

# ОТРЫВ ЭЛЕКТРОНОВ ПРИ СТОЛКНОВЕНИИ ДВУХ ОТРИЦАТЕЛЬНЫХ ИОНОВ

*М. И. Чибисов*<sup>\*</sup>

*Российский научный центр «Курчатовский институт»  
123182, Москва, Россия*

*Ф. Бруйар*<sup>\*\*</sup>

*Université Louvain-la-Neuve, unité FYAM  
B-1348 Louvain-la-Neuve, Belgique*

*М. Шеркани*<sup>\*\*\*</sup>

*Université Sidi Mohamad Ben Abdollah, Fès, Maroc*

Поступила в редакцию 26 сентября 2000 г.

Рассчитаны сечения отрыва одного и двух электронов при столкновении двух отрицательных ионов,  $H^- + H^-$ ,  $H^- + Cs^-$  и  $Cs^- + Cs^-$ , в широком диапазоне энергий столкновения: от энергетического порога до 100 кэВ. При адиабатически медленных столкновениях отрыв электронов происходит в результате одно- и двухэлектронных оже-распадов, скорости которых рассчитаны в приближении асимптотически больших расстояний между ионами. Для больших энергий столкновения сечения отрыва электронов вычисляются методом сильной связи состояний. Рассчитанные сечения хорошо согласуются с результатами экспериментальных измерений, проведенных для столкновения  $H^- + H^-$ .

PACS: 34.10.+x, 34.70.+e

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Изучение процессов ионизации при столкновении двух отрицательных ионов представляет интерес в связи с решением проблемы нагрева термоядерной плазмы нейтральными пучками атомов водорода. Пучки быстрых нейтральных атомов выгодно получать путем ускорения и нейтрализации отрицательных ионов ввиду относительно большого поперечного сечения их нейтрализации на мишенях. Однако столкновения отрицательных ионов внутри высокоинтенсивных пучков, происходящие из-за разброса их скоростей, эффективно уменьшают интенсивности этих пучков. Отрыв электронов в столкновениях двух отрицательных атомных ионов водорода,  $H^- + H^-$ , изучался ранее экспериментально [1–3] и теоретически [4, 5].

В настоящей статье исследованы три процесса отрыва электронов:

$$A^- + B^- = \begin{cases} A + B^- + e, & (A) \\ A^- + B + e, & (B) \\ A + B + 2e, & (AB) \end{cases}$$

вероятности которых сильно конкурируют друг с другом, и поэтому их сечения вычисляются нами одновременно при решении одного волнового уравнения. Реакции (A), (B) и (AB) исследуются нами для трех столкновений:  $H^- + H^-$ ,  $H^- + Cs^-$  и  $Cs^- + Cs^-$ .

При больших скоростях столкновений процессы (A), (B), (AB) происходят в результате прямой передачи электронам части кинетической энергии ядер. В этом пределе сечения рассчитываются в динамическом приближении. При малых скоростях обмен энергией между электронами и ядрами маловероятен и эффективным становится другой механизм. Из-за малости величин энергий связи отри-

<sup>\*</sup>E-mail: chib@qq.nfi.kiae.su

<sup>\*\*</sup>F. Brouillard, E-mail: brouillard@fyam.fyam.ucl.ac.be

<sup>\*\*\*</sup>M. Cherkani.

цательных ионов и из-за расталкивания между ними при малых скоростях становятся эффективными сразу несколько каналов автоионизационного распада. При сближении ионов электронный терм поднимается вверх и пересекает границу континуума уже при очень больших расстояниях между ядрами. Оже-распады возникающих при этом автоионизационных состояний приводят, как и в динамическом приближении, к весьма большим сечениям указанных реакций.

В статье используются атомные единицы измерения.

## 2. ОТРЫВ ЭЛЕКТРОНОВ ПРИ БОЛЬШИХ СКОРОСТЯХ СТОЛКНОВЕНИЯ. ДИНАМИЧЕСКИЙ ОТРЫВ

Все три реакции, (А), (В) и (АВ), происходят в основном при больших расстояниях  $R$  между ядрами, когда основным является кулоновское расталкивание между слабосвязанными электронами отрицательных ионов. При больших  $R$  оно может быть разложено в ряд по обратным степеням  $R$ :

$$\begin{aligned} \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} &\approx \\ &\approx \frac{1}{R} + \frac{z_{1a}}{R^2} + \frac{3z_{1a}^2 - r_{1a}^2}{2R^3} + \frac{r_{1a}z_{1a}(5z_{1a} - 3r_{1a})}{2R^4} + \dots - \\ &- \frac{z_{2b}}{R^2} + \frac{3z_{2b}^2 - r_{2b}^2}{2R^3} - \frac{r_{2b}z_{2b}(5z_{2b} - 3r_{2b})}{2R^4} + \dots + \\ &+ W(\mathbf{r}_{1a}, \mathbf{r}_{2b}) + \dots, \quad r_{1a}, r_{2b} \ll R, \end{aligned} \quad (1)$$

где  $\mathbf{r}_1$  и  $\mathbf{r}_2$  — радиусы-векторы электронов 1 и 2 в произвольной системе координат, а  $\mathbf{r}_{1a}$  и  $\mathbf{r}_{2b}$  являются векторами электронов 1 и 2 относительно ядер атомов  $a$  и  $b$  соответственно. Корреляционное слагаемое  $W(\mathbf{r}_{1a}, \mathbf{r}_{2b})$  зависит от произведения координат обоих электронов:

$$W(\mathbf{r}_{1a}, \mathbf{r}_{2b}) = \frac{\mathbf{r}_{1a} \cdot \mathbf{r}_{2b} - 3z_{1a}z_{2b}}{R^3} + \dots, \quad (2)$$

а остальные слагаемые в (1) зависят от координат только одного из электронов, 1 или 2.

Относительно большой член  $1/R$  в разложении (1) влияет только на энергию системы. Этот член не зависит от координат электронов и не возмущает волновые функции слабосвязанных электронов. Мы можем поэтому использовать невозмущенные волновые функции как для связанных состояний, так и для состояний в континууме. Переходы между этими состояниями определяются следующими после  $1/R$  членами в разложении (1). Для вы-

числения матричных элементов дипольных переходов можно использовать простые выражения для волновых функций начального связанного состояния [6–8]:

$$\begin{aligned} \psi_0^{(-)}(r) &= B(\gamma, \beta) \sqrt{\frac{\gamma}{2\pi}} \frac{e^{-\gamma r} - e^{-\beta r}}{r}, \\ B(\gamma, \beta) &= \frac{\sqrt{1 + \gamma/\beta}}{1 - \gamma/\beta}, \end{aligned} \quad (3)$$

энергия связанного отрицательного иона  $\varepsilon = -\gamma^2/2$ , а для  $P$ -состояния в континууме —

$$\begin{aligned} \psi_a^\varepsilon(\mathbf{r}) &= \sqrt{\frac{2}{\pi k}} \frac{1}{r} \left[ \frac{\sin(kr)}{kr} - \cos(kr) \right] \times \\ &\times \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \left\{ \cos \theta; \sin \theta \cos \varphi; \sin \theta \sin \varphi \right\} \end{aligned} \quad (4)$$

с тремя компонентами угловых функций:  $\cos \theta$ ;  $\sin \theta \cos \varphi$  и  $\sin \theta \sin \varphi$ . Ось  $z$  введенной системы координат перпендикулярна плоскости столкновения. Энергии связи исследуемых ионов  $H^-$  и  $Cs^-$  равны [9]

$$\varepsilon_{H^-} = -0.75421 \text{ эВ} \quad (\gamma_{H^-} = 0.23544),$$

$$\varepsilon_{Cs^-} = -0.4716 \text{ эВ} \quad (\gamma_{Cs^-} = 0.1862).$$

В книге [6] коэффициент  $B$  определялся сшивкой первого члена в формуле (3) с волновой функцией иона  $H^-$ , найденной Чандрасекаром [10] с тремя варьируемыми параметрами, и было получено  $B_{H^-} = 1.183$ . В работах [7, 8] рассматривалось волновое уравнение, которому удовлетворяет функция (3), и подгонкой потенциала, стоящего в этом уравнении, к статическому потенциалу нейтрального атома водорода в основном состоянии для  $H^-$  было получено  $\beta_{H^-} = 2.66$ , что с помощью формулы (3), определяющей коэффициент  $B$ , дает его величину  $B_{H^-} = 1.145$ . Относительная разность величин коэффициента  $B_{H^-}$  из [6] и из [7, 8] составляет всего 3.3%. Для  $Cs^-$  теперь (в том же приближении, что и ранее [7, 8] для  $H^-$ ) было получено  $\beta_{Cs^-} = 1.45$  (см. также [11]), что дает  $B_{Cs^-} = 1.22$ .

