



УДК 541.1.001.5

© С. А. Зайцев, В. А. Кныр, Ю. В. Попов, А. Ламам-Беннани, 2007

ПРОБЛЕМА ТРЕХ ЗАРЯЖЕННЫХ ТЕЛ В J-МАТРИЧНОМ ПОДХОДЕ

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

Обсуждается J-матричная версия уравнений Фаддеева-Меркурьева для кулоновской системы трех тел. Основные этапы численной схемы иллюстрируются на примере расчета сечения реакции однократной ионизации электронным ударом атома гелия.

The J-matrix version of the Faddeev-Merkuriev equations for a three-body Coulomb system is discussed. To illustrate all steps of the presented numerical scheme, calculations of the triple differential cross section for single ionization reaction on the helium atom are presented.

Введение

Сложнейшей проблемой в рассеянии трех заряженных частиц является корректное описание состояний непрерывного спектра системы. В принципе решение может быть получено с использованием уравнений Фаддеева-Меркурьева [1] в их дифференциальной или интегральной формах. В последнее время для описания трехтельной кулоновской системы также были предложены различные подходы в духе теории Фаддеева [2]. Однако численные приложения этих уравнений к реальным квантовым системам приводят к довольно сложным алгоритмам расчета, которые едва применимы даже при использовании современных компьютеров.

Наряду с уравнениями Фаддеева-Меркурьева, получили развитие и другие методы описания системы нескольких тел, основанные на уравнении Шредингера.

Так, например, результаты расчета сечения реакции двукратной ионизации атома гелия электронным ударом [3] показали, что хоро-



шим приближением для описания данной трехтельной кулоновской системы может служить так называемая ЗС-функция [4]. Проблема усовершенствования ЗС-функции довольно активно обсуждается в литературе [5-7].

Кроме того, развивается направление, в котором детально исследуются асимптотические свойства как самой волновой функции системы трех заряженных частиц, так и кулоновской функции Грина соответствующего уравнения Шредингера в координатном пространстве в различных асимптотических областях [8-9].

Вместе с тем продолжают использоваться традиционные методы, включающие метод гипергармоник [10], метод сильной связи каналов [11], а также метод псевдосостояний [12].

Метод гипергармоник, однако, применим к описанию истинно трехчастичного рассеяния и не способен учесть бинарные каналы.

С другой стороны, метод сильной связи каналов с большей или меньшей эффективностью описывает рассеяние третьей частицы на связанной паре в упругом канале, а также в каналах, отвечающих возбужденным состояниям связанной пары при энергиях ниже ее порога развала. Вместе с тем данный метод игнорирует каналы, соответствующие развалу пары, и не способен описать истинно трехчастичное рассеяние и процессы обмена.

Метод псевдосостояний можно рассматривать как усовершенствование метода сильной связи. Он позволяет эффективно учесть влияние каналов трехчастичного развала на упругое и неупругое рассеяние частицы на связанной паре. J-матричная версия метода псевдосостояний была использована нами в расчетах реакций однократной и двукратной ионизации атома гелия электронным ударом [13-14]. Метод J-матрицы [15-16] является алгебраической версией квантовой теории рассеяния, в рамках которой состояния дискретного и непрерывного спектров двухчастичной квантовой системы описываются с единых позиций в дискретном базисе квадратично-интегрируемых функций. Однако при энергиях выше порога трехчастичного развала метод псевдосостояний не дает адекватного описания свойств реакций, поскольку приводит к возникновению ложных резонансов с энергиями, близкими к энергиям псевдосостояний связанной пары частиц. Кроме того, данный метод не позволяет получить корректную структуру S-матрицы – воспроизвести ее сингулярности в случае рассеяния заряженных частиц.

В наших работах [17-19] был предложен новый метод решения проблемы трех тел, основанный на J-матричном подходе. Преимущество нашего метода по сравнению, например, с методом сильной связи каналов или методом псевдосостояний, заключается в том, что он по-



зволяет корректно учесть непрерывный спектр двухчастичной подсистемы (на которой происходит рассеяние третьей частицы). Первоначально метод [17–19] был сформулирован для решения уравнения Шредингера с короткодействующими двухчастичными потенциалами. В этом случае для описания взаимодействия предпочтительнее использовать осцилляторный базис. В последующих работах [20–21] метод [17–19] был обобщен на случай далекодействующих кулоновских потенциалов. Формализм [20–21] основан на решении уравнений Фаддеева-Меркурьева; при этом используется разложение радиальной части волновой функции по лагерровским базисным функциям. Мы начинаем с дифференциальных уравнений Фаддеева-Меркурьева. Однако необходимость интегрирования по непрерывному спектру двухчастичной подсистемы приводит к преобразованию исходных дифференциальных уравнений к интегральным. Так, в двухчастичной области Ω_α , где расстояние x_α между частицами β и γ много меньше расстояния y_α между их центром масс и частицей α , уравнения Фаддеева-Меркурьева сводятся к интегральному уравнению типа Липпмана-Швингера. Это результат был получен нами независимо от работ [22], где изначально использовались уравнения Фаддеева-Меркурьева в интегральной форме.

