)$ в post-формалізмі. Ми не будемо повторювати вже відомі нам обчислення. Запишемо зразу кінцевий результат:

$$T_{\alpha\beta}^{+}(DWB) = Z_\beta N_1 N_2^{(+)} \int_0^1 dt \frac{\partial}{\partial Z_\alpha} \left(-\frac{1}{\Delta_{(+)}} \frac{\partial}{\partial \Delta_{(+)}} + \frac{\partial}{\partial Z_\beta} \frac{1}{\Delta_{(+)}} \right) \wp^{(+)}(\Delta_{(+)}(Z_\alpha, Z_\beta)). \quad (49)$$

Тут ми використали позначення:

$$\wp^{(+)}(\Delta_{(+)}(Z_\alpha, Z_\beta)) = \frac{4\pi}{\Delta_{(+)}^2 + q^2} \left[1 - 2\mu_\alpha \wp \frac{q_z + i\Delta_{(+)}}{q^2 + \Delta_{(+)}^2} \right]^{i\nu_\alpha} \times (50)$$

$$\times \left[1 + 2\mu_\beta \wp \frac{q_z - i\Delta_{(+)}}{q^2 + \Delta_{(+)}^2} \right]^{i\nu_\beta} F(-i\nu_\beta, -i\nu_\alpha, 1, \tau_{(+)})$$

$$\tau_{(+)} = \frac{4\mu_\alpha \mu_\beta q_\perp^2 \wp^2}{\left[q^2 + \Delta_{(+)}^2 - 2\mu_\alpha \wp (i\Delta_{(+)} + q_z) \right] \left[q^2 + \Delta_{(+)}^2 - 2\mu_\beta \wp (i\Delta_{(+)} - q_z) \right]}, \quad (51)$$

$$\Delta_{(+)}^2 = \wp^2 t(1-t) + tZ_\alpha^2 + (1-t)(Z_\beta/a)^2, \quad \vec{q} = (q_z, \vec{q}_\perp), \quad (\vec{q}_\perp \cdot \vec{Q}) = 0,$$

$$q_z = (t - \frac{1}{2})\vartheta + \frac{\Delta E}{\vartheta}; \quad \bar{q}_\perp = -\bar{\eta}, \quad N_2^{(+)} = (2\pi/a^2)(Z_\beta^3/\pi)^{1/2}(Z_\alpha^3/\pi)^{1/2}. \quad (52)$$

Аналогічним чином, тобто диференціюванням по зарядам Z_α і Z_β можна врахувати і поліноміальну структуру передекспоненційних множників хвильових функцій збуджених станів водневоподібного атома чи іона.

Порівняємо запропонований підхід до визначення амплітуди перезарядки в наближенні одноразового розсіяння з традиційними наближеннями теорії збурень першого порядку. Для цього попередньо обговоримо асимптотичні властивості збуджуючих потенціалів U_α і U_β , як функцій R . Використовуючи формулу (2) із роботи [22], виразимо вектор $\vec{s}(\vec{x})$ через \vec{R} і $\vec{x}(\vec{s})$ і розкладемо кулонівський потенціал $V_\beta = -Z_\beta/s$ ($V_\alpha = -Z_\alpha/x$) в ряд за степенями малого параметру $\frac{x}{R}$ ($\frac{s}{R}$). В

результаті отримаємо асимптотичні представлення

$$V_\beta \cong -\frac{Z_\beta}{R} - \frac{Z_\beta(\hat{R}\vec{x})}{R^2} + \dots, \\ V_\alpha \cong -\frac{Z_\alpha}{R} - \frac{Z_\alpha(\hat{R}\vec{s})}{R^2} + \dots; \quad (53)$$

$R \rightarrow \infty$.

$$T_{\alpha\beta}^{(B1)}(\vec{\eta}) = \iint d\vec{r}_\alpha d\vec{x} \varphi_j^*(\vec{s}) \left[\frac{Z_\alpha Z_\beta}{R} - \frac{Z_\alpha}{s} \right] \varphi_i(\vec{x}) \exp(i\vec{k}_\alpha \vec{r}_\alpha - i\vec{k}_\beta \vec{r}_\beta) \quad (55)$$

яка визначає прямий одноступеневий механізм реакції (1) в рамках звичайного першого борнівського наближення (так зване наближення Джексона-Шиффа (JS) [11]). У випадку резонансної перезарядки протона на атомі водню, коли $Z_\alpha = Z_\beta = 1$, кулонівські хвильові функції $F_{\alpha,\beta}^\pm$ зводяться до плоских хвиль і формули (25) і (55) збігаються. Неспівпадання цих формул при $Z_{\alpha,\beta} \neq 1$ обумовлене тим, що у звичайному борнівському наближенні

Звідси випливає, що коли R прямує до нескінченності, потенціали U_α (U_β) прямують до нуля як R^{-2} :

$$U_\alpha = \frac{Z_\alpha}{R} - \frac{Z_\alpha}{s} \rightarrow -Z_\alpha O(R^{-2}), \\ U_\beta = \frac{Z_\beta}{R} - \frac{Z_\beta}{x} \rightarrow -Z_\beta O(R^{-2}). \quad (54)$$

Це дає підставу вважати потенціали U_α і U_β короткодійними.

