ВЕСТНИК ТОГУ. 2005. № 1

УДК 539.186

ОПИСАНИЕ РЕАКЦИИ (*e*,3*e*) НА АТОМЕ ГЕЛИЯ НА ОСНОВЕ РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЯ ФАДДЕЕВА-МЕРКУРЬЕВА В J-МАТРИЧНОМ ПОДХОДЕ*

Зайцев С. А. – канд. физ.-мат. наук, доц. кафедры «Физика»; *Кныр В. А.* – завкафедрой «Физика» д-р физ.-мат. наук, проф. (ТОГУ); *Попов Ю. В.* – завлабораторией специального практикума канд. физ.-мат. наук, ст. науч. сотр. НИИЯФ (МГУ)

Разработана версия метода J-матрицы для решения трехчастичных дифференциальных уравнений Фаддеева-Меркурьева. Для проверки эффективности метода проведен расчет дифференциального сечения двукратной ионизации электронным ударом атома гелия. Результаты хорошо совпадают с экспериментом как по форме кривых, так и по абсолютным величинам.

The version of the J-matrix method is developed to solve the three-body differential Faddeev-Merkuriev equations. To check the efficiency of our method the calculations of fivefold differential cross section for electron-impact double ionization of helium are performed. The results are in good agreement with the experiment both in shape and in absolute values.

Введение

Алгебраическая версия квантовой теории рассеяния, получившая название метода J-матрицы, первоначально была предложена в атомной физике [1]. Позднее этот подход был (независимо) сформулирован в исследовании проблем ядерных столкновений [2–4]. В рамках этого дискретного подхода волновая функция состояния (дискретного и непрерывного спектров) системы представляется в виде бесконечного разложения по базису квадратично-интегрируемых функций. Метод J-матрицы (формально и с точки зрения численной реализации аналогичный R-матричной теории) показал себя как эффективное и довольно точное средство расчета амплитуд процессов атомного и ядерного рассеяния.

* Работа частично поддержана региональным грантом РФФИ «Приамурье-2004», проект № 04-02-97001.

В работах [5] на основе метода J-матрицы был сформулирован н
вый подход к изучению непрерывного спектра системы трех тел. Да
ный подход можно сопоставить с так называемым сходящимся мет
дом связанных каналов (ССС) [6], где используется многоканальн
разложение волновой функции мишени (например, двухчастичн
подсистемы). Собственные состояния такого разложения как с отриц
тельными, так и с положительными энергиями получают в результа
диагонализации матрицы гамильтониана мишени. Развитый в [5] мет
обладает тем преимуществом, что здесь учет спектра выделенно
двухчастичной подсистемы осуществляется корректно, а именно:
разложении волновой функции системы трех частиц используетс
суммирование по состояниям дискретного и интегрирование по с
стояниям непрерывного спектра мишени.

В работе [7] версия [5] метода J-матрицы распространена на слу
чай кулоновской системы трех тел. Для этих целей наиболее подходи
лагерровский базис, в рамках которого двухчастичная кулоновска
проблема решается аналитически. В отличие от авторов метода [8] мы
исходили из дифференциального (а не интегрального) уравнения Фад
деева-Меркурьева [9], в рамках которого асимптотические граничны
условия для компонент формулируются в терминах фиксированного
набора координат Якоби.

В качестве примера эффективности нашей схемы представлен рас-
чет дифференциального сечения процесса двукратной ионизации элек-
тронным ударом атома гелия: $He(e,3e)He^{++}$-процесса (или просто
$(e,3e)$-процесса). Такие процессы позволяют существенно углубить
понимание механизмов и динамики взаимодействия электронов со
сложными многоэлектронными системами. Сравнительно недавно по-
ставленная группой А. Ламам-Беннани в Орсэ серия $(e,3e)$-экспе-
риментов на атоме гелия [10] показала разительные отличия теории
(см. также [11]) от эксперимента. Это послужило дополнительной мо-
тивацией выбора именно этой реакции для иллюстрации работы наше-
го метода.

