

МЕТОД J -МАТРИЦЫ В ПРИМЕНЕНИИ К ОПИСАНИЮ ($e, 3e$)-РЕАКЦИИ НА АТОМЕ ГЕЛИЯ

*В. А. Кныр**, *В. В. Насыров***

*Хабаровский государственный технический университет
680035, Хабаровск, Россия*

*Ю. В. Попов****

*Научно-исследовательский институт ядерной физики им. Д. В. Скобельцына
Московского государственного университета им. М. В. Ломоносова
119899, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 13 декабря 2000 г.

На основе модели недемократического распада с использованием метода J -матрицы выполнены расчеты дифференциальных сечений для серии ($e, 3e$)-экспериментов. Проведено сравнение теоретических расчетов с имеющимися экспериментальными данными, а также с расчетами других авторов.

PACS: 31.25.-v, 34.80.Kw, 32.80.Fb

1. ВВЕДЕНИЕ

Структура квантовых систем с числом частиц больше двух и реакции между ними — все то, что в зарубежной научной литературе называется «Few Body Problems in Physics», — привлекали внимание исследователей еще на заре создания квантовой механики. Мощный импульс это направление получило в последние десятилетия в связи с существенным усовершенствованием технической базы так называемых совпадательных экспериментов, когда измеряется максимально большое число параметров (энергии, углы, поляризация и т. п.) фрагментов реакций распада многочастичной системы (ядро, атом, молекула, тонкая пленка) под действием налетающей частицы.

Матричные элементы для описания таких реакций включают в себя многочастичные волновые функции с различными асимптотиками каналов, поэтому на первый план выходит задача их адекватного приближенного вычисления. При этом замечено, что чем больше фрагментов распада, тем более аккуратные приближенные схемы решения многочастичного уравнения Шредингера требуются.

Самым распространенным в настоящее время является метод сильной связи каналов, когда исходное уравнение Шредингера путем разложения многочастичной волновой функции по некоторому «удобному» базису преобразуется в бесконечную систему связанных линейных алгебраических уравнений для коэффициентов такого разложения. Задача, таким образом, сводится к выбору исходного базиса, максимально отражающего физику рассматриваемого процесса, и к составлению оптимального и экономного вычислительного алгоритма.

Расчеты дифференциальных сечений упругого и квазиупругого рассеяний электронов на атомах в целом достаточно успешно воспроизводят экспериментальные данные, в том числе и в абсолютной шкале. В расчетах процессов однократной ионизации атома электроном (так называемая ($e, 2e$)-реакция), также как и фотоионизации, в настоящее время доминирует разновидность метода сильной связи каналов, реализованная в виде компьютерных программ Бреем с соавт. [1, 2]. Аналогичная программа расчетов независимо разработана в ХГТУ авторами данной статьи для случая однократной ионизации атома гелия электронным ударом [3]. Большая энергия падающего и рассеянного электронов (порядка 5–8 кэВ в экспериментах группы А. Ламам-Беннани в Орсе [4]) позволяет сделать в этом случае ряд

*E-mail: knyr@fizika.khstu.ru

**E-mail: nasyrov@fizika.khstu.ru

***E-mail: popov@srldan.npi.msu.su

упрощающих предположений, в частности, описывать быстрый электрон плоской волной и ограничиться приближением однофотонного обмена (первый борновский член).

Расчеты [3] показали, что при сравнительно больших переданных импульсах $Q > 1$ ат. ед. и энергиях испущенного электрона $E_1 > 20$ эВ его угловое распределение в реакции $\text{He}(e, 2e)\text{He}^+$ хорошо согласуется с экспериментом, если ион He^+ находится в основном состоянии. Однако при уменьшении величин Q и E_1 наблюдается регулярно увеличивающееся отличие теоретических расчетов от экспериментальных данных в области обратного пика. В работе [5] было отмечено, что все теоретические расчеты в данной кинематической области, включая самые простые модели волновых функций как начального, так и конечного состояний, дают практически совпадающие между собой результаты, отличные от экспериментальных.

