

ПРОЦЕССЫ МНОГОКРАТНОЙ ИОНИЗАЦИИ С УЧАСТИЕМ БЫСТРЫХ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ

*Ю. В. Попов**

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

*О. Чулуунбаатар***

Объединенный институт ядерных исследований, Дубна

В. Л. Шаблов

Институт атомной энергетики, Обнинск, Россия

К. А. Кузаков

Физический факультет Московского государственного университета
им. М. В. Ломоносова, Москва

ВВЕДЕНИЕ	1019
МЕТОД ЭФФЕКТИВНЫХ ЗАРЯДОВ В ЗАДАЧЕ ДВУХ ЭЛЕКТРОНОВ В ПОЛЕ НЕПОДВИЖНОГО ЯДРА	1024
Интегральные уравнения теории рассеяния нескольких частиц с кулоновским взаимодействием.	1025
Второе борновское приближение для амплитуды развала.	1027
Две частицы в кулоновском поле неподвижного центра.	1029
Заключительное замечание.	1031
ДВЕ БЫСТРЫЕ ЧАСТИЦЫ В КОНЕЧНОМ СОСТОЯНИИ	1032
($e, 3e$)-электронная импульсная спектроскопия.	1032
Захват с одновременной ионизацией мишени.	1037
Обсуждение результатов.	1042
ОДНА БЫСТРАЯ ЧАСТИЦА В КОНЕЧНОМ СОСТОЯНИИ	1044
Многokратная ионизация атомов благородных газов быстрым электроном.	1045
ЗС-функция и расчеты с ней.	1051
Обсуждение результатов.	1054

*E-mail: popov@srd.sinp.msu.ru

**E-mail: chuka@jinr.ru

ИОНИЗАЦИЯ МОЛЕКУЛ ЭЛЕКТРОННЫМ УДАРОМ: ПРИ-	
БЛИЖЕНИЯ	1055
Общие формулы.	1056
Мишень с одним активным электроном.	1057
Однократная ионизация положительного иона молекулы	
водорода быстрым электроном.	1060
Однократная ионизация молекулы водорода электронным	
ударом.	1063
Двукратная ионизация молекулы водорода электронным	
ударом.	1066
Обсуждение результатов.	1069
ЗАКЛЮЧЕНИЕ	1070
СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ	1071

ПРОЦЕССЫ МНОГОКРАТНОЙ ИОНИЗАЦИИ С УЧАСТИЕМ БЫСТРЫХ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ

*Ю. В. Попов**

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

*О. Чулуунбаатар***

Объединенный институт ядерных исследований, Дубна

В. Л. Шаблов

Институт атомной энергетики, Обнинск, Россия

К. А. Кузаков

Физический факультет Московского государственного университета
им. М. В. Ломоносова, Москва

Обзор посвящен отдельным аспектам теории многократной ионизации квантовой мишени в результате ее взаимодействия с быстрой заряженной частицей. В качестве мишени рассматриваются атомы и молекулы, а также их ионы, а в качестве ионизирующей частицы — электроны и протоны. Особое внимание уделено приближению эффективных зарядов при построении волновых функций континуума нескольких заряженных фрагментов в конечном канале реакции. Приведены теоретические расчеты дифференциальных и полных сечений различных процессов многократной ионизации, и, где это возможно, проведено сравнение результатов этих расчетов с экспериментальными данными.

The review is devoted to separate aspects of the theory of multiple ionization of a quantum target by a fast charged particle. Atoms and molecules, and their ions as well, are considered as targets, and electrons and protons are considered as ionizing particles. Special attention is paid to the effective charge approximation when constructing continuum wave functions for few charged fragments in the final channel of the reaction. Theoretical calculations of differential and total cross sections of various multiple ionization processes are presented and, when it is possible, a comparison of the results of these calculations with experimental data is carried out.

PACS: 34.80.Dg; 03.65.Nk; 34.10.+x

ВВЕДЕНИЕ

Теоретический анализ многократной ионизации атомной или молекулярной мишени ударом быстрой налетающей частицы (электрона, протона, иона,

*E-mail: popov@srd.sinp.msu.ru

**E-mail: chuka@jinr.ru

фотона, группы фотонов) — труднейшая задача нерелятивистской физики. Хотя быструю частицу в ряде случаев удастся описать плоской волной и свести задачу к борновским приближениям по взаимодействию с нейтральным атомом (молекулой), это не сильно уменьшает сложность проблемы. Появление в конце реакции нескольких, зачастую медленных, электронов требует привлечения теории рассеяния малого числа (few body) заряженных частиц. В случае трех нейтральных частиц такая теория сформулирована и математически обоснована [1, 2]. В случае трех заряженных частиц сформулированы математически корректно граничные условия дифференциальной задачи для вычисления волновой функции в конфигурационном пространстве [2, 3]. Отдельные подходы для формулировки задачи рассеяния трех заряженных частиц в импульсном пространстве для амплитуд рассеяния содержатся в далеко не полном перечне работ, представленных в недавнем обзоре [4]. В частности, там обсуждаются дополнительные сингулярности амплитуды рассеяния нескольких кулоновских частиц и способы их устранения при переходе энергии столкновения на так называемую энергетическую поверхность, т. е. возникает связь энергии и импульсов частиц.

