

УДК 539.17

ИОНИЗАЦИЯ АТОМОВ ВОДОРОДА ПРОТОНАМИ И ЭЛЕКТРОНАМИ

С. А. Позднеев

Представлены расчеты ионизации атомов водорода электронами и протонами, выполненные на основе эйконального приближения в системе трех заряженных частиц.

Процессы ионизации в атомных столкновениях как с легкими, так и тяжелыми частицами, например, ионизация атомов водорода электронами и протонами

$$e + H \rightarrow \begin{cases} e + H^* & \text{процессы упругого рассеяния возбуждения} \\ p + e + e & \text{процессы ионизации} \end{cases} \quad (1)$$

$$p + H \rightarrow \begin{cases} p + H & \text{процессы упругого рассеяния возбуждения} \\ H + p & \text{процессы перезарядки с возбуждением} \\ p + e + p & \text{процессы ионизации} \end{cases} \quad (2)$$

привлекали и привлекают пристальное внимание как экспериментаторов, так и теоретиков [1, 2], причем именно в этих процессах впервые возникла необходимость математически корректного описания волновых функций системы нескольких частиц [3].

В этом случае дифференциальное сечение ионизации определяется формулой [1, 2, 4 - 7]

$$\frac{d^2\sigma}{dE_f d\Omega_f} = \frac{\mathbf{K}_f \mathbf{k}_e}{\mathbf{K}_i} \int A_e d\Omega_e,$$

где

$$A_e = -2\pi\mu \int \Psi_f V_i \Psi_i d\tau \quad (3)$$

– амплитуда процесса ионизации,

$$\Psi_i = (2\pi)^{-3/2} \varphi_i \exp i\mathbf{K}_i \mathbf{R}$$

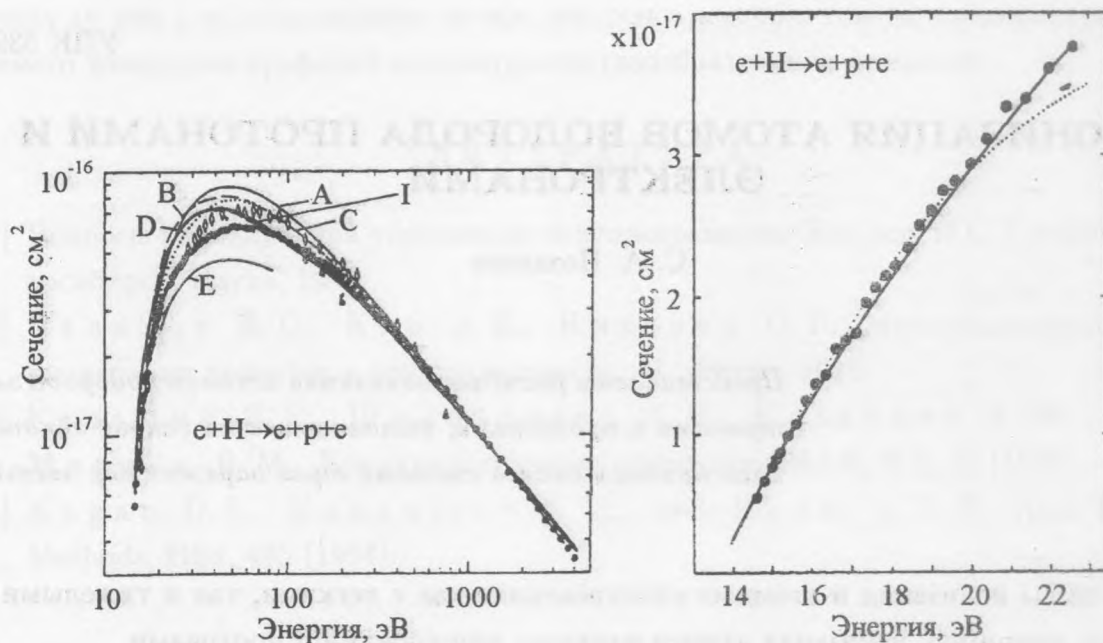


Рис. 1. Полное сечение ионизации атомов водорода электронами. Символы – экспериментальные данные [1, 2, 8, 9]; А – расчеты в приближении Борна [1, 2]; В, С – расчеты в приближении Борна с обменом [1, 2]; D – расчеты в приближении Очкура [1, 2]; I – результаты расчетов настоящей работы.