Аналогичная регулярность наблюдается, если ион He^+ находится в возбужденном состоянии: при уменьшении Q и E_1 требуется все больший домножающий фактор. Однако здесь, по всей видимости, велик вклад двухфотонного обмена (второй борновский член) [6], хотя этот вопрос до конца не изучен.

Недавно поставленная группой А. Ламам-Беннани в Орсе серия $(e, 3e)$ -экспериментов на атоме гелия [7] показала еще более разительные отличия теории от эксперимента. В этой серии падающий и рассеянный электроны опять имеют большую энергию порядка 5 кэВ, а два медленных испущенных электрона имеют небольшие, не более 10 эВ, энергии. Угол испускания одного электрона фиксировался, и пятикратное дифференциальное сечение рассматривалось как функция угла вылета другого электрона. Малое, 0.24 ат. ед., значение переданного импульса Q могло бы указывать на близость экспериментальной ситуации к оптическому пределу и на доминирование вклада дипольного перехода. Однако результаты измерений в целом не подтвердили данный вывод. Это стимулировало наши расчеты серии $(e, 3e)$ -экспериментов с использованием разновидности метода сильной связи каналов, основанной на методе J -матрицы, которая показала свою высокую эффективность при анализе $(e, 2e)$ -процессов [3].

2. ТЕОРИЯ

Метод J -матрицы в данной работе применяется к расчетам реакции $\text{He}(e, 3e)\text{He}^{++}$, где имеется большой массив экспериментальных данных по измере-

нию угловых распределений испущенных атомом электронов [7]. Кинематические условия рассматриваемых экспериментов (энергия налетающего и рассеянного электронов $E_i \approx E_s \approx 5-8$ кэВ, энергии испущенных атомом электронов E_1 и E_2 порядка нескольких электрон-вольт) позволяют ограничиться первым борновским приближением (обмен одним виртуальным фотоном между падающим электроном и атомом) и использовать модель недемократического распада, основное приближение которой заключается в наличии промежуточного псевдосостояния иона He^+ с энергией, равной энергии одного из выбитых в реакции $(e, 3e)$ электронов. Это дает возможность представить амплитуду $(e, 3e)$ -процесса в виде суммы

$$f^{(e,3e)} = \sum_{\mu} f_{\mu}^{(e,2e)} f_{\mu}^{(e,e)},$$

где $f_{\mu}^{(e,2e)}$ — амплитуда $(e, 2e)$ -реакции, $f_{\mu}^{(e,e)}$ — амплитуда испускания второго электрона вследствие механизма встряски, индекс μ нумерует псевдосостояния иона He^+ , которые удобно характеризовать квантовыми числами (n, l, m) . В более развернутой записи

$$f_{nlm}^{(e,3e)} = -\frac{2}{Q^2} \sum_{nlm} \langle \psi_{nlm}^{-}(\mathbf{p}_1) | \exp(i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{r}_1) + \exp(i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{r}_2) - 2|\phi_0\rangle \langle \Phi_C^{-}(\mathbf{p}_2) | \Phi_{nlm} \rangle. \quad (1)$$

В выражении (1) $\psi_{nlm}^{-}(\mathbf{p}_1; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ — волновая функция конечного состояния $(e, 2e)$ -процесса, где, однако, вместо волновой функции реального иона-остатка рассматривается его псевдосостояние, $\Phi_C^{-}(\mathbf{p}_2)$ — кулоновская функция электрона, рассеянного в поле иона He^{++} , $\mathbf{Q} = \mathbf{p}_i - \mathbf{p}_s$ — импульс, переданный системе, Φ_{nlm} — волновая функция псевдосостояния иона He^+ , ϕ_0 — волновая функция атома гелия.