Проведений розгляд вказує на наявність своєрідної кореляції між поведінкою збуджуючих потенціалів U_α і U_β на великих відстанях R і асимптотичними властивостями спотворених хвиль $\chi_i^{\alpha+}$ і $\chi_f^{\beta-}$. Ця кореляція призводить до короткодійного характеру збурення U_α (U_β) при коректній поведінці (11) функцій $\chi_i^{\alpha+}$ ($\chi_f^{\beta-}$) на нескінченності.

Якщо в (25) замінити $F_{\alpha,\beta}^\pm$ плоскими хвилями $\exp(i\vec{k}_{\alpha,\beta} \vec{r}_{\alpha,\beta})$, а оператор переходу U_α -каналюю взаємодією ϑ_α , то отримаємо амплітуду

кулонівська взаємодія у початковому і кінцевому станах не враховується. Тому каналні хвильові функції не задовольняють кулонівським граничним умовам задачі про розсіяння. Таким чином, вираз (25) можна розглядати як коректне узагальнення борнівського наближення з урахуванням кулонівського спотворення асимптотичної поведінки хвильових функцій в обох каналах реакції перезарядки. Це узагальнення борнівського наближення, яке ми будемо називати першим кулон-борнівським (КБ1) наближенням,

використовуватиметься в наступних публікаціях нижче при аналізі конкретних реакцій перезарядки. При достатньо великих енергіях налітаючих іонів кулонівські хвильові функції незначно відрізняються від плоских хвиль і КБ1-наближення практично збігається з борнівським [21, 24]. При малих і проміжних енергіях необхідно враховувати ефекти далекодіючого кулонівського поля в процесах перезарядки, які суттєво впливають на поведінку перерізів у цій області.

На заключення слід ще раз підкреслити, що при використанні КБ1-наближення ми нехтуємо ефектами перерозсіяння, тобто не враховуємо можливі багатоступінчаті механізми реакції. Із зростанням енергії налітаючих частинок зростає роль двоступінчатих переходів через проміжний стан, який знаходиться у дискретному або неперервному спектрах [26]. Кількісне описання таких переходів стає можливим лише при достатньо повному включенні взаємодії після зіткнення у хвильовій функції кінцевого стану, що еквівалентно рівнозначно врахуванню ефектів багаторазового перерозсіяння електрона на іоні-залишкові мішені.

