*Краткие сообщения по физике № 3 март 1973*

# О ВОЗБУЖДЕНИИ АТОМОВ АТОМАМИ ПРИ СРЕДНИХ ЭНЕРГИЯХ

А. Д. Уланцев

Процесс возбуждения атома нейтральным атомом значительно сложнее процесса возбуждения бесструктурной заряженной частицей. Удовлетворительные методы расчета сечений неупругих атом-атомных столкновений при средних энергиях (~ 0,5 - 20 кэв) отсутствуют. Результаты немногочисленных надежных экспериментов /I,2/ показывают непригодность расчетов, использующих для описания мишени статический хартри-фоковский потенциал /3,4/. Такие расчеты даже качественно не описывают эксперимент (рис. I), причем этот вывод не зависит от приближения, в котором решалась задача о столкновении (Борновское в /3/, сильная связь нескольких состояний атома в /4/). В настоящей работе применен метод, основанный на использовании в задаче о столкновении атомов имеющейся информации о рассеянии электрона на атоме - мишени (фазы рассеяния). Такой подход аналогичен импульсному приближению, широко применяемому в ядерной физике. Для атомных столкновений соответствующее приближение может быть построено в рамках квазиклассического описания движения атома-мишени и ядра (остатка возбуждаемого атома. Результаты расчета в таком приближении достаточно хорошо согласуются с экспериментом для реакции H(1s) + + He ⟶ H(2s,2p) + He. Наиболее последовательным путем для развития такого подхода является использование системы уравнений трех частиц /5,6/.

Рассмотрим систему уравнений для частиц I (электрон), 2 (атомный остаток, в простейшем случае протон) и 3 (нейтральный атом). Если центры 2,3 бесконечно тяжелы и движутся по заданным траекториям, временная система уравнений для трех частиц содержит только два уравнения /7/. Простейший вид такой системы получается при переходе от стационарных уравнений, предложенных в /6/, к временным

$$\Psi(t) = \varphi_i^{12}(t) + \int_{-\infty}^{t} G_{12}^{+}(t - t')V_{13}(t')\Psi(t')dt', \qquad (Ia)$$

$$\Psi(t) = \int_{-\infty}^{t} G_{13}^{+}(t - t')V_{12}(t')\Psi(t')dt'. \qquad (Iб)$$

Здесь $\psi(t)$ зависит только от $\vec{r}_1$ или $\vec{k}_1$ (в зависимости от представления координатного или импульсного; далее $\vec{k}_1 \equiv \vec{k}$). $V_{12}$, $V_{13}$ - потенциалы взаимодействия частиц (I,2) и (I,3), которые зависят от $t$ через параметры $\vec{R}_2(t)$ и $\vec{R}_3(t)$. $G_{12}^{+}(t)$, $G_{13}^{+}(t)$ - - временные функции Грина (ФГ) электрона

$$\left| i\frac{\partial}{\partial t} - H_0 - V_{1j}\right| G_{1j}^{+}(t) = \delta(t), \qquad j = 2,3,$$

$\varphi_i^{12}(t) = \varphi_i^{12}(\vec{k})\exp(- iE_i t)$ - электронная волновая функция атома (I,2). Используем связь временной ФГ со стационарной

$$G_{13}^{+}(t) = \int_{-\infty}^{\infty} dE G_{13}^{+}(E)\exp(- iEt)$$

и операторное равенство $\hat{V}\hat{G}_{13E} = \hat{T}_{13E}G_{OE}^{+}$, где $\hat{T}_{13E}$ - оператор рассеяния электрона на атоме-мишени, $\hat{G}_{OE}$ - свободная ФГ электрона.

Подставляя (Iб) в (Ia), получим

$$\Psi(t) =$$

$$= \varphi_i^{12}(t) + \int_{-\infty}^{t} dt' \int_{-\infty}^{t'} dt'' G_{12}^{+}(t - t') \int_{-\infty}^{\infty} dE T_{13E}G_{OE}^{+}\exp\left[- iE(t' - t'')\right] \times$$

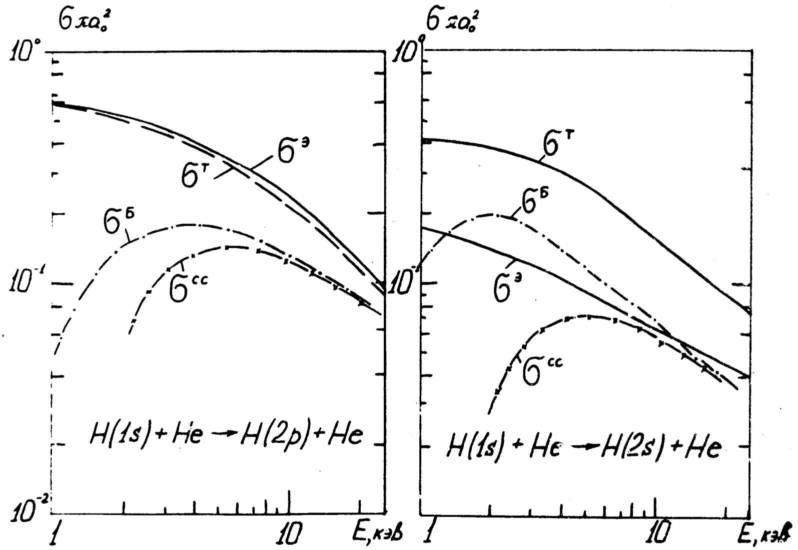
$$\times V_{12}(t'')\Psi(t''). \qquad (2)$$