Указанные расходимости возникают в высших порядках теории возмущений, когда в матричном элементе амплитуды рассеяния присутствует функция Грина свободного уравнения. Первый порядок (FBA) от этих проблем, как правило, свободен. Однако, что такое FBA? Гамильтониан задачи должен быть разбит на сумму как минимум двух слагаемых $H = H_0 + V$, где H_0 — свободный гамильтониан и V — взаимодействие. FBA записывается в виде матричного элемента

$$T_{fi} = \langle \Psi_f^- | V | \Psi_i^+ \rangle, \quad (\text{B.1})$$

где начальная $|\Psi_i^+\rangle$ и конечная $|\Psi_f^-\rangle$ волновые функции системы принадлежат к спектру гамильтониана H_0 . Такие процессы называются прямыми. В процессах с перестройкой полный гамильтониан H представляется в двух формах $H = H_{0i} + V_i = H_{0f} + V_f$, что ведет к формуле

$$T_{fi} = \langle \Psi_f^- | V_i | \Psi_i^+ \rangle = \langle \Psi_f^- | V_f | \Psi_i^+ \rangle. \quad (\text{B.2})$$

Выражения (B.1) и (B.2) — точные в пределах FBA, но функции $|\Psi_f^-\rangle$ и $|\Psi_i^+\rangle$ являются решениями многочастичных дифференциальных (интегральных) уравнений, которые зачастую не удастся решить даже численно ввиду невозможности сформулировать адекватные задаче граничные условия. И тут мы вступаем на зыбкую почву приближений.

Главная идея большинства приближений — идея сепарабилизации конечной многоэлектронной функции. Грубо говоря, в уравнении Шредингера (УШ) для волновой функции $|\Psi_f^-\rangle$ выделяется часть, собственная функция

которой есть произведение функций, а оставшаяся часть объявляется возмущением и опускается в рамках FBA. Зачастую в основе таких подходов лежат асимптотические соображения. Однако сделать это далеко не просто, если мы стремимся с помощью FBA описать максимально возможный круг явлений. Препятствуют этому потенциалы электрон-электронного взаимодействия, с которыми связывают многообразные эффекты электронных корреляций. Их довольно проблематично как-либо разумно «приблизить». В связи с этим в разд. 1 мы рассмотрим математические основы метода эффективных зарядов, сформулированные с учетом расходимостей высших порядков теории возмущений, о чем подробно говорилось в нашем предыдущем обзоре [4].

В представленном обзоре мы в основном рассмотрим реакции именно многократной ионизации, когда атомная мишень под действием быстрой частицы испускает не менее двух электронов (простейшие мишени — это атом гелия и молекула водорода). При этом с сожалением приходится оставлять в стороне практически необозримый теоретический и экспериментальный багаж реакций однократной ионизации, накопленный к настоящему времени и продолжающий расти. Вместе с тем нам не удастся совсем избежать обращения к $(e, 2e)$ -реакциям на сложных мишенях, поскольку конечные состояния $(e, 2e)$ - и $(e, 3e)$ -реакций на одной и той же мишени суть различные собственные функции ее гамильтониана, и сравнения неизбежны. Лишь в последнем разд. 4 мы рассмотрим $(e, 2e)$ -реакции на молекулах. Это не новый материал, но даже простейшая молекула водорода — это система четырех тел, и в последнее время появился ряд интересных приближенных подходов и численных методов, которые следует представить и обсудить.

Прямые процессы многократной ионизации различаются количеством быстрых электронов в конечном состоянии. При этом предполагается, что конечные быстрые частицы измеряются на совпадение как между собой, так и с медленными испущенными электронами. Если для определенности говорить об ионизации многоэлектронной мишени быстрыми электронами (с энергией в несколько кэВ), то различают так называемые диполярные $(e, 3e)$ -реакции, когда налетающий электрон передает атому небольшую часть энергии и импульса, улетая практически с начальной скоростью, и $(e, 3e)$ -квазиупругие реакции (или электронная импульсная спектроскопия, ЭИС), когда в конечном состоянии присутствуют два быстрых электрона с примерно равными энергиями и углами разлета. Дифференциальные сечения $(e, 3e)$ -процессов с полностью измеренными углами и энергиями всех трех конечных электронов чрезвычайно малы [5, 6], особенно в случае ЭИС [7]. При этом прибегают к измерению сечений меньшей кратности, скажем, $(e, 3-1e)$, когда не измеряется медленный электрон [8]. Хотя $(e, 3e)$ -эксперименты в квазиупругой кинематике крайне редки на сегодняшний день, они чрезвычайно информативны, с их помощью можно эффективно различать степень парных электронных корреляций в многочастичной волновой функции мишени [7, 8].

К реакциям многократной ионизации можно отнести и процесс захвата налетающим быстрым протоном (с энергией несколько МэВ) электрона из атомной мишени с ее одновременной ионизацией (transfer ionization, TI). Здесь в процессе удара мишень опять же теряет как минимум два электрона, один из которых захватывается протоном с образованием быстрого атома водорода. При этом возможны самые разнообразные конечные состояния фрагментов и их комбинации: основное (возбужденное) состояние атома водорода, основное (возбужденное) состояние иона-остатка, диссоциация иона молекулы (в случае молекулярной мишени) и т. п. Измерение на совпадение различных продуктов реакции может дать эксклюзивную информацию о механизмах рассматриваемой реакции. К настоящему времени накоплен довольно богатый экспериментальный материал.

Разд. 2 посвящен реакциям с образованием в конце двух быстрых частиц.

В так называемых дипольных экспериментах присутствует в конце одна быстрая частица, та самая, которая бомбардировала мишень. Такие эксперименты дают больший выход событий на совпадение и тем самым более популярны у экспериментаторов. Но от теоретиков при этом требуется построить (рассчитать) трехчастичную функцию конечного состояния двух «свободных» электронов в поле иона, или хотя бы адекватное ее приближение. Мы остановимся на этих вопросах подробнее в разд. 3.

