

УДК 539.172.2

РЕЗОНАНСЫ В РАССЕЯНИИ ЭЛЕКТРОНОВ МОЛЕКУЛАМИ

С. А. Позднеев

Представлены основные особенности резонансного рассеяния электронов молекулами и определение резонансов, основанное на теории столкновения в системе двух тел, а также определение резонансов, возникающих при столкновении в системе нескольких тел. Исследованы закономерности возникновения этих резонансов и их характеристики. Представлены результаты расчетов резонансных процессов, происходящих при столкновениях электронов с двухатомными молекулами, выполненные на основе квантовой теории рассеяния в системе нескольких тел. Результаты проведенных расчетов сечений резонансных процессов столкновений электронов с молекулами сопоставляются с имеющимися экспериментальными данными и результатами расчетов, использующих иные приближения.

Понятие резонанса является одним из основных в квантовой физике. Термину резонанс можно придать достаточно широкий смысл, включая в него и стабильные уровни, подразумевая их влияние на процессы рассеяния.

В любой области физики, начиная с молекулярной и кончая физикой элементарных частиц, присутствуют резонансы, приводящие к богатству и своеобразию физической картины явлений [1, 2]. Особая роль отводится резонансам в физике необратимых процессов. В этом случае, согласно теореме Пуанкаре [1], резонансы являются причиной неинтегрируемости большинства динамических систем.

Теоретическое объяснение резонансов и их параметров в принципе может быть дано, исходя из сил взаимодействия между частицами, считающимися элементарными в

данных процессах. Например, резонансные процессы в атомной физике определяются силами взаимодействия между электронами и ядрами, а резонансы в ядерной физике – силами между нуклонами.

Резонансом в рассеянии обычно называют любой пик на экспериментальной кривой зависимости сечения рассеяния от энергии. Достаточно часто при столкновении электронов с молекулами образуются метастабильные состояния (отрицательные молекулярные ионы), которые традиционно и называют молекулярными резонансами. Резонанс характеризуется: моментом, четностью, спином, временем жизни и т.д. В силу того, что атомы движутся медленно по сравнению с электронами, систему электрон + молекула можно рассматривать как квазимолекулу, электронная оболочка которой в каждый момент времени соответствует как бы стационарному состоянию такой квазимолекулы, что соответствует хорошо известному адиабатическому приближению. Здесь необходимо отметить, что в обычных условиях при столкновении электронов, атомов или ионов с молекулами весьма затруднены различные электронные переходы – возбуждение, ионизация, перезарядка. А для того, чтобы такой обмен мог произойти, необходимо выполнение условия [2, 3] $\Delta E \Delta t \sim \hbar$, где ΔE – изменение энергии квазимолекулы, а Δt – время столкновения. Таким образом при медленных столкновениях, когда Δt велико, переходы могут происходить только если ΔE мало, т.е. два состояния квазимолекулы до и после столкновения должны быть близки и такой процесс также называется резонансным. Такая трактовка резонанса раскрывает связь между равновесием и динамикой, с одной стороны, и физикой диссипативных процессов с другой [1].

Исходя из теории столкновений в системе двух тел, в которой молекула-мишень рассматривается как силовой центр, различают следующие типы резонансов [1 – 5]:

1. Резонанс формы – резонанс, возникающий в случае, когда налетающий электрон оказывается захваченным на квазистационарный уровень, отделенный от уровня сплошного спектра центробежным барьером, который образуется комбинацией полей притяжения и отталкивания молекулы – мишени. Этот тип резонанса возникает только в том случае, если электрон обладает моментом количества движения относительно молекулы – мишени. В случае низкоэнергетического s -рассеяния ($l = 0$) захват электрона невозможен и в этом случае резонанс формы отсутствует;

2. Колебательно-возбужденный резонанс возникает тогда, когда налетающий электрон возбуждает колебания молекулы-мишени и оказывается временно связанным. Этот тип резонанса связан с нарушением принципа Борна–Оппенгеймера. Времена жизни та-

ких резонансных состояний, особенно для многоатомных молекул, чрезвычайно велики и достигают десятков микросекунд;

3. Электронно-возбужденный резонанс возникает тогда, когда налетающий электрон возбуждает электронную систему молекулы-мишени и также оказывается временно связанным. В этом случае отрыв электрона невозможен до тех пор, пока молекула остается в возбужденном состоянии. Тем не менее отрыв электрона все же может произойти, если присутствует связь закрытых и открытых каналов [1, 2, 7];

Теоретическое описание подобных резонансов, возникающих в случае образования метастабильных отрицательных ионов, на основе теории рассеяния в системе двух тел представлено в работах Ю. Н. Демкова, Б. М. Смирнова, Г. Бардсли, Ж. Герценберга, Т. Мандла, Т. О'Малея, Г. Фешбаха, В. Домке и др. [1 – 5], в которых резонансы определяют как комплексные полюса матрицы рассеяния, продолженные на нефизический лист энергии, либо как полюсы аналитического продолжения функции Грина.

