01; 02

УЧЕТ КУЛОНОВСКИХ ЭФФЕКТОВ В РЕАКЦИЯХ ДВУХЭЛЕКТРОННОЙ ПЕРЕЗАРЯДКИ В РАМКАХ МЕТОДА ИСКАЖЕННЫХ ВОЛН НЕПРЕРЫВНОГО СПЕКТРА

В. Ю. Лазур, Ю. Ю. Машика

На основе интегральных уравнений Додда—Грайдера для оператора перехода с перестройкой разработан шредингеровский формализм метода искаженных волн непрерывного спектра для описания процесса двухэлектронной перезарядки при средних и больших скоростях относительного движения. Привлекательной стороной предлагаемого формализма является последовательное рассмотрение асимптотики волновых функций в обоих каналах реакции, учитывающее дальнодействующую природу кулоновских взаимодействий. Применение общей теории иллюстрируется на примере реакции двухэлектронной перезарядки при столкновении атомов гелия с α-частицами.

Введение

В последние годы уделяется большое внимание исследованию элементарных процессов с участием многозарядных ионов, включая ядра, полностью лишенные электронной оболочки [1]. Интерес к многозарядным ионам вызван прежде всего возможностью осуществления малоисследованного класса процессов. К ним относятся процессы обмена двумя, тремя и более электронами, которые специфичны только для ионов высоких зарядовых состояний. В экспериментальных исследованиях группы Зальцборна (ФРГ) [2] наблюдался обмен даже четырьмя электронами при столкновениях атомов и ионов аргона с зарядом $z=7$. Измеренные сечения в принципе не слишком малы по сравнению с одноэлектронными. В некоторых случаях двухэлектронный обмен является преобладающим, подавляя одноэлектронный. Такой случай для пары $C^{4+}+He$ изучался теоретически [3, 4] и экспериментально [5].

В большинстве теоретических работ (см., например, [4] и указанную там литературу), посвященных изучению процесса двухэлектронной перезарядки, используется адиабатическое приближение, справедливое при малых энергиях столкновений. В работах [6–8] исследована промежуточная область энергий, которая требует учета эффекта переноса импульса электронов, существенно усложняющего расчеты. Олсон и сотрудники [6] выполнили численные расчеты на основе метода статистических испытаний классических траекторий (метод Монте-Карло). Авторы работы [7] при развитии соответствующей теории пошли по пути обобщения одноэлектронного подхода: полная вероятность двухэлектронного конфигурационного перехода представляется в виде произведения вероятностей одноэлектронных переходов. Строго обосновать справедливость такого рассмотрения сложно. Можно только указать, что используемое в [7] приближение независимых электронов применимо при определенных ограничениях на энергии падающих частиц. Эти энергии должны значительно превышать потенциальную энергию взаимного расталкивания электронов. Более точная модель расчета сечений двухэлектронной перезарядки предложена в [8], где соответствующие амплитуды переходов определялись с использованием метода искаженных волн в приближении независимых событий. В качестве электронных волновых функций брались волновые функции Плювинажа, точно учитывающие корреляции двух электронов в основном состоянии атома гелия. Отметим, что в своей идейной части используемое в [8] приближение независимых событий эквивалентно приближению независимых электронов [7] и переходит в последнее при пренебрежении электронными корреляциями в волновой функции начального состояния.

Для строгого анализа процессов двухэлектронного обмена наиболее естественно использовать методы многочастичной теории рассеяния, рассматривая систему, состоящую из налетающей частицы, двух активных электронов и остаточного иона. Поскольку взаимодействие частиц, участвующих в реакции, кулоновское, то основой теоретического описания могут быть модифицированные уравнения Фаддеева—Якубовского для системы четырех заряженных частиц [9]. Однако практическая реализация теоретического аппарата интегральных уравнений сопряжена со значительными вычислительными трудностями и в настоящее время осуществлена только для трехчастичных систем [9]. При переходе к системам с большим числом частиц резко усложняется теоретический аппарат и, следовательно, уменьшаются возможности проведения строгого количественного расчета таких систем. Наряду со строгими формулировками проблемы трех и четырех частиц в литературе по теории рассеяния даны и некоторые примеры приближенных динамических уравнений, пригодных в ряде случаев и не требующих для своего решения изощренной техники, необходимой при решении точных уравнений. В качестве таких уравнений мы предпочитаем уравнения Додда—Грайдера [10] для оператора перехода с перестройкой. Использование указанных уравнений в задаче одноэлектронной перезарядки атомов на ионах приводит к хорошему согласию теории с экспериментальными данными [11, 12].

В настоящей работе на основе интегральных уравнений Додда—Грайдера описывается простой формализм, применяемый для анализа процесса двухэлектронной перезарядки при средних и больших скоростях относительного движения. Этот формализм аналогичен формализму метода искаженных волн непрерывного спектра (continuum distorted wave (CDW) approximation [11, 12]) для задачи одноэлектронной перезарядки и оказывается лишь немного более громоздким, чем последний. Привлекательной стороной предлагаемого формализма является последовательное рассмотрение асимптотики волновых функций в обоих каналах реакции, учитывающее дальнодействующую природу кулоновских взаимодействий [9, 12]. Амплитуда реакции двухэлектронной перезарядки рассчитывается в приближении механизма последовательного захвата двух электронов. Применение общей теории иллюстрируется на примере реакции двухэлектронной перезарядки при столкновении атомов гелия с α-частицами (в работе используется атомная система единиц).

1. Уравнения Додда—Грайдера

В рамках нерелятивистской квантовой механики рассмотрим столкновения в системе четырех частиц α, β, γ_1, γ_2, в которых три частицы как в начальном, так и в конечном состояниях являются связанными, т. е. образуют «составную» частицу

$$\alpha + (\beta;\ \gamma_1,\ \gamma_2) \rightarrow (\alpha;\ \gamma_1,\ \gamma_2) + \beta, \tag{1}$$

где символ $(\lambda; \gamma_1, \gamma_2)$ обозначает соответствующую составную частицу ($\lambda = \alpha$, β — атомные ядра и γ_1, γ_2 — электроны).

Без ограничения общности спины частиц можно не учитывать, поскольку интересующие нас кулоновские эффекты не зависят от спинов. Введем полный гамильтониан системы $H = H_0 + V$, где H_0 — оператор кинетической энергии четырех частиц в системе их центра масс,

$$V = \sum_{k=1}^{2} \left(V_{\alpha,\gamma_k} + V_{\beta,\gamma_k}\right) + V_{\gamma_1,\gamma_2} + V_{\alpha,\beta} \tag{2}$$

— полное взаимодействие, V_{α,γ_1} — оператор парного взаимодействия частиц α и γ_1 и т. д.

Обозначим через V_α (V_β) эффективное взаимодействие, формирующее составную частицу в начальном (конечном) канале реакции (1); $H_\alpha = H_0 + V_\alpha$ ($H_\beta = H_0 + V_\beta$) — гамильтониан начального (конечного) канала; $G(W) = [W - H]^{-1}$ — функция Грина (резольвента) гамильтониана H. Определим также оператор $v_\lambda = V - V_\lambda$ ($\lambda = \alpha,\ \beta$).

Амплитуда перехода $T_{\alpha\beta}$ из канала α в канал β в prior-формализме определяется стандартным образом

$$T^-_{\alpha\beta} = \lim_{W \to E + i0} \langle \Phi_\beta | v_\alpha + v_\beta G(W) v_\alpha | \Phi_\alpha \rangle \equiv \langle \Phi_\beta | U^-_{\alpha\beta} | \Phi_\alpha \rangle. \tag{3}$$

Здесь $U^-_{\alpha\beta}$ — оператор перехода из канала α в канал β; $\langle \Phi_\beta |$, $| \Phi_\alpha \rangle$ — соответственно конечное и начальное асимптотические состояния системы, являющиеся собственными функциями операторов H_β, H_α с собственными значениями $\tilde{E}_\beta$, $\tilde{E}_\alpha$. На энергетической поверхности $\tilde{E}_\beta = \tilde{E}_\alpha = E$; E — полная энергия четырехчастичной системы.