Теория

Кинематические условия рассматриваемых экспериментов (энер-
гия налетающего и рассеянного электронов $E_i \approx E_s \approx 5$–8 кэВ, энергии
испущенных атомом электронов E_1 и E_2 порядка нескольких элек-
трон-вольт) позволяют ограничиться первым борновским приближени-
ем (обмен одним виртуальным фотоном между падающим электроном
и атомом). Таким образом, быстрые электроны (налетающий и рассе-

янный) описываются плоскими волнами, и для вычисления сечения реакции $He(e,3e)He^{++}$ требуется найти волновую функцию кулоновской трехчастичной системы $(e^-e^-He^{++})=(123)$ с энергией $E=E_1+E_2$ $(E_1,E_2>0)$.

Гамильтониан системы $(e^-e^-He^{++})$ имеет вид

$$H=H_0+\sum V_\alpha(x_\alpha), \tag{1}$$

где H_0 – оператор кинетической энергии

$$H_0=-\Delta_{x_\alpha}-\Delta_{y_\alpha}. \tag{2}$$

Потенциалы V_α совпадают с кулоновским взаимодействием

$$V_\alpha(x_\alpha)=\frac{Z_\alpha}{x_\alpha}. \tag{3}$$

В (1) и (2) $(\vec{x}_\alpha,\vec{y}_\alpha)$ – набор координат Якоби [9]:

$$\vec{x}_\alpha=\tau_\alpha(\vec{r}_\beta-\vec{r}_\gamma),\vec{y}_\alpha=\mu_\alpha\left(\vec{r}_\alpha-\frac{m_\beta\vec{r}_\beta+m_\gamma\vec{r}_\gamma}{m_\beta+m_\gamma}\right), \tag{4}$$

m_i – массы частиц,

$$\tau_\alpha=\sqrt{2\frac{m_\beta m_\gamma}{m_\beta+m_\gamma}},\mu_\alpha=\sqrt{2m_\alpha\left(1-\frac{m_\alpha}{m_1+m_2+m_3}\right)}. \tag{5}$$

Взаимодействие V_α раскладывается на короткодействующую $V_\alpha^{(s)}$ и дальнодействующую $V_\alpha^{(l)}$ части

$$V_\alpha^{(s)}(x_\alpha,y_\alpha)=V_\alpha(x_\alpha)\varsigma_\alpha(x_\alpha,y_\alpha),\ V_\alpha^{(l)}(x_\alpha,y_\alpha)=V_\alpha(x_\alpha)[1-\varsigma_\alpha(x_\alpha,y_\alpha)] \tag{6}$$

с помощью функции вида

$$\varsigma(x,y)=2/\{1+\exp[(x/x_0)^\nu/(1+y/y_0)]\},\nu>2. \tag{7}$$

Полная волновая функция синглетного $g=+1$ и триплетного $g=-1$ состояний системы записывается в виде

$$\Psi^{(-)}=\frac{2}{\pi}\frac{1}{p_0k_0}(1+gP_{12})\sum_{L,\ell_0,\lambda_0,m_0,\mu_0}(\ell_0m_0\lambda_0\mu_0\,|\,LM)i^{\ell_0+\lambda_0}Y^*_{\ell_0m_0}(\hat{k}_0)Y^*_{\lambda_0\mu_0}(\hat{p}_0)\psi^{LM}_{\ell_0\lambda_0}\,. \quad (8)$$

Здесь компонента $\psi^{LM}_{\ell_0\lambda_0}\equiv\psi(\vec{x}_1,\vec{y}_1)$ удовлетворяет уравнению Фаддеева-Меркурьева [12]

$$\left[H_0+V_1(x_1)+V_3(x_3)+V_2^{(l)}(x_2)-E\right]\psi(\vec{x}_1,\vec{y}_1)=-gV_1^{(s)}P_{12}\psi(\vec{x}_1,\vec{y}_1), \quad (9)$$

которое в нашем случае описывает рассеяние частицы 1 на двухчастичной подсистеме (2, 3).

