УЧЕТ ИЗМЕНЕНИЯ СКОРОСТИ В КВАЗИРЕЗОНАНСНЫХ ПРОЦЕССАХ

В. А. Картошкин, Г. В. Клементьев

В последние годы много внимания уделяется теоретическим исследованиям нерезонансных столкновительных процессов с малым дефектом резонанса [1–3], что связано, в частности, и с появлением новых экспериментальных данных о такого рода процессах (см., например, [4–6]). Во многих случаях (обмена метастабильностью, перезарядки) описание этих процессов проводится в рамках двухуровневой модели Розена—Зинера—Демкова [7, 8], когда разность диагональных матричных элементов постоянна и равна дефекту резонанса ($H_{11}-H_{22}=\Delta E$), а недиагональный матричный элемент представляется либо гиперболическим секансом ($H_{12}\sim \operatorname{sech} Bt$) [7] или экспонентой ($H_{12}\sim \exp(-\alpha t)$) [8]. В [8] было получено решение в случае достаточно большого разделения центра области неадиабатичности, определяемого условием $\Delta E=H_{12}$, и классической точки поворота R_0. При низких температурах, однако, большой вклад в величину сечения дают столкновения, при которых центр области неадиабатичности либо близок к R_0, либо вообще не достигается, и неадиабатические переходы происходят в области с большим изменением радиальной скорости v_R. В настоящей работе рассматривается квазиклассическая задача, в которой учитывается изменение v_R при экспоненциальной зависимости от расстояния R недиагонального матричного элемента ($H_{12}=A'\exp(-\alpha R)=A\exp(-\alpha R)$, где $r=R-R_0$).

В двухуровневом приближении эволюция амплитуд вероятностей a_1 и a_2 описывается системой уравнений [9]

$$i\dot{a}_1=\delta a_1+A\exp(-\alpha r)\,a_2,\quad i\dot{a}_2=\delta a_2+A\exp(-\alpha r)\,a_1, \tag{1}$$

где $\delta=\Delta E/2$, $|a_1(t=-\infty)|=1$ и требуется определить $|a_2(t=+\infty)|^2$.

Рассмотрим весьма распространенный случай, когда взаимодействие атомных частиц можно описать потенциалом Борна—Майера $U=B'\exp(-\beta R)=B\exp(-\beta r)$. Поскольку при классическом движении $v_R^2=2E(1-V/E-\rho^2/R^2)/\mu$, где μ — приведенная масса, а ρ — прицельный параметр, то с учетом быстрого (экспоненциального) спада с расстоянием недиагонального матричного элемента радиальную скорость можно представить в виде

$$v_R=v_0\left[1-\exp(-\beta' r)\right]^{1/2}, \tag{2}$$

где $v_0=(2B/\mu)^{1/2}$, $\beta'=\beta+2\rho^2/R_0^3$.

Решение системы (1) получим для случая равенства показателей экспоненты ($\alpha=\beta'$). Сделаем замену независимой переменной в соответствии с соотношением $1-\exp(-\alpha r)=y^2$. При этом y меняется от -1 до 0 при изменении расстояния R от ∞ до R_0 (изменении времени t от $-\infty$ до 0) и от 0 до 1 при изменении R от R_0 до ∞ (t от 0 до $+\infty$). Тогда система (1), учитывая (2), сводится к дифференциальному уравнению второго порядка

$$(1-y^2)^2\frac{d^2a_1}{dy^2}+\left[k_1^2+ik_2y+(1-y^2)^2k_3^2\right]a_1=0, \tag{3}$$

где $k_1^2=4\delta^2/\alpha^2v_0^2$, $k_2=4\delta/\alpha v_0$, $k_3^2=4A^2/\alpha^2v_0^2$.

Это уравнение с тремя особыми точками ($y=-1$, 1 и ∞), причем на ∞ особая точка является нерегулярной.

Сделаем еще одну (уже несущественную) замену переменной $1+y=2\xi$, что приведет к уравнению

$$\xi^2(1-\xi)^2\frac{d^2a_1}{d\xi^2}+\left[-p^2-p+2p\xi+q^2\xi^2(1-\xi)^2\right]a_1=0, \tag{4}$$

где $p=ik_2/4=i\delta/\alpha v_0=i\varepsilon/2$ (ε — параметр Месси), $q=4A/\alpha v_0$.

Особые точки уравнения (4): 0, 1 и ∞. Независимая переменная меняется от 0 до 1 ($\xi=1/2$ соответствует классической точке поворота). В окрестности особой точки $\xi=0$ в соответствии с общей теорией обыкновенных дифференциальных уравнений [10] вплоть до ближайшей другой особой точки $\xi=1$ решение уравнения (4) представляется бесконечным рядом

$$a_1=\xi^{1+p}(b_0+b_1\xi+b_2\xi^2+b_3\xi^3+\ldots)+\xi^{-p}(c_0+c_1\xi+c_2\xi^2+c_3\xi^3+\ldots)=$$
$$=\xi^{1+p}b_0R_1+\xi^{-p}c_0R_2, \tag{5}$$