Для оператора перехода $U^-_{\alpha\beta}$ в системе из трех частиц можно записать интегральное уравнение, полученное и рассмотренное впервые Доддом и Грайдером [10]. Известные трудности нерелятивистской квантово-механической задачи трехчастичного рассеяния с перестройкой (математические основы современной теории многочастичного рассеяния см. в [9]) разрешаются в теории Додда и Грайдера путем введения двух вспомогательных трехчастичных потенциалов: исключающих появление несвязных диаграмм в ядре получающегося уравнения для оператора перехода. Итерационные ряды для оператора перехода, получаемые на основе этого уравнения, оказываются в данной задаче быстро сходящимися, что позволяет делать не только оценочные, но и весьма точные прямые расчеты.

Действуя по такой же схеме, как и в трехчастичном случае [10], можно выписать подобное уравнение и для оператора перехода в системе четырех частиц. С этой целью представим канальное «взаимодействие» v_λ ($\lambda = \alpha,\ \beta$) в виде суммы двух слагаемых $v_\lambda = (v_\lambda - w_\lambda) + w_\lambda$, явный вид которых дадим ниже. Здесь w_α и w_β — «искажающие» потенциалы во входном и выходном каналах реакции (1) соответственно. Введем соответствующие этим потенциалам волновые операторы Меллера

$$\omega^+_\alpha = 1 + (E - H_\alpha - w_\alpha + i\varepsilon)^{-1} w_\alpha = 1 + g^+_\alpha w_\alpha; \quad \omega^-_\beta = 1 + (E - H_\beta - w_\beta - i\varepsilon)^{-1} w_\beta = 1 + g^-_\beta w_\beta, \tag{4}$$

где ε — сколь угодно малое положительное число.

В prior-формализме используемой теории потенциал w_β — произволен, а потенциал w_α не должен приводить к перестройке канала β, т. е. $\lim\limits_{\varepsilon \to 0} i\varepsilon \langle \Phi_\beta | \omega^+_\alpha | \Phi_\alpha \rangle = 0$. Продолжая аналогию с трехчастичным случаем введем вспомогательный потенциал $v_\varkappa$, отвечающий виртуальному промежуточному каналу $\varkappa$, а также соответствующий ему гриновский оператор $g^+_\varkappa = (E - H + v_\varkappa + i\varepsilon)^{-1}$. Тогда уравнение для четырехчастичного оператора перехода $U^-_{\alpha\beta}$ с учетом использованных обозначений имеет вид

$$U^-_{\alpha\beta} = \omega^{-*}_\beta \{[1 + (v_\beta - w^*_\beta) g^+_\varkappa] (v_\alpha - w_\alpha) \omega^+_\alpha + (v_\beta - w^*_\beta) g^+_\varkappa v_\varkappa G^+_\beta U^-_{\alpha\beta}\}. \tag{5}$$

Пока это точное уравнение. Сделаем теперь приближение для оператора перехода $U^-_{\alpha\beta}$, а именно в правой части уравнения (5) удержим только нулевую итерацию. В результате для амплитуды перехода $T^-_{\alpha\beta}$ получим представление

$$T^-_{\alpha\beta} = \langle \Phi_\beta | \omega^{-*}_\beta [1 + g^+_\varkappa (v_\beta - w_\beta)]^* (v_\alpha - w_\alpha) \omega^+_\alpha | \Phi_\alpha \rangle = T^-_{\alpha\beta}(\text{БПИВ}) + \langle \Phi_\beta | \omega^{-*}_\beta [g^+_\varkappa (v_\beta - w_\beta)]^* (v_\alpha - w_\alpha) \omega^+_\alpha | \Phi_\alpha \rangle, \tag{6}$$

в котором $T^-_{\alpha\beta}$ (БПИВ)$= \langle \Phi_\beta \mid \omega^{-*}_\beta (v_\alpha - w_\alpha)\ \omega^+_\alpha \mid \Phi_\alpha \rangle$ есть амплитуда реакции (1) в борновском приближении искаженных волн (БПИВ) [13]. Первый член в правой части (6) соответствует прямой передаче электронов от одной атомной частицы к другой без дополнительных перерассеяний, в то время как второй член описывает двухступенчатые переходы электронов через непрерывный спектр из атома мишени в состояния, связанные относительно быстрой частицы.

2. Амплитуда двухэлектронной перезарядки в рамках метода искаженных волн непрерывного спектра

Для описания системы в координатном представлении выделим два стандартных набора приведенных координат $\mathbf{r}_\alpha$, $\mathbf{x}'_k=(k=1,\ 2)$ и $\mathbf{r}_\beta$, $\mathbf{s}'_k=(k=1,\ 2)$. Эти величины выражаются через координаты частиц $\mathbf{r}_i$ и их массы m_i $(i=1,\ 2,\ 3,\ 4)$ формулами

$$\mathbf{r}_\alpha=\mathbf{r}_3-\frac{\mathbf{r}_1+\mathbf{r}_2+m_\beta\mathbf{r}_4}{m_\beta+2};\quad \mathbf{x}'_k=\mathbf{r}_k-\frac{m_\beta\mathbf{r}_4+\sum\limits_{i=1}^{k-1}\mathbf{r}_i}{m_\beta+k-1}; \tag{7}$$

$$\mathbf{r}_\beta=\mathbf{r}_4-\frac{\mathbf{r}_1+\mathbf{r}_2+m_\alpha\mathbf{r}_3}{m_\alpha+2};\quad \mathbf{s}'_k=\mathbf{r}_k-\frac{m_\alpha\mathbf{r}_3+\sum\limits_{i=1}^{k-1}\mathbf{r}_i}{m_\alpha+k-1}, \tag{8}$$

где цифры 1, 2, 3, 4 нумеруют частицы γ_1, γ_2, α, β соответственно, $m_{\alpha,\beta}=m_{3,4}/m$, причем $m_1=m_2=m$.

Введем радиус-векторы $\mathbf{x}_k$ и $\mathbf{s}_k$, определяющие положение k-го электрона (γ_k) относительно ядер β и α соответственно; их разность $\mathbf{x}_k-\mathbf{s}_k=\mathbf{R}$ — расстояние между ядрами β и α. В этих обозначениях канальные взаимодействия v_α и v_β имеют вид

$$v_\alpha=-\frac{z_\alpha}{s_1}+\frac{z_\alpha z_\beta}{R}-\frac{z_\alpha}{s_2},\quad v_\beta=-\frac{z_\beta}{x_1}+\frac{z_\alpha z_\beta}{R}-\frac{z_\beta}{x_2}, \tag{9}$$

где z_α и z_β — заряды ядер α и β соответственно.

По определению гамильтониан $H_\alpha(H_\beta)$ описывает асимптотическую ситуацию, когда частица $\alpha(\beta)$ ни с чем не взаимодействует, а три другие β, γ_1, γ_2 $(\alpha,\ \gamma_1,\ \gamma_2)$ находятся в связанном состоянии в потенциале $V_\alpha(V_\beta)$. Таким образом, собственные состояния $|\Phi_\alpha\rangle$ $(|\Phi_\beta\rangle)$ гамильтониана $H_\alpha(H_\beta)$, т. е. канальные собственные состояния, имеют вид произведения волновой функции $\varphi_\alpha(\mathbf{x}'_1,\ \mathbf{x}'_2)$ $(\varphi_\beta(\mathbf{s}'_1,\ \mathbf{s}'_2))$ связанного состояния системы $(\beta;\ \gamma_1,\ \gamma_2)$ $((\alpha;\ \gamma_1,\ \gamma_2))$ и плоской волны относительного движения частиц в начальном конечном состоянии

$$\Phi_\alpha=\varphi_\alpha(\mathbf{x}'_1,\ \mathbf{x}'_2)\exp(i\mathbf{k}_\alpha\mathbf{r}_\alpha);\quad \Phi_\beta=\varphi_\beta(\mathbf{s}'_1,\ \mathbf{s}'_2)\exp(-i\mathbf{k}_\beta\mathbf{r}_\beta), \tag{10}$$

где $\mathbf{k}_\alpha(\mathbf{k}_\beta)$ — импульс налетающей (рассеянной) частицы в СЦИ до (после) столкновения.

