Краткие сообщения по физике № 3 1980

СООТНОШЕНИЕ МЕЖДУ КВАЗИКЛАССИЧЕСКОЙ И КВАНТОВО-МЕХАНИЧЕСКОЙ АМПЛИТУДАМИ В ЗАДАЧЕ О ПЕРЕЗАРЯДКЕ

В. П. Шевелько

УДК 539.186.3

Получено соотношение между квазиклассической амплитудой захвата электрона $a(\vec{\rho},v)$ и квантово-механической амплитудой $f(\vec{q},v)$ в задаче о перезарядке в приближении Бринкмана-Крамерса. Используя водородоподобные волновые функции. получены аналитические выражения амплитуд $a(\vec{\rho},v)$ для реакций перезарядки с участием многозарядных ионов.

Для расчета эффективных сечений одноэлектронной перезарядки ионов на атомах $B^{Z+} + A \to B^{(Z-1)+} + A^{+}$ в области относительных скоростей сталкивающихся частиц $v > \sqrt{\omega}$ (ω - дефект резонанса реакции), как правило, используют приближение Бринкмана-Крамерса /1/ (БК) или его модификации. В области максимума сечений $v \sim \sqrt{\omega}$ приближение БК дает сильно завышенные результаты, особенно для переходов между близкими уровнями, а при $\omega = 0$ сечение расходится как v^{-2} при $v \to 0$. Это связано с тем обстоятельством, что в области $v \lesssim \sqrt{\omega}$ приближение БК, строго говоря, неприменимо, так как нарушается условие сохранения числа частиц. Устранение этого дефекта, называемое "нормировкой сечения", может быть выполнено квазиклассическим методом, т.е. в представлении параметра удара /2-4/.

В приближении БК квантово-механическая амплитуда перезарядки $f(\vec{q},v)$ является произведением Фурье-образов волновых функций начального и конечного состояний с потенциалом взаимодействия и хорошо изучена теоретически /5-7/. Величины квазиклассических амплитуд $a(\vec{\rho},v)$, вычисленные с помощью полученного в настоящей работе соотношения, могут быть использованы для расчета "нормированных" сечений перезарядки в области скоростей столкновения $v \lesssim \sqrt{\omega}$.

Согласно квазиклассическому подходу, выражение $a(\vec{\rho},v)$ для захвата электрона из состояния 0 атома мишени в состояние I образующегося иона в приближении БК имеет вид /8/:

$$a(\vec{\rho},\ v) = \int_{-\infty}^{\infty} dt\ \exp(-\ i\omega t) \int d\vec{r}\varphi_1^*(\vec{r}_2)V(r_1)\varphi_0(\vec{r}_1)\exp(i\vec{v}\vec{r}), \quad (I)$$

где ρ – прицельный параметр, $\varphi_{0,1}$ – волновые функции, $V(r_1)$ – взаимодействие, $\vec{r} = (\vec{r}_1 + \vec{r}_2)/2$.

Выражение (I) можно записать через Фурье-компоненты функций φ_1 и $V\varphi_0$:

$$a(\vec{\rho},v) = (2\pi)^{-6} \int_{-\infty}^{\infty} dt\ \exp(-i\omega t) \int d\vec{r}d\vec{p}d\vec{q}\Phi_0(\vec{p})\Phi_1^*(\vec{q})\times$$
$$\times \exp\left[-\ i\vec{q}(\vec{r} - \vec{R}/2) + i\vec{p}(\vec{r} + \vec{R}/2) - i\vec{v}\vec{r}\right]; \quad (2)$$

$$\Phi_0(\vec{p}) = \int d\vec{r}V(r)\varphi_0(\vec{r})\exp(-\ i\vec{p}\vec{r}), \quad (3)$$

$$\Phi_1^*(\vec{q}) = \int d\vec{r}\varphi_1^*(\vec{r})\exp(i\vec{q}\vec{r}), \quad (4)$$

где $\vec{R}$ – расстояние между ядрами сталкивающихся частиц. В случае прямолинейной траектории $\vec{R} = \vec{\rho} + \vec{v}t$ $(\vec{\rho}\vec{v} = 0)$ интегрирование по $\vec{r}$ и t в (2) соответственно дает $\delta(\vec{p} - \vec{q} + \vec{v})$ и $\delta(\vec{q}\vec{v} - \omega - v^2/2)$, что приводит к выражению

$$a(\vec{\rho},v) = \frac{1}{(2\pi)^2 v} \int_P f(\vec{q},v)\exp(i\vec{q}\vec{\rho})d^2\vec{q}, \quad (5)$$

$$f(\vec{q},v) = \Phi_0(\vec{p})\Phi_1^*(\vec{q}), \quad (6)$$

$$\vec{q} - \vec{p} = \vec{v},\ \ q^2 - p^2 = 2\omega. \quad (7)$$

Интегрирование в (5) проводится по плоскости P, описываемой уравнением $\vec{q}\vec{v} - \omega - v^2/2 = 0$. Произведение Фурье-образов (6) с условием (7) представляет собой квантово-механическую амплитуду перезарядки в приближении БК (см., например, /6/*)).