Для численного расчета в волновой функции конечного состояния $\psi_{nlm}^{-}(\mathbf{p}_1; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ удобно выделять полный орбитальный момент L двух электронов и его проекцию M . Тогда волновая функция конечного состояния иона He^+ и выбитого электрона может быть записана в виде разложения

$$|\psi_{nlm}^{-}(\mathbf{p}_1)\rangle = \frac{1}{\sqrt{p_1}} \sum_{\nu' \Gamma' L M} a_{\nu' \Gamma' L M}^L(E) \times C_{lm \lambda \mu}^{L M} Y_{\lambda \mu}(\hat{\mathbf{p}}_1) |(n'l')(v'l') : LM\rangle, \quad (2)$$

где $Y_{\lambda \mu}(\hat{\mathbf{p}}_1)$ — шаровая функция, (nlm) — квантовые числа иона He^+ в конечном состоянии, $(\lambda \mu)$ — кван-

товые числа выбитого электрона, $\Gamma' \equiv (n'l'\lambda')$ — индекс канала реакции, $E = p_1^2/2 + \varepsilon_{nl}$ — полная энергия, $\varepsilon_{n'l'}$ — энергия псевдосостояния, а базисные векторы $|(n'l)(\nu\lambda) : LM\rangle$ в координатном представлении имеют вид

$$\langle \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 | (n'l)(\nu\lambda) : LM \rangle = \begin{cases} \frac{1}{r_1 r_2} \mathcal{P}[\chi_{nl}(r_2)\chi_{\nu\lambda}(r_1)\mathcal{Y}_{l\lambda LM}(\hat{\mathbf{r}}_2, \hat{\mathbf{r}}_1)], & n \leq N_l, \\ \frac{1}{r_1 r_2} \mathcal{P}[\chi_{nl}(r_2)\phi_{\nu\lambda}(\xi\lambda r_1)\mathcal{Y}_{l\lambda LM}(\hat{\mathbf{r}}_2, \hat{\mathbf{r}}_1)], & n > N_l, \end{cases} \quad (3)$$

где \mathcal{P} — оператор симметризации, $\chi_{nl}(r)$ — радиальные волновые функции псевдосостояний,

$$\mathcal{Y}_{l\lambda LM}(\hat{\mathbf{r}}_2, \hat{\mathbf{r}}_1) = \sum_{m\mu} \langle lm\lambda\mu | LM \rangle Y_{lm}(\hat{\mathbf{r}}_2) Y_{\lambda\mu}(\hat{\mathbf{r}}_1).$$

Волновая функция основного состояния атома не также ищется в виде разложения по базисному набору (3):

$$|\phi_0\rangle = \sum_{\lambda l} \sum_{n=0}^{N_l} \sum_{\nu=0}^{N_\lambda} a_{n\nu l \lambda}^{(0)} |(n'l)(\nu\lambda) : 00\rangle. \quad (4)$$

Волновые функции $\chi_{nl}(r)$ определяются при помощи метода псевдосостояний, в рамках которого считается, что один из электронов может находиться в псевдосостоянии, характеризуемом волновой функцией

$$\Phi_{nlm}(\mathbf{r}) = \frac{1}{r} \chi_{nl}(r) Y_{lm}(\hat{\mathbf{r}}), \quad (5)$$

а второй электрон находится в состоянии, которое может принадлежать как к дискретному, так и непрерывному спектрам. Число псевдосостояний принимается конечным, поэтому волновые функции $\chi_{nl}(r)$ ищутся в виде разложения по базисным функциям:

$$\chi_{nl}(r) = \sum_{n'=0}^{N_l} D_{nn'}^l \phi_{n'l}(\xi_l r), \quad (6)$$

где ξ_l — параметр базиса. При решении задач с кулоновским взаимодействием удобно использовать лаггеровский базис:

$$\phi_{nl}(x) = \sqrt{\frac{n!}{(n+2l+1)!}} \times x^{l+1} \exp\left(-\frac{x}{2}\right) L_n^{2l+1}(x), \quad (7)$$

$L_n^\alpha(x)$ — присоединенные полиномы Лагерра. Величина N_l определяет точность расчета волновых функций [8]. Этот параметр можно выбирать независимо для каждой парциальной волны.