Обсудим теперь физический смысл операторов, входящих в формулу (6). Формально оператор $\omega_\alpha^+(\omega_\beta^-)$ можно рассматривать как оператор, переводящий начальное (конечное) асимптотическое состояние системы $|\Phi_\alpha\rangle$ $(|\Phi_\beta\rangle)$ в искаженную волну $|\chi_\alpha^+\rangle$ $(|\chi_\beta^+\rangle)$ во входном (в выходном) канале реакции

$$|\chi_\alpha^+\rangle=\omega_\alpha^+|\Phi_\alpha\rangle, \tag{11}$$

$$|\chi_\beta^-\rangle=\omega_\beta^-|\Phi_\beta\rangle. \tag{12}$$

Наконец, $W_\alpha=v_\alpha-w_\alpha$ можно рассматривать как оператор, вызывающий переход системы из начального состояния (α) в конечное (β).

Введем в рассмотрение вектор состояния $|\xi_\beta\rangle$, определив его соотношением

$$|\xi_\beta^-\rangle=[1+g_x^{+*}(v_\beta-w_\beta)]|\chi_\beta^-\rangle. \tag{13}$$

В обозначениях (11)—(13) амплитуду перехода (6) можно представить в виде

$$T_{\alpha\beta}^-=\langle\xi_\beta^-|W_\alpha|\chi_\alpha^+\rangle. \tag{14}$$

Получим явный вид дифференциальных уравнений для расчета искажений во входном и в выходном каналах реакции. Применяя оператор $(E-H_\alpha-w_\alpha)$ к обеим частям равенства (11) и устремляя $\varepsilon \to 0^+$ получим следующее уравнение для искаженной волны во входном канале:

$$(E-H_\alpha-w_\alpha)\,|\chi_\alpha^+\rangle=(E-H_\alpha)\,|\Phi_\alpha\rangle=0;\quad E=E_\alpha+k_\alpha^2/(2\mu_\alpha), \tag{15}$$

где символ $\varepsilon \to 0^+$ означает, что параметр ε неотрицателен.

Аналогичное уравнение можно получить на основе (12) и для искаженной волны в выходном канале

$$(E-H_\beta-w_\beta)\,|\chi_\beta^-\rangle=(E-H_\beta)\,|\Phi_\beta\rangle=0;\quad E=E_\beta+k_\beta^2/(2\mu_\beta). \tag{16}$$

Здесь E_α (E_β) — энергия связи частицы $(\beta;\ \gamma_1,\ \gamma_2)$ $((\alpha;\ \gamma_1,\ \gamma_2))$ по отношению к распаду $(\beta;\ \gamma_1,\ \gamma_2)\to\beta+\gamma_1+\gamma_2$ $((\alpha;\ \gamma_1,\ \gamma_2)\to\alpha+\gamma_1+\gamma_2)$; $\mu_\alpha=m_\alpha\,(m_\beta+2)/M$, $\mu_\beta=m_\beta\,(m_\alpha+2)/M$ — приведенные массы соответствующих групп частиц, $M=m_\alpha+m_\beta+2$.

В основе дальнейших выводов лежит одно «техническое» требование, которое собственно и делает рассматриваемую в этой работе задачу явно решаемой. Фактически речь будет идти о специальном выборе функции χ_β^-, основанном на простых физических соображениях. Потребуем, чтобы решение χ_β^- уравнения (16) представлялось в факторизованном виде

$$|\chi_\beta^-\rangle=|\varphi_\beta(\mathbf{s}_1',\ \mathbf{s}_2')\cdot f(\mathbf{r}_\beta)\rangle, \tag{17}$$

где функция $f(\mathbf{r}_\beta)$ описывает искажение волновой функции $\varphi_\beta(\mathbf{s}_1',\ \mathbf{s}_2')$ связанного состояния системы $(\alpha;\ \gamma_1,\ \gamma_2)$ за счет взаимодействия ее с ядром β в выходном канале.

Это требование, естественное на первый взгляд, является на самом деле дополнительным предположением. Дело в том, что представление для многочастичной волновой функции χ_β^- в форме (17) применимо, если относительная скорость движения тяжелых частиц больше орбитальной скорости связанного электрона. Однако если скорость столкновения невелика и ядро β достаточно долго взаимодействует с частицами α, γ_1, γ_2, то такая факторизация едва ли обоснована.

С учетом кулоновской природы взаимодействия заряженных частиц с заряженными структурными мишенями решение χ_β^- уравнения (16) должно удовлетворять следующему асимптотическому условию:

$$\chi_\beta^-\ \xrightarrow[r_\beta\to\infty]{}\ \varphi_\beta(\mathbf{s}_1',\ \mathbf{s}_2')\exp\left\{-i\mathbf{k}_\beta\mathbf{r}_\beta-i\,\frac{z_\beta\,(z_\alpha-2)}{v'}\ln\,(k_\beta r_\beta-\mathbf{k}_\beta\mathbf{r}_\beta)\right\};\quad \mathbf{v}'=\frac{\mathbf{k}_\beta}{\mu_\beta}. \tag{18}$$

Выполнение требований, которые мы предъявляли к функции χ_β^-, легко достичь соответствующим выбором искажающего потенциала w_β в уравнении (16). В качестве ω_β можно выбрать, например, потенциал $w_\beta^{(0)}=(z_\beta\,(z_\alpha-2))/r_\beta$, тогда функцию $f(\mathbf{r}_\beta)$ можно явно выразить через вырожденную гипергеометрическую функцию. Однако мы не будем приводить соответствующие формулы, так как явный вид $f(\mathbf{r}_\beta)$ здесь несуществен.

Перейдем теперь от уравнения (13) к его дифференциальной форме. Применяя к обеим частям равенства (13) оператор $(E-H+v_\varkappa^*)$ и учитывая (16), получим (в пределе $\varepsilon\to 0^+$) его дифференциальный аналог

$$(E-H+v_\varkappa^*)\,|\xi_\beta^-\rangle=v_\varkappa^*\,|\chi_\beta^-\rangle. \tag{19}$$

Поскольку решение неоднородного уравнения (19) с реалистичным локальным потенциалом $v_\varkappa$ дело очень сложное, то разумно попытаться заменить этот потенциал оператором, выбрав его так, чтобы

$$v_\varkappa^*\,|\chi_\beta^-\rangle=0, \tag{20}$$

и придать решению уравнения (19) форму, аналогичную (17),

$$|\xi_\beta^-\rangle=|\varphi_\beta(\mathbf{s}_1',\ \mathbf{s}_2')\,\mathscr{G}^-\rangle, \tag{21}$$

где неизвестная пока искажающая функция $\mathcal{J}^-$ описывает асимптотическое движение связанной системы из трех частиц (α; γ_1, γ_2) в кулоновском поле, создаваемом четвертой частицей β.