Не исследованными остаются процессы столкновения электронов с молекулами, происходящие без образования промежуточных комплексов, а также процессы столкновения при тепловых энергиях налетающих электронов, где также наблюдается немонотонная зависимость сечения рассеяния от энергии. В этом случае применение стандартных методов расчетов сечений не оправдано вследствие нарушения приближения Борна–Оппенгеймера [2, 3, 7]. Применение для расчетов этих процессов теории столкновения в системе двух тел сталкивается со значительными трудностями, т.к. исследуемая система является существенно многочастичной.

Поэтому основная цель настоящей работы состоит в том, чтобы для описания резонансных процессов, происходящих при столкновениях электрона с молекулами, применить более последовательный подход, основанный на квантовой теории рассеяния в системе нескольких частиц [2 – 7].

В этом формализме, например, резонанс в трехчастичной системе определяется двухчастичными резонансами [2, 5, 6]. Таким образом, причиной существования одних резонансов является существование других. Эта не совсем популярная точка зрения связана с тем, что не всегда такая связь присутствует и даже при наличии такой связи она не всегда может быть явно определена. Впервые это было показано в ядерной физике, физике элементарных частиц, где взаимодействие между частицами, приводящее к существованию резонансов, определяется обменом между частицами тех же самых резонансов и таким образом резонансы продуцируют сами себя.

В атомной физике также существует широкий круг явлений (рассеяние электронов

молекулами, связь между кластерами в молекулах биополимеров и т.д. [7]), где существует связь между резонансами. Эта связь заключается в том, что двухчастичные резонансы приводят к серии трехчастичных резонансов, причем своеобразие этого явления состоит в том, что чем более сильным является двухчастичный резонанс, тем больше он продуцирует трехчастичных резонансов. Как показали исследования [2, 7], подобные резонансные состояния в многочастичных системах приводят к аномально большим скоростям химических реакций, динамическому связыванию невзаимодействующих частиц и т.д. [1 – 7]. Кроме этого важность исследования подобных резонансных состояний связана с нахождением энергии связи системы N тел, используя сведения о подсистемах этой многочастичной системы, т.е. построение зависимости $E_N = f(E_{N-1}, E_{N-2}, \dots)$ и определение условий образования связанной многочастичной системы, при условии, что некоторые подсистемы являются не связанными.

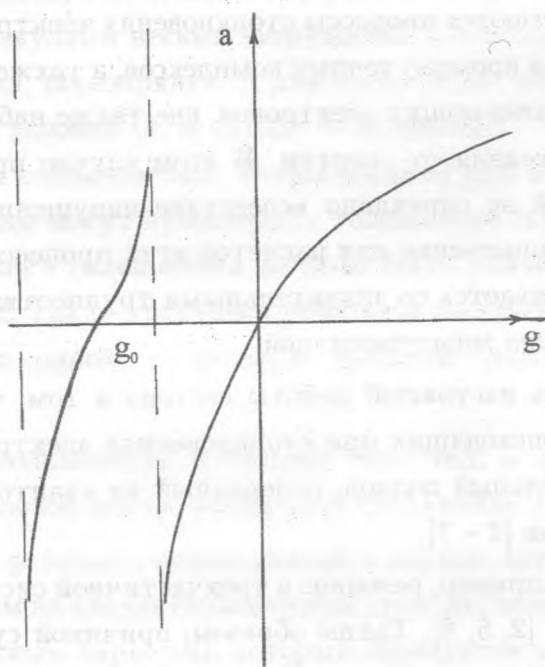


Рис. 1. Зависимость длины рассеяния от параметра g .

Физическую основу рассматриваемого эффекта можно пояснить на примере трех одинаковых бесспиновых частиц. Пусть взаимодействие между двумя частицами имеет вид $gV(r)$, где $V(r)$ – короткодействующий потенциал радиуса r_0 , конкретный вид которого несущественен. При увеличении константы связи g у пары частиц при некотором g_0

появляется первый связанный s -уровень (рис. 1). В окрестности g_0 этот уровень, будучи виртуальным ($g < g_0$) или реальным ($g > g_0$), влияет на рассеяние при малой энергии, причем теория этого явления (теория потенциалов нулевого радиуса) детально разработана как для ядерной, так и для атомной физики [1 – 3]. Этот уровень представляет собой двухчастичный резонанс, количественной характеристикой которого является амплитуда рассеяния при нулевой энергии, однозначно определяемая длиной рассеяния a , причем в окрестности g_0 a много больше радиуса сил r_0 и при $g = g_0$ a обращается в бесконечность (рис. 1).

Особенность рассматриваемого эффекта состоит в том, что по мере приближения g к g_0 число трехчастичных уровней увеличивается как $\ln(|a|/r)$ и при $g = g_0$, т.е. когда двухчастичный резонанс становится связанным s -уровнем, их число бесконечно. Эти необычные резонансные трехчастичные состояния подобны друг другу, отличаясь только масштабом энергии и длины, причем размер этих состояний много больше r_0 . Основные особенности этих состояний состоят в следующем:

- ярко выраженное влияние двухчастичных резонансов на спектр трехчастичной системы, т.е. двухчастичный резонанс способен кардинальным образом перестроить спектр дискретных уровней трех частиц;
- трехчастичные уровни являются стабильными;
- число трехчастичных уровней, определяемых двухчастичным резонансом, не является монотонной функцией константы связи g , несмотря на то, что энергия каждого уровня растет с увеличением g . Это связано с тем, что порог распада трехчастичной системы на пару частиц и частицу понижается с увеличением константы связи более быстро, чем энергия трехчастичного уровня.