Коэффициенты разложения $a_{\nu'\Gamma'\Gamma}^L(E)$ являются решением бесконечной системы алгебраических уравнений

$$\sum_{M\Gamma'} \sum_{\nu'=0}^{\infty} a_{\nu'\Gamma'\Gamma}^L(E) \times \langle (n'l')(\nu' \lambda') : LM | H - E | (n''l'')(\nu'' \lambda'') : LM \rangle = 0, \quad (8)$$

где H — гамильтониан двухэлектронной мишени, который без учета спин-орбитального взаимодействия может быть записан в виде

$$H = -\frac{1}{2}\Delta_1 - \frac{1}{2}\Delta_2 - \frac{Z}{r_1} - \frac{Z}{r_2} + \frac{1}{r_{12}}. \quad (9)$$

Система уравнений (8) решается приближенно при помощи J -матричного метода [9]. Основное приближение J -матричного формализма в применении к данной задаче заключается в пренебрежении матричными элементами остаточного взаимодействия $V = r_1^{-1} - r_{12}^{-1}$ при условии $\nu' > N_{\lambda'}$ и (или) $\nu'' > N_{\lambda''}$.

В результате система уравнений (8) разбивается на две части — внутреннюю ($\nu'' \leq N_{\lambda''}$) и внешнюю ($\nu'' > N_{\lambda''}$). Бесконечная система уравнений для $\nu'' > N_{\lambda''}$ решается аналитически точно, и ее решением являются по существу точные кулоновские функции эжектированного электрона в выбранном дискретном представлении, умноженные на волновые функции псевдосостояний иона-остатка. Для $\nu'' \leq N_{\lambda''}$ система уравнений (8) решается диагонализационным методом. Сшивка внутренних и внешних решений позволяет определить характеристики непрерывного спектра двухэлектронной атомной системы. Для определения волновой функции основного состояния $\phi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ достаточно диагонализировать матрицу гамильтониана (9) в базисе (3).

Применение указанной выше теоретической схемы к расчетам собственно $(e, 2e)$ -реакций на атоме гелия дало хороший результат [3]. Использование волновых функций (2) и (4), симметричных относительно перестановки координат \mathbf{r}_1 и \mathbf{r}_2 , позволяет получить амплитуду $(e, 2e)$ -процесса:

$$f_{nlm}^{(e, 2e)} = -\frac{4}{Q^2} \langle \psi_{nlm}^- | \exp(i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{r}_1) - 1 | \phi_0 \rangle = -\frac{4}{Q^2} \sum_{L\lambda} J_L^\Gamma(Q) C_{lm\lambda, -m}^{L0} Y_{\lambda, -m}^*(\hat{\mathbf{p}}_1), \quad (10)$$

где

$$J_L^\Gamma(Q) = \sum_{\nu'\Gamma'} (a^*)_{\nu'\Gamma'}^L D_{\nu'\Gamma'}^{L0}(Q), \quad (11)$$

$$D_{\nu'\Gamma}^{LM}(Q) = \langle (n'l')(l'\lambda') : LM \parallel 1 - i^L \sqrt{4\pi} j_L(Qr) Y_L(\hat{\mathbf{r}}) \parallel \psi_0 \rangle, \quad (12)$$

где $C_{lm\lambda, -m}^{L0}$ — коэффициент Клебша–Гордана, j_L — сферическая функция Бесселя.

Аналогично вычисляется и амплитуда $f_{nlm}^{(e,e)}$.