Благодаря условию (20) уравнение (19) сводится к однородному

$$\left[E - H_0 + \sum_{i=1}^{2}\left(\frac{z_\beta}{x_k} + \frac{z_\alpha}{s_k}\right) - \frac{z_\alpha z_\beta}{R} - \frac{1}{|\mathbf{s}_1 - \mathbf{s}_2|} + v_\varkappa^*\right]|\xi_\beta^-\rangle = 0. \tag{22}$$

Используя описанные выше два набора приведеных относительных координат, представим оператор H_0 в двух эквивалентных формах

$$H_0 = -\frac{1}{2\mu_\alpha}\Delta_{\mathbf{r}_\alpha} - \sum_{k=1}^{2}\frac{1}{2\mu_{\beta k}}\Delta_{\mathbf{x}'_k} = -\frac{1}{2\mu_\beta}\Delta_{\mathbf{r}_\beta} - \sum_{k=1}^{2}\frac{1}{2\mu_{\alpha k}}\Delta_{\mathbf{s}'_k}, \tag{23}$$

где $\mu_{\beta k} = (m_\beta + k - 1)/(m_\beta + k)$, $\mu_{\alpha k} = (m_\alpha + k - 1)/(m_\alpha + k)$.

На первый взгляд может показаться, что проблема решения уравнения (22) вообще тривиальна. На самом деле это не так. Усложнения возникают из-за того, что фигурирующие в этом уравнении потенциалы взаимодействия и оператор H_0 зависят от разных комбинаций относительных переменных, используемых в задаче (например, координат Якоби $\mathbf{r}_\alpha$, $\mathbf{x}'_k$ или $\mathbf{r}_\beta$, $\mathbf{s}'_k$, от которых зависит оператор H_0, и координат $\mathbf{x}_k$, $\mathbf{s}_k$, $\mathbf{R}$, от которых зависят потенциалы взаимодействия). Чтобы избежать эту трудность, рассмотрим приближенный способ разделения переменных в уравнении (22), основанный на естественном предположении, что массы частиц γ_1, γ_2 (электронов) много меньше, чем массы двух других частиц α и β (атомных ядер), т. е. $m_1 = m_2 \ll m_{3,4}$. В этом случае в выражениях (7) и (8) можно пренебречь членами, содержащими отношения масс $m_k/m_{3,4}$ ($k=1$, 2), в результате чего якобиевы координаты $\mathbf{x}'_k$, $\mathbf{r}_\alpha$, $\mathbf{s}'_k$ и $\mathbf{r}_\beta$ близки к координатам $\mathbf{x}_k$, $\mathbf{R}$, $\mathbf{s}_k$ и $-\mathbf{R}$ соответственно, т. е.

$$\mathbf{x}'_k \simeq \mathbf{x}_k, \quad \mathbf{s}'_k \simeq \mathbf{s}_k, \quad \mathbf{r}_\alpha \simeq \mathbf{R}, \quad \mathbf{r}_\beta \simeq -\mathbf{R}. \tag{24}$$

Подставляя в уравнения (22) волновую функцию ξ_β^- в виде (21), получаем, учитывая (16) и (24), уравнение относительно $\mathcal{J}^-$

$$\varphi_\beta(E - E_\beta - H_0 - v_\beta)\mathcal{G}^- + \sum_{k=1,2}\frac{1}{\mu_{\alpha k}}\nabla_{\mathbf{s}'_k}\varphi_\beta\nabla_{\mathbf{s}'_k}\mathcal{G}^- + v_\varkappa^*(\varphi_\beta\mathcal{G}^-) = 0. \tag{25}$$

Это уравнение мы должны решить, учитывая упомянутое выше дополнительное условие (20), а также граничное условие, конкретизирующее динамику, которое будет сформулировано ниже. В качестве $v_\varkappa$ в последнем уравнении выберем оператор $v_\varkappa^{(0)}$, действие которого на произвольную функцию Ψ от $\mathbf{r}_\beta$ и $\mathbf{s}'_k$ ($k=1$, 2) описывается соотношением

$$v_\varkappa^{(0)}\Psi = -\sum_{k=1,2}\frac{1}{\mu_{\alpha k}}\nabla_{\mathbf{s}'_k}\varphi_\beta\nabla_{\mathbf{s}'_k}[\Psi/\varphi_\beta]. \tag{26}$$

В том, что этот оператор удовлетворяет требуемому свойству (20), легко убедиться, если воспользоваться очевидным соотношением $\nabla_{\mathbf{s}'_k}(\chi_\beta^-\cdot\varphi_\beta) = \nabla_{\mathbf{s}'_k} f(\mathbf{r}_\beta) = 0$. Подставляя выражение (26) для $v_\varkappa^{(0)}$ в (25) и учитывая (24), получаем уравнение для $\mathcal{J}^-$ следующего вида:

$$\left[E - E_\beta + \frac{1}{2\mu_\alpha}\Delta_{\mathbf{r}_\alpha} + \sum_{k=1,2}\left(\frac{1}{2\mu_{\beta k}}\Delta_{\mathbf{x}'_k} + \frac{z_\beta}{x'_k}\right) - \frac{z_\alpha z_\beta}{r_\alpha}\right]\mathcal{G}^- = 0. \tag{27}$$

Будем искать решение уравнения (27), имеющее на бесконечности вид искаженной плоской волны с единичной амплитудой,

$$\mathcal{G}^- \xrightarrow[r_\beta\to\infty]{} f(\mathbf{r}_\beta) \xrightarrow[r_\beta\to\infty]{} \exp\left\{-i\mathbf{k}_\beta\mathbf{r}_\beta - i\,\frac{z_\beta(z_\alpha - 2)}{v'}\ln(k_\beta r_\beta - \mathbf{k}_\beta\mathbf{r}_\beta)\right\}. \tag{28}$$

Решая уравнение (27) методом разделения переменных, найдем, что

$$\mathscr{G}^{-}=C^{-}\mathscr{F}^{(-)}(\mathbf{r}_{\alpha})\prod_{k=1}^{2}\mathscr{F}_{k}^{(-)}(\mathbf{x}_{k}'),\quad C^{-}=\mathrm{const},\tag{29}$$

где двухчастичные кулоновские искажающие функции $\mathscr{F}_k^{(-)}(\mathbf{x}_k')$ и $\mathscr{F}^{(-)}(\mathbf{r}_\alpha)$ описываются в терминах вырожденных гипергеометрических функций равенствами [14]

$$\mathscr{F}_{k}^{(-)}(\mathbf{x}_{k}')=N^{(+)}(\nu_{\beta k}')\exp(i\mathbf{q}_{k}\mathbf{x}_{k}')F(-i\nu_{\beta k}',\ 1,\ -iq_{k}\xi_{k}),\tag{30}$$

$$\mathscr{F}^{(-)}(\mathbf{r}_{\alpha})=N^{(-)}(\nu_{\alpha}')\exp(i\mathbf{q}_{\alpha}\mathbf{r}_{\alpha})F(i\nu_{\alpha}',\ 1,\ -iq_{\alpha}\xi_{\alpha}).\tag{31}$$

Здесь $N^{(\pm)}(\nu)=\Gamma(1\pm i\nu)\exp(\pm\pi\nu/2)$ — нормировочные коэффициенты; $\xi_k=x_k'+\hat{\mathbf{q}}_k\mathbf{x}_k'$, $\xi_\alpha=r_\alpha+\hat{\mathbf{q}}_\alpha\mathbf{r}_\alpha$ — двухчастичные параболические переменные; $\hat{\mathbf{q}}_k$ и $\hat{\mathbf{q}}_\alpha$ — единичные векторы, направленные вдоль векторов $\mathbf{q}_k$ и $\mathbf{q}_\alpha$; $\nu_{\beta k}'=z_\beta\mu_{\beta k}/q_k$, $\nu_\alpha'=z_\alpha z_\beta\mu_\alpha/q_\alpha$ — характерные кулоновские параметры. Из сохранения энергии следует, что импульсные переменные $\mathbf{q}_\alpha$ и $\mathbf{q}_k$ должны удовлетворять уравнению

$$E-E_{\beta}=\frac{k_{\beta}^{2}}{2\mu_{\beta}}=\frac{q_{\alpha}^{2}}{2\mu_{\alpha}}+\sum_{k=1,\,2}\frac{q_{k}^{2}}{2\mu_{\beta k}}.\tag{32}$$