Таким образом возникают следующие вопросы:

Всякий ли двухчастичный резонанс приводит к появлению серий уровней в трехчастичной системе?

Как этот эффект зависит от масс частиц, составляющих трехчастичную систему?

Нужно ли, чтобы двухчастичные резонансы присутствовали в силах всех пар частиц?

Как влияют на этот эффект спины, заряды частиц?

Можно утверждать, что не всякий двухчастичный резонанс способен перестроить спектр трех частиц, а только резонанс с размерами $r_{res} \sim 1/\sqrt{(2m_{ij}|e_0|)}$, много больше радиуса действия r_0 (e_0 – энергия связи, m_{ij} – приведенная масса пары частиц). Таким резонансом может быть только s -резонанс ($l = 0$), т.к. подобные резонансы сильно от-

личаются от других типов резонансов по размерам, а при $e_0 \rightarrow 0$ $r_{res} \rightarrow \infty$. Размер резонансного состояния проявляется в рассеянии частиц в виде большой длины рассеяния a и при малом e_0 она равна размеру этого резонансного состояния. Анализируя резонансные состояния с точки зрения их размеров, можно обнаружить, что все они резко отличаются от вышерассмотренного резонанса. Например, состояние, в котором находится система, на уровне в парциальной волне с $l \neq 0$ имеет размер порядка радиуса действия сил из-за сжимающего действия центробежного барьера, компаунд-резонанс также не обладает большими размерами. Таким образом двухчастичный s -уровень с малой энергией связи занимает в отношении своих размеров исключительное положение среди резонансных состояний.

Кроме этого доминирование s -резонанса означает, во-первых, что волновая функция двух частиц при $r \leq r_0$ пропорциональна волновой функции резонанса, а это означает, что логарифмическая производная волновой функции при $r = r_0$ в данной области энергий равна постоянной, причем, если ее вычислить при $e = e_0$, то эта постоянная есть $-1/a$ и таким образом

$$\frac{\partial r \psi}{\partial r} = \frac{1}{a} r \psi \text{ при } r = r_0.$$

Во-вторых, доминирование s -резонанса означает, что в амплитуде рассеяния резонансное слагаемое

$$f(e) \sim -\frac{1}{1/a + i\sqrt{(2m_{ij}e)}}$$

намного превосходит нерезонансную часть, которая пропорциональна r_0 .

Отметим, что приведенные выше выражения не зависят от конкретной формы потенциала, т.е. от сил взаимодействия между частицами, и являются универсальными в том смысле, что отражают лишь факт существования резонанса. Таким образом, какова бы ни была форма парных сил между частицами, если она приводит к двухчастичному s -резонансу с малой энергией, то это автоматически приводит к появлению семейства трехчастичных резонансов. Поэтому причина появления трехчастичных уровней состоит в том, что двухчастичный резонанс с большим пространственным размером продуцирует взаимодействие трех частиц, имеющее большой радиус. Это взаимодействие обычно оказывается притяжением, которое и приводит к большому числу уровней.

Определим характер этого взаимодействия. Для этого рассмотрим систему, состоящую из двух тяжелых и одной легкой частицы – простейшую модель молекулы, связь

в которой и осуществляется за счет обмена легкой частицей между тяжелыми. Если тяжелые частицы разведены на расстояние $r \gg a$, то у легкой частицы имеется два вырожденных уровня, соответствующих нахождению легкой частицы около каждой из тяжелых частиц. Обмен начинает играть роль, когда $r \sim a$, причем в этом случае вырождение снимается и один уровень понижается, что и соответствует притяжению тяжелых частиц, а другой уровень соответствует отталкиванию. Таким образом ясно, что обмен может приводить к притяжению, как и оказывается на самом деле для всех соотношений масс трех частиц.

Для определения вида этого взаимодействия рассмотрим состояние трех частиц, образованное за счет этого обменного дальнего действия и имеющее размер R , который удовлетворяет следующему условию $r_0 \ll R \ll a$. Если это состояние образовалось за счет резонансов в парной подсистеме, которые определяются амплитудой рассеяния и не зависят от r_0 , то взаимодействие трех частиц в этом состоянии также не может зависеть от r_0 . Кроме того с подобным состоянием трех частиц ничего не случится, если $a \rightarrow \infty$. Таким образом, взаимодействие трех частиц в этом необычном состоянии не содержит никакого размерного параметра, характеризующего парные силы. Из соображений размерности это взаимодействие должно иметь вид $[U] \sim [\mathcal{L}]^{-2}$, причем при определении $[\mathcal{L}]$ (где $[\mathcal{L}]$ имеет размерность длины) не могут быть использованы ни r_0 , ни a . Для построения $[\mathcal{L}]$ можно использовать координаты $\mathbf{r}_{ik} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_k$, и кроме этого эта величина должна быть симметрична относительно всех трех частиц. Можно показать [2], что $\mathcal{L}^2 \sim r_{12}^2 + r_{13}^2 + r_{23}^2$ и таким образом это дальнее действие имеет следующий вид:

$$U \sim A/R^2, \text{ где } R^2 = (2/3)(r_{12}^2 + r_{13}^2 + r_{23}^2)$$

и действует в интервале $r_0 - a$ (рис. 2). Константа этого взаимодействия A в общем случае зависит от квантовых чисел трехчастичного состояния, момента, четности, симметрии относительно перестановок частиц, оценка для которой представлена в [8]. Наибольшее притяжение должно быть при орбитальном моменте трех частиц $L = 0$, т.к. там нет центробежных сил, симметрия этого состояния должна быть максимальной, в противном случае волновая функция будет иметь узлы и связь уменьшится. Таким образом, количество резонансных состояний в трехчастичной системе определяется только специфическими свойствами парных подсистем. В связи с простотой данной модели представляется интересным исследование влияния различных факторов на эти необычные состояния трехчастичной системы. В результате можно показать [2, 6, 7], что:

- центробежные силы разрушают эффект, как показано выше,
- данные состояния обладают максимальной симметрией,
- тройные силы не влияют на эффект,
- добавление частицы к трехчастичной системе разрушает эффект,
- заряд частиц влияет на эффект и в этом случае эффект выражен менее ярко, что связано с тем, что число уровней в образованных полях $A/R^2 + B/R$ уже не может быть бесконечным,
- для спиновых частиц эффект выражен менее ярко.

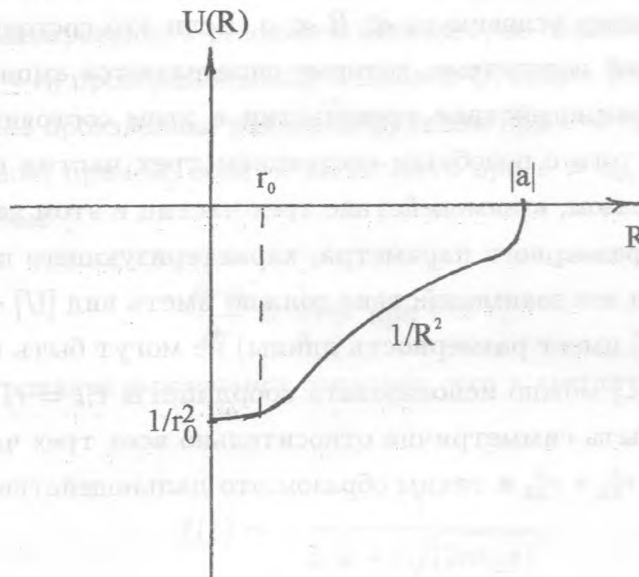


Рис. 2. Эффективный потенциал, отвечающий за резонансы в трехчастичной системе.

Наиболее существенно влияют на эффект массы частиц. Имеется три характерных режима: режим одинаковых частиц, режим тяжелого центра и молекулярный режим [1 – 3, 6 – 8].

Режим тяжелого центра имеет место, когда две частицы имеют массы одного порядка m_l , а третья m_h намного тяжелее, причем у пары легких частиц нет уровня или они не взаимодействуют между собой, а взаимодействуют только с тяжелой частицей при помощи притягивающего потенциала. В этом случае при бесконечно тяжелой третьей частице имеем случай пары частиц в силовом центре и естественно в такой системе трехчастичные уровни не возникают. В случае конечной массы тяжелого центра число уровней пропорционально:

$$N \sim \frac{m_l}{m_h} \ln \frac{1}{e_0 m_l r_0^2}.$$

Особенность этого режима состоит в том, что для существования трехчастичных уровней необходимы чрезвычайно мелкие уровни в парных подсистемах в отличие от молекулярного режима, где требования на парные уровни значительно проще. В этом случае тяжелая частица не реагирует на движение невзаимодействующих частиц, которые движутся независимо друг от друга в поле неподвижной тяжелой частицы. Поэтому в этом пределе энергия связи трех частиц аддитивно складывается из энергий связи двухчастичных систем. Однако при конечной величине массы тяжелой частицы все три частицы движутся согласованно, оставляя неподвижным центр масс системы. При этом тяжелая частица реагирует на изменение положений двух других частиц, в движении которых возникает корреляция, несмотря на отсутствие прямого взаимодействия между ними. Таким образом, динамическая корреляция в движении связываемых частиц может трактоваться как специфическое притяжение. Необходимо отметить, что подобное динамическое притяжение возникает и в том случае, когда между связываемыми частицами действуют силы отталкивания. В этом случае динамическое притяжение компенсирует взаимное отталкивание и приводит к стабилизации системы, что хорошо видно на примере иона позитрония $-e^+e^-e^-$.

В молекулярном режиме, когда легкая частица имеет мелкие уровни при взаимодействии с тяжелыми частицами, число уровней пропорционально

$$N \sim \sqrt{\left(\frac{m_l}{m_h}\right)} \ln \frac{1}{|e_0| m_l r_0^2}$$

и взаимодействие, создаваемое легкой частицей, имеет вид [2]

$$V \sim \frac{-0.32}{m_l r_{hh}^2},$$

что и представляет собой энергию молекулярного терма. Простейший пример этого режима – электрон и два нейтральных атома. Образованная таким образом молекула отличается от обычной тем, что ядра совершают колебания в области R , размер которой определяется энергией мелкого парного уровня e_0 , причем кроме колебательных уровней данная система имеет и вращательный спектр. Таким образом, в этом режиме двухчастичные уровни приводят к образованию серии не только колебательных, но и вращательных уровней, а для максимального вращательного момента можно получить оценку [2]:

$$L_{max}(L_{max} + 1) \sim 0.16 \frac{m_h}{m_l}.$$

Необходимо отметить, что эти необычные резонансные состояния проявляют себя в широком диапазоне условий и представляют собой устойчивое явление, которое может быть достаточно надежно идентифицировано.