Из-за малости энергий связи отрицательных ионов сечения всех трех реакций велики и поэтому мы учитываем только переходы слабосвязанных электронов. Тогда волновые функции полного на-

бора состояний системы двух отрицательных ионов равны

$$\psi_a^{(-)}(\mathbf{r}_{1a})\psi_b^{(-)}(\mathbf{r}_{2b}) \exp[-i(\varepsilon_a + \varepsilon_b)t], \quad (5)$$

$$\psi_a^\varepsilon(\mathbf{r}_{1a})\psi_b^{(-)}(\mathbf{r}_{2b}) \exp(-i\varepsilon_b t - i\varepsilon t), \quad (6)$$

$$\psi_a^{(-)}(\mathbf{r}_{1a})\psi_b^\varepsilon(\mathbf{r}_{2b}) \exp(-i\varepsilon_a t - i\varepsilon t), \quad (7)$$

$$\psi_a^\varepsilon(\mathbf{r}_{1a})\psi_b^{\varepsilon'}(\mathbf{r}_{2b}) \exp(-i\varepsilon t - i\varepsilon' t), \quad (8)$$

где  $\psi_{a,b}^{(-)}$  — волновые функции слабосвязанных электронов,  $\psi_{a,b}^\varepsilon$  — волновые функции нейтральных атомов с электроном в континууме с энергией  $\varepsilon$ . Выражение (5) является волновой функцией системы из двух отрицательных ионов, т. е. волновой функцией начального состояния; выражения (6) и (7) описывают состояния, когда электрон одного из ионов,  $A^-$  или  $B^-$ , оторван и находится в континууме; (8) описывает состояние с двумя оторванными электронами.

Полная волновая функция системы равна

$$\begin{aligned} \Psi_{AB}^{(-)}(t, \mathbf{r}_{1a}, \mathbf{r}_{2b}) = & a_0(t)\psi_a^{(-)}(\mathbf{r}_{1a})\psi_b^{(-)}(\mathbf{r}_{2b}) \times \\ & \times \exp[-i(\varepsilon_a + \varepsilon_b)t] + \\ & + \int a(t, \varepsilon)\psi_a^\varepsilon(\mathbf{r}_{1a})\psi_b^{(-)}(\mathbf{r}_{2b}) \exp[-i(\varepsilon_b + \varepsilon)t] d\varepsilon + \\ & + \int b(t, \varepsilon)\psi_a^{(-)}(\mathbf{r}_{1a})\psi_b^\varepsilon(\mathbf{r}_{2b}) \exp(-i(\varepsilon_a + \varepsilon)t) d\varepsilon + \\ & + \iint c(t, \varepsilon, \varepsilon')\psi_a^\varepsilon(\mathbf{r}_{1a})\psi_b^{\varepsilon'}(\mathbf{r}_{2b}) \times \\ & \times \exp(-i\varepsilon t - i\varepsilon' t) d\varepsilon d\varepsilon', \quad (9) \end{aligned}$$

а система временных уравнений для амплитуд  $a_0(t), a(t, \varepsilon), b(t, \varepsilon), c(t, \varepsilon, \varepsilon')$  может быть записана в виде

$$\begin{aligned} i \frac{da_0}{dt} = & \int a(t, \varepsilon)V_{0,\varepsilon}^A(t) \exp[i\phi_{0\varepsilon}^A(t)] d\varepsilon + \\ & + \int b(t, \varepsilon)V_{0,\varepsilon}^B(t) \exp[i\phi_{0\varepsilon}^B(t)] d\varepsilon + \\ & + \iint c(t, \varepsilon, \varepsilon')V_{0,\varepsilon,\varepsilon'}^{AB}(t) \exp[i\phi_{0\varepsilon,\varepsilon'}^{AB}(t)] d\varepsilon d\varepsilon', \\ & \dots \\ i \frac{da(t, \varepsilon)}{dt} = & a_0(t)V_{\varepsilon,0}^A(t) \exp[-i\phi_{0\varepsilon}^A(t)], \quad (10) \\ & \dots \\ i \frac{db(t, \varepsilon)}{dt} = & a_0(t)V_{\varepsilon,0}^B(t) \exp[-i\phi_{0\varepsilon}^B(t)], \\ & \dots \\ i \frac{dc(t, \varepsilon, \varepsilon')}{dt} = & a_0(t)V_{\varepsilon,\varepsilon',0}^{AB}(t) \exp(-i\phi_{0\varepsilon,\varepsilon'}^{AB}(t)), \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned} \phi_{0\varepsilon}^{A,B}(t) = & -(\varepsilon - \varepsilon_{a,b})t, \\ \phi_{0\varepsilon,\varepsilon'}^{AB}(t) = & -(\varepsilon - \varepsilon_a + \varepsilon' - \varepsilon_b)t. \end{aligned} \quad (11)$$

$a_0(t)$  — амплитуда начального состояния,  $a(t, \varepsilon)$  и  $b(t, \varepsilon)$  — амплитуды состояний с одним оторванным электроном соответственно от иона  $A^-$  или  $B^-$ ,  $c(t, \varepsilon, \varepsilon')$  — амплитуда состояния с обоими оторванными электронами. Мы пренебрегли переходами между состояниями в континууме. Система уравнений (10) должна быть решена при начальном условии

$$a_0(t = -\infty) = 1, \quad a(-\infty) = b(-\infty) = c(-\infty) = 0.$$

Интегрируя уравнения для  $a, b$  и  $c$  один раз,

$$\begin{aligned} a(t, \varepsilon) = & -i \int_{-\infty}^t a_0(t')V_{\varepsilon,0}^A(t') \exp[-i\phi_{0\varepsilon}^A(t')] dt', \\ b(t, \varepsilon) = & -i \int_{-\infty}^t a_0(t')V_{\varepsilon,0}^B(t') \exp[-i\phi_{0\varepsilon}^B(t')] dt', \\ c(t, \varepsilon, \varepsilon') = & -i \int_{-\infty}^t a_0(t')V_{\varepsilon,\varepsilon',0}^{AB}(t') \exp[-i\phi_{0\varepsilon,\varepsilon'}^{AB}(t')] dt', \end{aligned}$$

и подставляя эти интегралы в первое уравнение системы (10), получаем одно интегриродифференциальное уравнение для одной неизвестной функции  $a_0(t)$ :

$$\frac{da_0}{dt} = -S_A(t) - S_B(t) - S_{AB}(t), \quad (12)$$

где

$$\begin{aligned} S_{A,B}(t) = & \int_{-\infty}^t a_0(t') \times \\ & \times \exp[i\varepsilon_{a,b}(t - t')] K_{A,B}(t, t') dt', \quad (13) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} S_{AB}(t) = & \int_{-\infty}^t a_0(t') \times \\ & \times \exp[i(\varepsilon_a + \varepsilon_b)(t - t')] K_{AB}(t, t') dt', \quad (14) \end{aligned}$$

а ядра  $K(t, t')$  интегродифференциального уравнения (12) равны

$$K_{A,B}(t, t') \equiv \int_0^\infty V_{0\varepsilon}^{A,B}(t) V_{\varepsilon 0}^{A,B}(t') \times \exp[-i\varepsilon(t-t')] d\varepsilon, \quad (15)$$

$$K_{AB}(t, t') \equiv \int_0^\infty \int_0^\infty V_{0\varepsilon\varepsilon'}^{AB}(t) V_{\varepsilon\varepsilon'0}^{AB}(t') \times \exp(-i(\varepsilon + \varepsilon')(t-t')) d\varepsilon d\varepsilon'. \quad (16)$$

Уравнение (12) решалось численно для каждой прямолинейной траектории классического движения атомных ядер. Аналогичное интегродифференциальное уравнение использовалось ранее [8] для вычисления сечения ионизации отрицательного иона полем положительного иона в столкновении  $H^- + H^+$ .