Используя выражение для амплитуды $f^{(e,3e)}$, с учетом нормировки волновой функции (2) нетрудно получить следующий вид дифференциального сечения $\sigma^{(5)}$ ($e, 3e$)-реакции:

$$\sigma^{(5)} \equiv \frac{d^5\sigma}{d\Omega_s dE_1 d\Omega_1 dE_2 d\Omega_2} = \frac{p_s}{p_1 p_2} \left| f^{(e,3e)} \right|^2. \quad (13)$$

3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Метод сильной связи каналов в применении к кулоновским ($e, 3e$)-реакциям имеет один существенный дефект: учет конечного числа псевдосостояний не удается удовлетворительно описать эффект сильного отталкивания испущенных из мишени электронов при уменьшении угла между ними и близости их энергий. Для учета электрон-электронного отталкивания волновая функция конечного состояния может быть домножена [10] на введенный в работе [11] так называемый гамов-фактор

$$\varphi(|\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2|) = \exp\left(-\frac{\pi}{|\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2|}\right) \Gamma\left(1 - \frac{1}{|\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2|}\right).$$

Гамов-фактор является частью приближенной трехчастичной функции конечного состояния, имеющей правильную трехчастичную асимптотику. Следствием такого домножения, однако, является потеря свойства ортогональности функций двухэлектронного континуума, что приводит к сильному уменьшению дифференциального сечения ($e, 3e$)-реакции $\sigma^{(5)}$ по абсолютной величине. Для восстановления правильной абсолютной величины нормируем результат на значение дифференциального сечения $\sigma^{(4)}$:

$$\sigma^{(4)} = \int_0^\pi \sigma^{(5)} d\theta_2.$$

Таким образом, для вычисления дифференциального сечения $\sigma_G^{(5)}$ используется следующее выражение:

$$\sigma_G^{(5)} = \frac{\sigma^{(5)} |\varphi(|\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2|)|^2}{\int_0^\pi \sigma^{(5)} |\varphi(|\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2|)|^2 d\theta_2} \sigma^{(4)}.$$

Отметим, что такая перенормировка в нашем случае достаточно уместна, так как при расчете амплитуды $f_{nlm}^{(e,2e)}$ в рамках J -матричного подхода мы учитываем значительную часть взаимодействий выбитых электронов в конечном состоянии.

Результаты расчетов показаны на рис. 1, 2, где дифференциальные сечения $\text{He}(e, 3e)\text{He}^{++}$ -процесса (в атомных единицах) представлены как функции плоского угла вылета одного из гелиевых электронов, отсчитанного от направления пучка быстрых падающих электронов ($E_i = 5599$ эВ), при этом плоский угол вылета второго электрона фиксирован. Энергии электронов равны соответственно 10 эВ (рис. 1) и 4 эВ (рис. 2). На всех рисунках $\theta_Q = 319^\circ$. Сплошной кривой показаны результаты наших расчетов, штриховой — расчетов Хейфеца по другой версии метода сильной связи каналов [7]. Экспериментальные результаты взяты из той же работы.

Результаты наших расчетов показали (за исключением коэффициентов домножения) значительное совпадение угловых распределений испущенных электронов с расчетами Хейфеца и др., выполненными на мощном мультипроцессорном вычислителе. При этом использовалась одна и та же физическая модель недемократического распада. Вместе с тем следует отметить, что и те, и другие расчеты показали в целом ряде случаев существенное отклонение от результатов эксперимента как по абсолютной величине, так и по углу испускания электрона. Эти отклонения от результатов независимых качественных расчетов ясно указывают на проявление новых физических эффектов даже в случае такого простого атома, как атом гелия.

Во-первых, очевидно, что модель недемократического распада, восходящая к экспериментам с испусканием электронов высоких энергий порядка 300–500 эВ [12], более неадекватна физике низкоэнергетических процессов с энергиями испускания 5–20 эВ. Этот вывод, в частности, подтверждается недавними ($e, 3e$)-экспериментами группы Ульриха (Германия) [13]. Таким образом, для расчета дифференциальных сечений ($e, 3e$)-реакции в кинематической области близких и небольших энергий испускания электронов требуется принципиально иная модель учета корреляций.