Рис. 2. Сечение ионизации атомов водорода электронами около порога ионизации. • – экспериментальные данные [1, 2, 8, 9]; штриховая линия – расчеты в борн-кулоновском приближении [1, 2]; сплошная линия – результаты расчетов настоящей работы.

– волновая функция начального состояния трехчастичной системы, φ_i – волновая функция связанного состояния пары, K_i, K_f, k_e – моменты налетающей и рассеянной частиц, а также момент ионизованной частицы,

$$V_i = V_{pH} = -\frac{Z}{r_1} - \frac{Z}{r_2} + \frac{Z^2}{r_{12}}$$

– потенциал взаимодействия в случае рассеяния протона на атоме водорода,

$$r_{12} = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$$

и

$$V_i = V_{eH} = -\frac{Z}{r_1} - \frac{Z}{r_2} + \frac{1}{r_{12}}$$

в случае рассеяния электрона на атоме водорода.

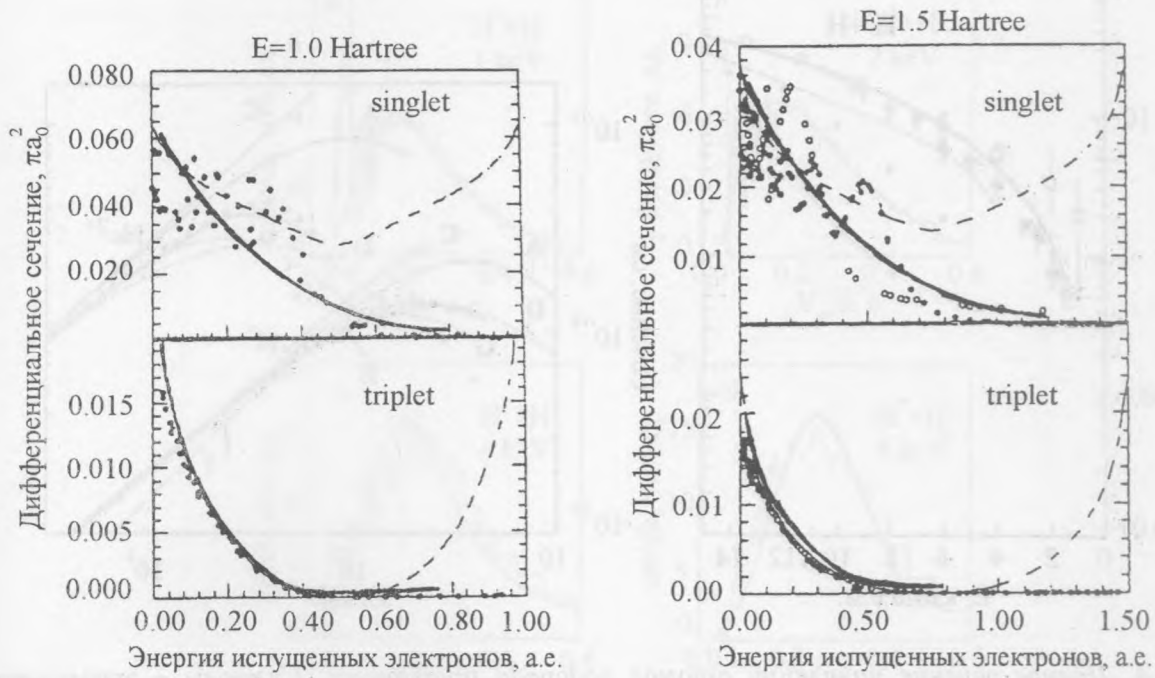


Рис. 3. Дифференциальное сечение ионизации атомов водорода электронами. а) – $E = 1$ Hartree, б) – $E = 1.5$ Hartree. \circ – экспериментальные данные [1, 2]; штриховая линия – результаты расчетов в квазиклассическом приближении [2]; сплошная линия – результаты расчетов настоящей работы.