Для количественного исследования молекулярного режима в случае нейтральных частиц используем интегральные уравнения Фаддеева, подробно представленные в [2, 6, 7] вместе с численным методом их решения.

Результаты расчетов этих резонансных процессов рассмотрим на примере расчета сечений простейшей реакции диссоциативного прилипания (ДП) электронов к молекулам водорода. Эти результаты представлены на рис. 3 вместе с последними экспериментальными данными [3] и расчетами, выполненными на основе других приближений. Представленные результаты подтверждают наличие этих необычных резонансных состояний (эффекта Ефимова) в рассматриваемой системе.

Для оценки влияния зарядов частиц на эти резонансные состояния рассмотрим взаимодействие электронов с молекулами галогеноводородов, причем исследуем конкретный процесс, а именно процесс диссоциативного прилипания. В предлагаемом подходе основное приближение состоит в том, что взаимодействие налетающего электрона с электронами и ядрами молекулы-мишени заменяется взаимодействием налетающего электрона с протоном и отрицательным ионом галогена в связи с тем, что электронное сродство к атому водорода значительно меньше, чем электронное сродство к атому галогена [1], и таким образом, молекулы галогеноводородов можно представить как систему, состоящую из протона и отрицательного иона галогена. Таким образом, сложная многочастичная задача по расчетам сечений рассеяния электрона двухатомными молекулами сводится к задаче столкновения в системе трех тел, для решения которой и применяется метод квантовой задачи рассеяния в системе нескольких частиц. Необходимо отметить, что данное приближение справедливо при энергиях налетающего электрона, меньших, чем энергия электронного возбуждения молекулы [6, 7].

Основные сложности расчетов сечений в рассматриваемом приближении связаны с дальнедействующими кулоновскими потенциалами взаимодействия между налетающим электроном, протоном и отрицательным ионом галогена. Как хорошо известно, непосредственное применение интегральных уравнений Фаддеева в этом случае невозможно – необходима либо модификация этих уравнений, либо использование дифференциальных уравнений Фаддеева в координатном пространстве,

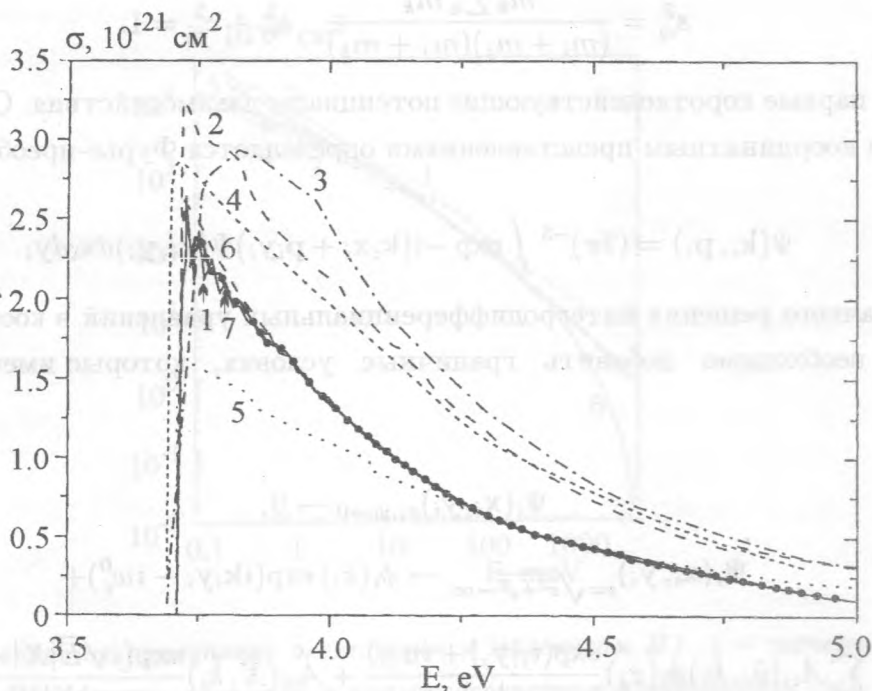


Рис. 3. Зависимость сечения процесса ДП к молекулам H_2 от энергии налетающих электронов. 1 (сплошная) – экспериментальные данные [4a)], 2 – результаты расчетов [4b)], 3 – результаты расчетов [4c)], 4 – результаты расчетов [4d)], 5 – результаты расчетов [4g)], 6 – результаты расчетов [4f)], 7 (– o – o – o) – результаты расчетов настоящей работы.