Мы не ставим перед собой цель просто представить и прокомментировать в предлагаемом обзоре все существующие приближения в теории. Как известно, «нельзя объять необъятное». Иногда ученые просто желают добиться совпадения их теоретической модели с экспериментом, «подкручивая» и «подвинчивая» что-то в классической приближенной схеме. На свет появляется множество аббревиатур, обозначающих введение еще какого-то параметра в известные приближения и подчас ограниченных рамками статьи, где модель представлена. Разобраться в этом массиве просто невозможно. Кроме того, в последнее время теоретики все больше прибегают к практике численных расчетов матричных элементов, что зачастую затрудняет понимание физики происходящих процессов. Не всегда ясно, что заложено в программу, какова реальная точность расчетов, и что мы имеем на выходе.

Широко распространено мнение, что изучение многократных ионизационных процессов дает возможность значительно глубже понять роль электронных корреляций в мишени, выйти за рамки хартри-фоковских одночастичных моделей. И это так, но не всегда данная общая декларация подкрепляется ясной физикой. Поэтому здесь, во-первых, рассматриваются быстрые процессы, которые позволяют в большинстве случаев ограничиться первым борновским приближением с прозрачными механизмами реакции. Во-вторых, быстрые частицы создают возможность дальнейших физически обоснованных упрощений сложнейшей многочастичной кулоновской функции свободного движения фрагментов реакции. В-третьих, численные расчеты матричных

элементов ограничиваются многократным интегрированием, тоже непростым, но значительно лучше проработанным вычислительным методом, чем, скажем, интегрирование многомерных дифференциальных (интегральных) уравнений многочастичной теории рассеяния.

Завершая введение, мы хотели бы привести ссылки на ряд обзорных публикаций и книг, имеющих отношение к рассматриваемой теме и включающих большое число ссылок на оригинальные работы. Прежде всего это классический труд Петеркопа [10] по теории ионизации атомов электронным ударом, включающий ссылки на книги и основные оригинальные работы до 1970 г., в частности, на книги Друкарева, Мотта и Месси, Ву и Омурсы, Руджа и Ситона и др. с обзором еще более ранних приближений и методов, ставших классическими. Взгляд экспериментатора на проблему ионизации электронным ударом содержится в обзоре [12] с большим количеством ссылок на оригинальные работы до 1990 г. Из более поздних обзоров следует упомянуть [13].

Помимо указанных опубликован ряд обзорных работ по частной теме электронной импульсной спектроскопии. Наряду с упомянутым выше обзором Неудачина и др. [7], это книга Уайголда и Мак-Карти [14], обзор Коплана и др. [15]. Впрочем, в большинстве этих работ рассматривается все же случай $(e, 2e)$ -реакций, по которым накоплен значительный экспериментальный материал в 60–80-е годы прошлого века.

Необходимо отметить замечательный обзор Бригса и Шмидта [16] по $(\gamma, 2e)$ -реакциям, а также Садепура [17] на ту же тему, но со ссылками на работы до 1995 г. Наконец, с вопросами поведения «двухэлектронных» атомов в сильном электрическом поле, в том числе зависящем от времени, читатель может познакомиться в обзоре [18]. Последняя тема бурно развивается в последнее время и заслуживает отдельного обзора на страницах журнала «ЭЧАЯ», и здесь мы ее касаться не будем, поскольку теория таких реакций базируется на временизависимом уравнении Шредингера и требует других теоретических схем и приближений.

Литература по проблемам захвата более обширна, что связано с прикладным значением данной темы. В книге [19] и обзорах [20] и [21] дана подробная теория ион-атомных столкновений, тогда как в классическом обзоре Инокути [22] представлен значительный экспериментальный материал по неупругим столкновениям быстрых заряженных частиц с атомами и молекулами и его сравнение с теорией Бете.

Там, где не оговорено особо, при записи формул используются атомные единицы $e = m_e = \hbar = 1$. Кроме того, в большинстве иллюстрирующих рисунков, взятых из разных работ, плоские (азимутальные) углы векторов импульсов частиц отсчитываются от направления вектора скорости падающей частицы против часовой стрелки. Другой отсчет оговаривается в подписи к рисунку.

1. МЕТОД ЭФФЕКТИВНЫХ ЗАРЯДОВ В ЗАДАЧЕ ДВУХ ЭЛЕКТРОНОВ В ПОЛЕ НЕПОДВИЖНОГО ЯДРА

Наиболее известный метод факторизации функции континуума трех заряженных частиц — это метод эффективных зарядов, являющийся разновидностью метода искаженных волн. Его разработка принадлежит Петеркопу [9, 10], Руджу и Ситону [11], и в основе лежит динамика классического движения двух электронов в поле ядра при больших относительных расстояниях между всеми тремя компонентами системы. Действительно, согласно принципу соответствия в квантовой механике асимптотическое движение электронов от области столкновения к детекторам задается классическими соотношениями $\mathbf{r}_i = \mathbf{k}_i|t|$. В этом случае потенциал взаимодействия можно записать в виде

$$-\frac{Z}{r_1} - \frac{Z}{r_2} + \frac{1}{r_{12}} = \frac{1}{|t|} \left(-\frac{Z}{k_1} - \frac{Z}{k_2} + \frac{1}{2k_{12}} \right), \quad (1.1)$$

где $r_{12} = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|^{-1}$, $2k_{12} = |\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2|^{-1}$ и Z — заряд ядра. Правую часть соотношения (1.1) можно теперь переписать следующим образом:

$$\frac{1}{|t|} \left(-\frac{Z}{k_1} - \frac{Z}{k_2} + \frac{1}{2k_{12}} \right) = \frac{1}{|t|} \left(-\frac{Z_1}{k_1} - \frac{Z_2}{k_2} \right) = \left(-\frac{Z_1}{r_1} - \frac{Z_2}{r_2} \right), \quad (1.2)$$