Полная вероятность отрыва электрона от иона А к моменту столкновения  $t$  равна

$$P_A(\varrho, t) \equiv \int_0^\infty |a(\varepsilon, t)|^2 d\varepsilon, \quad (17)$$

а ее производная —

$$\frac{dP_A(\varrho, t)}{dt} = 2 \operatorname{Re} \left\{ \int_0^\infty a(\varepsilon, t) \frac{da^*(\varepsilon, t)}{dt} d\varepsilon \right\}. \quad (18)$$

Аналогичные выражения могут быть написаны для  $P_B$  и для  $P_{AB}$ . Подставляя сюда производную от амплитуды  $da^*(\varepsilon, t)/dt$  из системы уравнений (10), получаем полные вероятности отрыва одного и двух электронов:

$$P_{A,B}(\varrho, t) = 2 \operatorname{Re} \left\{ \int_{-\infty}^t a_0^*(t') S_{A,B}(t') dt' \right\}, \quad (19)$$

$$P_{AB}(\varrho, t) = 2 \operatorname{Re} \left\{ \int_{-\infty}^t a_0^*(t') S_{AB}(t') dt' \right\}. \quad (20)$$

При решении уравнения (12) эти соотношения позволяют прямо вычислять полные вероятности отрыва электронов без дополнительного интегрирования по спектрам.

Матричные элементы  $V_{0,\varepsilon}$  могут быть вычислены в дипольном приближении, поскольку межъядерные расстояния, вносящие основной вклад в сечения

отрыва, очень велики. С помощью волновых функций (3), (4) получаем

$$|(r \cos \theta)_{0,\varepsilon}|^2 = \frac{16\gamma k^3 B^2(\gamma, \beta)}{3\pi(\gamma^2 + k^2)^4} \times \left[ 1 - \left( \frac{\gamma^2 + k^2}{\beta^2 + k^2} \right)^2 \right]^2 \approx \frac{16\gamma k^3 B^2(\gamma, \beta)}{3\pi(\gamma^2 + k^2)^4}. \quad (21)$$

Точность проведенного в (21) разложения определяется малым параметром  $(\gamma/\beta)^2 \sim 10^{-2}$ , так как  $k \sim \gamma$ . Ядра  $K$  уравнения (12) при этом равны

$$K_{A,B}(t, t') = \frac{4B_{a,b}^2}{3\pi|\varepsilon_{a,b}|} \frac{\cos[\varphi_R(t) - \varphi_R(t')]}{R^2(t)R^2(t')} \times F(|\varepsilon_{a,b}|(t-t')), \quad (22)$$

$$K_{AB}(t, t') = \frac{16B_a^2 B_b^2 F(|\varepsilon_a|(t-t')) F(|\varepsilon_b|(t-t'))}{3\pi^2|\varepsilon_a \varepsilon_b|} \times \frac{3 \cos^2[\varphi_R(t) - \varphi_R(t')] - 1}{R^3(t)R^3(t')}, \quad (23)$$

где спектральная функция

$$F(x) = \int_0^\infty \frac{y^{3/2} e^{-ixy} dy}{(1+y)^4} \quad (24)$$

является функцией только одной переменной, что существенно упрощает процедуру численного решения уравнения (12). Эта функция была вычислена численно.

При больших прицельных параметрах  $\varrho \rightarrow \infty$  вероятности отрыва одного электрона  $P_{A,B} \sim \varrho^{-3}$ , так что  $P_{A,B}(\varrho) \varrho d\varrho \sim \varrho^{-2} d\varrho$ . Эффективные сечения определялись путем численного решения уравнения (12) в области прицельных параметров  $0 \leq \varrho \leq \varrho_{max}$ , а вклад от больших прицельных параметров  $\varrho \geq \varrho_{max}$  вычислялся в приближении теории малых возмущений. В дипольном приближении

вклад от  $\varrho \geq \varrho_{max}$  равен

$$\begin{aligned} \sigma_{A,B}(\varrho_m) &= 2\pi \int_{\varrho_{max}}^{\infty} P_1(\varrho) \varrho d\varrho = \frac{64B_{a,b}^2}{3v^2|\varepsilon_{a,b}|} \times \\ &\times \operatorname{Re} \left\{ \int_0^{\infty} \exp[-iy\Omega(\varrho_m)] F(y\Omega(\varrho_m)) dy \times \right. \\ &\times \left. \int_0^{\infty} f(x,y) dx \right\}, \\ f(x,y) &\equiv \\ &\equiv \frac{1 + \left(x + \frac{y}{2}\right) \left(x - \frac{y}{2}\right) + q_+(x,y)q_-(x,y)}{q_+(x,y)q_-(x,y) \left[ q_+(x,y) + q_-(x,y) \right]^2}, \\ q_{\pm}(x,y) &\equiv \sqrt{1 + \left(x \pm \frac{y}{2}\right)^2}, \end{aligned} \quad (25)$$

где  $v$  — относительная скорость столкновения.

Полные сечения одно- и двухэлектронного отрыва при больших скоростях столкновения,

$$\sigma_{A,B,AB} = 2\pi \int_0^{\infty} P_{A,B,AB}(\varrho) \varrho d\varrho,$$

были вычислены с использованием прямолинейных траекторий для столкновения  $H^- + H^-$ . Относительная погрешность расчета полных сечений не превышала 1%. Прицельный параметр  $\varrho_{max}$  выбирался таким, чтобы вклад в сечения от  $\varrho \geq \varrho_{max}$  также не превышал 1%. Полные сечения одно- и двухэлектронного отрыва показаны ниже на рис. 1 в сравнении с результатами экспериментальных измерений [1, 2, 5]. Для симметричного столкновения полное сечение отрыва одного электрона равно  $\sigma_1 = \sigma_A + \sigma_B$  ( $\sigma_A$  — сечение отрыва электрона от партнера столкновения  $H_A^-$ ,  $\sigma_B$  — сечение отрыва электрона от  $H_B^-$ ), причем  $\sigma_A = \sigma_B = \sigma_1/2$ .

### 3. МАЛЫЕ СКОРОСТИ СТОЛКНОВЕНИЯ. ОДНО- И ДВУХЭЛЕКТРОННЫЕ ОЖЕ-РАСПАДЫ

При малых скоростях столкновения,  $v \ll 1$ , обмен энергией между электронами и ядрами маловероятен. Хотя энергия тяжелых частиц превышает суммарную энергию связи слабосвязанных электронов, сечения динамического отрыва адиабатически малы. Из рис. 1 видно, что для столкновения

$H^- + H^-$  граничная энергия равна 2–3 кэВ в системе центра масс. При малых энергиях, однако, открываются пять каналов [3] оже-распадов, и сечения отрыва электронов остаются большими ( $\sim 10^{-14}$  см<sup>2</sup>) вплоть до пороговых энергий порядка 1 эВ, где они уменьшаются из-за кулоновского расталкивания отрицательных ионов.

Для изучения оже-распадов необходимо детально рассмотреть поведение энергий связи электронов при сближении отрицательных ионов. Разложение (1) можно представить в виде

$$\frac{1}{r_{12}} = -\frac{1}{R} + \frac{1}{|\mathbf{R}-\mathbf{r}_{1a}|} + \frac{1}{|\mathbf{R}+\mathbf{r}_{2b}|} + W(\mathbf{r}_{1a}, \mathbf{r}_{2b}), \quad (26)$$

$$r_{1a}, r_{2b} \ll R,$$

так как все степенные члены первой строчки в (1) совпадают с таковыми в разложении взаимодействия электрона с отрицательным точечным зарядом,  $|\mathbf{R}-\mathbf{r}_{1a}|^{-1}$ . Если добавить член  $1/R$  ко второй строке в (1), то эта строка будет совпадать с разложением взаимодействия  $|\mathbf{R}+\mathbf{r}_{2b}|^{-1}$ . Эти совпадения следуют из разложения Тейлора для функции нескольких переменных  $r_{12}^{-1}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ . Степенной ряд для  $W(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  дается смешанными производными ряда Тейлора.

Если один из электронов удаляется на большие расстояния от системы, то справедливы разложения

$$\frac{1}{r_{12}} \approx \frac{1}{|\mathbf{R}-\mathbf{r}_{1a}|} - \frac{\mathbf{r}_{2b} \cdot (\mathbf{R}-\mathbf{r}_{1a})}{|\mathbf{R}-\mathbf{r}_{1a}|^3} + \dots, \quad |\mathbf{R}-\mathbf{r}_{1a}| \gg r_{2b},$$

$$\frac{1}{r_{12}} \approx \frac{1}{|\mathbf{R}+\mathbf{r}_{2b}|} - \frac{\mathbf{r}_{1a} \cdot (\mathbf{R}+\mathbf{r}_{2b})}{|\mathbf{R}+\mathbf{r}_{2b}|^3} + \dots, \quad |\mathbf{R}+\mathbf{r}_{2b}| \gg r_{1a}.$$

Представление межэлектронного взаимодействия в виде выражения (26) указывает на некоторую аналогию между столкновением двух отрицательных ионов и столкновением отрицательного иона с бесструктурной отрицательно заряженной точечной частицей (электроном или антипротоном), исследованным ранее [12, 13]. В частности, одноэлектронный отрыв при столкновении двух отрицательных ионов определяется процессом «выдавливания» [12] одного электрона полем другого, т. е. процессом туннелирования одного электрона от своего иона через потенциальный барьер, созданный другим отрицательным ионом. Однако при столкновении двух отрицательных ионов процессу выдавливания подвергаются оба электрона, и эти процессы конкурируют между собой, поскольку после отрыва одного слабосвязанного электрона выдавливание второго электрона становится невозможным. При столкновении отрицательного иона, например, с антипротоном такой конкуренции нет.