В J-матричном подходе компонента ψ представляется в виде бисферического разложения

$$\psi=\sum_{\ell,\lambda,n,\nu}C^{L(\ell\lambda)}_{n,\nu}(E)\,|\,n\ell,\nu\lambda;LM>, \quad (10)$$

$$|\,n\ell,\nu\lambda;LM>=\frac{\phi^\ell_n(x)\phi^\lambda_\nu(y)}{xy}Y^{LM}_{\ell\lambda}(\hat{x},\hat{y}), \quad (11)$$

где $Y^{LM}_{\ell\lambda}(\hat{x},\hat{y})=\sum_{m,\mu}(\ell m\lambda\mu\,|\,LM)Y_{\ell m}(\hat{x})Y_{\lambda\mu}(\hat{y})$,

с использованием лагерровских базисных функций

$$\phi^\ell_n(x)=\left[(n+1)_{(2\ell+1)}\right]^{-1/2}(2ux)^{\ell+1}e^{-ux}L^{2\ell+1}_n(2ux)\,. \quad (12)$$

Здесь u – масштабный параметр, который влияет на скорость сходимости вычислений.

В рамках подхода Фаддеева-Меркурьева [9] асимптотические граничные условия для компоненты ψ задаются в терминах фиксированной пары якобиевых координат $\{\vec{x},\vec{y}\}$. Представление компоненты ψ в виде разложения (10) позволяет сформулировать граничные условия для коэффициентов $C^{L(\ell\lambda)}_{n,\nu}$ лишь для двухчастичной области (без учета шестимерной кулоновской сферической волны на асимптотике). В результате уравнение (9) преобразуется в уравнение относительно коэффициентов $C^{L(\ell\lambda)}_{n,\nu}$ разложения (10) [7]

$$C^{L(\ell\lambda)}_{n,\nu}(E)=\delta_{(\ell\lambda)}\delta_{(\ell_0\lambda_0)}e^{-i(\sigma_{\ell_0}+\sigma_{\lambda_0})}S_{n\ell_0}(k_0)S_{\nu\lambda_0}(p_0)+$$
$$+\sum_{n',\nu',n'',\nu'',\ell'',\lambda''}\left[\int dkS_{n\ell}(k)S_{n'\ell}(k)G^{\lambda(-)}_{\nu\nu'}(p=\sqrt{E-k^2})\right]V^{L(\ell\lambda)(\ell''\lambda'')}_{n'\nu';n''\nu''}C^{L(\ell''\lambda'')}_{n''\nu''}(E). \quad (13)$$

Здесь $V^{L(\ell\lambda)(\ell'\lambda')}_{n\nu;n'\nu'}$ – матричные элементы потенциала

$$V(\vec{x},\vec{y})=V_3(x_3)+V_2^{(l)}(x_2)-\frac{Z_{11}}{y}+gV_1^{(s)}P_{12}, \quad (14)$$

вычисленные на базисных функциях (11). Нас будет интересовать поведение компоненты ψ в области пространства, где локализована волновая функция Ψ_0 основного состояния атома гелия, поскольку сечение реакции содержит матричный элемент с участием Ψ_0. В данной области оператор $V(\vec{x},\vec{y})$ является короткодействующим [9], что позволяет ограничиться конечным верхним пределом N в сумме в правой части выражения (13).

Интеграл по dk в квадратных скобках в выражении (13) обозначает суммирование по дискретному спектру и интегрирование по непрерывному спектру двухчастичной подсистемы (2, 3) [7]. Таким образом, в отличие от метода псевдосостояний, где используется конечное число псевдосостояний подсистемы (2, 3), в нашем подходе спектр подсистемы (2, 3) учитывается корректно.