введя эффективные заряды Z_1 и Z_2 . Отсюда получаем одно уравнение на эти два заряда

$$\frac{Z}{k_1} + \frac{Z}{k_2} - \frac{1}{2k_{12}} = \frac{Z_1}{k_1} + \frac{Z_2}{k_2} \quad (1.3)$$

и конечную несимметризованную волновую функцию в виде произведения двух кулоновских функций

$$\Psi^{-*}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \approx \varphi^{-*}(\mathbf{k}_1, \mathbf{r}_1; Z_1) \varphi^{-*}(\mathbf{k}_2, \mathbf{r}_2; Z_2). \quad (1.4)$$

В (1.4) кулоновская функция выбрана в виде

$$\varphi^{-*}(\mathbf{p}, \mathbf{r}; Z_{\text{eff}}) = e^{-\pi\xi/2} \Gamma(1+i\xi) e^{-i\mathbf{p}\mathbf{r}} {}_1F_1(-i\xi, 1; i\mathbf{p}\mathbf{r} + i\mathbf{p}\mathbf{r}), \quad (1.5)$$

$$\xi = -\frac{Z_{\text{eff}}}{p}.$$

Несмотря на элегантность формулы (1.4), произведение двух кулоновских функций не может быть использовано в качестве свободного члена некоего уравнения Липпмана–Швингера (ЛШ) с компактным ядром, поскольку возмущающий потенциал

$$V_{\text{pert}} = -\frac{Z - Z_1}{r_1} - \frac{Z - Z_2}{r_2} + \frac{1}{r_{12}}$$

не перестал быть дальнедействующим. К тому же этот потенциал еще и нелокален, поскольку зависит от энергии электронов. Однако решение проблемы все же можно найти. Мы рассмотрим метод эффективных зарядов в рамках последовательной теории, подробно представленной в обзоре [4] (см. п. 1.4 про метод искаженных волн). Здесь же лишь кратко напомним основные результаты, необходимые для изложения нового материала.

1.1. Интегральные уравнения теории рассеяния нескольких частиц с кулоновским взаимодействием. Для общности обозначений введем понятие канала реакции α . Набор относительных якобиевских импульсов $\mathbf{p}_{\beta\gamma}$, задающих движение N_α фрагментов, сталкивающихся в канале α , будем обозначать \mathbf{p}_α . При этом относительная координата частиц i и j записывается как \mathbf{r}_{ij} , а их относительный импульс как \mathbf{k}_{ij} . Волновой вектор $|\phi_\alpha\rangle$ есть произведение волновых векторов связанных состояний фрагментов, задающих канал α , с суммарной энергией связи $-\kappa_\alpha^2$. Таким образом, асимптотический волновой вектор канала α имеет вид $|\phi_\alpha, \mathbf{p}_\alpha\rangle$. V^α обозначает сумму парных потенциалов взаимодействия между частицами, входящих в состав различных фрагментов, которые сталкиваются в канале α . Определим также кулоновский параметр (кулоновское число, параметр Зоммерфельда) канала α :

$$\eta_\alpha = \sum_{\beta,\gamma} \eta_{\beta\gamma} = \sum_{\beta,\gamma} \frac{q_\beta q_\gamma \mu_{\beta\gamma}}{p_{\beta\gamma}},$$

равный сумме кулоновских параметров пар фрагментов β и γ , $\mu_{\beta\gamma}$ — приведенная масса этих фрагментов; q_β и q_γ — их полные заряды. Суммарный кулоновский параметр $\eta = \sum_\alpha \eta_\alpha$. Наконец, определим фазу Долларда канала α [23]

$$A_\alpha = \sum_{\beta,\gamma} \eta_{\beta\gamma} \ln \frac{2p_{\beta\gamma}^2}{\mu_{\beta\gamma}} = \sum_{\beta,\gamma} \eta_{\beta\gamma} \ln 4E_{\beta\gamma},$$

где $E_{\beta\gamma}$ — энергия относительного движения фрагментов β и γ . Канал полного развала (без связанных состояний) будем обозначать индексом «0», например, A_0 .

Рассмотрим для простоты реакцию развала двухчастичной нейтральной связанной пары налетающей заряженной частицей (не обязательно быстрой). Потенциал взаимодействия такой системы можно записать в виде

$$V = \sum_{i<j} \frac{q_i q_j}{r_{ij}} = \sum_{\gamma=1}^3 \frac{\lambda_\gamma}{r_\gamma}. \quad (1.6)$$

Определим теперь оператор

$$T(z) = V^\alpha + VG(z)V^\alpha, \quad (1.7)$$

где $G(z) = (z - H_0 - V)^{-1}$ и H_0 — свободный гамильтониан трех частиц. Оператор (1.7) задает амплитуду развала нейтральной пары α (атома, например) и удовлетворяет интегральному уравнению ЛШ

$$T(z) = V^\alpha + VG_0(z)T(z). \quad (1.8)$$

В этом уравнении оператор $G_0(z) = (z - H_0)^{-1}$ обозначает свободную функцию Грина.

Оператор $T(z)$ согласно [2, 24, 25] (см. также общее определение (1.27) в [4]) можно записать следующим образом:

$$T(z) = (z - H_0)^{i\eta} M(z) + R(z). \quad (1.9)$$

Матричные элементы $\langle \mathbf{k}_\gamma, \mathbf{p}_\gamma | M(z) | \mathbf{p}_\alpha^0, \phi_\alpha \rangle$ и $\langle \mathbf{k}_\gamma, \mathbf{p}_\gamma | R(z) | \mathbf{p}_\alpha^0, \phi_\alpha \rangle$ несингулярны при переходе $z \rightarrow E + i0 = k_\gamma^2 / (2\mu_\gamma) + p_\gamma^2 / (2m_\gamma) + i0$. Пара якобиевских импульсов $(\mathbf{k}_\gamma, \mathbf{p}_\gamma)$ соответствует конечному каналу развала, где можно определить три таких эквивалентных набора, \mathbf{p}_α^0 — импульс падающей частицы (электрона) по отношению к связанной паре в начальном канале α .