Ниже мы на примере атома гелия приводим краткое описание используемого формализма метода и обсуждаем детали его применения к расчету конкретной реакции.

1. Теория

Гамильтониан системы $(e^-e^-He^{++}) = (123)$ имеет вид

$$H = H_0 + \sum V_\alpha(x_\alpha), \quad (1)$$

где H_0 – оператор кинетической энергии:

$$H_0 = -\Delta_{x_\alpha} - \Delta_{y_\alpha}. \quad (2)$$

Потенциалы V_α совпадают с кулоновским взаимодействием:

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



В (1) и (2) $(\bar{x}_\alpha, \bar{y}_\alpha)$ – набор координат Якоби [1]. Взаимодействие V_α раскладывается на короткодействующую $V_\alpha^{(s)}$ и дальнедействующую $V_\alpha^{(l)}$ части

$$\begin{aligned} V_\alpha^{(s)}(x_\alpha, y_\alpha) &= V_\alpha(x_\alpha) \zeta_\alpha(x_\alpha, y_\alpha) \\ V_\alpha^{(l)}(x_\alpha, y_\alpha) &= V_\alpha(x_\alpha) [1 - \zeta_\alpha(x_\alpha, y_\alpha)], \end{aligned} \quad (4)$$

с помощью «разделительной» функции

$$\zeta(x, y) = 2 / \{1 + \exp[(x/x_0)^\nu / (1 + y/y_0)]\}, \quad \nu > 2. \quad (5)$$

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

$$\Psi_{n, \ell_0, m}^{(-)} = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{1}{p_0} \frac{(1 + gP_{12})}{\sqrt{2}} \sum_{L, \ell_0, \lambda_0, m_0, \mu_0} (\ell_0 m_0 \lambda_0 \mu_0 | LM) i^{\lambda_0} Y_{\ell_0 m_0}^*(\hat{k}_0) Y_{\lambda_0 \mu_0}^*(\hat{p}_0) \psi_{\ell_0 \lambda_0}^{LM} \mathbf{O}$$

шибка! Закладка не определена. (6)

Здесь компонента $\psi_{\ell_0 \lambda_0}^{LM} \equiv \psi(\bar{x}_1, \bar{y}_1)$ удовлетворяет уравнению Фаддеева-Меркурьева [1]

$$[H_0 + V_1(x_1) + V_3(x_3) + V_2^{(l)}(x_2) - E] \psi(\bar{x}_1, \bar{y}_1) = -g V_1^{(s)} P_{12} \psi(\bar{x}_1, \bar{y}_1), \quad (7)$$

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

В J-матричном подходе компонента ψ представляется в виде би-сферического разложения

$$\psi = \sum_{\ell, \lambda, n, \nu} C_{n, \nu}^{L(\ell, \lambda)}(E) |n\ell, \nu\lambda; LM\rangle, \quad (8)$$

$$|n\ell, \nu\lambda; LM\rangle = \frac{\phi_n^\ell(x) \phi_\nu^\lambda(y)}{xy} Y_{\ell\lambda}^{LM}(\hat{x}, \hat{y}), \quad (9)$$

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

с использованием лагерровских базисных функций

$$\phi_n^\ell(x) = [(n+1)_{(2\ell+1)}]^{-1/2} (2bx)^{\ell+1} e^{-ux} L_n^{2\ell+1}(2bx). \quad (10)$$

Здесь b – масштабный параметр, значение которого влияет на скорость сходимости вычислений.



В двухчастичной области $\Omega_1: x_1 \ll y_1$ исходное дифференциальное уравнение (7) преобразуется в интегральное уравнение Липпмана-Швингера, дискретный аналог которого в нашем случае принимает вид [20–21].

$$C_{n,v}^{L(\ell\lambda)}(E) = \delta_{(\ell\lambda)} \delta_{(\ell_0\lambda_0)} S_{nl_0}^{(n_0)} S_{v\lambda_0}(p_0) + \sum_{n',v',n'',v'',\ell'',\lambda''} \left[\int dk S_{n\ell}(k) S_{n'\ell'}(k) G_{vv'}^{\lambda(-)}(p = \sqrt{E - k^2}) \right] V_{n'v';n''v''}^{L(\ell\lambda)(\ell''\lambda'')} C_{n''v''}^{L(\ell''\lambda'')} (E). \quad (11)$$

Здесь $V_{n'v';n''v''}^{L(\ell\lambda)(\ell''\lambda'')}$ – матричные элементы потенциала вычисленные на базисных функциях (9).