Используя разложение (26), полный гамильтониан системы можно записать в виде

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + W(\mathbf{r}_{1a}, \mathbf{r}_{2b}), \quad \hat{H}_0 = \hat{h}_a + \hat{h}_b, \quad (27)$$

где одноэлектронные гамильтонианы  $\hat{h}_a$  и  $\hat{h}_b$  равны

$$\begin{aligned} \hat{h}_a &= -\frac{\Delta_1}{2} + U_a(r_{1a}) + \frac{1}{|\mathbf{R} - \mathbf{r}_{1a}|} - \frac{1}{R}, \\ \hat{h}_b &= -\frac{\Delta_2}{2} + U_b(r_{2b}) + \frac{1}{|\mathbf{R} + \mathbf{r}_{2b}|}, \end{aligned} \quad (28)$$

а  $U_{a,b}(r)$  являются энергиями взаимодействия слабосвязанных электронов  $a$  и  $b$  со своими атомными остатками. Волновые уравнения для этих электронов равны

$$\left( -\frac{\Delta_1}{2} + U_a(r_{1a}) + \frac{1}{|\mathbf{R} - \mathbf{r}_{1a}|} - \frac{1}{R} - E_a(R) \right) \times \psi_a^{(-)}(\mathbf{r}_{1a}) = 0, \quad (29)$$

$$\left( -\frac{\Delta_2}{2} + U_b(r_{2b}) + \frac{1}{|\mathbf{R} + \mathbf{r}_{2b}|} - E_b(R) \right) \times \psi_b^{(-)}(\mathbf{r}_{2b}) = 0, \quad (30)$$

а их энергии —

$$\begin{aligned} E_a(R) &\approx \varepsilon_a - \frac{\alpha_a}{2R^4} + \dots, \\ E_b(R) &\approx \varepsilon_b + \frac{1}{R} - \frac{\alpha_b}{2R^4} + \dots, \end{aligned} \quad (31)$$

где  $\alpha_{a,b}$  — поляризуемости отрицательных ионов.

Слагаемые  $-1/R$  можно отнести либо к гамильтониану  $\hat{h}_a$ , либо к гамильтониану  $\hat{h}_b$ . В (28)–(30) этот член отнесен к  $\hat{h}_a$ . В этом случае электрон  $b$  обладает избытком энергии  $1/R$ , а изменение энергии электрона  $a$  мало, и им можно пренебречь. Абсолютная величина  $1/R$  порядка или больше  $|\varepsilon_{a,b}|$ , а электрическое поле, порядка  $1/R^2$ , мало, и им можно пренебречь. Энергия  $E_b(R)$  электрона  $b$  находится в континууме при межъядерных расстояниях  $R \leq R_b \equiv 1/|\varepsilon_b|$ , и этот электрон может туннелировать от иона В в противоположную сторону от иона А. Этот процесс был исследован ранее [12] для столкновения  $\text{H}^-$  с электроном, рассматриваемым как классическая точечная частица. Для столкновения двух отрицательных ионов, в отличие от столкновения одного отрицательного иона с бесструктурной отрицательно заряженной точечной частицей, возможен также следующий двухэлектронный процесс. Электрон  $b$  может передать избыток своей энергии  $1/R$  электрону  $a$ , после чего электрон  $a$  перейдет в континуум, если  $R \leq R_a \equiv |\varepsilon_a|^{-1}$ . В этом необычном оже-процессе, подробно описанном ниже, отрывается только один электрон, а второй электрон остается связанным с отрицательным ионом.

Если  $R \leq R_{ab} \equiv |\varepsilon_a + \varepsilon_b|^{-1}$ , то энергетически возможен оже-распад с вылетом двух электронов. Скорость этого распада дается квадратом матричного элемента корреляционного взаимодействия  $W$  (см. ниже).

Если член  $-1/R$  добавлен к гамильтониану  $\hat{h}_b$ , то мы получаем альтернативное представление, эквивалентное предыдущему с заменой индексов  $a \leftrightarrow b$ . Для полного описания системы надо рассматривать оба представления. Ниже мы детально рассматриваем представление (28)–(30), а для альтернативного представления результаты выписываются по аналогии.

В обоих представлениях полная энергия системы равна

$$E(R) = E_a(R) + E_b(R) = \varepsilon_a + \varepsilon_b + \frac{1}{R}. \quad (32)$$

Поляризационные члены малы, и мы ими пренебрегаем. В работе [3] было подробно исследовано изменение полной энергии  $E(R)$  в приближении модели  $\delta$ -потенциала [14] с использованием кулоновской функции Грина [15, 16]. Было показано, что полная энергия следует соотношению (32) и после пересечения границы континуума.

Нулевой член межэлектронного расталкивания  $1/R$  можно формально разделить на две, например равные, части и каждую половину приписать разным электронам, т.е. можно вместо формул (31) формально написать одноэлектронные энергии, например, в виде

$$E_a(R) \approx \varepsilon_a + 1/2R, \quad E_b(R) \approx \varepsilon_b + 1/2R.$$

При этом, однако, получаются неверные значения межъядерного расстояния, при которых открываются каналы одноэлектронных отрывов. Из (31) и (32) следует, что отрыв электрона от иона  $a$  становится возможным при  $R \leq |\varepsilon_a|^{-1}$ , а из написанных выше формул для  $E_{a,b}(R)$  получаем, что это происходит при в два раза меньшем расстоянии  $R \leq |2\varepsilon_a|^{-1}$ .

Скорости всех перечисленных выше оже-распадов были вычислены на основании метода Фано [17], который использовался и в ранних работах [12, 18–20], см. также работы [21, 22].

Расстояния  $R_a$ ,  $R_b$  и  $R_{ab}$  очень велики, так как энергии связи отрицательных ионов очень малы. Например, для столкновения  $\text{H}^- + \text{H}^-$  расстояния  $R_a = R_b \approx 36a_0$  и  $R_{ab} \approx 18a_0$ . Поэтому эффективные сечения отрыва электронов, определяющиеся указанными оже-распадами, очень велики,  $\sim 10^{-14} \text{ см}^2$ .

### 3.1. Процесс «выдавливания»

Если  $R < R_b$ , то энергия электрона  $b$  находится в континууме:  $E_b = \varepsilon_b + 1/R > 0$ , и электрон  $b$  может туннелировать через потенциальный барьер, переходя в континуум. При  $R < R_a$  то же самое справедливо для электрона  $a$ . Скорость туннелирования через барьер,  $\Gamma_{sq}$ , вычисленная в [12], равна

$$\Gamma_{sq,(a,b)}(R) = \frac{B_{a,b}^2}{2\gamma_{a,b}R^2} \exp\left[-\frac{4}{\gamma_{a,b}}yf(y)\right],$$

$$f(y) \equiv \frac{\arcsin \sqrt{y}}{\sqrt{y(1-y)}} - 1, \quad y \equiv \frac{R}{R_{a,b}} \leq 1, \quad (33)$$

$$R_{a,b} \equiv \frac{1}{|\varepsilon_{a,b}|}.$$

Скорость распада  $\Gamma_{sq,(a,b)}(R) \equiv 0$  при  $R \geq R_{a,b}$ , так как при этих расстояниях энергия «туннелирующего» электрона отрицательна,  $E_{a,b}(R) < 0$ , и туннелирование невозможно. Если при  $R \leq R_{a,b}$  туннелирует электрон  $a$  (или  $b$ ), то электрон  $b$  (или  $a$ ) туннелировать в континуум уже не может, так как в системе  $A + B^-$  (или в системе  $A^- + B$ ) нет кулоновского расталкивания. Одновременное туннелирование двух электронов также невозможно, ибо согласно формуле (31) положительной может быть энергия только одного электрона.

Формула (33) справедлива при больших расстояниях между ионами, удовлетворяющих условию [12]

$$\gamma R > 1. \quad (34)$$

В работе [3] формула (33) была получена в приближении  $\delta$ -потенциала с использованием кулоновской функции Грина [15, 16], записанной в квазиклассическом приближении.