Основная трудность, возникающая при расчетах сечений процессов ионизации (1, 2) – это нахождение асимптотики функции Ψ_f во всех областях конфигурационного пространства в связи с тем, что при определении амплитуды A_e (3) приходится интегрировать по всему конфигурационному пространству.

Поэтому для описания процессов ионизации при столкновении электронов и протонов с атомами водорода (1, 2) естественно использовать квантовую теорию рассеяния для системы трех заряженных частиц, основу которой составляют модифицированные интегро-дифференциальные уравнения Фаддеева в конфигурационном пространстве. Однако кулоновские взаимодействия, присущие этой простейшей задаче трех заряженных частиц, представляют значительные трудности для численного решения.

Попытки построения волновых функций системы нескольких частиц, не связанных с решениями уравнений Фаддеева, предпринимались во многих работах [1 – 6].

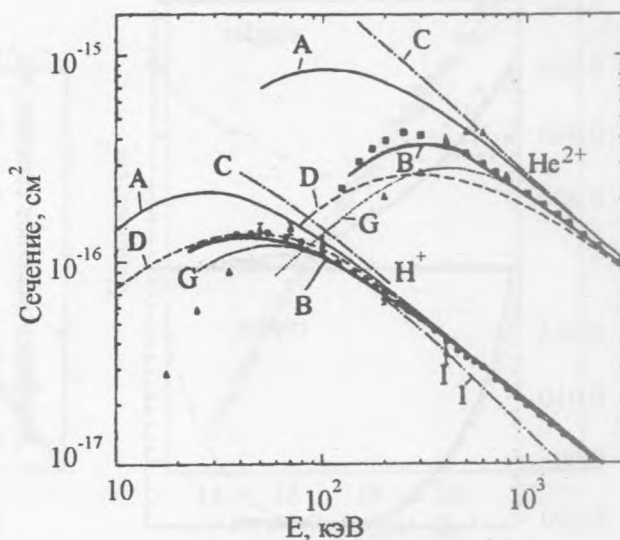
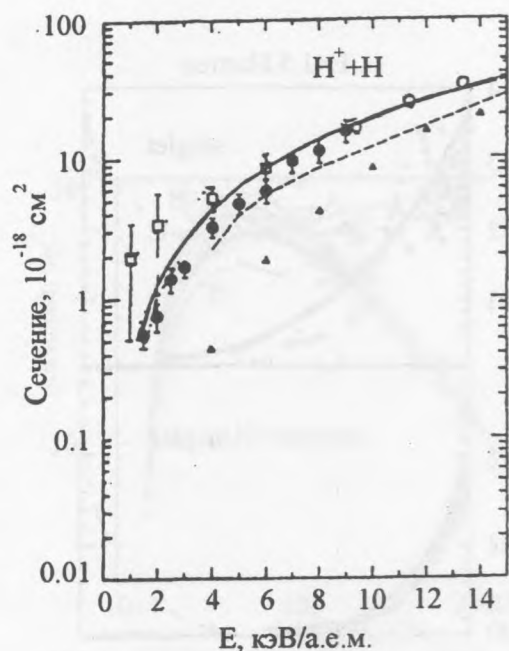


Рис. 4. Полное сечение ионизации атомов водорода протонами. Символы – экспериментальные данные [11 – 13]; штриховая линия – результаты расчетов в квазиклассическом приближении [10 – 12]; сплошная линия – результаты расчетов настоящей работы.

Рис. 5. Полное сечение ионизации атомов водорода и гелия. Символы – экспериментальные данные [1, 2, 11 – 14]; А – приближение Борна [1, 2]; В – результаты расчетов настоящей работы; С – приближение метода искаженных волн [1, 2]; G – приближение Глаубера [1, 2, 9 – 14]; В – приближение сильной связи [1, 2, 9 – 14]; I – классические траекторные расчеты [1, 2].

