Краткие сообщения по физике № 5 1981

СЕЧЕНИЯ ПЕРЕЗАРЯДКИ, НОРМИРОВАННЫЕ В ПРЕДСТАВЛЕНИИ ПАРАМЕТРА УДАРА

В. П. Шевелько

УДК 539.186.3

Получены аналитические выражения для вероятностей одноэлектронной перезарядки быстрых ионов на атомах для $1s - nlm$, $n' - n$ переходов. На основе полученных выражений выполнены численные расчеты эффективных сечений перезарядки с учетом нормировки в представлении параметра удара.

В работе /I/ в первом порядке теории возмущений получено соотношение между квазиклассической $a(\rho, v)$ и квантово-механической $f(q, v)$ амплитудами в задаче о перезарядке

$$B^{Z+} + A(n_o l_o m_o) \longrightarrow B^{(Z-1)+}(nlm) + A^+ \qquad (I)$$

в виде

$$a(\rho, v) = \frac{1}{(2\pi)^2 v} \int_P f(\vec{q}, v) e^{i\vec{q}\vec{\rho}} d^2\vec{q}, \qquad (2)$$

где v – относительная скорость частиц, ρ – прицельный параметр, ω – дефект резонанса; интегрирование проводится по плоскости $P[\vec{q}\vec{v} - \omega - v^2/2 = 0]$.

Используя водородоподобные волновые функции

$$P_{nl}(r) = Z^{3/2} P^H_{nl}(Zr), \qquad (3)$$

выражения для $a(\rho, v)$ можно получить в замкнутом аналитическом виде. Так, для захвата K-электронов ($n_o l_o m_o = 1s_o$) в состояния nlm ($n = 3$) получаем:

$$|a_{1s,3s}| = \frac{2}{3\sqrt{3}} \frac{(Z_oZ)^{5/2}\rho^2}{vq_o^2} \left| K_2(q_o\rho) - \frac{8Z^2\rho}{3^4 q_o} K_3(q_o\rho) + \frac{Z^4\rho^2}{3^6 q_o^2} K_4(q_o\rho)\right|,$$

$$|a_{1s,3p,0}| = \frac{2^3(Z_oZ)^{5/2}Z\left|\frac{\omega}{v} + \frac{v}{2}\right|\rho^3}{3^4\sqrt{2}\ vq_o^3} \left| K_3(q_o\rho) - \frac{Z^2\rho}{36q_o} K_4(q_o\rho)\right|,$$

$$|a_{1s,3p,\pm 1}| = \frac{2^2(Z_oZ)^{5/2}Z\rho^3}{3^4 vq_o^2} \left| K_2(q_o\rho) - \frac{Z^2\rho}{36q_o} K_3(q_o\rho)\right|, \qquad (4)$$

$$|a_{1s,3d,0}| = \frac{2^3(Z_oZ)^{5/2}Z^2\rho^3}{3^5\sqrt{6}vq_o^3} \left| \left[2\left|\frac{\omega}{v} + \frac{v}{2}\right|^2 + q_o^2\right] \frac{\rho}{2^3 q_o} K_4(q_o\rho) - \right.$$

$$\left. - K_3(q_o\rho)\right|,$$

$$|a_{1s,3d,\pm 1}| = \frac{(Z_oZ)^{5/2}Z^2\rho^4\left|\frac{\omega}{v} + \frac{v}{2}\right|}{3^5 vq_o^3} K_3(q_o\rho),$$

$$|a_{1s,3d,\pm 2}| = \frac{(Z_oZ)^{5/2}Z^2\rho^4}{2\cdot 3^5 vq_o^2} K_2(q_o\rho),$$

$$q_o^2 = \left|\frac{\omega}{v} + \frac{v}{2}\right|^2 + \frac{Z^2}{n^2},\ \omega = \frac{Z_o^2}{2n_o^2} - \frac{Z^2}{2n^2} \equiv I_o - I, \qquad (5)$$

где $K_n(x)$ – функции Макдональда, Z_o, Z – эффективные заряды, определяемые энергией связи I захватываемого электрона в атоме А и ионе $B^{(Z-1)+}$ соответственно: $Z = n\sqrt{2I}$.

Выражения $a(\rho, v)$ для состояний nlm с $n = 1$ и 2 приведены в /I/. Аналогично можно получить выражения $a(\rho, v)$ для захвата электронов из L-, M- и т.д. оболочек мишени в различные состояния иона $B^{(Z-1)+}$.

Для ряда приложений необходимо знание величин $a(\rho, v)$ и эффективных сечений перезарядки, просуммированных по всем квантовым числам lm, т.е. для реакции

$$B^{Z+} + A(n_o) \rightarrow B^{(Z-1)+}(n) + A^+. \qquad (6)$$

Для реакции (6) с учетом (2) и с функциями (3) соответствующие выражения имеют вид:

$$f_{n_o n}(q, v) = \frac{2^3(4\pi)^2(Z_o Z)^{5/2}}{(n_o n)^{3/2}\left[q^2 + \left(\frac{\omega}{v} + \frac{v}{2}\right)^2 + \frac{Z^2}{n^2}\right]^3}, \tag{7}$$

$$|a_{n_o n}(\rho, v)|^2 = \frac{4(Z_o Z)^5 \rho^4}{n_o^2 \quad (n_o n)^3\left[\left(\frac{\omega}{v} + \frac{v}{2}\right)^2 + \frac{Z^2}{n^2}\right]^2} K_2^2\left(\rho\sqrt{\left(\frac{\omega}{v} + \frac{v}{2}\right)^2 + \frac{Z^2}{n^2}}\right), \tag{8}$$

$$\sigma(n_o - n) = \pi a_o^2 \frac{2^8 N(Z_o Z)^5}{15 v^2 n^3 n_o^5}\left[\left(\frac{\omega}{v} + \frac{v}{2}\right)^2 + \frac{Z^2}{n^2}\right]^{-5}, \quad \omega = \frac{Z_o^2}{2n_o^2} - \frac{Z^2}{2n^2}, \tag{9}$$