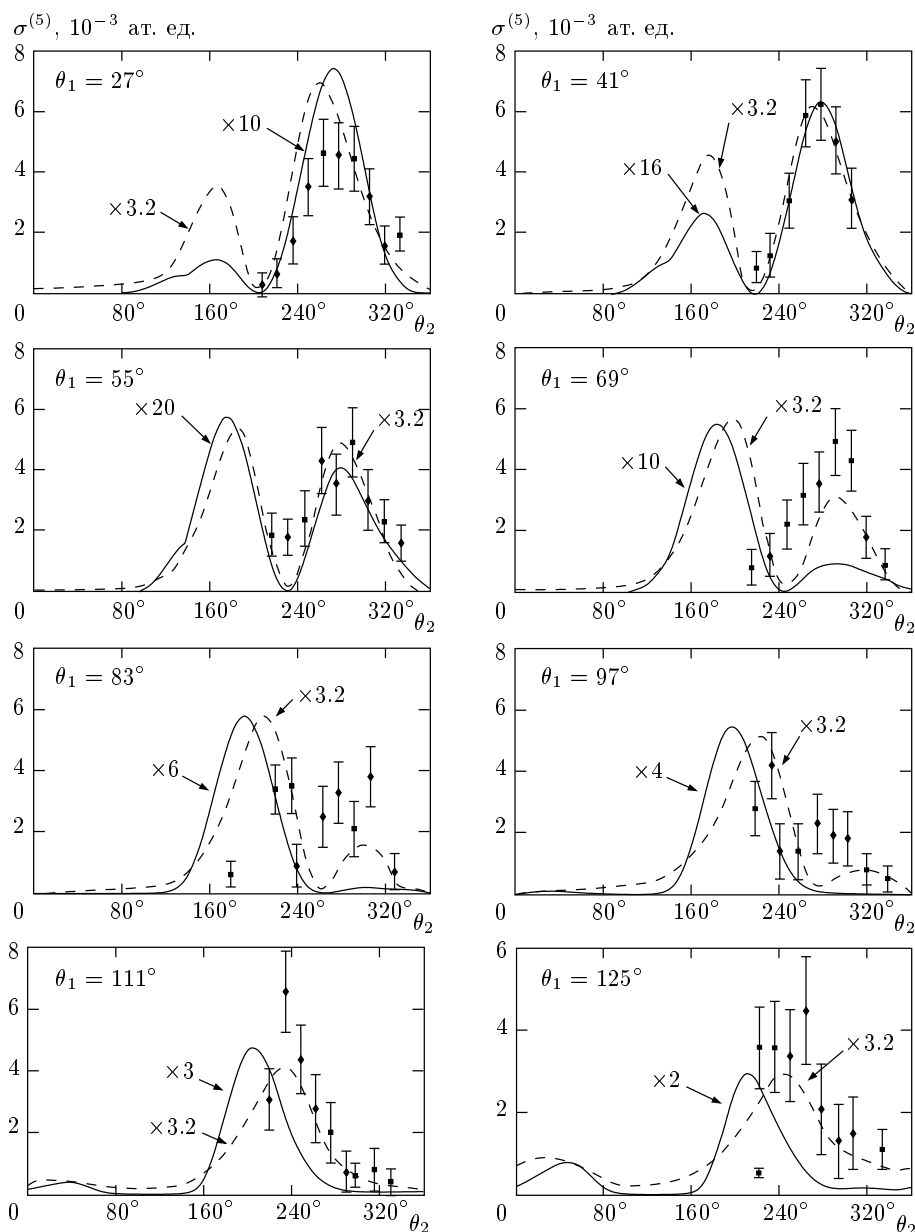


Рис. 1. Дифференциальные сечения $\sigma^{(5)} = d^5\sigma/d\Omega_s dE_1 d\Omega_1 dE_2 d\Omega_2$ реакции $(e, 3e)$ на атоме гелия для энергии налетающего электрона $E_i = 5599$ эВ. Угол вылета рассеянного электрона $\theta_s = 0.45^\circ$, переданный импульс $Q = 0.24$ ат. ед., энергии выбитых электронов $E_1 = E_2 = 10$ эВ. Сплошная линия — наш расчет, штриховая — расчет [7]. Экспериментальные данные взяты из работы [7]