Матричные элементы $G^{\ell(\pm)}_{nn'}(k)$ представляются в виде произведения [13]

$$G^{\ell(\pm)}_{nn'}(k)=-\frac{1}{k}S_{n_<\ell}(k)C^{(\pm)}_{n_>\ell}(k),\, n_<=\min\{n,n'\}\; n_>=\max\{n,n'\}, \quad (15)$$

регулярного $S_{n\ell}(k)$ и нерегулярного $C^{(\pm)}_{n\ell}(k)$ решений дискретного аналога уравнения Шредингера для кулоновской системы с зарядом Z [1]:

$$S_{n\ell}(k)=\frac{1}{2}\sqrt{(n+1)_{2\ell+1}}(2\sin\varsigma)^{\ell+1}e^{-\pi t/2}\xi^{-it}\frac{|\Gamma(\ell+1+it)|}{(2\ell+1)!}(-\xi)^n{}_2F_1(-n,\ell+$$
$$+1+it;2\ell+2;1-\xi^2),$$
$$C^{(\pm)}_{n\ell}(k)=-\sqrt{n!(n+2\ell+1)!}\frac{e^{\pi t/2}\xi^{it}}{(2\sin\varsigma)^{\ell}}\frac{\Gamma(\ell+1+it)}{|\Gamma(\ell+1+it)|}\times$$
$$\times\frac{(-\xi)^{\pm(n+1)}}{\Gamma(n+\ell+2\pm it)}\,{}_2F_1(-\ell\pm it,n+1;n+\ell+2\pm it;\xi^2), \quad (16)$$

где $t = \dfrac{Z}{2k}$, $\xi = e^{i\varsigma} = \dfrac{iu-k}{iu+k}$.

Результаты и их обсуждение

Пятикратное дифференциальное сечение $\sigma^{(5)}$ $(e,3e)$-реакции имеет вид

$$\sigma^{(5)} \equiv \frac{d^5\sigma}{d\Omega_s dE_1 d\Omega_1 dE_2 d\Omega_2} = \frac{p_s k_1 k_2}{2 p_i Q^4}\left|\left\langle \Psi^{(-)} \right| \exp\left(i\vec{Q}\cdot\vec{r}_1\right) + \right.$$
$$\left. + \exp\left(i\vec{Q}\cdot\vec{r}_2\right) - 2\left|\Psi_0\right\rangle\right|^2. \tag{17}$$