1. Belkic Dz., Lazur V. Yu. Sum rules for the bound-free transition form factors in hydrogenlike atoms// *Z. f.Phys.A.*-1984.-vol.319,N 1.-p.261-267.
2. Фаддеев Л.Д. Теория рассеяния для системы из трех частиц// *ЖЭТФ.*-1960.-т.39, вып.5.-с.1459-1467.
3. Фаддеев Л.Д. Математические вопросы квантовой теории рассеяния для системы трех частиц// *Тр.МИАН СССР.*- М.: Наука, 1963.- т.69.- 122с.
4. Dodd L.R. Greider K.R. Rigorous solution of three-body scattering processes in the distorted-wave formalism// *Phys.Rev.*-1966.- vol.146. №3.-p.675-686.
5. Belkic Dz., Gayet R., Salin A. Electron capture in high-energy ion-atom collisions // *Phys.Rep.*-(1979)-vol.56, №6.-p.279-369.
6. Merkuriev S.P. On the three-body Coulomb scattering problem // *Ann.Phys.*-(1980)-vol.130, N2.-p.395-426.
7. Greider K.R., Dodd L.R. Divergence of the distorted-wave Born series for rearrangement scattering// *Phys.Rev.*-(1966)-vol.146, N3.-p.671-675.
8. Л.П. Пресняков, В.П. Шевелько, Р.К. Янев. Элементарные процессы с участием многозарядных ионов.-М.: Энергоатомиздат, (1986) – 200с.
9. Macek J., Alston S. Theory of electron capture from a hydrogenlike ion by a bare ion// *Phys. Rev. A.*- 1982. – vol. 26, N1. – p. 250-271.
10. Dewangan D.P., Eichler J. Boundary conditions and the strong potential Born approximation for electron capture// *J. Phys. B.* – 1985. –vol. 18, N 8. –p. L65-L69.
11. Jackson J., Schiff H. Electron capture by protons passings through hydrogen// *Phys. Rev.* – 1953. –vol. 89, N2. –p. 359-365.
12. Потапов В.С. , Бродский А.М.,Толмачев В.В. Асимптотическое поведение сечения перезарядки в низших порядках теории возмущений // *Вестн. МГУ.*- 1969. № 4. – с. 52-59.
13. Бродский А.М., Потапов В.С. , Асимптотика амплитуды рассеяния в трехчастичной задаче // *ЯФ.*-1970.-т.12,№6. – с.1163-1171.
14. Oppenheimer J. On the quantum theory of the capture of electrons // *Phys. Rev.* – 1928. – vol. 31 N 3.- p. 349-356.
15. Карнаков Б.М. Асимптотическое поведение сечений перезарядки // *ЖЭТФ.* – 1982. – т. 82, вып. 5. – с. 1407-1421.
16. Shakeshaft R. Inner-shell electron capture by a swift bare ion: Second Born effects// *Phys. Rev. Lett.* – 1980. – vol. 44, N 2. – p.442-445/
17. 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. – vol. 17, N 4. – p. 1011-1017.
18. Потапов В.С. О сходимости борновского ряда в трехчастичной задаче рассеяния при больших энергиях // *ТМФ.* – 1980. – т. 43, № 1. –с. 65-77.
19. Bates D., Dalgarno A. Electron capture. I. Resonance capture from hydrogen atoms by fast protons// *Proc. Phys. Soc. A.* – 1952.-vol.65, N 10. – p. 919-925.
20. Lin C., Soong S., Tunnell L. Two-state atomic expansion methods for electron capture from multielectron atoms by fast protons// *Phys. Rev. A.* – 1978. – vol. 17, N 5. – p. 1616-1619.
21. Halpern A. Inner-shell charge transfer in a distorted-wave eikonal approximation using the asymptotic interaction // *Phys.*

- Rev. A. – 1977. - vol. 15, N 2. – p. 619-630.
22. Лазур В.Ю., Халус Л.М. “Інтегральні рівняння Додда-Грайдера в задачі про одноелектронну перезарядку”, Вісник Ужгородського Університету, Серія Фізика №4, 1999, ст 86-93.
23. Nordsieck A. Reduction of an integral in the theory of Bremsstrahlung //Phys.Rev. –1954. – vol. 93, N 3. – p. 785-787.
24. Omidvar K., Golden J., McGuire J., Weaver L. Single-electron Born approximation for charge transfer from multielectron atoms to protons //Phys.Rev. A. –1976. – vol. 13, N1. – p. 500-503.
25. Lin C., Soong S. Differential cross sections for electron capture in fast proton-multielectron atom collisions // Phys.Rev. A. –1978.- vol. 17, N 2. – p. 499-505.
26. Shakeshaft R., Spruch L. Mechanisms for charge transfer (or for the capture of any light particle) at asymptotically high impact velocities // Rev. Mod. Phys. – 1979. – vol. 51, N2. – p. 369-405.
27. Macek J., Shakeshaft R. Second Born approximation with the Coulomb Green's function: Electron capture from hydrogen ion by a bare ion // Phys.Rev. A. –1980. – vol. 22, N4. – p. 1441-1446.

FIRST BORN APPROXIMATION WITH DISTORTED WAVES

V.Yu. Lazur, L.M. Khalus

Uzhgorod State University, 88000, Uzhgorod, Voloshin Str. 32.

On the basis of three-particle Dodd-Greider's integral equation modified for Coulonic interaction, method of accounts the Coulonic effects at the reaction of one-electron charge-exchange is elaborated. Reaction amplitude is derived as first member of iteration row that represents a solution of Dodd-Greider equation for quantum-mechanics operator for three-particle scattering with redistribution. At the framework of one-step scattering approximation, as it was shown, the offered method leads to the so-called Coulon-Born approximation, which asymptotic motion of particle at income and outgoing channels of recharge reaction describes by two-particle Coulonic wave-function of continues spectra.



Володимир Юрійович Лазур – завідувач кафедри теоретичної фізики, професор

Народився в 1950 р. Закінчив УЖДУ в 1972 р. Кандидат фіз.-мат. наук з 1977р. Доктор - з 1993 р.



Людмила Михайлівна Халус – аспірант кафедри теоретичної фізики

Народилася в 1974р. Закінчила УЖДУ в 1996 р.