которые имеют следующий вид [6]:

$$(-\Delta_{x_i} - \Delta_{y_i} + V_i(x_i) - E)\Psi_i = -V_i \sum_{j \neq i} \Psi_j, \quad (1)$$

где

$$V_i = n_i/x_i + V_{st}(x_i), \quad n_i = \frac{q_k q_j}{\sqrt{(2m_{kj})}},$$

$$x_i = \sqrt{\left(\frac{2m_j m_k}{m_j + m_k}\right)} (\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_k), \quad y_i = \sqrt{\left(\frac{2m_i(m_j + m_k)}{m_i + m_j + m_k}\right)} \mathbf{r}_i - \frac{m_j \mathbf{r}_j + m_k \mathbf{r}_k}{m_j + m_k},$$

а связь между координатами представляется следующими соотношениями

$$x_i = c_{ij}x_j + s_{ij}y_j, \quad y_i = -s_{ij}x_j + c_{ij}y_j,$$

$$s_{ij}^2 = \frac{m_k \sum_k m_k}{(m_i + m_j)(m_j + m_k)}, \quad s_{ij}^2 + c_{ij}^2 = 1.$$

$V_{st}(x_i)$ – парные короткодействующие потенциалы взаимодействия. Связь между импульсным и координатным представлениями определяется Фурье-преобразованием

$$\Psi(\mathbf{k}_i, \mathbf{p}_i) = (2\pi)^{-3} \int \exp -i(\mathbf{k}_i \mathbf{x}_i + \mathbf{p}_i \mathbf{y}_i) \Psi(\mathbf{x}_i, \mathbf{y}_i) d\mathbf{x}_i d\mathbf{y}_i.$$

Для однозначного решения интегродифференциальных уравнений в координатном пространстве необходимо добавить граничные условия, которые имеют следующий вид [6, 7]:

$$\Psi_i(\mathbf{x}_i, \mathbf{y}_i)_{x_i, y_i \rightarrow 0} \rightarrow 0, \quad (2)$$

$$\Psi_i(\mathbf{x}_i, \mathbf{y}_i)_{\rho = \sqrt{x^2 + y^2} \rightarrow \infty} \rightarrow \phi_i(x_i) \exp(i\mathbf{k}_i \mathbf{y}_i - i w_i^0) + \sum_j A_{ij}(\hat{y}_j, \hat{k}_i) \phi_i(x_j) \frac{\exp(i_j |y_j| + i w_{ij})}{|y_j|} + A_{0i}(\hat{X}, \hat{k}_i) \frac{\exp(i\sqrt{E}|X| + i w_0)}{|X|^{5/2}}, \quad (3)$$

где

$$w_i^0 = \frac{n_i}{2|\mathbf{k}_i|} \ln [|\hat{k}_i| |\hat{x}_i| - (k_i, x_i)], \quad w_{ij} = \sum_{k \neq j} \frac{n_k}{2|s_{jk} \sqrt{E_k}} \ln 2\sqrt{E_k} |y_k|,$$

$$w_0 = -\frac{|\mathbf{X}|}{2\sqrt{E}} \sum_i \frac{n_i}{|\mathbf{x}_i|} \ln 2\sqrt{E} |\mathbf{X}|, \quad n_i = \frac{k q_i q_j}{\sqrt{(2m_{ij})}}, \quad E_k = E - \kappa_j.$$

В настоящее время разработано множество численных методов, основанных на аппроксимации компонент Ψ_i бикубическими эрмитовыми сплайнами, квинтетными базисными сплайнами и т.д. Однако, несмотря на эти эффективные методы численного решения, в настоящее время отсутствует надежный и универсальный алгоритм численного решения уравнений Фаддеева в координатном пространстве, что связано со следующими причинами:

– из-за достаточно сложных граничных условий отсутствует алгоритм численного решения для процессов, когда в начальном и конечном состоянии находятся три свободные частицы;

– во всех известных численных методах решения, использующих конечно-разностную аппроксимацию, не удалось аналитически доказать поточечную сходимость получаемого решения к точному при уменьшении шага сетки.

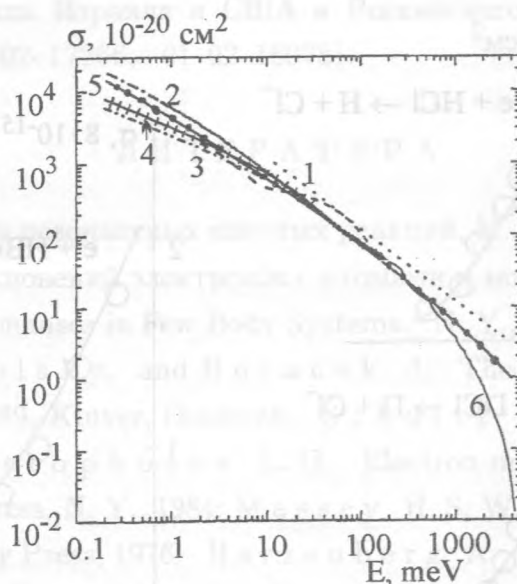


Рис. 4. Диссоциативное прилипание электронов к молекулам HI. 1 – экспериментальные данные [4с], 2 – результаты расчетов в квазиклассическом приближении [4с], 3 – результаты в приближении сильной связи расчетов [4с], 4 – результаты расчетов [4f]), 5 – (–○–○–○) – результаты расчетов настоящей работы, 6 – результаты расчетов [4g)).