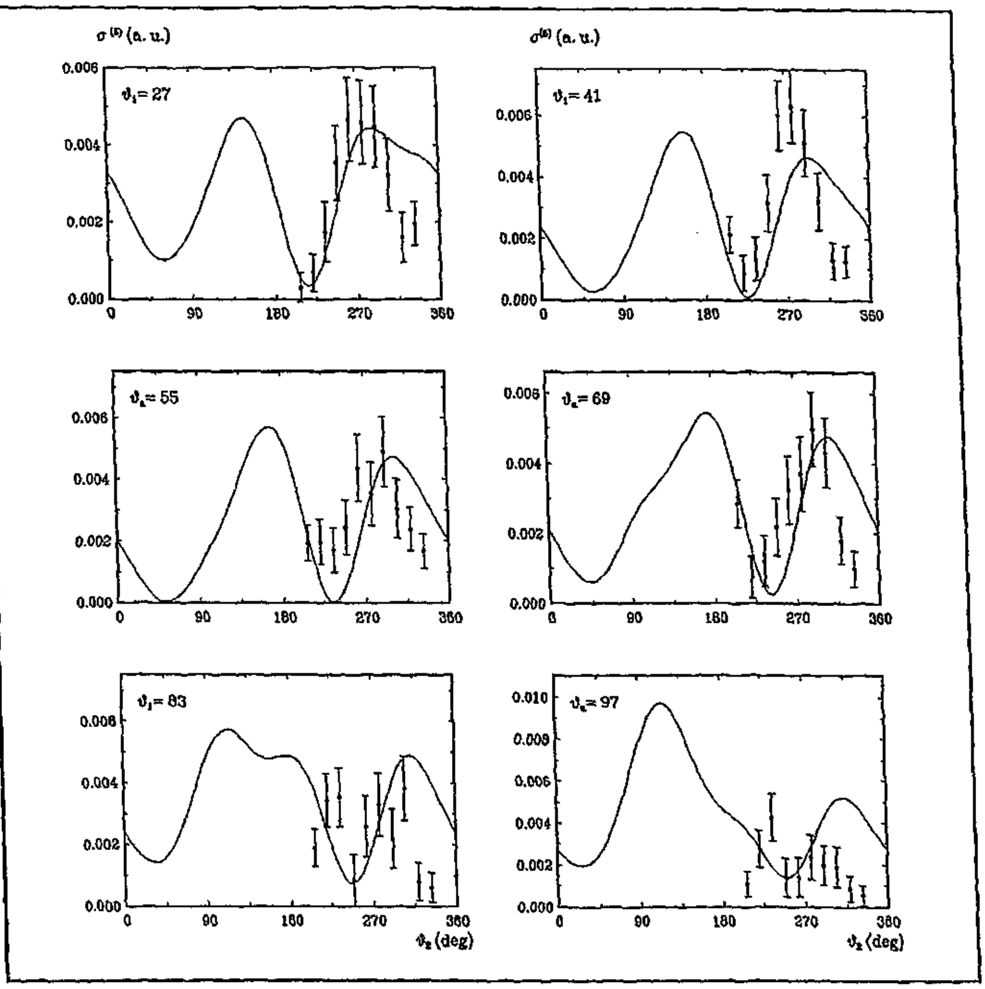
Здесь $\vec{p}_i$ ($p_i = \sqrt{2E_i}$) и $\vec{p}_s$ ($p_s = \sqrt{2E_s}$) – импульсы налетающего и рассеянного электронов; $\vec{Q} = \vec{p}_i - \vec{p}_s$ – импульс, переданный атому; $\vec{r}_1, \vec{k}_1$ и $\vec{r}_2, \vec{k}_2$ – радиусы-векторы и импульсы выбитых электронов.

Волновая функция Ψ_0 основного состояния атома гелия была получена в результате диагонализации матрицы гамильтониана (1), рассчитанной в базисе (11) с $\ell = \lambda$, $\mathrm{L} = 0$. Для нахождения Ψ_0 мы ограничились парциальными волнами $\ell_{\max} = 3$ и $n_{\max} = \nu_{\max} = 15$. В результате при выборе масштабного параметра $u_b = 1{,}193$ а. е. мы получили значение энергии основного состояния атома гелия $E_0 = -2.903256$ а. е.

Результаты расчетов $\sigma^{(5)}$ в атомных единицах представлены на рисунке как функции плоского угла вылета одного из гелиевых электронов, отсчитанного от направления пучка быстрых падающих электронов. При этом плоский угол вылета второго электрона фиксирован. Энергия E_5 = 5 500 эВ и угол вылета $\theta_s = 0{,}45°$ рассеянного электрона также фиксировались в эксперименте. Энергии выбитых (медленных) электронов задавались равными $E_1 = E_2 = 10$ эВ.

Волновая функция $\Psi^{(-)}$ (8) конечного состояния системы $(e^- e^- He^{++})$ получена описанным выше способом. При этом мы ограничились парциальными волнами $\ell_{\max} = \lambda_{\max} = 3$ и значением полного орбитального момента $L = 2$. Число N используемых в расчете базисных функций (12) (по каждой из координат Якоби x и y) ограничено значением 20. Значение масштабного параметра u базисной функции (12) было выбрано равным $u = 0{,}3$ а. е.