Во-вторых, в обоих расчетах использованы пробные волновые функции основного состояния атома гелия, которые не являются формальным решением уравнения Шредингера [14], а получены путем вариационных вычислений, тем не менее удобны для численных расчетов. Отмечено, например, что простые пробные волновые функции гелия, с успехом используемые в расчетах упругих, квази-

упругих и даже $(e, 2e)$ -реакций, совершенно недостаточны для описания дифференциальных сечений $(e, 3e)$ -процессов: требуются все более громоздкие многоконфигурационные хартри-фоковские функции или многочленные хиллераасовские. Вместе с тем как теория, так и последние экспериментальные данные указывают на возможность асимптотического квантования угла между радиусами-векторами

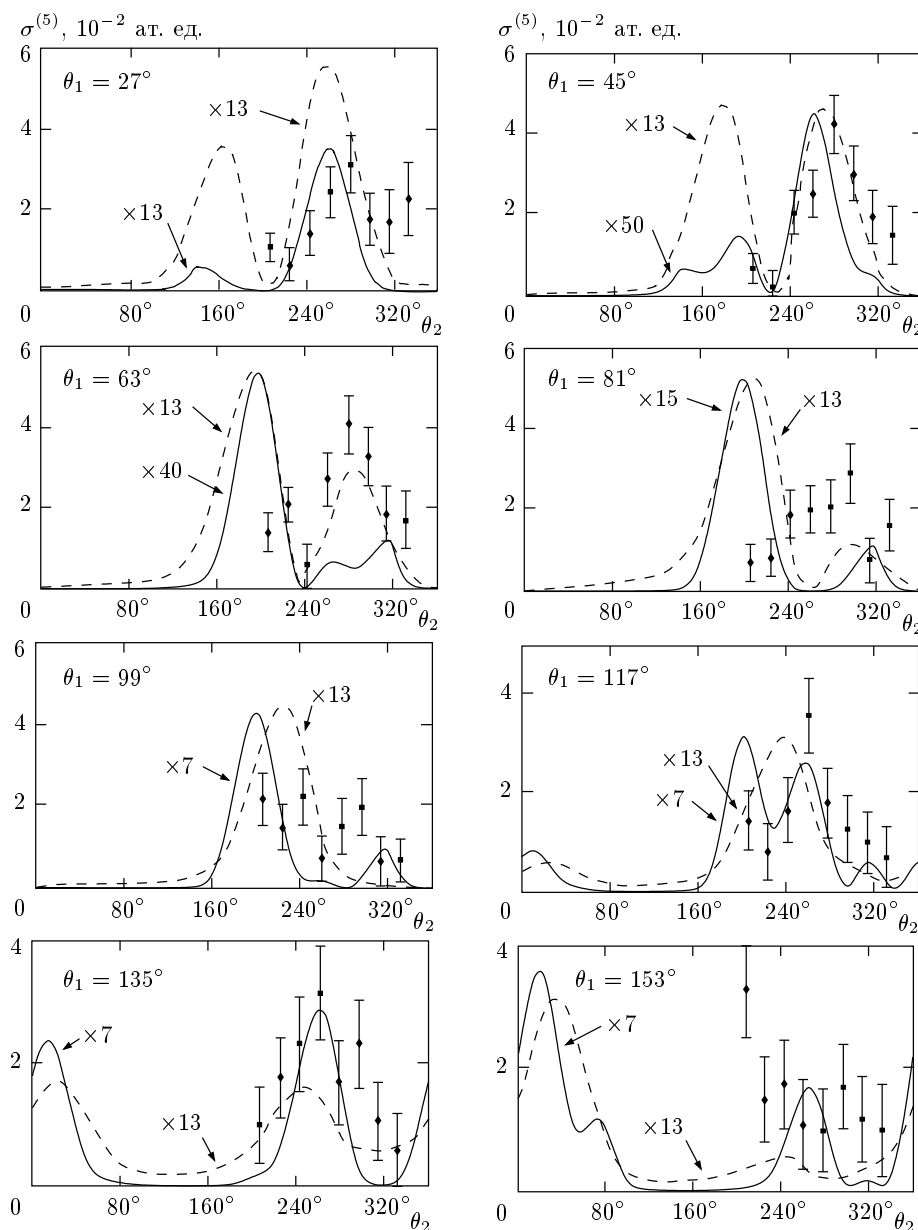


Рис. 2. Дифференциальные сечения $\sigma^{(5)} = d^5\sigma/d\Omega_s dE_1 d\Omega_1 dE_2 d\Omega_2$ реакции $(e, 3e)$ на атоме гелия для энергии налетающего электрона $E_i = 5599$ эВ. Угол вылета рассеянного электрона $\theta_s = 0.45^\circ$, переданный импульс $Q = 0.24$ ат. ед., энергии выбитых электронов $E_1 = E_2 = 4$ эВ. Сплошная линия — наш расчет, штриховая — расчет [7]. Экспериментальные данные взяты из работы [7]

электронов, что предполагал еще Гейзенберг в 20-х годах. Это в свою очередь существенно меняет вид волновой функции атома на средних расстояниях электронов от ядра, которые вносят основной вклад в интеграл матричного элемента, используемый в расчетах.

Наконец, в-третьих, учет пусть большого, но конечного числа псевдосостояний не может в полной

мере воспроизвести эффект влияния промежуточно-многоэлектронного континуума на результат расчетов в случае систем с кулоновскими потенциалами.

Таким образом, метод сильной связи каналов при исследовании многоэлектронных ионизационных процессов сталкивается все с большими «идеологическими» и вычислительными трудностями.