Поэтому применение для численного решения системы связанных интегродифференциальных уравнений в частных производных (1) с граничными условиями (2, 3) метода сеток в полярной системе координат представляется наиболее обоснованным, т.к. в данном случае имеются и аналитические решения для некоторых параметров потенциала, определяющего исследуемые резонансные состояния [6 – 8], что позволяет оценить точность получаемых численным методом решений.

Результаты расчетов сечений процессов ДП электронов к молекулам галогеноводородов, выполненные на основе предлагаемого метода, представлены на рис. 4 – 6 вместе с экспериментальными данными [9] и результатами расчетов, основанных на других приближениях [10], из которых видно отсутствие осцилляций в этих сечениях. Приведенные результаты подтверждают вывод о подавлении рассматриваемых резонансных состояний трехчастичной системы кулоновскими силами.

Таким образом, экспериментальные данные [1 – 4] и результаты расчетов (рис. 4 – 6) подтверждают наличие особых, не исследованных ранее, резонансных состояний, возникающих при определенных условиях в многочастичных системах. Эти резонансные

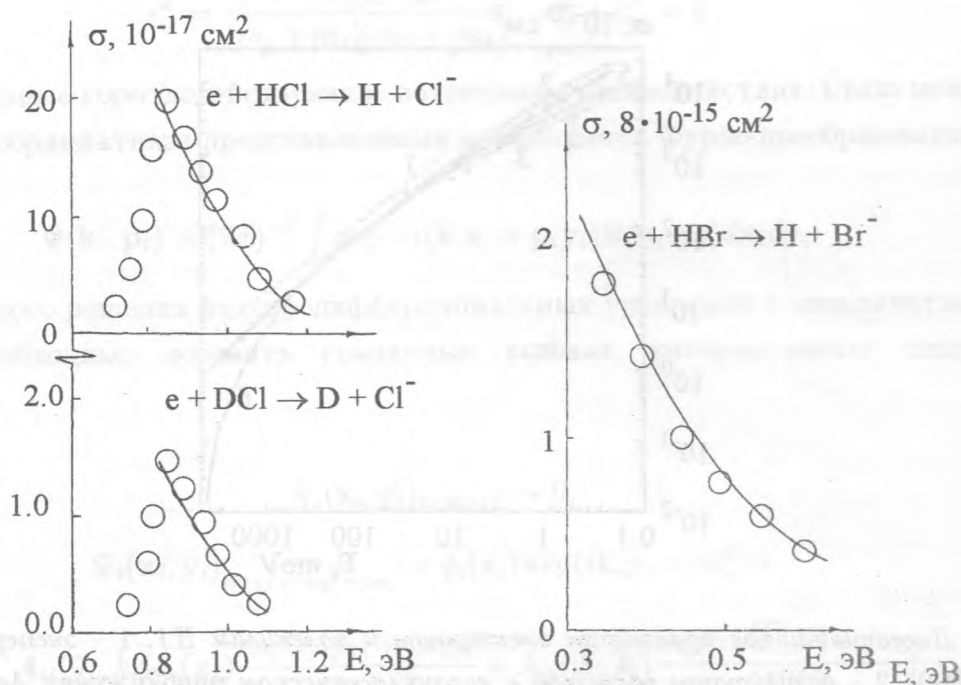


Рис. 5. Диссоциативное прилипание электронов к молекулам HCl и DCl . $\circ \circ \circ$ – экспериментальные данные [4c), ————— – результаты расчетов настоящей работы.

Рис. 6. Диссоциативное прилипание электронов к молекулам HBr . $\circ \circ \circ$ – экспериментальные данные [19], ————— – результаты расчетов настоящей работы.

состояния представляют собой устойчивое явление в атомной, молекулярной и ядерной физике [2 – 7], причем на эти состояния влияют центробежные силы, заряды, массы и спины частиц, что подтверждают представленные расчеты и их удовлетворительное согласие с соответствующими экспериментальными данными.

Полученные в настоящей работе результаты могут быть обобщены на случай многочастичных систем на основе кластерного приближения [2, 6 – 8]. Это расчеты реальных многочастичных систем (сложные ядра, мюонные системы, молекулы белков, биополимеров и т.д.), которые допускают разделение на три группы частиц, в которых частицы первой группы взаимодействуют с частицами второй и третьей групп, взаимодействие между которыми отсутствует.

Работа выполнена при поддержке Научного фонда Китайской Народной Республики (грант NSF 19734030), Академии наук Тайваня (грант NSC 85-212-M-007-009), Со-

вместного научного фонда Израиля и США и Российского фонда фундаментальных исследований (грант 98-02-17266, 01-02-16075).