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

К сожалению, в рамках нашего подхода не удастся учесть иные виды асимптотики волновой функции системы. Однако при энергии $E < 0$ есть все основания ожидать, что этот недостаток не окажется критическим. В двухчастичной области оператор $V(\vec{x}, \vec{y})$ является короткодействующим [1], что позволяет ограничиться конечным верхним пределом N в сумме в правой части выражения (11).

Учет непрерывного спектра подсистемы (2, 3) осуществляется путем интегрирования по dk в квадратных скобках в выражении (11). В этом состоит преимущество нашего подхода по сравнению с методом псевдосостояний.

2. Обсуждение деталей расчетов

Детали работы метода проиллюстрируем расчетом трехкратного дифференциального сечения (TDCS) реакции однократной ионизации ($(e, 2e)$ -реакции) атома гелия, находящегося в синглетном состоянии. В случае, когда быстрый электрон (с энергией в несколько электрон-вольт) передает атому сравнительно малые энергию и импульс, соответствующая проблема четырех тел может быть существенно упрощена путем ограничения первым борновским приближением взаимодействия налетающего электрона с атомом.



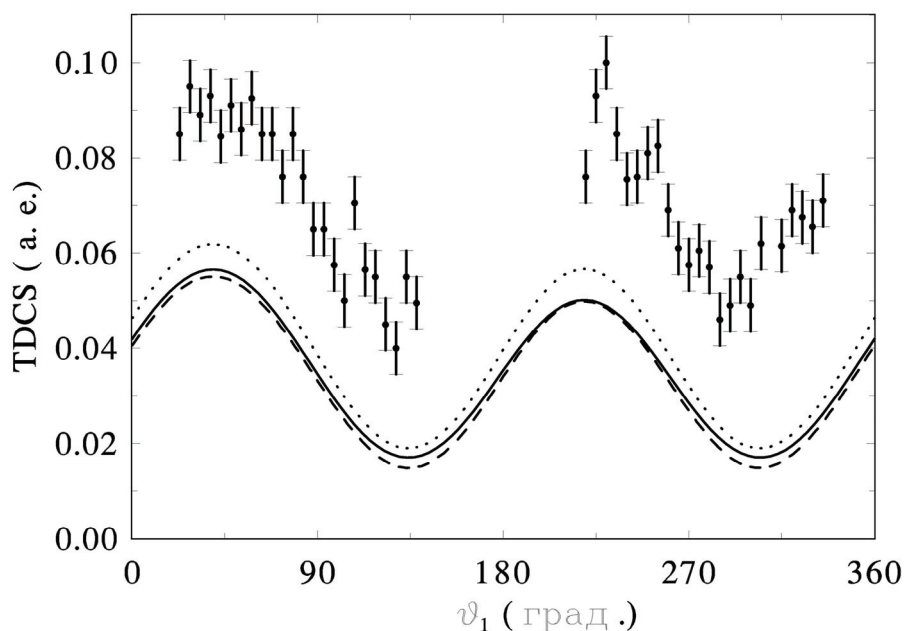
Расчеты были выполнены в пределе $m_3 \rightarrow \infty$, что означает $\vec{x}_1 = \sqrt{2}\vec{r}_2$ и $\vec{y}_1 = \sqrt{2}\vec{r}_1$ (здесь мы используем атомные единицы: $m_e = e = \hbar$). Троекратное дифференциальное сечение $He(e,2e)He^+$ реакции, когда ион He^+ остается в возбужденном состоянии, имеет вид

$$\frac{d^3\sigma_{n_0}}{d\Omega_s dE_1 d\Omega_1} = \frac{4p_s k_1}{p_i Q^4} \sum_{l_0, m} \left| \langle \Psi_{n_0, l_0, m}^{(-)} | \exp(i\vec{Q} \cdot \vec{r}_1) + \exp(i\vec{Q} \cdot \vec{r}_2) - 2 | \Psi_0 \rangle \right|^2. \quad (12)$$

Здесь p_i , p_s и k_1 – импульсы налетающего, рассеянного и медленного выбитого электрона, соответственно; $\vec{Q} = \vec{p}_i - \vec{p}_s$ – переданный импульс. Угловое распределение выбитого электрона рассчитано для эксперимента [23], когда ион остается в состоянии $n_0 = 2$, быстрый электрон с энергией $E_s = 5500$ эВ рассеивается под углом $\vartheta_s = 0,32^\circ$, а выбитый электрон обладает энергией $E_1 = 10$ эВ.