### 3.2. Одноэлектронный оже-распад

Если избытком энергии  $1/R$  обладает электрон  $b$ , то он может передать его электрону  $a$ , который при  $R \leq R_a$  перейдет в континуум. Электрон  $b$  при этом остается в связанном состоянии, так что этот процесс является одноэлектронным оже-распадом. Скорость такого распада определяется матричным элементом корреляционного взаимодействия  $W(\mathbf{r}_{1a}, \mathbf{r}_{2b})$ . Если при вычислении этого матричного элемента использовать невозмущенную волновую функцию электрона  $b$ , то этот матричный элемент будет равен нулю, так как состояние электрона  $b$  не меняется. В действительности же волновые функции электрона  $b$  до и после распада

различны. До распада состояние электрона  $b$  возмущено межэлектронным расталкиванием, и его волновая функция поляризована. После распада этот электрон возмущается нейтральным атомом  $A$ . Это возмущение гораздо слабее кулоновского расталкивания, и им можно пренебречь. Матричный элемент корреляционного взаимодействия  $W$ , вычисляемый с такими волновыми функциями электрона  $b$ , оказывается отличным от нуля. Таким образом, необходимо определить волновую функцию электрона  $b$ , поляризованную в начальном состоянии из-за взаимодействия с электроном  $a$ .

Возмущенная орбита  $\psi_b^{(-)}(\mathbf{r}_{2b})$  является решением волнового уравнения (30). При больших  $R$  это уравнение можно переписать в виде

$$\left(-\frac{\Delta}{2} + U_b(r_{2b}) + \frac{r_{2b} \cos \theta}{R^2} - \varepsilon_b\right) \psi_b^{(-)}(\mathbf{r}_{2b}) = 0 \quad (35)$$

и использовать для решения этого уравнения теорию малых возмущений ( $\psi_b^{(-)} = \psi_{b0}^{(-)} + \delta\psi_b^{(-)} + \dots$ ):

$$\left(-\frac{\Delta}{2} + U_b(r_{2b}) - \varepsilon_b\right) \psi_{b0}^{(-)} = 0, \quad (36)$$

$$\begin{aligned} \left(-\frac{\Delta}{2} + U_b(r_{2b}) - \varepsilon_b\right) \delta\psi_b^{(-)}(\mathbf{r}_{2b}) = \\ = -\frac{r_{2b} \cos \theta}{R^2} \psi_{b0}^{(-)}, \end{aligned} \quad (37)$$

где невозмущенная орбита  $\psi_{b0}^{(-)}$  дается выражением (3). Точное решение уравнения (37) с соответствующими граничными условиями равно

$$\psi_b^{(-)} = \psi_{b0}^{(-)}(r_{2b}) \left[1 - \frac{r_{2b}^2 \cos \theta}{2\gamma_b R^2} + O\left(\frac{r_{2b}^3}{R^3}\right)\right]. \quad (38)$$

Подставляя (38) в уравнение (37), мы непосредственно убеждаемся, что (38) действительно является точным решением этого уравнения.

Двухэлектронный матричный элемент для одноэлектронного оже-распада,

$$W_{if} = \langle \psi_{a0}^{(-)}(\mathbf{r}_{1a}) \psi_{b0}^{(-)}(\mathbf{r}_{2b}) | \times \\ \times | W(\mathbf{r}_{1a}, \mathbf{r}_{2b}) | \psi_a^{\varepsilon}(\mathbf{r}_{1a}) \psi_b^{(-)}(\mathbf{r}_{2b}) \rangle, \quad (39)$$

после вычисления дипольных матричных элементов оказывается равным

$$W_{if} = \frac{1}{\gamma_a \sqrt{3\pi}} \frac{(k/\gamma_a)^{3/2}}{(1 + (k/\gamma_a)^2)^2} \frac{1}{(\gamma_a R)^5}. \quad (40)$$

Используя закон сохранения энергии,

$$\frac{k^2}{\gamma_a^2} = \frac{R_a}{R} - 1, \quad R_a \equiv \frac{1}{|\varepsilon_a|}, \quad (41)$$

получаем скорость  $\Gamma_{1ab}$  одноэлектронного оже-распада с отрывом электрона от отрицательного иона  $A^-$  отрицательным ионом  $B^-$ :

$$\Gamma_{1ab}(R) = 2\pi |W_{if}|^2 = \frac{\gamma_a^8 B_a^2 B_b^4}{6\sqrt{2}} \left(\frac{\gamma_a}{\gamma_b}\right)^4 \times \frac{(1-x)^{3/2}}{(2x)^{15/2}}, \quad x \equiv \frac{R}{R_a} < 1. \quad (42)$$

Аналогично скорость  $\Gamma_{1ba}$  одноэлектронного оже-распада с отрывом электрона от отрицательно-го иона  $B^-$  отрицательным ионом  $A^-$  равна

$$\Gamma_{1ba}(R) = \frac{\gamma_b^8 B_a^4 B_b^2}{6\sqrt{2}} \left(\frac{\gamma_b}{\gamma_a}\right)^4 \frac{(1-y)^{3/2}}{(2y)^{15/2}}, \quad (43)$$

$$y \equiv \frac{R}{R_b} < 1, \quad R_b \equiv \frac{1}{|\varepsilon_b|}.$$

### 3.3. Двухэлектронный оже-распад

Скорость  $\Gamma_{AB}(R)$  двухэлектронного оже-распада может быть вычислена с помощью невозмущенных волновых функций начального состояния системы двух отрицательных ионов:

$$\Gamma_{ab}(R) = 2\pi \sum_m \left| \langle \psi_{a0}^{(-)}(\mathbf{r}_{1a}) \psi_{b0}^{(-)}(\mathbf{r}_{2b}) | \times W(\mathbf{r}_{1a}, \mathbf{r}_{2b}) | \psi_a^\varepsilon(\mathbf{r}_{1a}) \psi_b^{\varepsilon'}(\mathbf{r}_{2b}) \rangle \right|^2. \quad (44)$$

В результате получаем парциальную ширину распада,

$$\Gamma_{ab}(R, k_a, k_b) = \frac{2^{10} \gamma_a \gamma_b B_a^2 B_b^2}{3\pi R^6} \times \frac{k_a^3 k_b^3}{(\gamma_a^2 + k_a^2)^4 (\gamma_b^2 + k_b^2)^4}, \quad (45)$$

при котором образуется пара свободных электронов с импульсами  $k_a, k_b$ , связанными законом сохранения энергии:

$$k_a^2 + k_b^2 = 2 \left( \frac{1}{R} - |\varepsilon_a + \varepsilon_b| \right).$$

После интегрирования по электронному импульсу получаем полную скорость двухэлектронного оже-распада:

$$\Gamma_{ab}(R) = \frac{2^{10} \gamma_a \gamma_b B_a^2 B_b^2}{3\pi R_{ab}^2} \frac{(1-x)^4}{x^2} \times \int_0^1 \frac{(1-t^2)^{3/2} dt}{[1 - (1-x)^2 t^2]^4}, \quad (46)$$

$$R_{ab} \equiv \frac{1}{|\varepsilon_a + \varepsilon_b|}, \quad x \equiv \frac{R}{R_{ab}} < 1.$$

Скорости всех оже-распадов показаны ниже на рис. 2 как функции межъядерного расстояния  $R$  для столкновения  $H^- + Cs^-$ . Скорость выдавливания  $\Gamma_{sq}(R)$  является наибольшей в области расстояний  $2-3 \leq R \leq 35$ , которые вносят основной вклад в сечение одноэлектронного отрыва при не очень малых энергиях столкновения. Однако скорость выдавливания является экспоненциально убывающей функцией  $R$ , и при расстояниях  $R > 25-35$  она становится меньше скорости  $\Gamma_1$  одноэлектронного оже-распада, которая является степенной функцией  $R$ . В результате при малых припороговых энергиях столкновения одноэлектронный распад определяется одноэлектронным оже-распадом, т.е. величиной  $\Gamma_1$ . Такое поведение скоростей распада и сечений отрыва электронов имеет место для всех трех изученных столкновений,  $H^- + H^-$ ,  $H^- + Cs^-$  и  $Cs^- + Cs^-$ .