В [4] для описания динамики трех частиц в конечном состоянии использовались волновые функции в виде произведения трехчастичных плоских волн и кулоновских искажающих множителей, выраженных через вырожденные гипергеометрические функции. Подобное представление волновых функций оправдано только в том случае, когда все расстояния между тремя парами частиц стремятся к бесконечности [3].

В работах [5] была предпринята попытка построения асимптотического решения трехчастичного уравнения Шредингера в области конфигурационного пространства, где две частицы находятся недалеко друг от друга, а третья находится на достаточно большом расстоянии (причем, как отмечено в ряде работ [4 – 6], эта область

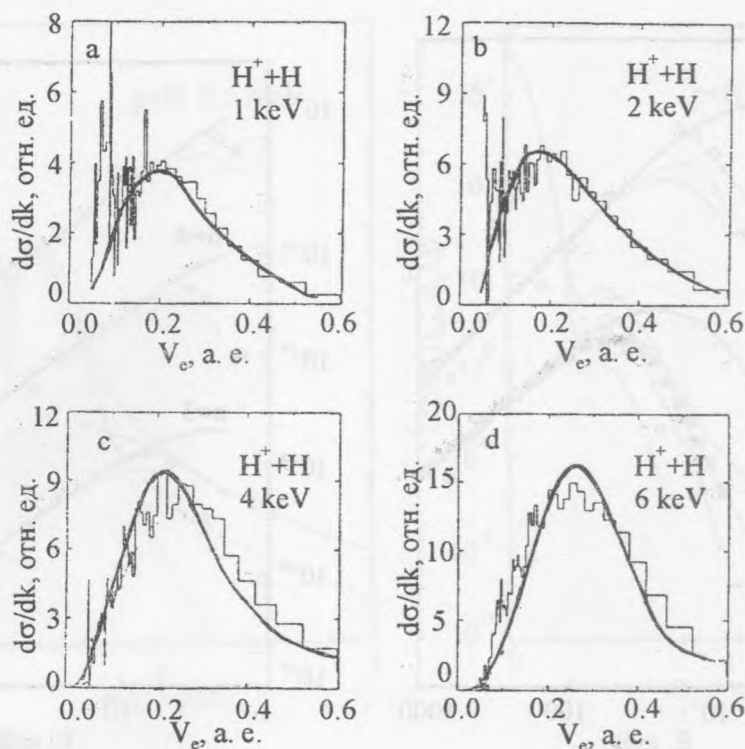


Рис. 6. Дифференциальное сечение распределения ионизированных электронов по скоростям при столкновении протонов с атомами водорода. \circ – экспериментальные данные [1, 2, 11]; сплошная кривая – результаты расчетов настоящей работы.

конфигурационного пространства вносит значительный вклад в амплитуду рассеяния). Однако волновые функции, полученные с учетом кулоновского перерассеяния пар частиц, имеют некорректное асимптотическое поведение [3, 6], а так как при вычислении амплитуды интегрирование проводится по всему конфигурационному пространству системы трех тел, то тем самым подобные волновые функции не могут быть использованы в расчетах.

Таким образом, основной недостаток всех представленных выше теоретических моделей ионизации следующий:

- применение для описания процессов ионизации волновых функций, имеющих не правильное асимптотическое поведение [4, 5];
- применение волновых функций системы трех тел, имеющих корректное асимптотическое поведение, но к совершенно иной задаче, а именно описанию рассеяния в системе четырех и большего числа заряженных частиц [6], для которой, естественно, волновые