Если оператор $M(z)$ известен, искомая несингулярная амплитуда реакции на поверхности энергии может быть определена следующим образом [2, 24, 25]:

$$t(\mathbf{k}_\gamma, \mathbf{p}_\gamma, \mathbf{p}_\alpha^0) = \frac{\exp\left(-\frac{\pi}{2}\eta + iA_0\right)}{\Gamma(1 - i\eta)} \langle \mathbf{k}_\gamma, \mathbf{p}_\gamma | M(E + i0) | \mathbf{p}_\alpha^0, \phi_\alpha \rangle. \quad (1.10)$$

К сожалению, для оператора $M(z)$ не удается сформулировать какого-либо уравнения с компактным ядром и приходится выделять сингулярность из решения уравнения ЛШ в явном виде, что в ряде случаев ведет к регуляризациям (перенормировкам). Эта тема раскрывается в обзоре [4].

В то же время оператор $R(z)$ в (1.9) не имеет какого-либо физического смысла, и его матричный элемент исчезает при переходе на поверхность энергии [2, 25]. Это полезное наблюдение мы используем при формулировке метода эффективных зарядов.

Для конечного состояния с заданными импульсами \mathbf{k}_γ и \mathbf{p}_γ мы определяем нелокальный (зависящий от энергии) парный потенциал $U = \lambda_\gamma / r_\gamma$ с эффективным зарядом $\lambda_\gamma = \eta k_\gamma / \mu_\gamma$ и трансформируем уравнение (1.8) следующим образом:

$$T(z) = [I - UG_0(z)]^{-1} V^\alpha + [I - UG_0(z)]^{-1} (V - U)G_0(z)T(z).$$

Можно записать равенство

$$[I - UG_0(z)]^{-1} = I + t_U(z)G_0(z),$$

где оператор $t_U(z)$ соответствует амплитуде рассеяния на потенциале U . В итоге получаем

$$T(z) = [I + t_U(z)G_0(z)] V^\alpha + [I + t_U(z)G_0(z)] (V - U)G_0(z)T(z). \quad (1.11)$$

Смысл введения потенциала U заключается в компенсации трехчастичной особенности $(z - E)^{i\eta}$ в матричном элементе $\langle \mathbf{k}_\gamma, \mathbf{p}_\gamma | (V - U)G_0(z)T(z) | \mathbf{p}_\alpha^0, \phi_\alpha \rangle$ при переходе $z \rightarrow E + i0$ введением дополнительной двухчастичной кулоновской сингулярности (см. также формулу (1.47) в [4]). Поэтому двухчастичный потенциал должен быть с необходимостью энергезависимым.

1.2. Второе борновское приближение для амплитуды развала. Учитывая соотношения (1.10) и (1.11), можно записать следующее выражение для физической амплитуды рассеяния:

$$t(\mathbf{k}_\gamma, \mathbf{p}_\gamma, \mathbf{p}_\alpha^0) = \exp\left(-i\eta \ln \frac{2k_\gamma^2}{\mu_\gamma} + iA_0\right) \left[\langle \varphi_\gamma^-(\mathbf{k}_\gamma), \mathbf{p}_\gamma | V^\alpha | \mathbf{p}_\alpha^0, \phi_\alpha \rangle + \langle \varphi_\gamma^-(\mathbf{k}_\gamma), \mathbf{p}_\gamma | (V - U)G_0(E + i0)T(E + i0) | \mathbf{p}_\alpha^0, \phi_\alpha \rangle \right], \quad (1.12)$$

где $\varphi_\gamma^-(\mathbf{k}_\gamma)$ — двухчастичная кулоновская функция, соответствующая потенциалу U . После несложных преобразований (1.12) можно переписать в хорошо известной форме

$$t(\mathbf{k}_\gamma, \mathbf{p}_\gamma, \mathbf{p}_\alpha^0) = \exp\left(-i\eta \ln \frac{2k_\gamma^2}{\mu_\gamma} + iA_0\right) \times \langle \varphi_\gamma^-(\mathbf{k}_\gamma), \mathbf{p}_\gamma | (V - U) | \Psi_\alpha^+(\mathbf{p}_\alpha^0) \rangle, \quad (1.13)$$

которая была впервые получена Петеркопом [10]. FBA в методе эффективных зарядов задается выражением

$$t_1(\mathbf{k}_\gamma, \mathbf{p}_\gamma, \mathbf{p}_\alpha^0) = \exp\left(-i\eta \ln \frac{2k_\gamma^2}{\mu_\gamma} + iA_0\right) \times \langle \varphi_\gamma^-(\mathbf{k}_\gamma), \mathbf{p}_\gamma | (V - U) | \phi_\alpha, \mathbf{p}_\alpha^0 \rangle. \quad (1.14)$$

Перед тем как определить SBA, рассмотрим сумму

$$\sum_\gamma \exp\left(i\eta \ln \frac{2k_\gamma^2}{\mu_\gamma}\right) \frac{\eta_\gamma}{\eta} t(\mathbf{k}_\gamma, \mathbf{p}_\gamma, \mathbf{p}_\alpha^0) \quad (1.15)$$

с амплитудой $t(\mathbf{k}_\gamma, \mathbf{p}_\gamma, \mathbf{p}_\alpha^0)$ (1.13). Для вычисления суммы (1.15) пометим потенциал U индексом γ , который для простоты обозначений мы опускали ранее, и учтем следующую цепочку равенств:

$$\sum_{\gamma} \frac{\eta_{\gamma}}{\eta} (V - U_{\gamma}) = V - \sum_{\gamma} \frac{\eta_{\gamma} k_{\gamma}}{\mu_{\gamma} r_{\gamma}} = V - \sum_{\gamma} \frac{\lambda_{\gamma}}{r_{\gamma}} = 0.$$