### 3.4. Вероятности и сечения для многоканального распада

Начальное состояние системы из двух отрицательных ионов,  $A^- + B^-$ , может распадаться по пяти различным каналам с образованием трех различных конечных состояний: (A), (B) и (AB). Вероятности такого распада должны рассчитываться по многоканальной схеме. Пусть  $P_0(\varrho, t)$  — вероятность найти систему в начальном состоянии в момент времени  $t$  при столкновении с прицельным параметром  $\varrho$ , а  $\Gamma_{tot}(R(t))$  — полная вероятность распада по всем каналам, тогда

$$P_0(\varrho, t) = \exp \left[ - \int_{-\infty}^t \Gamma_{tot}(R(t')) dt' \right], \quad (47)$$

$$P_0(\varrho) \equiv P_0(\varrho, t = +\infty).$$

Вероятность распада по каналу  $i$  равна

$$P_i(\varrho) = \int_{-\infty}^{\infty} P_0(\varrho, t) \Gamma_i(R(t)) dt = \int_{-\infty}^{\infty} \Gamma_i(R(t)) \exp \left[ - \int_{-\infty}^t \Gamma_{tot}(R(t')) dt' \right] dt, \quad (48)$$

где  $\Gamma_i(R(t))$  есть скорость распада по каналу  $i$  и

$$\Gamma_{tot} = \sum_i \Gamma_i = \Gamma_{sq,a} + \Gamma_{sq,b} + \Gamma_{1,ab} + \Gamma_{1,ba} + \Gamma_{ab}. \quad (49)$$



Сечения  $\sigma_A$  и  $\sigma_B$  одноэлектронных отрывов соответственно от ионов  $A^-$  и  $B^-$ ,

$$\sigma_A = 2\pi \int_0^\infty (P_{sq,a}(\varrho) + P_{1ab}(\varrho)) \varrho d\varrho, \quad (50)$$

$$\sigma_B = 2\pi \int_0^\infty (P_{sq,b}(\varrho) + P_{1ba}(\varrho)) \varrho d\varrho,$$

и сечение  $\sigma_{AB}$  двухэлектронного отрыва,

$$\sigma_{AB} = 2\pi \int_0^\infty P_{ab}(\varrho) \varrho d\varrho, \quad (51)$$

были вычислены с использованием кулоновских траекторий  $R(t)$ , что позволило правильно воспроизвести поведения сечений вблизи энергетических порогов, которое определяется расталкиванием ионов  $A^-$  и  $B^-$ .

Сечения отрыва электронов в столкновениях  $H^- + H^-, H^- + Cs^-, Cs^- + Cs^-$  показаны ниже на рис. 1, 3 и 4. Сравнение с результатами экспериментальных измерений приведено на рис. 1 только для столкновения  $H^- + H^-$ , так как экспериментальные результаты для столкновений других ионов опубликованы не были. Показанные на рис. 1 и 4 полные сечения одноэлектронных отрывов при столкновении одинаковых ионов,  $H^- + H^-$  и  $Cs^- + Cs^-$ , равны

$$\sigma_1 \equiv \sigma_A + \sigma_B = 2\pi \times \int_0^\infty (P_{sq,a}(\varrho) + P_{sq,b}(\varrho) + P_{1ab}(\varrho) + P_{1ba}(\varrho)) \varrho d\varrho, \quad (52)$$

а сечения отрыва электрона от каждого партнера столкновения равны половине полного сечения.

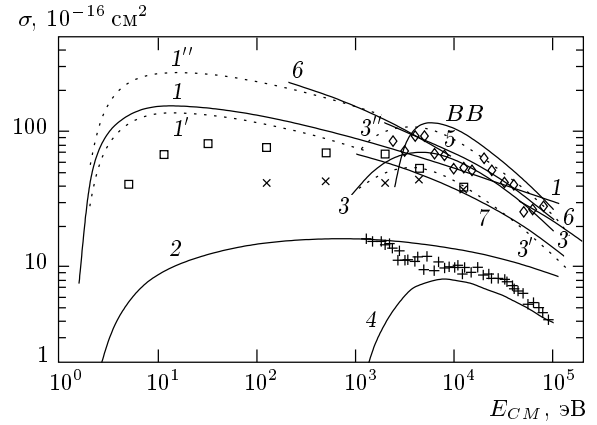
#### 4. РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

Уравнение (12) было решено численно методом конечных разностей. Использованное рекуррентное соотношение пятого порядка имеет вид

$$a_0(t_{i+1}) = a_0(t_i) + dt \left[ \frac{103}{60} S(t_i) - \frac{119}{120} S(t_{i-1}) + \frac{41}{120} S(t_{i-2}) - \frac{3}{40} S(t_{i-3}) + \frac{1}{120} S(t_{i-4}) \right],$$

где  $S(t_i)$  является правой частью уравнения (12):

$$S(t_i) \equiv S_A(t_i) + S_B(t_i) + S_{AB}(t_i).$$



**Рис. 1.** Сечения отрыва электронов в столкновении  $H^- + H^-$  в зависимости от энергии столкновения  $E_{CM}$  в системе центра масс: 1 и 2 — расчет в приближении распада соответственно одно- и двухэлектронного отрывов; точечные кривые 1' — рассчитанное нами сечение «выдавливания» [12] электрона в столкновении с антипротоном,  $H^- + \bar{p}$ , 1'' — удвоенное антипротонное сечение;  $\square$  и  $\times$  — умноженные на 2 сечения отрыва электрона от  $H^-$  в столкновении с антипротоном, классическое приближение, метод Монте-Карло [25, 26]; 3 и 4 — рассчитанные нами в динамическом приближении сечения соответственно одно- и двухэлектронных отрывов; точечные кривые 3' — сечение отрыва электрона ударом антипротона, динамическое приближение, 3'' — удвоенное антипротонное сечение; кривая  $BB$  — удвоенное сечение Бете–Борна одноэлектронного отрыва [12];  $\diamond$  и  $+$  — результаты экспериментальных измерений соответственно одно- и двухэлектронных отрывов [1, 2, 5]; кривые 5 и 6 — теоретические оценки полного сечения одноэлектронного отрыва с использованием удвоенного антипротонного сечения [5, 24]; 7 — полное сечение одноэлектронного отрыва, рассчитанное в классическом приближении методом Монте-Карло [1]

Эти величины вычислялись интегрированием от  $t = -\infty$  до  $t_i$ , так что для каждой траектории проводилось двойное интегрирование. Стабильность схемы расчета контролировалась по равенству единице полной вероятности:

$$1 = |a_0|^2 + P_A + P_B + P_{AB}.$$

Относительная ошибка расчета была порядка  $10^{-3}$ – $10^{-4}$ .

На рис. 1 показаны сечения одно- и двухэлектронного отрывов для столкновения  $H^- + H^-$  в области энергий столкновения от порогов до 100 кэВ в сравнении с результатами экспериментальных измерений [1, 2, 5], выполненных в области больших

энергий (1–100 кэВ). Сечение одноэлектронного отрыва, рассчитанное нами в динамическом приближении, в среднем хорошо согласуется с результатами экспериментальных измерений, хотя необходимо отметить довольно большой разброс экспериментальных точек. Рассчитанное сечение двухэлектронного отрыва на 15–20% меньше экспериментального. Это расхождение можно объяснить вкладом реакции  $H^- + H \rightarrow H + H + e$  в экспериментально наблюдаемое сечение [5], который не был учтен в нашем расчете. Эта реакция, впервые теоретически исследованная в работе [23], происходит после одноэлектронного отрыва и приводит в результате к отрыву двух электронов. Оба рассчитанных нами сечения динамического отрыва экспоненциально убывают при адиабатически малых энергиях столкновений ( $\leq 2-3$  кэВ).

На рис. 2 показаны скорости распада по всем возможным каналам как функции межъядерного расстояния при столкновении  $H^- + Cs^-$ . Наибольшую величину имеют скорости выдавливания в области расстояний  $5 \leq R \leq (22-37)a_0$ , причем наибольшей является скорость выдавливания электрона из  $Cs^-$ , так как энергия связи иона  $Cs^-$  (0.4716 эВ) почти в два раза меньше энергии связи иона  $H^-$  (0.75421 эВ). Отрыв электрона от иона  $Cs^-$  становится энергетически возможным при расстоянии  $R \leq R_{1,Cs^-} = 57.70a_0$ , а от иона  $H^-$  при  $R \leq R_{1,H^-} = 36.08a_0$ . Двухэлектронный распад возможен в этом столкновении при расстояниях  $R \leq R_2 = 22.20a_0$ , и основной вклад в сечение двухэлектронного распада дают расстояния  $5 \leq R \leq 20a_0$ . Скорость выдавливания экспоненциально убывает при увеличении расстояния до  $R_{sq}$ , и поэтому при расстояниях близких к  $R_{sq}$  ( $R \sim R_{sq}$ ) скорость одноэлектронного оже-распада, которая уменьшается медленнее с ростом  $R$ , становится больше скорости выдавливания.