где коэффициенты степенных рядов R_1 и R_2 определяются пятичленными рекуррентными соотношениями

$$b_{i-4}q^2 - 2b_{i-3}q^2 + b_{i-2}[p^2 + p(2i-3) + (i-1)(i-2) + q^2] - \\ - 2b_{i-1}[p^2 + 2p(i-1) + i(i-1)] + b_i[i(i+1) + 2ip] = 0, \tag{6а}$$

$$c_{i-4}q^2 - 2c_{i-3}q^2 + c_{i-2}[p^2 - p(2i-5) + (i-2)(i-3) + q^2] - \\ - 2c_{i-1}[p^2 - 2p(i-1) + (i-1)(i-2)] + c_i[i(i-1) - 2ip] = 0. \tag{6б}$$

В окрестности особой точки $\xi=1$ решение уравнения (4)

$$a_1 = (1-\xi)^{1-p} d_0 R_3 + (1-\xi)^p e_0 R_4, \tag{7}$$

где коэффициенты степенных рядов R_3 и R_4 по степеням $(1-\xi)$ определяются теми же рекуррентными формулами, что и соответственно R_1 и R_2, но с заменой: $p \to -p$.

В соответствии с начальным условием $b_0=0$ и $c_0=1$. Коэффициенты d_0 и e_0 в (7) могут быть найдены из условия непрерывности решения уравнения (4) и его первой производной в какой-либо точке интервала (0, 1). Поскольку требуется определить $|a_2(t=+\infty)|^2 = 1 - |a_1(t=+\infty)|^2$, а, согласно (7), $|a_1(\xi=1)| = |e_0|$, то

$$|a_2|^2 = 1 - \left|\left[(1-2p)R_2R_3 - \frac{1}{2}(R_2R_3' - R_2'R_3)\right] \Big/ \left[(1-2p)R_3R_4 - \frac{1}{2}(R_3'R_4 - R_3R_4')\right]\right|, \tag{8}$$

где ряды и их производные считаются в точке «сшивания» (у нас $\xi=1/2$).

Выражение (8) дает точное решение системы (1) для зависимости радиальной скорости от расстояния вида (2). При расчете коэффициентов рядов по рекуррентным соотношениям (6) достаточно ограничиться членами, квадратичными по p, поскольку обычно рассматриваются столкновения с малым дефектом резонанса. Мы провели расчет десяти членов ряда для R_1, R_3 и двенадцати членов для R_2, R_4, что обеспечило точность порядка 0.0001. В результате было получено, что для значений q, заметно не превышающих единицы, вероятность перехода

$$|a_2|^2 = \sin^2 q + 13.157p^2q^2 - 4.2124p^2q^4 + 0.5431p^2q^6 - 0.03786p^2q^8 + 0.001651p^2q^{10}. \tag{9}$$

Из (9) видно, что влияние дефекта резонанса на вероятность перехода, а следовательно, и на сечение процесса существенно возрастает вследствие изменения скорости вблизи точки поворота. Так, согласно формуле Розена—Зинера—Демкова [7, 8], при малом параметре Месси ε относительное уменьшение вероятности перехода в нерезонансном процессе по сравнению с резонансным $\eta = 1 - W_{\text{нерез}}/W_{\text{рез}} = \pi^2\varepsilon^2/4$. В соответствии с (9), однако, при $q \to 0$ $\eta = 13.157\,\varepsilon^2/4$, т. е. больше на 33 %, и мало меняется вплоть до $q \lesssim 2$. Приближение к случаю Розена—Зинера—Демкова имеет место при еще бóльших значениях q. Таким образом, формулы (8) и (9) позволяют лучше объяснить поведение сечений многих квазирезонансных процессов при низких энергиях относительного движения.

Список литературы

[1] *Никитин Е. Е.*, *Уманский С. Я.* Неадиабатические переходы при медленных атомных столкновениях. М.: Атомиздат, 1979. 278 с.
[2] *Лаптев В. Д.* // ЖЭТФ. 1981. Т. 81. Вып. 3 (9). С. 862—868.
[3] *Девдариани А. З.*, *Загребин А. Л.* // ЖЭТФ. 1984. Т. 86. Вып. 6. С. 1969—1980.
[4] *Haberland H.*, *Österlin P.* // Z. Phys. A. 1982. Bd 304. N 1. S. 11—21.
[5] *Житников Р. А.*, *Картошкин В. А.*, *Клементьев Г. В.* // ЖЭТФ. 1976. Т. 71. Вып. 3 (9). С. 1761—1772.
[6] *Картошкин В. А.* // Письма в ЖЭТФ. 1987. Т. 45. Вып. 3. С. 126—127.
[7] *Rosen N.*, *Zener C.* // Phys. Rev. 1932. Vol. 40. N 2. P. 502—506.
[8] *Демков Ю. Н.* // ЖЭТФ. 1963. Т. 45. Вып. 1. С. 195—201.
[9] *Мотт Н.*, *Месси Г.* Теория атомных столкновений. М.: Мир, 1969. 756 с.
[10] *Schlesinger L.* Differentialgleichungen. Leipzig, 1904. 320 S.

Физико-технический институт
им. А. Ф. Иоффе АН СССР
Ленинград

Поступило в Редакцию
10 ноября 1988 г.