Волновая функция основного состояния атома гелия получена в результате диагонализации матрицы гамильтониана в базисе (12). Здесь мы ограничились $l_{\max} = 3$, $n_{\max} = \nu_{\max} = 15$. При использовании базисного параметра $b_0 = 1,193$ мы получили для энергии основного состояния значение $E_0 = -2,903256$.

Волновая функция конечного состояния $\Psi_{n_0, l_0, m}^{(-)}$ получена нашим методом (кратко рассмотренным в п. 1). При этом мы ограничились максимальным значением полного момента $L_{\max} = 2$ и $l, \lambda \leq 3$. Масштабный параметр базисных функций (10) задавался равным $b = 0,3$. Значения параметров функции «разделения» ζ (7) были следующими: $x_0 = 5$, $y_0 = 50$, $\nu = 2,1$. Заметим, что в пределе использования бесконечного количества парциальных волн результаты не должны зависеть от вида функции ζ (а тем более от ее параметров). Поскольку мы ограничиваем число используемых парциальных волн, значения параметров функции «разделения» ζ сказывается на скорости сходимости результатов в зависимости от числа базисных функций N . На рисунке приводятся результаты с $N = 19$ (штриховая линия), $N = 20$ (сплошная линия) и $N = 21$ (пунктирная линия). Экспериментальные данные взяты из [23].



Зависимость TDCS ионизации гелия от числа N радиальных базисных функций:

Из графика видно, что результаты расчетов воспроизводят форму экспериментальной кривой. Полученные абсолютные значения сечения (при данной энергии выбитого электрона) отличаются от экспериментальных, что подтверждается результатами других авторов [24–25].

Библиографические ссылки

1. Меркурьев С. П., Фаддеев Л. Д. Квантовая теория рассеяния для систем нескольких частиц. М., 1985.
2. Berakdar J. // Phys. Rev. Lett. 85. 2000.
3. Jones S. and Madison D. H. // Phys. Rev. Lett. 91. 2003. 073201.
4. Klar H. // Z. Phys. D 16. 1990.
5. Berakdar J. // Phys. Rev. A 53. 1996.
6. Gasaneo G., Colavecchia F. D., Garibotti C. R. // Phys. Rev. A 55. 1997.
7. Gasaneo G., Colavecchia F. D. // Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B 192. 2002.
8. Kadyrov A. S., Mukhamedzhanov A. M., Steblovics A. T. et al. // Phys. Rev. A 68. 2003. 022703 .
9. Mukhamedzhanov A. M., Kadyrov A. S., Pirlepsov F. // Phys. Rev. A 73. 2006. 012713.



10. *Smith F. T.* // *Phys. Rev.* 140. 1960.
11. *Massey H. S. W.* // *Rev. Mod. Phys.* 28. 1956.
12. *Burke P. G., Callaher D. F., Geltman S.* // *J. Phys. B* 2. 1969.
13. *Кныр В. А., Насыров В. В., Попов Ю. В., Стотланд Л. Я.* // *ЖЭТФ.* 1996. Т. 109.
14. *Кныр В. А., Насыров В. В., Попов Ю. В.* // *ЖЭТФ.* 2001. Т. 119.
15. *Heller E. J., Yamani H. A.* // *Phys. Rev. A* 9. 1974.
16. *Broad J. T., Reinhardt W. P.* // *Phys. Rev. A* 14. 1976.
17. *Кныр В. А., Стотланд Л. Я.* // *ЯФ* 55. 1992.
18. *Кныр В. А., Стотланд Л. Я.* // *ЯФ* 56. 1993.
19. *Кныр В. А., Стотланд Л. Я.* // *ЯФ* 59. 1996.
20. *Зайцев С. А., Кныр В. А., Попов Ю. В.* // *ЯФ* 69. 2006.
21. *Zaytsev S. A., Knyr V. A., Popov Yu. V., Lahmat-Bennani A.* // *Phys. Rev. A* 75. 2007. 022718.
22. *Papp Z., Hu C.-Y., Hlousek Z. T. et al.* // *Phys. Rev. A* 63. 2001. 062721.
23. *Dupre C., Lahmat-Bennani A., Duguet A. et al.* // *J. Phys. B* 25. 1992.
24. *Bray I.* // *Phys. Rev. A* 49. 1994.
25. *Fursa D. V., Bray I.* // *J. Phys. B* 30. 1997.