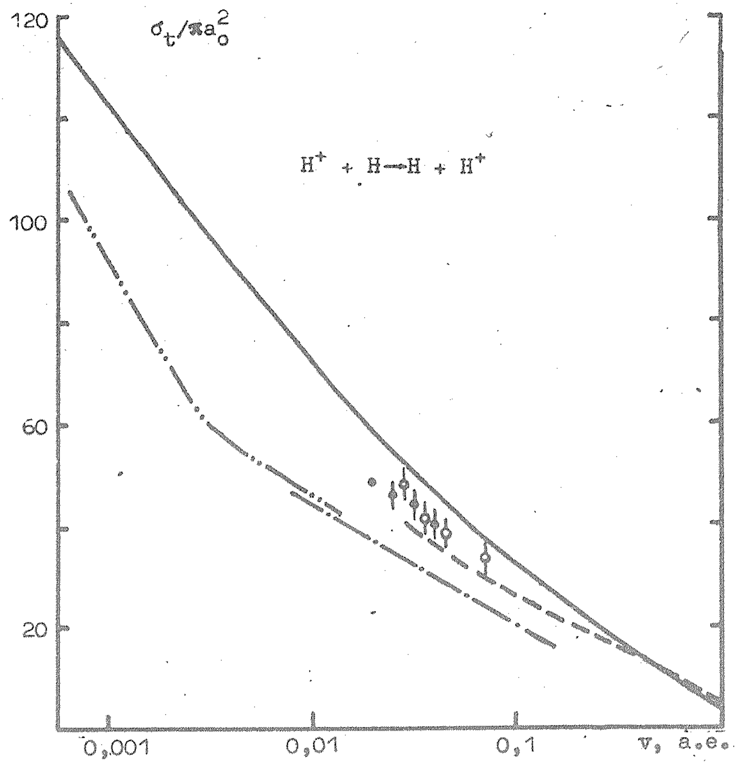
где N – число эквивалентных электронов атома-мишени в оболочке с главным квантовым числом n_o. Формула (9) совпадает с квантово-механическим выражением для $\sigma(n_o - n)$, полученным в /2/.

Большой интерес представляют реакции перезарядки с малым дефектом резонанса ω, когда сечения захвата электрона очень велики: $\sigma_{max} \sim 10^{-14} - 10^{-16}$ см^2. Для таких переходов борновское приближение дает сильно завышенные результаты (т.к. вероятности $|a(\rho, v)|^2$ оказываются много большими единицы), и форма записи сечения через $a(\rho, v)$ является более удобной, чем через квантовую амплитуду $f(q, v)$, т.к. позволяет осуществить процедуру нормировки сечения в представлении параметра удара в виде

$$\sigma_{01}^N(v) = 2\int_0^\infty \rho d\rho \left|a_{01}^N(\rho, v)\right|^2 (\pi a_o^2),$$

$$\left|a_{01}^N(\rho, v)\right|^2 = \frac{|a_{01}(\rho, v)|^2}{1 + \sum\limits_{m \neq 0} |a_{om}(\rho, v)|^2}, \tag{IO}$$

где $a_{om}(\rho, v)$ – борновские амплитуды (2).



Р и с. I. Полное сечение перезарядки $p + H(1s) \to H + p$. Расчет: —..— метод возмущенных стационарных состояний /3/, —.— молекулярный подход /4/, ——— настоящая работа, формула (I0); эксперимент: – – – /5/, ... /6/, ōōō реакция $D^+ + D$ /6/

На рис. I иллюстрируется влияние эффекта нормировки сечений на примере перезарядки протонов на атомах H: $p + H(1s) \to H + p$. Сечения, вычисленные без учета нормировки, превышают экспериментальные данные в 10^4 раз при $v = 0,01$ а.е. и совпадают с нормированными сечениями (I0) только при $v \geqslant 2$ а.е. (1 а.е. = $= 2,2 \cdot 10^8$ см/с).

В заключение отметим, что процедура нормировки, использовавшаяся в настоящей работе, существенна для переходов с малым дефектом резонанса ω в области скоростей, определяемой квазиклассическими пределами

$$\sqrt{2\omega/M} < v < \sqrt{2\omega}, \tag{II}$$

где M - приведенная масса сталкивающихся частиц.

Поступила в редакцию
27 февраля I98I г.

Литература

I. В. П. Шевелько, Краткие сообщения по физике ФИАН № 3, 33 (I980).
2. V. P. Shevelko, Zs. Phys., A287, 19 (1978).
3. А. В. Матвеенко, Л. И. Пономарев, ЖЭТФ, 68, 920 (I975).
4. F. J. Smith, Proc. Phys. Soc., 92, 866 (1967).
5. H. S. W. Massey and H. B. Gilbody, Electronic and Ionic Impact Phenomena, vol. 4, Oxford-Clarendon, 1974.
6. V. A. Belyaev, B. G. Brezhnev, E. M. Erastov, YI ICPEAC, Leningrad, Nauka, 1967, Abstracts, p. 157.