Расчеты хорошо воспроизводят экспериментальные данные как по углу испускания электрона, так и по абсолютной величине. Последнее совпадение выгодно отличает наши результаты от полученных ранее методом псевдосостояний [10, 11], в которых для сопоставления экспериментальных данных и теоретических результатов требуются масштабные множители.



Дифференциальные сечения $\sigma^{(5)}$ реакции $(e,3e)$ на атоме гелия. Энергия E_s и угол вылета θ_s рассеянного электрона фиксированы: $E_s = 5500$ эВ, $\theta_s = 0{,}45°$. Энергии выбитых электронов $E_1 = E_2 = 10$ эВ. Экспериментальные данные взяты из работы [10]

Таким образом, можно заключить, что представленный метод, основанный на J-матричном подходе, позволяет построить эффективную расчетную схему для решения задач атомной физики, а также учета кулоновских эффектов в ядерных задачах нескольких тел.

Библиографические ссылки

1. *Heller E. J. and Yamani H. A.* New L^2 approach to quantum scatterin Theory // Phys. Rev. A. 1974. V. 9; *Yamani H. A. and Fishman L.* J-matri method: Extensions to arbitrary angular momentum and to Coulomb scatterin // J. Math. Phys. 1975. V. 16; *Broad J. T. and Reinhardt W. P. One-* and twc electron photoejection from H^-: A multichannel J-matrix calculation // Phys. Rev A. 1976. V. 14.

2. *Филиппов Г. Ф., Охрименко И. П.* О возможности использования ос цилляторного базиса для решения задач непрерывного спектра // ЯФ. 1980 Т. 32.

3. *Smirnov Yu. F., Nechaev Yu. I.* The elements of scattering theory in th harmonic oscillator representation // Kinam. 1982. V. 4; *Смирнов Ю. Ф., Нечаев Ю. И.* О решении задачи рассеяния в осцилляторном представлении // ЯФ. 1982. Т. 35.

4. *Revai J., Sotona M. and Zofka J.* Note on the use of harmonic-oscillator wavefunctions in scattering calculations // J. Phys. G. 1985. V. 11.

5. *Кныр В. А., Стотланд Л. Я.* Проблема трех тел и метод J-матрицы // ЯФ. 1992. Т. 55; *Кныр В. А., Стотланд Л. Я.* О возможности решения задачи трех тел методом J-матрицы // ЯФ. 1996. Т. 59.

6. *Bray I. and Steblovics A. T.* Convergent close-coupling calculations of electron-hydrogen scattering // Phys. Rev. A. 1992. V. 46.

7. *Зайцев С. А., Кныр В. А., Попов Ю. В.* Решение уравнения Фаддеева-Меркурьева в J-матричном подходе: применение к кулоновским задачам // ЯФ. 2006. Т. 69. № 2. (to be published).

8. *Papp Z., Hu C.-Y., Hlousek Z. T., Konya B. and Yakovlev S. L.* Three-potential formalism for the three-body scattering problem with attractive Coulomb interactions // Phys. Rev. A. 2001. V. 63.

9. *Меркурьев С. П., Фаддеев Л. Д.* Квантовая теория рассеяния для систем нескольких частиц. М., 1985.

10. *Kheifets A., Bray I., Lahmam-Bennani A., Duguet A. and Taouil I.* A comparative experimental and theoretical investigation of the electron-impact double ionization of He in the keV regime // J. Phys. B. 1999. V. 32.

11. *Кныр В. А., Насыров В. В., Попов Ю. В.* Метод J-матрицы в применении к описанию $(e,3e)$-реакции на атоме гелия // ЖЭТФ. 2001. Т. 119. Вып. 5.

12. *Kvitsinsky A. A., Wu A., Hu Chi-Yu.* Scattering of electrons and positrons on hydrogen using the Faddeev equations // J. Phys. 1995. V. 28.

13. *Heller E. J.* Theory of J-matrix Green's functions with applications to atomic polarizability and phase-shift error bounds // Phys. Rev. A. 1975. V. 12.