Учитывая далее асимптотический вид функции $F(a,\ b,\ \varkappa)$ при $x\to\infty$ [14], найдем из условий сшивания асимптотики функции (29) с эйкональным приближением (28), что

$$\sum_{k=1,\,2}\mathbf{q}_{k}\mathbf{x}_{k}'+\mathbf{q}_{\alpha}\mathbf{r}_{\alpha}=-\mathbf{k}_{\beta}\mathbf{r}_{\beta},\tag{33}$$

$$C^{-}\exp\left\{i\sum_{k=1,\,2}\nu_{\beta k}'\ln(q_{k}\xi_{k})-i\nu_{\alpha}'\ln(q_{\alpha}\xi_{\alpha})\right\}\xrightarrow[r_{\beta}\to\infty]{}\exp\left\{-i\frac{z_{\beta}(z_{\alpha}-2)}{v'}\ln(k_{\beta}r-\mathbf{k}_{\beta}\mathbf{r}_{\beta})\right\}.\tag{34}$$

Выразим $\mathbf{r}_\beta$ через координаты $\mathbf{r}_\alpha$, $\mathbf{x}_1'$ и $\mathbf{x}_2'$ с помощью формулы

$$\mathbf{r}_{\beta}=-a_{2}\mathbf{r}_{\alpha}-\sum_{k=1,\,2}\frac{b_{k}}{\mu_{\beta}}\mathbf{x}_{k}';\quad a_{k}=m_{\alpha}/(m_{\alpha}+k);\quad b_{k}=m_{\beta}/(m_{\beta}+k).\tag{35}$$

Подставим теперь (35) в правую часть равенства (33) и приравняем в обеих его частях члены при $\mathbf{r}_\alpha$, $\mathbf{x}_1'$ и $\mathbf{x}_2'$. Получим

$$\mathbf{q}_{\alpha}=a_{2}\mathbf{k}_{\beta}\xrightarrow[m_{\alpha}\to\infty]{}\mathbf{k}_{\beta};\quad \mathbf{q}_{k}=\frac{b_{k}}{\mu_{\beta}}\mathbf{k}_{\beta}\equiv b_{k}\mathbf{v}'\xrightarrow[m_{\beta}\to\infty]{}\mathbf{v}'\ \ (k=1,\ 2).\tag{36}$$

Учитывая далее асимптотическую оценку

$$(-iz_{\beta}/v')\ln\left(\frac{k_{\beta}r_{\beta}-\mathbf{k}_{\beta}\mathbf{r}_{\beta}}{v'x_{k}'-\mathbf{v}'\mathbf{x}_{k}'}\right)\xrightarrow[r_{\beta}\to\infty]{}\ln\left(\mu_{\beta}^{-iz_{\beta}/v'}\right)\quad(k=1,\ 2),\tag{37}$$

найдем из условия сшивания (34), что $C^{-}=\mu_{\beta}^{2iz_{\beta}/v'}$. Из формул (29)—(31) и (36) следует тогда, что искажающую функцию $\mathscr{G}^{-}$ в выходном канале можно представить в виде

$$\mathscr{G}^{-}=\mu_{\beta}^{2i\nu_{\beta}'}N^{(-)}(\nu')[N^{(+)}(\nu_{\beta}')]^{2}\exp(-i\mathbf{k}_{\beta}\mathbf{r}_{\beta})\times$$

$$\times F(i\nu',\ 1,\ -ik_{\beta}r_{\alpha}-i\mathbf{k}_{\beta}\mathbf{r}_{\alpha})\prod_{k=1}^{2}F(-i\nu_{\beta}',\ 1,\ -iv'x_{k}'-i\mathbf{v}'\mathbf{x}_{k}'),\tag{38}$$

где $\nu_{\beta}'=z_{\beta}/v'$, $\nu'=z_{\alpha}z_{\beta}/v'$.

Итак, построена волновая функция конечного состояния ξ^{-} (определяемая выражениями (21), (38)), которая в рассматриваемой задаче описывает рассеяние заряженной частицы β на связанном комплексе трех частиц α, γ_1, γ_2. Опишем далее волновую функцию начального состояния. Эту функцию можно получить решением дифференциального уравнения (15). Дополним указанное уравнение граничным условием на бесконечности

$$\chi_\alpha^+ \xrightarrow[r_\alpha\to\infty]{} \varphi_\alpha(\mathbf{x}_1', \mathbf{x}_2')\exp\left\{i\mathbf{k}_\alpha\mathbf{r}_\alpha + i\frac{z_\alpha(z_\beta-2)}{v}\ln(k_\alpha r_\alpha - \mathbf{k}_\alpha\mathbf{r}_\alpha)\right\}; \quad \mathbf{v}=\frac{\mathbf{k}_\alpha}{\mu_\alpha}. \tag{39}$$

Подставляя функцию χ_α^+ в виде произведения

$$\chi_\alpha^+ = \varphi_\alpha(\mathbf{x}_1', \mathbf{x}_2')\mathscr{G}^+ \tag{40}$$

в уравнение (15) и совершая простые преобразования, получим следующее уравнение для $\mathscr{G}^+$:

$$\varphi_\alpha(E-E_\alpha-H_0-v_\alpha)\mathscr{G}^+ + \sum_{k=1,2}\frac{1}{\mu_{\beta k}}\nabla_{\mathbf{x}_k'}\varphi_\alpha\nabla_{\mathbf{x}_k'}\mathscr{G}^+ + W_\alpha(\varphi_\alpha\mathscr{G}^+)=0. \tag{41}$$

Для дальнейших вычислений нам потребуется конкретный вид оператора $W_\alpha=v_\alpha-w_\alpha$. При выборе W_α можно высказать лишь самые общие соображения. Во-первых, ясно, что этот оператор должен быть таким, чтобы уравнение (41) имело решения в классе специальных или элементарных функций. При этом необходимо следить за тем, чтобы волновая функция начального состояния χ_α^+ обладала правильным асимптотическим поведением (39). Во-вторых, оператор W_α нужно подобрать так, чтобы искажения во входном ($\mathscr{G}^+$) и в выходном ($\mathscr{G}^-$) каналах реакции (1) трактовались одинаково. Дело в том, что несимметричный выбор v_α и W_α в уравнениях (25) и (41) приводит к несимметричному определению искажений в начальном и конечном каналах реакции, что противоречит основной идее метода искаженных волн [12]. Кроме того, если известна какая-нибудь априорная информация о волновых функциях рассеяния ξ_β и χ_α^+, то она также может быть учтена при выборе v_α и W_α в уравнениях (25) и (41) соответственно.