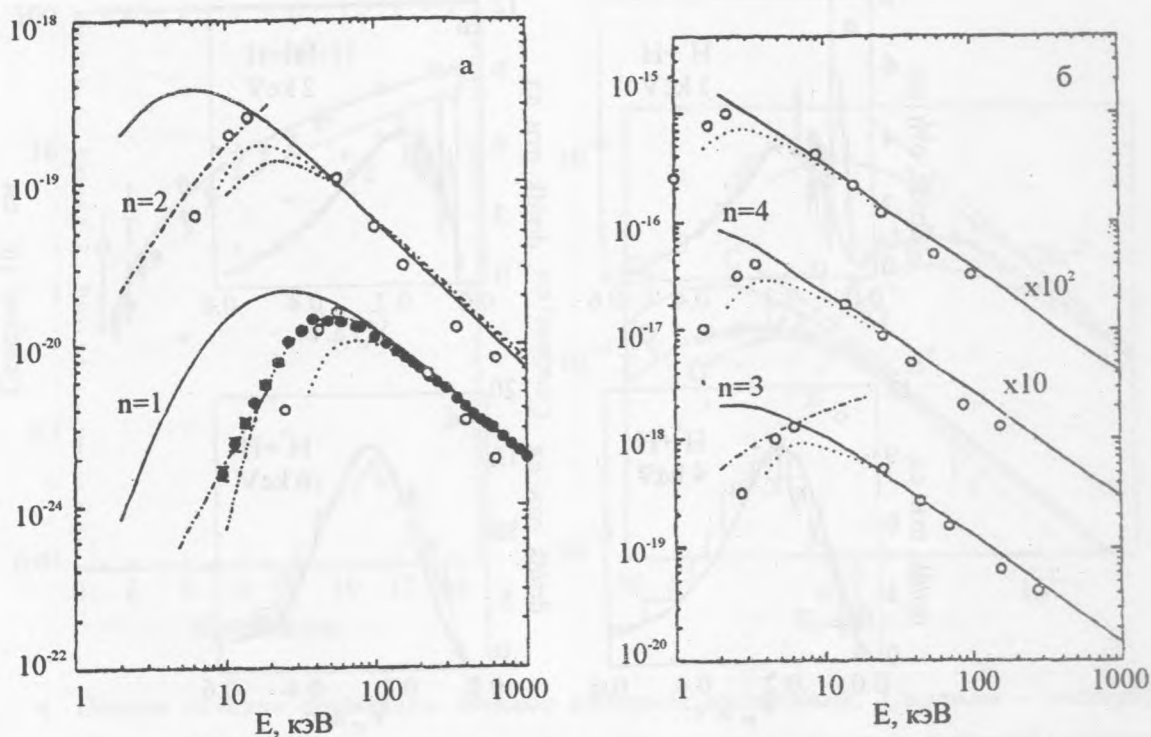


Рис. 7. Полное сечение ионизации атомов водорода протонами в зависимости от главного квантового числа а) $n = 1 - 2$; б) $n = 3 - 5$. Символы - экспериментальные данные [1, 2, 12 - 14]; штриховая линия - результаты расчетов в квазиклассическом приближении [1, 2, 11]; штрих-пунктирная линия - результаты расчетов в борн-кулоновском приближении [1, 2, 9 - 14]; сплошная линия - результаты расчетов настоящей работы.

функции системы трех тел применены быть не могут.

Поэтому применим эйкональное приближение для построения волновых функций системы трех заряженных частиц, справедливое в случае возмущений, малых по сравнению с энергией E налетающей частицы ($V_c(x)/E \ll 1$, $V_c(x)$ - кулоновские потенциалы). Отметим, что это эйкональное приближение было успешно применено для построения асимптотических граничных условий для модифицированных уравнений Фаддеева [3]. В этом случае также не требуется решение модифицированных уравнений Фаддеева и тем самым задача упрощается и приводится к вычислению интегралов.

Таким образом, основной целью настоящей работы является применение эйконального приближения [7] для расчетов процессов ионизации атомов водорода протонами и электронами.