Кроме того, запишем без доказательства выражение для свертки кулоновской функции с гладкой функцией $f(\mathbf{k})$

$$\begin{aligned} \langle \varphi^{-}(\mathbf{k}) | f \rangle &= \exp\left(-\frac{\pi}{2}\eta\right) \Gamma(1+i\eta) f(\mathbf{k}) + \\ &+ \int d\mathbf{k}' \langle \varphi^{-}(\mathbf{k}) | V_c(E - h_0 + i0)^{-1} | \mathbf{k}' \rangle (f(\mathbf{k}') - f(\mathbf{k})) = \\ &= \exp\left(-\frac{\pi}{2}\eta\right) \Gamma(1+i\eta) f(\mathbf{k}) + \\ &+ \int d\mathbf{k}' \langle \mathbf{k} | V_c(E - h_0 + i0)^{-1} | \mathbf{k}' \rangle (f(\mathbf{k}') - f(\mathbf{k})) + \\ &+ (\text{higher order terms}). \end{aligned} \quad (1.16)$$

Данные вспомогательные вычисления позволяют представить (1.13) в виде

$$\begin{aligned} t(\mathbf{k}_\gamma, \mathbf{p}_\gamma, \mathbf{p}_\alpha^0) &= N \sum_{\gamma} \frac{\eta_{\gamma}}{\eta} \times \\ &\times \left(\langle \varphi_{\gamma}^{-}(\mathbf{k}_\gamma), \mathbf{p}_\gamma | V^{\alpha} | \phi_{\alpha}, \mathbf{p}_\alpha^0 \rangle + Y(\mathbf{k}_\gamma, \mathbf{p}_\gamma; \mathbf{p}_\alpha^0; E + i0) \right). \end{aligned} \quad (1.17)$$

Фактор N в (1.17) равен

$$e^{iA_0} \left(\sum_{\gamma} \frac{\eta_{\gamma}}{\eta} \exp\left(i\eta \ln \frac{2k_{\gamma}^2}{\mu_{\gamma}}\right) \right)^{-1},$$

и функция Y может быть записана как

$$\begin{aligned} Y(\mathbf{k}_\gamma, \mathbf{p}_\gamma; \mathbf{p}_\alpha^0; E + i0) &= \sum_{\gamma} \int d\mathbf{k}'_{\gamma} \left(\frac{k_{\gamma}^2}{2\mu_{\gamma}} - \frac{k'_{\gamma}{}^2}{2\mu_{\gamma}} + i0 \right)^{-1} \times \\ &\times \langle \psi_{\gamma}^{-}(\mathbf{k}_\gamma) | U_{\gamma} | \mathbf{k}'_{\gamma} \rangle \left[\langle \mathbf{k}'_{\gamma}, \mathbf{p}_\gamma | (V - U_{\gamma}) G_0(E + i0) T(E + i0) | \mathbf{p}_\alpha^0, \phi_{\alpha} \rangle - \right. \\ &\left. - \langle \mathbf{k}_\gamma, \mathbf{p}_\gamma | (V - U_{\gamma}) G_0(E + i0) T(E + i0) | \mathbf{p}_\alpha^0, \phi_{\alpha} \rangle \right] \end{aligned} \quad (1.18)$$

и, очевидно, включает борновские члены по потенциалам выше второго. Ее можно опустить в рамках SBA, и оставшаяся часть в (1.17) будет соответствовать приближению второго порядка. Оказывается, в рамках второго борновского приближения можно фиксировать эффективные заряды в формуле (1.3), что и будет рассмотрено в следующем пункте.

1.3. Две частицы в кулоновском поле неподвижного центра. Мы для удобства несколько изменим обозначения переменных. Рассмотрим процесс (23) + 1 \rightarrow 1 + 2 + 3, где бесконечно тяжелое ядро (центр) обозначается индексом (3), $|\phi_2\rangle$ обозначает волновую функцию начального связанного состояния, \mathbf{k}_0 — импульс падающей частицы, \mathbf{k}_1 и \mathbf{k}_2 — импульсы конечных частиц. Эти частицы могут быть электронами.

Уравнение (1.11) в новых обозначениях выглядит как

$$T(z) = [I + t_{1,2}(z)G_0(z)](V - U_{1,2}) + \\ + [I + t_{1,2}(z)G_0(z)](V - U_{1,2})G_0(z)T(z). \quad (1.19)$$

Оператор $t_{1,2}(z)$ обозначает амплитуду рассеяния на потенциале $U_{1,2} = U_1 + U_2$, где $U_j = -Z_j q_j / r_j$ ($j = 1, 2$) и константы Z_j — эффективные заряды. При этом в общем случае (ср. (1.3))

$$-\frac{Z_1 q_1}{v_1} - \frac{Z_2 q_2}{v_2} = \tilde{\eta}_1 + \tilde{\eta}_2 = \eta = \eta_1 + \eta_2 + \eta_{12} = -\frac{Z q_1}{v_1} - \frac{Z q_2}{v_2} + \frac{q_1 q_2}{v_{12}}. \quad (1.20)$$

Здесь $\mathbf{v}_j = \mathbf{k}_j / m_j$ — скорость легкой частицы; q_j — ее заряд и $\mathbf{v}_{12} = \mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2$ — относительная скорость легких частиц.