Отделяя угловые и радиальные части в формулах (5) – (7) для перехода $n_0l_0m_0 \rightarrow n_1l_1m_1$ окончательно получаем:

---

*) В случае возбуждения атома тяжелой частицей интегрирование амплитуды рассеяния в (5) проводится по плоскости $P[\vec{q}\vec{v} - \omega = 0]$ (см. /9/).

$$|a(\rho,v)|^2 = \left|\frac{2}{v}\int_0^\infty \text{æ}\,d\text{æ}\,C_{l_0m_0}C_{l_1m_1}P_{l_0}^{m_0}(\theta_0)P_{l_1}^{m_1}(\theta_1)J_{\Delta m}(\text{æ}\rho)\times\right.$$
$$\left.\times T_0(\sqrt{\text{æ}^2 + (\omega/v - v/2)^2})T_1(\sqrt{\text{æ}^2 + (\omega/v + v/2)^2})\right|^2; \tag{8}$$

$$C_{lm} = [(2l + 1)(l - m)!/(l + m)!]^{1/2},$$

$$\Delta m = |m_0 - m_1|, \quad \vec{\text{æ}} = \vec{q} - (\vec{v}/v)(\omega/v + v/2),$$

$$\theta_0 = \frac{v/2 - \omega/v}{\sqrt{\text{æ}^2 + (\omega/v - v/2)^2}}; \quad \theta_1 = \frac{\omega/v + v/2}{\sqrt{\text{æ}^2 + (\omega/v + v/2)^2}},$$

где $J(x)$ – функция Бесселя, P_l^m – присоединенные полиномы Лежандра; функции $T_{0,1}$ являются радиальными частями Фурье-образов (3) и (4) соответственно.

Для реакции перезарядки ядер на водородоподобном ионе $Z + H_{Z'}(1s) \to H_Z(nlm) + Z'$ выражения для амплитуд $a(\rho,v)$ в ряде случаев могут быть записаны в замкнутом аналитическом виде:

$$nlm = 1s_0; \quad |a(\rho,v)| = \frac{2\rho^2(ZZ')^{5/2}}{v(q_0^2 + Z^2)}K_2(\rho\sqrt{q_0^2 + Z^2}), \tag{9}$$

$$nlm = 2s_0; \quad |a(\rho,v)| = \frac{\rho^2(ZZ')^{5/2}}{\sqrt{2}v(q_0^2 + Z^2/4)}\times$$
$$\times\left|K_2(\rho\sqrt{q_0^2 + Z^2/4}) - \frac{\rho Z^2 K_3(\rho\sqrt{q_0^2 + Z^2/4})}{12(q_0^2 + Z^2/4)}\right|, \tag{I0}$$

$$nlm = 2p_0; \quad |a(\rho,v)| = \frac{\sqrt{2}\rho^3(ZZ')^{5/2}Zq_0}{12v(q_0^2 + Z^2/4)^{3/2}}K_3(\rho\sqrt{q_0^2 + Z^2/4}), \tag{II}$$

$$nlm = 2p_{\pm1}; \quad |a(\rho,v)| = \frac{\rho^3 Z(ZZ')^{5/2}}{12v(q_0^2 + Z^2/4)}K_2(\rho\sqrt{q_0^2 + Z^2/4}), \tag{I2}$$

где $q_0 = \omega/v + v/2$, $K_\nu(x)$ – функции Макдональда. Формула (9) при $Z = Z' = 1$ $(\omega = 0)$ переходит в выражение, полученное в (I). Сечения перезарядки, вычисленные с помощью формул (9) – (I2), дают известный результат с асимптотикой $\sigma \sim (Z'Z)^5 Z^{2l} v^{-2(6+l)}$

(см. /10/).

Автор благодарен А. В. Виноградову и Л. П. Преснякову за полезные замечания.

Поступила в редакцию
25 декабря 1979 г.

Литература

1. H. C. Brinkman, H. A. Kramers, Proc. Acad. Sci. Amst. 33,973 (1930).
2. M. J. Seaton, Proc. Phys. Soc. 79, 1105 (1962).
3. И. А. Полуэктов, Л. П. Пресняков, ЖЭТФ, 54, 121 (1968).
4. L. A. Vainstein, A. V. Vinogradov, J. Phys. B 3, 1090 (1970).
5. R. M. May, Phys. Rev., 136A, 669 (1964).
6. А. В. Виноградов, В. П. Шевелько, ЖЭТФ, 59, 593 (1970).
7. V. P. Shevelko, Zs. Phys., A287, 19,(1978).
8. Атомные и молекулярные процессы под ред. Д. Бейтс, "Мир", М., 1964 г.
9. А. В. Виноградов, Опт. и спектр. 22, 663 (1967).
10. D. R. Bates, R. McCarroll, Adv. Phys., 11, 39 (1962).