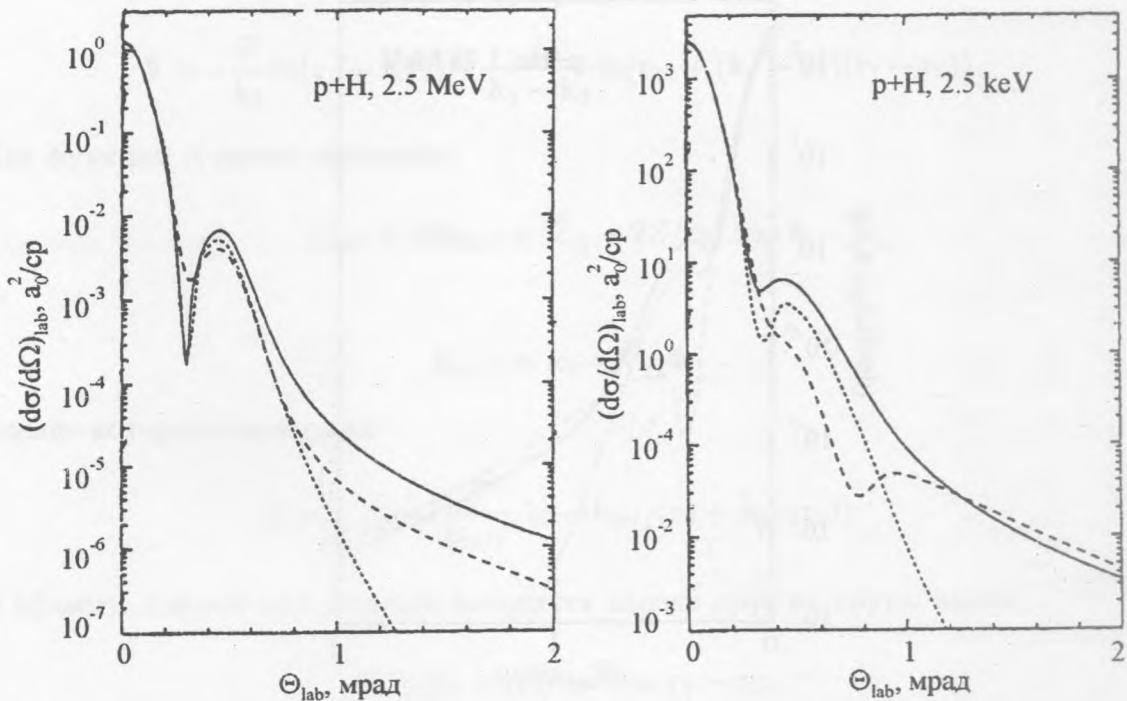


Рис. 8. Дифференциальное сечение процесса перезарядки протонов на атомах водорода при энергии налетающих протонов 2.5 МэВ. Штриховая линия – результаты расчетов в эйкональном приближении [1, 2, 5, 12]; пунктир – результаты расчетов в приближении сильной связи [1, 2, 5, 12]; сплошная линия – результаты расчетов настоящей работы.

Рис. 9. Дифференциальное сечение процесса перезарядки протонов на атомах водорода при энергии налетающих протонов 624 МэВ. Штриховая линия – результаты расчетов в эйкональном приближении [1, 2, 5, 12]; пунктир – результаты расчетов в приближении сильной связи [1, 2, 5, 12]; сплошная линия – результаты расчетов настоящей работы.

В нашем случае уравнение Шредингера имеет вид (для простоты рассмотрим рассеяние электрона на атоме водорода)

$$(\Delta_{r_1} + \Delta_{r_1} - 2V - 2E)\Psi = 0. \tag{4}$$

Для построения асимптотики Ψ во всех областях конфигурационного пространства используем эйкональное приближение, представленное в [3, 7].