Из (1.12) следует

$$t(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_0) = \exp\left(-i(A_0 - \tilde{A}_{1,2})\right) [\langle \varphi_1^-(\mathbf{k}_1), \varphi_2^-(\mathbf{k}_2) | (V - U_{1,2}) | \mathbf{k}_0, \phi_2 \rangle + \\ + \langle \varphi_1^-(\mathbf{k}_1), \varphi_2^-(\mathbf{k}_2) | (V - U_{1,2}) G_0(E + i0) T(E + i0) | \mathbf{k}_0, \phi_2 \rangle], \quad (1.21)$$

где $|\varphi_i^-(\mathbf{k}_i)\rangle$ — кулоновская волновая функция, описывающая рассеяние на потенциале U_i , и

$$A_0 = \eta_1 \ln 4E_1 + \eta_2 \ln 4E_2 + \eta_{12} \ln 4E_{12}, \\ \tilde{A}_{1,2} = \tilde{\eta}_1 \ln 4E_1 + \tilde{\eta}_2 \ln 4E_2.$$

Однако возможен другой выбор потенциала U и, соответственно, другая запись уравнения (1.12):

$$t(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_0) = \exp\left(-i(A_0 - \tilde{A}_{12})\right) [\langle \varphi_{12}^-(\mathbf{k}_{12}), \mathbf{K}_{12} | (V - U_{12}) | \mathbf{k}_0, \phi_2 \rangle + \\ + \langle \varphi_{12}^-(\mathbf{k}_{12}), \mathbf{K}_{12} | (V - U_{12}) G_0(E + i0) T(E + i0) | \mathbf{k}_0, \phi_2 \rangle], \quad (1.22)$$

где

$$U_{12} = \frac{\eta k_{12}}{\mu_{12}} \frac{1}{r_{12}} = \frac{\lambda_{12}}{r_{12}}, \quad \tilde{A}_{12} = \tilde{\eta}_{12} \ln 4E_{12},$$

и $\mathbf{k}_{12} = (m_2 \mathbf{k}_1 - m_1 \mathbf{k}_2)/(m_1 + m_2)$, $\mathbf{K}_{12} = \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2$, соответственно, относительный импульс в паре (1.12) и ее суммарный импульс.

Применим теперь схему (1.16) к (1.21) и (1.22). В результате получаем

$$\begin{aligned} \exp\left(i(A_0 - \tilde{A}_{1,2})\right) t(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_0) &= \langle \varphi_1^-(\mathbf{k}_1), \varphi_2^-(\mathbf{k}_2) | (V - U_{1,2}) | \mathbf{k}_0, \phi_2 \rangle + \\ &+ \exp\left(-\frac{\pi}{2}\eta\right) \Gamma(1 + i\tilde{\eta}_1) \Gamma(1 + i\tilde{\eta}_2) \times \\ &\times \langle \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 | (V - U_{1,2}) G_0(E + i0) T(E + i0) | \mathbf{k}_0, \phi_2 \rangle + \\ &+ (\text{higher order terms}) \end{aligned} \quad (1.23a)$$

и

$$\begin{aligned} \exp\left(i(A_0 - \tilde{A}_{12})\right) t(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_0) &= \\ &= \langle \varphi_{12}^-(\mathbf{k}_{12}), \mathbf{K}_{12} | (V - U_{12}) | \mathbf{k}_0, \phi_2 \rangle + \exp\left(-\frac{\pi}{2}\eta\right) \Gamma(1 + i\eta) \times \\ &\times \langle \mathbf{k}_{12}, \mathbf{K}_{12} | (V - U_{12}) G_0(E + i0) T(E + i0) | \mathbf{k}_0, \phi_2 \rangle + \\ &+ (\text{higher order terms}). \end{aligned} \quad (1.23b)$$

Построим линейную комбинацию выражений (1.23), а именно

$$\begin{aligned} \exp(iA_0) \left(\frac{x \exp(-i\tilde{A}_{1,2})}{\Gamma(1 + i\tilde{\eta}_1) \Gamma(1 + i\tilde{\eta}_2)} + \frac{y \exp(-i\tilde{A}_{12})}{\Gamma(1 + i\eta)} \right) t(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_0) &= \\ &= \frac{x \langle \varphi_1^-(\mathbf{k}_1), \varphi_2^-(\mathbf{k}_2) | (V - U_{1,2}) | \mathbf{k}_0, \phi_2 \rangle}{\Gamma(1 + i\tilde{\eta}_1) \Gamma(1 + i\tilde{\eta}_2)} + \\ &+ \frac{y}{\Gamma(1 + i\eta)} \langle \varphi_{12}^-(\mathbf{k}_{12}), \mathbf{K}_{12} | (V - U_{12}) | \mathbf{k}_0, \phi_2 \rangle + \\ &+ \exp\left(-\frac{\pi}{2}\eta\right) \langle \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 | ((x + y)V - xU_{1,2} - yU_{12}) \times \\ &\times G_0(E + i0) T(E + i0) | \mathbf{k}_0, \phi_2 \rangle, \end{aligned} \quad (1.24)$$

с пока произвольными константами x и y . Положим теперь

$$(x + y)V - xU_{1,2} - yU_{12} = 0, \quad (1.25)$$

что приведет к равенству нулю последнего слагаемого в (1.24).