Перейдем к интегральному изображению операторов (в $\vec{k}$-представлении) и учтем только вклад от полюса $G_{OE}$, т.е. положим

$$\int_{-\infty}^{\infty} dE \frac{T_{13}(\vec{k},\vec{k}';E)}{E + i\gamma - E_{k'}} \exp\left[- iE(t' - t'')\right] =$$

$$= T_{13}(\vec{k},\vec{k}',E_{k'})\exp\left[- iE_{k'}(t' - t'')\right]. \qquad (3)$$

Используем тождество $\hat{V}_{12}\hat{\varphi}_i^{12}[\vec{k}] = (E_i - k^2/2)\varphi_i^{12}(\vec{k})$ и ограничимся прямолинейной траекторией движения тяжелых центров $\vec{R} = \vec{\rho} + \vec{v}t$ ($\vec{\rho}$ - прицельное расстояние, $\vec{v}$ - скорость относительного дви-




Р и с. I. Сечение возбуждения атома водорода в состояния $n = 2$ при столкновениях с атомом He. $\sigma^T$ - результат настоящей работы, $\sigma^Э$ - эксперимент /2/, $\sigma^Б$ - борновское приближение /4/, $\sigma^{CC}$ - сильная связь /5/.

жения атомов). Вычислим вероятность неупругого перехода в первом приближении ($\Psi(t) = \varphi_i^{12}(t) = \varphi_i^{12}(\vec{k})\exp(-iE_it)$ в правой части (2)). Тогда после тождественных преобразований

$$a_{i\to f}(\rho) = \frac{1}{i}\int_{-\infty}^{\infty} dt \int d\vec{k} \int d\vec{k}'\varphi_f^{12*}(\vec{k})\exp\left[i\vec{k}\vec{R}(t) + iE_ft\right]\times$$

$$\times T_{13}(\vec{k}+\vec{v},\ \vec{k}'+\vec{v};\ E_{k'+v})\varphi_i^{12}(\vec{k}')\exp\left[-i\vec{k}'\vec{R}(t) - iE_it\right]. \quad (4)$$

$a_{i\to f}(\rho)$ - амплитуда перехода $i\to f$.

Полное сечение имеет вид

$$\sigma_{i\to f}(v) = 2\pi \int_0^\infty |a_{i\to f}(\rho)|^2 \rho d\rho. \qquad (5)$$

Подставляя в (2) приближенное выражение $\psi(t) = \sum_\lambda c_\lambda(t)\varphi_\lambda^{12}(t)$, мы получим систему интегральных уравнений для $c_\lambda(t)$ /7/. В пренебрежении некоторыми членами удается свести такую систему к системе уравнений сильной связи

$$i\frac{dc_\mu}{dt} = \sum_\lambda c_\lambda(t)\exp\left[-i(E_\lambda - E_\mu)t\right]\int d\vec{k}\int d\vec{k}'\varphi_\mu^{12*}(\vec{k})\times$$
$$\times\exp[i\vec{k}\vec{R}(t)]T_{13}(\vec{k}+\vec{v}, \vec{k}'+\vec{v}; E_{k'+v})\varphi_\lambda^{12}(\vec{k}')\exp\left[-i\vec{k}'\vec{R}(t)\right]. \qquad (6)$$

Для использования выражений (4) или (6) необходима экстраполяция значений $T_{13}(\vec{k}, \vec{k}'; E_{k'})|_{|\vec{k}|=|\vec{k}'|} = -2\pi f(\vec{k}, \vec{k}')$ (где $f$ - амплитуда упругого рассеяния электрона на атоме 3) на область $|\vec{k}| \neq |\vec{k}'|$. Простейшим предположением является замена $T_{13}(\vec{k}, \vec{k}'; E_{k'})$ во всей области интегрирования на $-2\pi f(0,0) = 2\pi a$ ($a$ - длина рассеяния). Такое предположение, очевидно, обоснованно, когда $f(\vec{k}, \vec{k}')$ в основной области интегрирования меняется мало, например, для атома гелия. Были проведены расчеты для реакции $H(1s) + He \to H(2s, 2p) + He$ путем численного решения системы уравнений (6) с учетом $1s$, $2s$, $2p$ состояний атома $H$. Результаты, приведенные на рис. I, достаточно хорошо согласуются с экспериментом.

Сечения для $2p$-состояния совпадают с экспериментальными, а для $2s$ - превосходят экспериментальные примерно в 2 раза. При этом ход теоретических кривых $\sigma(E)$ соответствует ходу экспериментальных кривых как для $2p$-, так и для $2s$-состояний.

Благодарю Л. П. Преснякова за внимание к работе и многократное обсуждение.

Поступила в редакцию
I2 февраля I973 г.

## Литература


I. А. Л. Орбели, Е. П. Андреев, В. А. Анкундинов, В. М. Дукельский. ЖЭТФ, 57, 108 (1969).

2. J. H. Birely, R. J. Mc Neal. Phys. Rev., A5, 257 (1972).

3. H. Levy. Phys. Rev., 187, 136 (1969).

4. M. R. Flannery. J. Phys., B2, 912 (1969).

5. Л. Д. Фаддеев. Метод интегральных уравнений в теории рассеяния для трех и более частиц. М., 1971 г.

6. А. И. Базь, Я. Б. Зельдович, А. П. Переломов. Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике. "Наука", М., 1971 г.

7. R. K. Janev, A. Salin. Ann. Phys., 73, 136 (1972).