В области, где две частицы находятся недалеко друг от друга, а третья частица

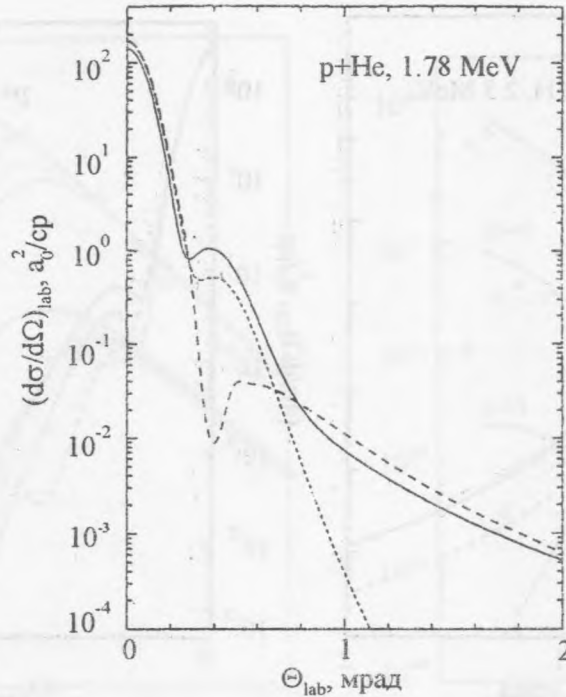


Рис. 10. Дифференциальное сечение процесса перезарядки протонов на атомах гелия при энергии налетающих протонов 1.78 МэВ. Штриховая линия – результаты расчетов в эйкональном приближении [1, 2, 5, 12]; пунктир – результаты расчетов в приближении сильной связи [1, 2, 5, 12]; сплошная линия – результаты расчетов настоящей работы.

находится на достаточно большом расстоянии, положим

$$\Psi = \exp i(\mathbf{k}_1 \mathbf{r}_1 + \mathbf{k}_2 \mathbf{r}_2) \tilde{\Psi}. \quad (5)$$

Подставим (5) в (4) и, учитывая $E = (k_1^2 + k_2^2)/2$, получим следующее уравнение для $\tilde{\Psi}$:

$$\Delta_{r_1} + \Delta_{r_2} + 2i(\mathbf{k}_1 \vec{\nabla}_{r_1} + \mathbf{k}_2 \vec{\nabla}_{r_2} - 2V)\tilde{\Psi} = 0. \quad (6)$$

Используя квазиклассическое представление для $\tilde{\Psi}$

$$\tilde{\Psi} = A \exp i\Phi(r_1) \quad (7)$$

и подставляя (7) в (6), получим следующее уравнение для определения Φ :

$$(\mathbf{k}_1 \vec{\nabla}_{r_1} + \mathbf{k}_2 \vec{\nabla}_{r_2})\Phi = -Z/r_1 - 1/r_{12},$$

решение которого имеет вид

$$\Phi = -\frac{Z}{k_1} \ln(\mathbf{r}_1 + \hat{k}_1 \mathbf{r}_1) + \frac{1}{k_1 - k_2} \ln(\mathbf{r}_{12} + (\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2)(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)).$$

Для функции A имеем уравнение

$$(\Delta_{r_2} + 2i\mathbf{k}_{2eff} + \vec{\nabla}_{r_2} - 2Z/r_2)A = 0,$$

где

$$\mathbf{k}_{2eff} = \mathbf{k}_2 + \vec{\nabla}_{r_2} \Phi$$

и решение которого имеет вид

$$A = {}_1F_1\left(-i\frac{Z}{k_{2eff}}, 1; -ik_{2eff}(\mathbf{r}_2 + \hat{k}_{2eff}\mathbf{r}_2)\right).$$

В области, где все три частицы находятся далеко друг от друга, имеем

$$\mathbf{R} = (\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)/2, \quad \mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2.$$

Положив

$$\tilde{\Psi} = B \exp i\Lambda,$$

получим для Λ уравнение

$$(\mathbf{k}_1 \vec{\nabla}_{r_1} + \mathbf{k}_2 \vec{\nabla}_{r_2})\Lambda = -Z/r_1 - Z/r_2,$$

решение которого имеет вид

$$\Lambda = -\frac{Z}{k_1} \log(\mathbf{r}_1 + \hat{k}_1 \mathbf{r}_1) + \frac{Z}{k_2} \log(\mathbf{r}_2 + \hat{k}_2 \mathbf{r}_2),$$

а для функции B имеем уравнение

$$(\Delta_r + 2i\mathbf{k}_{eff} \vec{\nabla}_r - 1/r)B = 0,$$

$$\mathbf{k}_{eff} = (\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2)/2 + (\vec{\nabla}_{r_1} \Lambda - \vec{\nabla}_{r_2} \Lambda),$$

решение которого имеет вид

$$B(r) = {}_1F_1\left(-i\frac{1}{k_{eff}}, 1; -ik_{eff}(\mathbf{r} + \hat{k}_{eff}\mathbf{r})\right).$$