Основываясь на этих соображениях, выберем в качестве W_α оператор $W_\alpha^{(0)}$, действие которого на произвольную функцию Ψ от $\mathbf{r}_\alpha$, $\mathbf{x}_1'$ и $\mathbf{x}_2'$ описывается соотношением

$$W_\alpha^{(0)}\Psi = -\sum_{k=1,2}\frac{1}{\mu_{\beta k}}\nabla_{\mathbf{x}_k'}\varphi_\alpha\nabla_{\mathbf{x}_k'}[\Psi/\varphi_\alpha]. \tag{42}$$

После подстановки (42) в (41) получаем для $\mathscr{G}^+$ уравнение, которое для дальнейшего удобно записать в виде

$$\left[E-E_\alpha+\frac{1}{2\mu_\beta}\Delta_{\mathbf{r}_\beta}+\sum_{k=1,2}\left(\frac{1}{2\mu_{\alpha k}}\Delta_{\mathbf{s}_k'}+\frac{z_\alpha}{s_k'}\right)-\frac{z_\alpha z_\beta}{r_\beta}\right]\mathscr{G}^+=0. \tag{43}$$

Решение этого уравнения однозначно определяется путем сравнения его асимптотики с соответствующим эйкональным приближением. Мы не будем, однако, проводить дальнейшую формализацию этих рассуждений. Необходимая для этого техника была достаточно подробно описана выше при построении решения $\mathscr{G}^-$ аналогичного уравнения (27). Опуская довольно громоздкие промежуточные выкладки, приведем сразу окончательный результат (в пределе $m_{3,4} \gg m_1=m_2$)

$$\begin{aligned}\mathscr{G}^+ &= \mu_\alpha^{-2i\nu_\alpha}N^{(-)*}(\nu)[N^{(+)*}(\nu_\alpha)]^2\exp(i\mathbf{k}_\alpha\mathbf{r}_\alpha)\\ &\times F(-i\nu,\ 1,\ ik_\alpha r_\beta+i\mathbf{k}_\alpha\mathbf{r}_\beta)\prod_{l=1}^{2}F(i\nu_\alpha,\ 1,\ ivs_k'+i\mathbf{v}\mathbf{s}_k'),\end{aligned} \tag{44}$$

где $\nu_{\alpha,\beta}=z_{\alpha,\beta}/v$, $\nu=z_\alpha z_\beta/v$.

Далее необходимо подставить выражения (21), (38), (40), (42) и (44) в (14), после чего амплитуду $T_{\alpha\beta}^-$ можно записать в виде сумм двух слагаемых, описывающих последовательный захват двух электронов быстрыми ионами при столкновении их с атомами

$$T^{-}_{\alpha\beta} = -[N^{(+)*}(\nu_\alpha)\, N^{(+)*}(\nu'_\beta)]^2 \int\int\int d\mathbf{x}'_1 d\mathbf{x}'_2 d\mathbf{r}_\alpha \exp(i\mathbf{k}_\alpha\mathbf{r}_\alpha + i\mathbf{k}_\beta\mathbf{r}_\beta)\, \mathscr{L}(\mathbf{r}_\alpha,\ \mathbf{r}_\beta) \times$$
$$\times \varphi^*_\beta(\mathbf{s}'_1,\ \mathbf{s}'_2) \prod_{j=1}^{2} F(i\nu'_\beta,\ 1,\ iv'x'_j + i\mathbf{v}'\mathbf{x}'_j) \sum_{k=1,\,2} \nabla_{\mathbf{x}'_k} \varphi_\alpha(\mathbf{x}'_1,\ \mathbf{x}'_2)\, \nabla_{\mathbf{s}'_k} \times$$
$$\times [F(i\nu_\alpha,\ 1,\ (ivs'_1 + i\mathbf{v}\mathbf{s}'_1)\, F(i\nu_\alpha,\ 1,\ ivs'_2 + i\mathbf{v}\mathbf{s}'_2)]. \qquad (45)$$

н В формуле (45) использовано обозначение

$$\mathscr{L}(\mathbf{r}_\alpha,\ \mathbf{r}_\beta) = \mu_\alpha^{-2i\nu_\alpha}\mu_\beta^{-2i\nu_\beta} N^{(-)*}(\nu)\, N^{(-)*}(\nu')\, F(-i\nu,\ 1,\ ik_\alpha r_\beta + i\mathbf{k}_\alpha\mathbf{r}_\beta) \times$$
$$\times F(-i\nu',\ 1,\ ik_\beta r_\alpha + i\mathbf{k}_\beta\mathbf{r}_\alpha). \qquad (46)$$

Полученное сложное выражение (45) легко упрощается. Прежде всего замечаем, что в случае быстрых соударений (при $k_\alpha^2/2\mu_\alpha > |E_\beta - E_\alpha|$) налетающие частицы рассеиваются в основном вперед, т. е. на достаточно малые углы ($\hat{\mathbf{k}}_\beta \simeq \hat{\mathbf{k}}_\alpha$). Именно эта область углов рассеяния внесет доминирующий вклад в полное сечение реакции (1), так как при больших углах рассеяния (переданных импульсах) амплитуда перехода $T^{-}_{\alpha\beta}$ становится малой из-за быстрых осцилляций экспоненциального фактора $\exp(i\mathbf{k}_\alpha\mathbf{r}_\alpha + i\mathbf{k}_\beta\mathbf{r}_\beta)$ под интегралом в (45). Физически это означает, что при малых углах рассеяния траектория становится почти прямолинейной и движения ядер происходит с постоянным вектором скорости. В этом случае вектор $\mathbf{R}$ может быть представлен в виде ортогональной суммы $\mathbf{R} = \boldsymbol{\rho} + \mathbf{Z}$, $\boldsymbol{\rho}\cdot\mathbf{Z} = 0$. Учтя, что $\mathbf{v}' \simeq \mathbf{v}$ и $m_1 = m_2 = m \ll m_3 \sim m_4$, для показателя экспоненты в (45) легко установить следующее соотношение:

$$\mathbf{k}_\alpha\mathbf{r}_\alpha + \mathbf{k}_\beta\mathbf{r}_\beta \simeq \mathbf{p}(\mathbf{x}_1 + \mathbf{x}_2) + \mathbf{q}(\mathbf{s}_1 + \mathbf{s}_2), \qquad (47)$$

где

$$2\mathbf{p} = -\boldsymbol{\eta} - \left(v - \frac{E_\beta - E_\alpha}{v}\right)\hat{\mathbf{v}}, \quad 2\mathbf{q} = \boldsymbol{\eta} - \left(v - \frac{E_\beta - E_\alpha}{v}\right)\hat{\mathbf{v}}, \quad \hat{\mathbf{v}} = \frac{\mathbf{v}}{v}, \qquad (48)$$

$\boldsymbol{\eta}$ — ортогональная относительно вектора $\mathbf{v}$ компонента вектора переданного импульса ($\boldsymbol{\eta}\cdot\mathbf{v} = \boldsymbol{\eta}\cdot\mathbf{Z} = \boldsymbol{\rho}\cdot\mathbf{v} = \boldsymbol{\rho}\cdot\mathbf{Z} = 0$).

Для функции $\mathscr{L}(\mathbf{r}_\alpha, \mathbf{r}_\beta)$ в этом приближении (являющемся простейшим вариантом «эйкональной аппроксимации» [12]) справедлива асимптотическая оценка

$$\lim_{m_{\alpha,\,\beta}\to\infty} \mathscr{L}(\mathbf{r}_\alpha,\ \mathbf{r}_\beta) = \mu^{-2i(\nu_\alpha + \nu_\beta - \nu)} (\rho v)^{2i\nu}, \quad \mu = m_\alpha m_\beta/(m_\alpha + m_\beta). \qquad (49)$$

Тогда с точностью до несущественного фазового множителя интересующее нас выражение для амплитуда рассеяния (т. е. перезарядка (1)) на малые углы принимает вид

$$T^{-}_{\alpha\beta} = -[N^{(+)*}(\nu_\alpha)\, N^{(+)*}(\nu_\beta)]^2 \sum_{k=1,\,2} I^{(k)}_{\alpha\beta}, \qquad (50)$$