Показанные на рис. 2 скорости оже-распадов использовались нами в расчетах сечений отрыва электронов в медленных столкновениях  $H^- + H^-$ . На рис. 1 линией 1 показано суммарное сечение одноэлектронного отрыва и линией 2 — сечение двухэлектронного отрыва. В работах [5, 24] сечение одноэлектронного отрыва оценивалось на основе предположения, что суммарное сечение одноэлектронного отрыва равно удвоенному сечению отрыва электрона от  $H^-$  ударом антипротона, рассчитанному ранее в работах [25, 26], где слабосвязанные электроны обоих ионов считались классическими частицами. В наших расчетах ни одно из этих упрощающих предположений не использовалось, и поэтому интересно

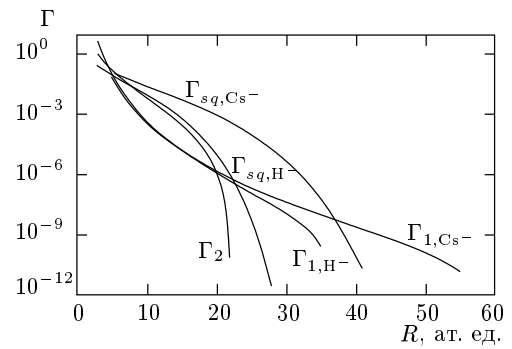


Рис. 2. Парциальные скорости распада как функции межъядерного расстояния  $R$  для столкновения  $H^- + Cs^-$ :  $\Gamma_{sq,H^-}$  и  $\Gamma_{sq,Cs^-}$  — скорости выдавливания электронов соответственно из  $H^-$  и  $Cs^-$ , формула (33);  $\Gamma_{1,H^-}$  и  $\Gamma_{1,Cs^-}$  — скорости одноэлектронных оже-распадов с отрывом электрона соответственно от  $H^-$  и  $Cs^-$ , формулы (42) и (43);  $\Gamma_2$  — скорость двухэлектронного оже-распада, формула (46)

сравнить полученное нами полное сечение одноэлектронного отрыва с сечением отрыва электрона от  $H^-$  ударом антипротона. Кривая 1' на рис. 1 является сечением отрыва электрона от  $H^-$  при медленном столкновении с антипротоном. В этом столкновении отрыв электрона при малых скоростях столкновения,  $v < v_0$ , возможен только в результате выдавливания, а при больших скоростях имеет место динамический отрыв. Поэтому при малых  $v$  сечение рассчитывалось по формуле (50), в которой присутствовал только один канал распада — выдавливание электрона из  $H^-$  полем антипротона, т. е. когда только  $\Gamma_{sq,H^-} \neq 0$ , а скорости распада по всем другим каналам полагались равными нулю. Кривая 1'' на рис. 1 — удвоенное сечение 1'. Точечная кривая 3' также является сечением отрыва электрона от  $H^-$  ударом антипротона, рассчитанным нами при больших  $v$  в динамическом приближении при решении уравнения (12), в котором было положено  $S_A \neq 0$ , а  $S_B = S_{AB} = 0$ . Точечная кривая 3'' на рис. 1 — удвоенное сечение 3'. Эти данные показывают, что при энергии столкновения  $E_{CM} \leq 10$  кэВ сечение отрыва электрона от  $H^-$  ударом антипротона очень близко к полному сечению одноэлектронного отрыва в столкновении  $H^- + H^-$ , а удвоенное антипротонное сечение примерно в два раза больше последнего. Лишь при больших энергиях  $E_{CM} \geq 100$  кэВ удвоенное антипротонное сечение 3'' приближается на рис. 1 к сечению 3.

Результаты сравнения легко объяснить. При

столкновении двух отрицательных ионов отрыв электрона от одного из ионов, например от иона  $H_A^-$ , конкурирует с отрывом электрона от другого иона,  $H_B^-$ . Отрыв электрона от иона  $H_A^-$  в результате кулоновского расталкивания с ионом  $H_B^-$  возможен, только пока ион В не разрушен. Если электрон иона  $H_B^-$  оторван, то отрыв электрона от иона  $H_A^-$  возможен только как результат более слабого взаимодействия с нейтральным атомом  $H_B$ . Поэтому вероятность отрыва электрона от  $H_A^-$  должна оцениваться как произведение  $P_A(1 - P_B)$ , где  $1 - P_B$  — вероятность того, что ион В не разрушен. Полная вероятность одноэлектронного отрыва тогда равна  $P_A(1 - P_B) + P_B(1 - P_A)$ . При больших энергиях столкновения основной вклад в сечение отрыва вносят столкновения с большими прицельными параметрами, когда вероятности отрыва малы,  $P_{A,B} \ll 1$ . Тогда  $1 - P_{A,B} \approx 1$ , полная вероятность одноэлектронного отрыва порядка  $P_A + P_B$ , а полное сечение порядка  $\sigma_A + \sigma_B$ . При энергиях  $E_{CM} \leq 10$  кэВ вероятности отрыва электрона  $P_{A,B}$  являются резкими функциями прицельного параметра  $\rho$ . При больших  $\rho \gg 1$  эти вероятности близки к нулю, в малой области  $\delta\rho$  они возрастают от нуля до единицы и остаются близкими к единице при меньших  $\rho$ . При таком поведении вероятностей сумма  $P_A + P_B \approx 2$  в основной области изменения  $\rho$ , и поэтому как вероятности, так и сечения нельзя складывать. Отрыв электрона от иона А сильно конкурирует с отрывом от иона В, и полное сечение одноэлектронного отрыва оказывается близким к однократному сечению  $I'$  отрыва антипротоном, а не к удвоенному сечению  $I''$  (см. рис. 1).

В работе [12] в приближении Бете–Борна была получена аналитическая формула для сечения ионизации  $H^-$  электроном. Для сравнения этой формулы с результатами настоящих численных расчетов полного сечения одноэлектронного отрыва в столкновении  $H^- + H^-$  необходимо рассматривать удвоенное бете-борновское сечение, которое согласно [12] равно

$$\sigma_{H^-+H^-}^{(1)} = 2\sigma_{e+H^-} = \frac{4\pi}{3} \frac{B^2 a_0^2}{|\epsilon_0| v^2} \ln \frac{1.55 v^2}{\gamma B}, \quad (53)$$

$$a_0^2 = 2.8003 \cdot 10^{-17} \text{ см}^2.$$

Сечение (53) показано на рис. 1 (кривая  $BB$ ). При его вычислении использовалась величина  $B = 1.145$  вместо прежней величины  $B = \sqrt{2.65} = 1.628$  [12]. Из рисунка видно, что даже при энергии столкновения около 100 кэВ бете-борновское сечение (53) примерно в 1.5 раза больше сечения, полученного в настоящей работе. В области максимума бете-борновское сечение примерно в два раза больше

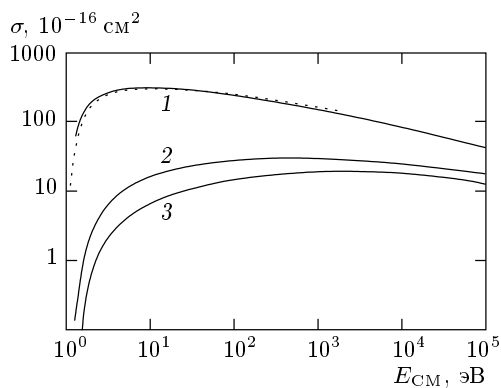
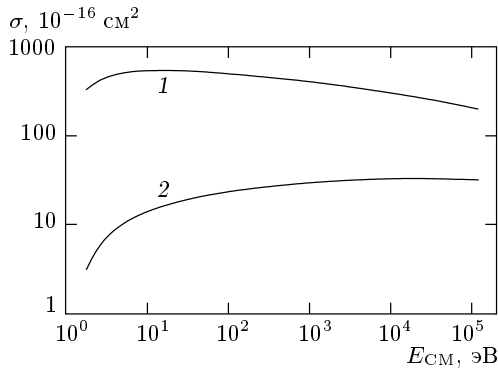


Рис. 3. Сечения одно- и двухэлектронных отрывов, рассчитанные в приближении распада для столкновения  $H^- + Cs^-$ : 1 и 2 — сечения отрыва одного электрона соответственно от  $Cs^-$  и  $H^-$ ; точки — сечение отрыва электрона в столкновении с антипротоном,  $Cs^- + \bar{p} = Cs + \bar{p} + e$ ; 3 — сечение отрыва обоих слабосвязанных электронов,  $H^- + Cs^- = H + Cs + 2e$

рассчитанного в данной работе (кривая 1). Различия объясняются тем, что в бете-борновском приближении применяется теория малых возмущений для решения временной задачи. В нашем же расчете временное уравнение (12) решалось точно, без применения каких-либо приближений. Отметим также, что формула (53) не учитывает описанной выше конкуренции отрывов электронов от каждого из ионов и может быть справедлива лишь при очень больших энергиях столкновений, когда основной вклад в сечение дает область больших прицельных параметров, где вероятность отрыва много меньше единицы.