Применяя аналогичные построения для всего конфигурационного пространства, имеем следующее представление:

$$\tilde{\Psi} = {}_1F_1\left(-i\frac{Z}{k_{2eff}}, 1; -ik_{2eff}(\mathbf{r}_2 + \hat{k}_{2eff}\mathbf{r}_2)\right) {}_1F_1\left(-i\frac{Z}{k_2}, 1; -ik_1(\mathbf{r}_1 + \hat{k}_1\mathbf{r}_1)\right) B(r).$$

Для проверки правильности асимптотики можно воспользоваться следующим правилом. Рассмотрим

$$\delta\Psi_f = (H - E)\Psi_f,$$

где H – гамильтониан трехчастичной системы. Если решение точное, то $\delta\Psi_f = 0$. В нашем случае, когда решение приближенное, имеем $\delta\Psi_f \simeq O(1/R^2)$, т.е. построенная таким образом волновая функция удовлетворяет асимптотическим условиям. В случае же волновых функций, полученных в [5], имеем $\delta\Psi_f \simeq O(1/R)$, т.е. волновые функции имеют неправильную асимптотику.

При вычислении амплитуды (4) можно использовать технику, представленную в [10]. В этом случае амплитуда рассеяния имеет представление в виде ряда, члены которого являются произведениями амплитуд рассеяния в системе двух тел, а количество сомножителей в слагаемых определяет порядок перерассеяния.

Таким образом, для процессов ионизации в рассматриваемом приближении рассеяние в системе трех заряженных частиц можно рассматривать как результат последовательных двухчастичных столкновений, причем в случае процессов ионизации парное рассеяние определяет старшие члены амплитуды рассеяния при вылете частиц под малыми углами.

Результаты расчетов процессов ионизации и перезарядки, происходящих при столкновениях электронов и протонов с атомами водорода, которые были выполнены на основе предлагаемого метода, представлены на рис. 1 – 10. На этих же рисунках представлены экспериментальные данные [1, 2, 4 – 13] и расчеты, выполненные в квазиклассическом приближении [4, 6, 12, 13], приближении сильной связи [4 – 6, 11, 12] и при помощи численного решения модифицированных уравнений Фаддеева для трех заряженных частиц [3, 5, 14].

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант N 98-02-1766) и Фонда поддержки науки Китайской Народной Республики (грант N 19734030).

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Peterkop R. K. Theory of Ionization of Atoms by Electron Impact, Boulder, Colorado, University Press, 1977.
- [2] Mark T. D., Dunn G. H. Electron Impact Ionization, N.Y., 1985.
- [3] Faddeev L. D., Merkuriev S. P. Quantum Scattering Theory for Several Particle System, Kluwer, Dordrech, 1993.
- [4] Bandyopadhyay A. et al. J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., **27**, 4337 (1994); Mandal P. et al. Phys. Rev., **A33**, 756 (1986).
- [5] Альт Э. О., Мухамеджанов Р. К. Письма в ЖЭТФ, **56**, 450 (1992); Phys. Rev., **A42**, 331 (1990); **A47**, 2004 (1993); **A53**, 2438 (1996); **A54**, 4091 (1996); **A60**, N 1, 314 (1999).
- [6] Куникеев Ш. Д., Сенашенко В. С. Письма в ЖТФ, **14**, 1181 (1988), ЖЭТФ, **96**, 1639 (1989); **109**, 44 (1996); **109**, 1116 (1996).
- [7] Engelns A., Klar H., Malcherek G. J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., **30**, L811 (1997).
- [8] Scott T., Bransden B. H. J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., **14**, 2277 (1981).
- [9] Shan M. B., Gilbody H. B. J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., **14**, 2361 (1981); **20**, 3501 (1987).
- [10] Nordsiek A. Phys. Rev., **93**, 758 (1954).
- [11] Baertschy M. et al. Phys. Rev., **A60**, N 1, R13 (1999).
- [12] Alston S. Phys. Rev., **A52**, N 5, 3860 (1995).
- [13] Piekma M. et al. Phys. Rev. Lett., **73**, N 1, 46 (1994).
- [14] Позднеев С. А. Труды ФИАН, **213**, 99 (1991).

Поступила в редакцию 29 декабря 1999 г.