Даже для такого простого атома как гелий требуются новые идеи и новые вычислительные алгоритмы.

Авторы выражают благодарность А. Ламмам-Беннани за предоставление результатов эксперимента.

Работа поддержана программой Министерства образования Российской Федерации «Фундаментальные исследования высшей школы в области естественных и гуманитарных наук. Университеты России» (проект № 01.01.58), Федеральной целевой научно-технической программой «Квантовые и волновые процессы» Министерства промышленности и науки Российской Федерации (контракт 108-39(00)-П) и частично Федеральной целевой программой «Интеграция» (проект № А0028).

ЛИТЕРАТУРА

1. I. Bray, Phys. Rev. A **49**, 1066 (1994).
2. D. V. Fursa and I. Bray, J. Phys. B **30**, 5895 (1997).
3. В. А. Кныр, В. В. Насыров, Ю. В. Попов, Л. Я. Стотланд, ЖЭТФ **109**, 361 (1996).
4. C. Dupre, A. Lahmam-Bennani, A. Duguet et al., J. Phys. B **25**, 259 (1992).
5. Yu. V. Popov, V. A. Knyr, V. V. Nasyrov, and A. Lahmam-Bennani, Few-Body Systems, suppl. **10**, 235 (1999).
6. P. J. Marchalant, C. T. Whelan, and H. R. J. Walters, J. Phys. B **31**, 1141 (1998).
7. A. Kheifets, I. Bray, A. Lahmam-Bennani et al., J. Phys. B **32**, 5047 (1999).
8. Ю. Ф. Смирнов, Л. Я. Стотланд, А. М. Широков, Изв. АН СССР, сер. физ. **54**, 897 (1990).
9. H. A. Yamani and L. Fishman, J. Math. Phys. **16**, 410 (1975).
10. M. Grin, C. Dal Cappello, R. El. Mkhater, and J. Rasch, J. Phys. B **33**, 131 (2000).
11. M. Brauner, J. S. Briggs, and H. Klar, J. Phys. B **22**, 2265 (1989).
12. R. L. Brown, Phys. Rev. A **1**, 586 (1970).
13. A. Dorn, R. Moshhammer, C. D. Schröder et al., J. de Phys. IV **9**, Pr6-89 (1999).
14. Yu. V. Popov and L. U. Ancarani, Phys. Rev. A **62**, 42702 (2000).