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Брейт Г. Теория резонансных ядерных реакций, М., ИИЛ, 1961; Друкaре в Г. Ф. Теория столкновений электронов с атомами и молекулами, М., Наука, 1978; Andras T. Resonances in Few-Body Systems, N. Y., Spriger, 2002; Kukulin V. I., Krasnopolsky, and Horasek J. Theory of Resonances Principles and Applications, 1989, Kluver, Dordrech; Schultz G. J. Rev. Mod. Phys., **45**, 423 (1973); Christophorov L. G. Electron molecule interaction and their application, Acad. Press, N. Y., 1984; Massey H. S. W. Negative Ions, Cambridge, Cambridge University Press, 1976; Herzenberg A. Electron-molecular collision, Plenum, N. Y., 1984; Домске W. Phys. Rep., **208**, N 2, 98 (1991); Chutjian A., Garscadden A., and Waderha J. M. Phys. Rep., **264**, 393 (1996); Пуанкаре А. Избранные труды, **1, 2**, М., Наука, 1971 – 1972; Пригожин И., Стенгерс И. Квант, хаос, время. К решению парадокса времени, М., Едиториал УРСС, 2003.
- [2] Ефимов В. Влияние резонансов в парных силах на спектр уровней трех частиц, М., МИФИ, 1973; Efimov V. Nucl. Phys., **A362**, 45 (1981); **A378**, 581 (1982); Phys. Rev., **C47**, 1876 (1993); Вугальтер С. А., Жислин Г. М. ДАН СССР, **267**, 784 (1982); Ребане Т. К. ЯФ, **61**, N 1, 61 (1998); Pozdneev S. Phys. Lett., **V125**, 255 (1983); Коноплев В. А., Позднеев С. А., Щеглов В. А. Краткие сообщения по физике ФИАН, N 6, 88 (1987); Позднеев С. А. Краткие сообщения по физике ФИАН, N 5, 3 (2003).
- [3] Демков Ю. Н., Островский В. Н. Метод потенциалов нулевого радиуса в атомной физике, Л., Изд. ЛГУ, 1975; Demkov Yu. N. and Ostrovskii V. N. Zero-range potentials and their application in atomic physics, Plenum, 1988; Ребане Т. К., Пенкина Н. Н. Масштабное преобразование в квантовой механике атомов и молекул, Л., Изд-во ЛГУ, 1985.
- [4] а) Drexel H., Senn G., Fiegele T., et al. J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., **34**, 1415 (2001); Waderha J. M., and Bardsley J. N. Phys. Rev. Lett., **41**, 1791 (1978); Chutjian A., Garscadden A., and Waderha J. M. Phys. Rep., **264**, 393 (1996); Waderha J. M. Phys. Rev., **41**, N 7, 3607 (1990); Phys. Rev. Lett., **41**, 1795 (1978); б) Gauyacq J. P. J. Phys. B: At. Mol. Opt.

- Phys., **18**, 1858 (1985); c) M u n d e l C., B e r m a n M., and D o m s k e W. Phys. Rev., **A32**, 181 (1985); d) H i c k m a n A. P. Phys. Rev., **43**, 3495 (1991); f) A t e m s D. E., and W a d e r h a J. M. Phys. Rev., **A42**, 5201 (1990); g) G a l l u p G. A., X u Y., and F a b r i c a n t I. I. Phys. Rev., **A57**, 2596 (1998); К а з а н с к и й А. К., X u Y., and F a b r i c a n t I. I. Phys. Rev., **A63**, 014703 (2000).
- [5] Н и к и т и н Е. Е. Теория элементарных атомно-молекулярных процессов в газах, М., Химия, 1970; Н и к и т и н Е. Е., У м а н с к и й С. Я. Неадиабатические переходы при медленных атомных столкновениях, М., Атомиздат, 1979; И л л е н б е р г е р Е., С м и р н о в Б. М. УФН, **168**, 731 (1998); К а з а н с к и й А. К., Ф а б р и к а н т И. И. УФН, **143**, 602 (1984); F a b r i c a n t I. I. and Н о т о р Н. Phys. Rev., **A63**, 022706 (2001).
- [6] М е р к у р ь е в С. П., Ф а д д е е в Л. Д. Квантовая теория рассеяния для систем нескольких частиц, М., Наука, 1985; Я ф а е в Д. Р. Математическая теория рассеяния, Санкт-Петербург, Изд. С.-Петербургского университета, 1994; F a d d e e v L. D. and M e r k u r i e v S. P. Quantum scattering theory for several particles systems, Kluwer, London, 1993; Б е л я е в В. Б. Лекции по теории малочастичных систем, М., Энергоиздат, 1986.
- [7] П о з д н е е в С. А. Применение квантовой теории рассеяния в системе трех тел для расчетов различных процессов ядерной, атомной и молекулярной физики, М., Янус-К, 2001; P o z d n e e v S. Dynamics of Elementary Atomic-Molecular Processes in Gas and Plasma. Nova Science Publ., **212**, 99 (1996); П о з д н е е в С. А. Краткие сообщения по физике ФИАН, N 5, 3 (2003), П о з д н е е в С. А. ХВЭ, **18**, 290 (1984).
- [8] П у п ы ш е в В. В. ЯФ, **66**, N 1, 64 (2003); J. Phys., A Math. Gen., **36**, L13 (2003); М о т о в и л о в А. К., П е н ь к о в Ф. М. Избранные вопросы теоретической физики и астрофизики, Дубна, ОИЯИ, 2003; P o z d n e e v S. J. Phys. B: At. Mol. Phys., **16**, 867 (1983); P o z d n e e v S. and D р у к а р е в G. F. J. Phys. B: At. Mol. Phys., **13**, 2611 (1980).
- [9] К а з а н с к и й А. К., Ф а б р и к а н т И. И. УФН, **143**, 602 (1984); F a b r i c a n t I. I. and Н о т о р Н. Phys. Rev., **A63**, 022706 (2001).

Поступила в редакцию 24 июня 2003 г.