Для столкновения тяжелых частиц из-за присутствия логарифма в формуле (53) борновское приближение оказывается применимым при энергиях, очень далеких от порога реакции (см. рис. 1), тогда как для столкновений с электроном это приближение применимо при энергиях более близких к порогу [12].

При столкновении двух разных отрицательных ионов,  $A^- + B^-$  отрыв электрона от одного иона сильно конкурирует с отрывом от другого иона, причем отношение вероятностей отрыва электрона от того или иного иона зависит от отношения их энергий связи. Если энергия связи иона  $A^-$  больше энергии связи иона  $B^-$ , то отрыв от  $B^-$  более вероятен, чем от  $A^-$ , причем сечение отрыва электрона от  $B^-$  близко к сечению отрыва антипротоном, а сечение разрушения  $A^-$  существенно меньше соответствующего антипротонного сечения. На рис. 3 пока-

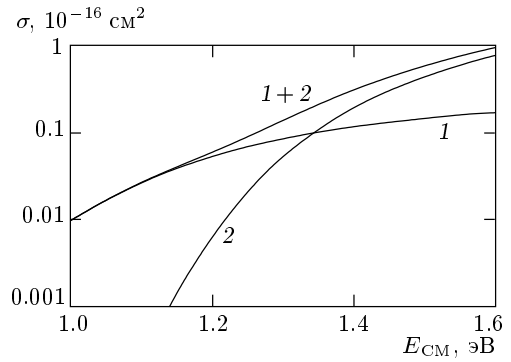


**Рис. 4.** Сечения одно- и двухэлектронных отрывов, рассчитанные в приближении распада для столкновения  $Cs_a^- + Cs_b^-$ : 1 — полное сечение одноэлектронного отрыва с образованием систем  $Cs_a + e + Cs_b^-$  или  $Cs_a^- + Cs_b + e$ ; 2 — сечение отрыва двух электронов,  $Cs^- + Cs^- = 2Cs + 2e$

заны вычисленные нами сечения отрыва электронов в столкновении  $H^- + Cs^-$ . Сечение отрыва электрона от  $Cs^-$  (кривая 1) очень близко к сечению разрушения иона  $Cs^-$  антипротоном (точечная кривая). В то же время сечение разрушения  $H^-$  (кривая 2) примерно в два раза меньше сечения отрыва электрона от одного из партнеров столкновения  $H^- + H^-$  (см. рис. 1).

На рис. 4 показаны вычисленные нами сечения для столкновения  $Cs^- + Cs^-$ . Сравнивая рис. 1 и 4, легко найти, что отношение полных сечений одноэлектронного отрыва (кривые 1 на этих рисунках) обратно пропорционально примерно квадрату отношения энергий связи отрицательных ионов. Сечение же отрыва двух электронов (кривые 2 на рис. 1 и 4) очень медленно возрастает при уменьшении энергии связи сталкивающихся ионов, причем это справедливо как для медленных (оже-распады), так и для быстрых (динамический отрыв) столкновений.

В п. 4.2 был рассмотрен новый тип оже-распада: одноэлектронный оже-распад, скорость  $\Gamma_1(R)$  которого примерно на два порядка величины меньше скорости выдавливания  $\Gamma_{sq}(R)$  при межъядерных расстояниях  $R = 10-20$  (см. рис. 2). Поэтому этот путь распада несуществен для больших энергий столкновения, далеких от энергетического порога. Однако, как было указано выше, скорость одноэлектронного распада значительно медленнее, чем скорость выдавливания, уменьшается с увеличением расстояния  $R$  между ионами. При энергиях столкновения, близких к порогу, сталкивающиеся ионы из-за кулоновского расталкивания не сближа-



**Рис. 5.** Сечение отрыва электрона от  $H^-$  в столкновении  $H^- + Cs^- = H + Cs^- + e$  в области пороговых энергий: 1 — сечение одноэлектронного оже-распада с отрывом электрона от  $H^-$ ; 2 — сечение выдавливания электрона из  $H^-$ ; 1 + 2 — сумма сечений 1 и 2

ются до расстояний, где преобладает выдавливание, и одноэлектронный отрыв определяется одноэлектронным оже-распадом. На рис. 5 показано сечение отрыва электрона от  $H^-$  в области пороговых энергий столкновения с  $Cs^-$ . Вклад в это сечение вносят процессы выдавливания (кривая 2) и одноэлектронный оже-распад (кривая 1). При энергии  $E_{CM} = 1.35$  эВ эти вклады равны друг другу (см. рис. 5). При меньших энергиях  $E_{CM} > 1.35$  эВ, преобладает одноэлектронный оже-распад. Суммарное сечение (кривая 1 + 2) меняет свою функциональную зависимость от энергии столкновения вблизи  $E_{CM} = 1.35$  эВ. Эта особенность поведения сечения может быть исследована экспериментально методом совмещенных пучков. Необходимо также отметить, что, так как при пороговых энергиях столкновения отрицательные ионы не сближаются до малых расстояний, использованное нами дипольное разложение межэлектронного взаимодействия является особенно точным и воспроизведенное на рис. 5 поведение сечения также достаточно точно.

Данная работа поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (проект 96-15-96815) по программе поддержки ведущих научных школ.

## ЛИТЕРАТУРА

1. R. Schulze, F. Melchert, M. Hagman et al., J. Phys. B **24**, L7-L12 (1991).

2. M. Benner, S. Krüdener, F. Melchert et al., in: *Taetigkeitsbericht* 1991, *Kernphysik*, Strahlencentrum, J. Liebig Universitaet, Giessen, p. 46.
3. F. Melchert, R. Schulze, S. Krüdener et al., *J. Phys. B* **28**, 3299 (1995).
4. М. И. Чибисов, Ю. Н. Явлинский, Препринт ИАЭ-5738/6, Москва (1994).
5. O. Busic, N. Grün, and W. Scheid, *J. Phys. B* **31**, 2659 (1998).
6. Б. М. Смирнов, *Отрицательные ионы*, Атомиздат, Москва (1978).
7. M. Chibisov, F. Brouillard, J. P. Chenu et al., *J. Phys. B* **30**, 991 (1997).
8. M. I. Chibisov, R. K. Janev, F. Brouillard et al., *J. Phys. B* **31**, 2795 (1998).
9. А. А. Радциг, Б. М. Смирнов, *Параметры атомов и атомных ионов* (справочник), Энергоатомиздат, Москва (1986).
10. S. Chandrasekhar, *Astrophys. J.* **100**, 176 (1944).
11. В. П. Жданов, М. И. Чибисов, *ДАН СССР* **226**, 1055 (1976).
12. Б. М. Смирнов, М. И. Чибисов, *ЖЭТФ* **49**, 841 (1965).
13. Е. А. Соловьев, *ЖЭТФ* **72**, 2072 (1977).
14. Ю. Н. Демков, В. Н. Островский, *Метод потенциалов нулевого радиуса в атомной физике*, ЛГУ, Ленинград (1975).
15. L. Hostler and R. H. Pratt, *Phys. Rev. Lett.* **10**, 469 (1963).
16. L. Hostler, *J. Math. Phys.* **5**, 591 (1964).
17. U. Fano, *Phys. Rev.* **124**, 1866 (1961).
18. Б. М. Смирнов, О. Б. Фирсов, *Письма ЖЭТФ* **2**, 478 (1965).
19. В. П. Жданов, М. И. Чибисов, *ЖЭТФ* **70**, 2087 (1976).
20. В. П. Жданов, М. И. Чибисов, *Опт. и спектр.* **41**, 521 (1976).
21. W. H. Miller and H. Morgner, *J. Chem. Phys.* **67**, 4923 (1977).
22. A. Naji, K. Olamba, J. P. Chenu, S. Szücs, M. Chibisov, and F. Brouillard, *J. Phys. B* **31**, 2961 (1998).
23. Б. М. Смирнов, О. Б. Фирсов, *ЖЭТФ* **47**, 232 (1964).
24. V. N. Ostrovskii and K. Taubbjerg, *J. Phys. B* **29**, 2573 (1996).
25. G. Fiorentini and R. Tripiccioni, *Phys. Rev. A* **27**, 737 (1983).
26. J. S. Cohen and G. Fiorentini, *Phys. Rev. A* **33**, 1590 (1986).