где через $I^{(k)}_{\alpha\beta}$ обозначены матричные элементы

$$I^{(k)}_{\alpha\beta} = \int\int\int d\mathbf{x}_1 d\mathbf{x}_2 d\mathbf{s}_1 \exp\{i\mathbf{p}(\mathbf{x}_1 + \mathbf{x}_2) + i\mathbf{q}(\mathbf{s}_1 + \mathbf{s}_2)\}\, \varphi^*_\beta(\mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2) \prod_{j=1}^{2} F(i\nu_\beta, 1, ivx_j + i\mathbf{v}\mathbf{x}_j) \times$$
$$\times \nabla_{\mathbf{x}_k}\varphi_\alpha(\mathbf{x}_1,\ \mathbf{x}_2)\, \nabla_{\mathbf{s}_k} [F(i\nu_\alpha,\ 1,\ ivs_1 + i\mathbf{v}\mathbf{s}_1)\, F(i\nu_\alpha,\ 1,\ ivs_2 + i\mathbf{v}\mathbf{s}_2)]. \qquad (51)$$

Будем считать, что активные электроны системы (λ; γ_1, γ_2), $\lambda = \alpha$, β движутся в заданном поле остова и их движение описывается гамильтонианом с разделенными переменными. Тогда волновую функцию $\varphi_\alpha(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$ ($\varphi_\beta(\mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2)$) начального (конечного) состояния можно представить в виде произведения одинаковых (так как начальным и конечным состояниями являются s^2) одноэлектронных функций

$$\varphi_\alpha(\mathbf{x}_1,\ \mathbf{x}_2) = \varphi_\alpha(\mathbf{x}_1)\, \varphi_\alpha(\mathbf{x}_2); \quad \varphi_\beta(\mathbf{s}_1,\ \mathbf{s}_2) = \varphi_\beta(\mathbf{s}_1)\, \varphi_\beta(\mathbf{s}_2), \qquad (52)$$

где $\varphi_\alpha(\mathbf{x}_k)$ и $\varphi_\beta(\mathbf{s}_k)$ — водородоподобные волновые функции в поле ядра $\varphi_\alpha(\mathbf{x}_k) = (\alpha^3/\pi)^{1/2} \exp(-\alpha x_k)$, $\varphi_\beta(\mathbf{s}_k) = (\beta^3/\pi)^{1/2} \exp(-\beta s_k)$ с эффективными зарядами $\alpha = z_\beta - 0.3125$ и $\beta = z_\alpha - 0.3125$.

Приступим теперь к вычислению матричных элементов (51). Покажем, как это можно сделать на примере одного из слагаемых в (50), записав его в импульсном представлении

$$I_{\alpha\beta}^{(1)} = (2\pi)^{-3} \int d\boldsymbol{\tau} \mathbf{R}_{\beta}^{(1)}(\mathbf{q}-\boldsymbol{\tau}) \cdot \mathbf{R}_{\alpha}^{(1)}(\mathbf{p}+\boldsymbol{\tau}) R_{\beta}^{(2)}(\mathbf{q}+\boldsymbol{\tau}) R_{\alpha}^{(2)}(\mathbf{p}-\boldsymbol{\tau}). \tag{53}$$

Здесь

$$\mathbf{R}_{\beta}^{(j)}(\mathbf{k}) = \int d\mathbf{s}_j e^{i\mathbf{k}\mathbf{s}_j} \varphi_{\beta}^{*}(\mathbf{s}_j) \nabla_{\mathbf{s}_j} F(i\nu_{\alpha}, 1, ivs_j + i\mathbf{v}\mathbf{s}_j), \tag{54}$$

$$\mathbf{R}_{\alpha}^{(j)}(\mathbf{k}) = \int d\mathbf{x}_j e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}_j} F(i\nu_{\beta}, 1, ivx_j + i\mathbf{v}\mathbf{x}_j)[\nabla_{\mathbf{x}_j}\varphi_{\alpha}(\mathbf{x}_j)], \tag{55}$$

$$R_{\beta}^{(j)}(\mathbf{k}) = \int d\mathbf{s}_j e^{i\mathbf{k}\mathbf{s}_j} \varphi_{\beta}^{*}(\mathbf{s}_j) F(i\nu_{\alpha}, 1, ivs_j + i\mathbf{v}\mathbf{s}_j), \tag{56}$$

$$R_{\alpha}^{(j)}(\mathbf{k}) = \int d\mathbf{x}_j e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}_j} \varphi_{\alpha}(\mathbf{x}_j) F(i\nu_{\beta}, 1, ivx_j + i\mathbf{v}\mathbf{x}_j). \tag{57}$$

Подынтегральное выражение в (53) локализовано в четырех областях пространства импульсов $\boldsymbol{\tau}$

$$|\mathbf{p}-\boldsymbol{\tau}| \leqslant 1/a, \quad |\mathbf{q}+\boldsymbol{\tau}| \leqslant 1/a, \quad |\mathbf{p}+\boldsymbol{\tau}| \leqslant 1/a, \quad |\mathbf{q}-\boldsymbol{\tau}| \leqslant 1/a, \tag{58}$$

где a — характерный радиус потенциалов парного взаимодействия.

Так как $\mathbf{R}_{\beta}^{(1)}(\boldsymbol{\tau})$ и $\mathbf{R}_{\alpha}^{(1)}(\boldsymbol{\tau})$ убывают быстрее, чем $R_{\beta}^{(2)}(\boldsymbol{\tau})$ и $R_{\alpha}^{(2)}(\boldsymbol{\tau})$, то легко сообразить, что вклад в величину интеграла (53) от третьей и четвертой из областей в (58) несуществен и его величина полностью определяется вкладом лишь первой и второй областей. При этом в выражении (53) для $I_{\alpha\beta}^{(1)}$ можно вынести за знак интеграла медленно меняющуюся функцию $R_{\alpha\beta}(\boldsymbol{\tau}) = (\mathbf{R}_{\beta}^{(1)}(\mathbf{q}-\boldsymbol{\tau}) \times \times \mathbf{R}_{\alpha}^{(1)}(\mathbf{p}+\boldsymbol{\tau}))$ в областях резкого возрастания остальной части подынтегрального выражения [15]. Применяя затем теорему о свертке и выполняя интегрирование по $\mathbf{x}$ в соответствии с обычной техникой метода контурного интегрирования Нордсика [16], получаем

$$I_{\alpha\beta}^{(1)} = -\frac{N_{\alpha}N_{\beta}}{2}[\mathbf{R}^{(1)}(\mathbf{q}-\mathbf{p}) \cdot \mathbf{R}_{\alpha}^{(1)}(2\mathbf{p}) + \mathbf{R}_{\beta}^{(1)}(2\mathbf{q}) \cdot \mathbf{R}_{\alpha}^{(1)}(\mathbf{p}-\mathbf{q})] \times \\ \times \frac{\partial J(\alpha+\beta, \mathbf{p}+\mathbf{q}, \nu_{\alpha}, \nu_{\beta}, \mathbf{v}, \mathbf{v})}{\partial \alpha}, \tag{59}$$

где

$$J(\lambda, \mathbf{k}, \nu_1, \nu_2, \mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2) = \int d\mathbf{x} \frac{e^{-\lambda x + i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}}{x} F(i\nu_1, 1, iv_1 x + i\mathbf{v}_1\mathbf{x}) F(i\nu_2, 1, iv_2 x + i\mathbf{v}_2\mathbf{x}) = \\ = \frac{4\pi}{(k^2+\lambda^2)}\left[1 + \frac{2(\mathbf{k}\mathbf{v}_1 - i\lambda v_1)}{k^2+\lambda^2}\right]^{-i\nu_1} \cdot \left[1 + \frac{2(\mathbf{k}\mathbf{v}_2 - i\lambda v_2)}{k^2+\lambda^2}\right]^{-i\nu_2} \cdot (i\nu_1, i\nu_2, 1, z),$$

$$z = \frac{4(\mathbf{k}\mathbf{v}_1 - i\lambda v_1)(\mathbf{k}\mathbf{v}_2 - i\lambda v_2) - 2(\lambda^2+k^2)(\mathbf{v}_1\mathbf{v}_2 - v_1 v_2)}{[k^2+\lambda^2+2(\mathbf{k}\mathbf{v}_1 - i\lambda v_1)][k^2+\lambda^2+2(\mathbf{k}\mathbf{v}_2 - i\lambda v_2)]}; \quad N_{\gamma} = \left(\frac{\gamma^3}{\pi}\right)^{1/2}, \ \gamma = \alpha, \beta. \tag{60}$$

Интерпретация соотношений (59), (60) следующая. Матричный элемент $(\mathbf{R}_{\beta}^{(1)} \cdot \mathbf{R}_{\alpha}^{(1)})$ описывает двухступенчатый (томасовский) механизм [12, 17] захвата электрона (γ_1) через непрерывный спектр из атома мишени $(\beta; \gamma_1, \gamma_2)$ в состояния, связанные относительно быстрой частицы α. Множитель $\partial J/\partial\alpha$, соответствующий интегрированию в $I_{\alpha\beta}^{(1)}$ по координатам второго электрона (γ_2), сводится к интегралу перекрывания.

Аналогичные по структуре соотношения получаются и для матричного элемента $I_{\alpha\beta}^{(2)}$. При этом видно, что для резонансной двухэлектронной перезарядки оба матричных элемента в (50) переходят друг в друга при перестановке электронов. Следовательно, их вклад в амплитуду $T_{\alpha\beta}^{-}$ одинаков.

3. Результаты расчетов и сопоставление с экспериментом

Применим полученные выше формулы к расчету сечений двухэлектронной перезарядки при столкновении атома гелия с α-частицами

$$He(1s^2) = He^{2+} \rightarrow He^{2+} + He(1s^2). \qquad (61)$$

Результаты для системы $He+He^{2+}$ являются в известной мере пробным камнем для всякой теории двухэлектронной перезарядки. Поэтому помимо экспериментальных данных [18] и расчета с амплитудой (50), (59) в таблице приведены также результаты расчетов других авторов [7, 8]. Из таблицы хорошо видны типичные черты расчета, основанного на использовании при вычислении амплитуды четырехчастичных интегральных уравнений Додда—Грайдера, — незначительное занижение вычисленных сечений в области средних энергий и сравнительно хорошее согласие с экспериментальными данными [18] при больших энергиях. При этом, как видно, результаты расчетов в приближении независимых электронов [7] завышены не только относительно наших расчетов и расчетов [8], но также и относительно эксперимента [18]. Это обстоятельство может быть связано с тем, что при уменьшении скорости столкновения приближение независимых электронов становится некорректным. В двух последних столбцах таблицы представлены также данные двух наиболее точных вариантов расчета [8] полного сечения двойной перезарядки для процесса (61), выполненного с использованием метода искаженных волн в приближении независимых событий. При этом данные (II) получены с учетом кулоновских искажений электронных волновых функций в обоих каналах реакции (61), а данные (I) — результаты расчета с учетом кулоновских эффектов только во входном канале. Видно, что при E=500 кэВ расчеты [8] хорошо согласуются с экспериментальными данными в обоих упомянутых случаях. Однако в области больших энергий ($E \geqslant 1000$ кэВ) проведенные в [8] расчеты приводят к занижению сечений, а предлагаемый в настоящей работе метод учета кулоновских эффектов в модели четырех тел лучше согласуется с экспериментальными данными. Вместе с тем следует указать на необходимость дальнейшего усовершенствования теории. Действительно, в настоящей работе расчеты проводились в предположении, что основной вклад в амплитуду реакции (1) в рассматриваемой области энергий дает механизм последовательного захвата двух электронов. В дальнейшем следует оценить вклады и других механизмов, в частности механизма одновременного захвата двух электронов. Безусловно, одновременный учет механизмов, указанных выше, является весьма сложной задачей и потребует дальнейших экспериментальных и теоретических усилий. При дальнейшем развитии теории следует также оценить вклады принебреженных нами корреляционых эффектов. Можно надеяться, что данные о корреляциях не только существенно дополнят теоретический материал, но и окажутся тестом, чувствительным к правильности той или иной модели.

Сечения двухэлектронного захвата ионами He^{2+} в гелии

E, кэВ	Эксперимент [18]	Наш расчет	Теория [7]	Теория [8]	
				I	II
500	5.1 (—18)	5.0 (—18)	1.6 (—17)	5.5 (—18)	5.8 (—18)
750	9.5 (—1.9)	6.8 (—19)	1.8 (—18)	7.0 (—19)	7.4 (—19)
1000	2.6 (—19)	2.4 (—19)	3.1 (—19)	1.5 (—19)	1.5 (—19)
1400	3.6 (—20)	3.5 (—20)	3.4 (—20)	2.0 (—20)	2.1 (—20)

Примечание. Числа в круглых скобках обозначают степени десяти, на которые следует умножить стоящие перед ними величины.

В заключение авторы благодарят В. С. Сенашенко и участников руководимого им семинара за стимулирующие обсуждения этой работы.

Список литературы

[1] *Пресняков Л. П., Шевелько В. П., Янев Р. К.* Элементарные процессы с участием многозарядных ионов. М.: Энергоатомиздат, 1986, 200 с.
[2] *Klinger H., Müller A., Salzborn E.* // J. Phys B. 1975. Vol. 8. N 2. P. 230—238.
[3] *Grozdanov T. P., Janev R. K.* // J. Phys. B. 1980. Vol. 13. N 11. P. 3431—3442.
[4] *Карбованец М. И., Лазур В. Ю., Чибисов М. И.* // ЖЭТФ. Т. 86. Вып. 1. С. 84—93.
[5] *Crandall D. H., Olson R. E., Shipsey E. J.* et al. // Phys. Rev. Lett. 1976. Vol. 36. N 15. P. 858—860.
[6] *Olson R. E., Salop A.* // Phys. Rev. A. 1977. Vol. 16. N 2. P. 531—541.
[7] *Gaeyt R., Rivarola R. D., Salin A.* // J. Phys. B. 1981. Vol. 14. N 9. P. 2421—2427.
[8] *Crothers D. S. F., McCarroll R.* // J. Phys. B. 1987. Vol. 20. N 12. P. 2835—2842.
[9] *Меркурьев С. П., Фаддеев Л. Д.* Квантовая теория рассеяния для систем нескольких частиц. М.: Наука, 1985. 398 с.
[10] *Dodd L. R., Greider K. R.* // Phys. Rev. 1966. Vol. 146. N 3. P. 675—686.
[11] *Gayet R.* // J. Phys. B. 1972. Vol. 5. N 3. P. 483—491.
[12] *Belkič Dž Gayet R., Saliv A.* // Phys. Rep. 1979. Vol. 56. N 6. P. 279—369.
[13] *Greider K. R., Dodd L. R.* // Phys. Rev. 1966. Vol. 146. N 3. P. 671—675.
[14] *Бейтман Г., Эрдей А.* Высшие трансцендентные функции. Т. 1. М.: Наука, 1973. с.
[15] *Пресняков Л. П.* // Тр. ФИАН. 1970. Т. 51. С. 20.
[16] *Nordsieck A.* // Phys. Rev. 1954. Vol. 93. N 4. P. 785—787.
[17] *Годунов А. Л., Куникеев Ш. Д., Сенашенко В. С.* // Физика плазмы. 1986. Т. 12. № 11. С. 1355—1361.
[18] *McDaniel E. W., Flannery M. R., Ellis H. W.* et al. // VS Army Missile Research and Development Command Technical Report. H78-1. 1977.

Институт ядерных исследований
Ужгородское отделение
Ужгородский государственный
университет

Поступило в Редакцию
30 ноября 1990 г.
В окончательной редакции
22 октября 1990 г.