Если заряд кулоновского центра Z , то потенциал V в общем случае записывается в виде

$$V = -\frac{Zq_1}{r_1} - \frac{Zq_2}{r_2} + \frac{q_1q_2}{r_{12}}.$$

Из (1.25) следует система алгебраических уравнений

$$\begin{cases} -(x+y)Z + Z_1x = 0, \\ -(x+y)Z + Z_2x = 0, \\ (x+y)q_1q_2 - \lambda_{12}y = 0. \end{cases} \quad (1.26)$$

Отсюда немедленно следует равенство эффективных зарядов $Z_1 = Z_2$. Положим $y = x\xi$ и с учетом (1.20) получим из (1.26) интересующие нас решения:

$$Z_1 = Z_2 = \frac{(Zq_1v_2v_{12} + Zq_2v_1v_{12} - q_1q_2v_1v_2)}{v_{12}(q_1v_2 + q_2v_1)}, \quad \lambda_{12} = \frac{Z_jq_1q_2}{Z_j - Z}, \quad \xi = \frac{Z_j - Z}{Z}.$$

Подставляя найденное в (1.24), получим окончательное выражение SBA для амплитуды в рамках метода эффективных зарядов

$$\begin{aligned} t(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_0) = & \\ = \exp(-iA_0) & \left(\Gamma(1+i\eta) \exp(-i\tilde{A}_{1,2}) + \xi \exp(-i\tilde{A}_{12}) \Gamma(1+i\tilde{\eta}_1) \Gamma(1+i\tilde{\eta}_2) \right)^{-1} \times \\ & \times \left[\Gamma(1+i\eta) \langle \varphi_1^-(\mathbf{k}_1), \varphi_2^-(\mathbf{k}_2) | \left(V + \frac{Z_1q_1}{r_1} + \frac{Z_2q_2}{r_2} \right) | \mathbf{k}_0, \phi_2 \rangle + \right. \\ & \left. + \Gamma(1+i\tilde{\eta}_1) \Gamma(1+i\tilde{\eta}_2) \langle \varphi_{12}^-(\mathbf{k}_{12}), \mathbf{K}_{12} | \left(V - \frac{\lambda_{12}}{r_{12}} \right) | \mathbf{k}_0, \phi_2 \rangle \right], \quad (1.27) \end{aligned}$$

где все вполне определено.

Выражение (1.27) можно теперь использовать для численных расчетов сечений. На рис. 1 в качестве примера представлен расчет сечений $(e, 2e)$ -реакций на атоме водорода по формуле (1.27) (жирная линия) в сравнении с традиционным FBA. На рис. 1, σ наблюдается интересная сходимость теории к эксперименту даже для энергий, когда применимость борновских приближений не слишком оправданна.

1.4. Заключительное замечание. В заключение разд. 1, где представлен материал, впервые опубликованный в [26], следует сказать, что теория многочастичного кулоновского рассеяния, дающая возможность построить физическую амплитуду ионизации, свободную от дополнительных сингулярностей, позволяет сформулировать метод эффективных зарядов, в котором эти заряды однозначно определены, если потребовать точности борновского ряда вплоть до второго порядка.

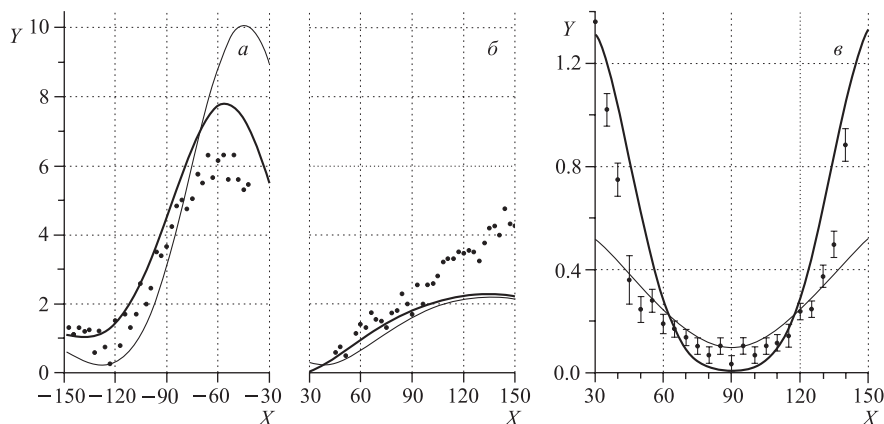


Рис. 1. TDCS (ось Y) для реакции $H(e, 2e)H^+$: $a, б$) асимметричная плоская геометрия, $E_0 = 150$ эВ, $E_2 = 5$ эВ, $\theta_1 = 4^\circ$, ось X — угол рассеяния медленного электрона θ_2 , отсчитанный как против часовой стрелки со знаком плюс, так и по часовой стрелке со знаком минус от направления налетающего электрона; $в$) симметричная плоская геометрия, $E_1 = E_2 = 2$ эВ, $\theta_1 = \theta_2 + \pi$ (ось X). Эксперимент [27, 28]. Рисунок заимствован из работы [26]

2. ДВЕ БЫСТРЫЕ ЧАСТИЦЫ В КОНЕЧНОМ СОСТОЯНИИ

2.1. $(e, 3e)$ -электронная импульсная спектроскопия. Матричные элементы амплитуды процесса многократной ионизации квантовой мишени быстрым электроном, когда в конце реакции образуются два быстрых электрона, измеряемых на совпадение, являются простейшими с точки зрения сепарабельного представления функции конечного состояния в (В.1). В дальнейшем мы рассмотрим атом гелия в качестве простейшей двухэлектронной мишени. В квазиупругой кинематике конечная волновая функция системы принимает вид произведения двух плоских волн быстрых электронов с импульсами $\mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e$ и кулоновской волны медленного электрона с импульсом \mathbf{p}_3 , описывающей его свободное движение в поле ядра с зарядом $Z = -2$ [29]:

$$|\Psi_f^-(\mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e, \mathbf{p}_3)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|\mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e, \varphi^-(\mathbf{p}_3)\rangle + (\mathbf{p}_s \leftrightarrow \mathbf{p}_e)]. \quad (2.1)$$

В свою очередь, начальная волновая функция представляется произведением плоской волны быстрого падающего электрона на волновую функцию основного состояния атома гелия

$$|\Psi_i^+(\mathbf{p}_0)\rangle = |\mathbf{p}_0, \Phi_0\rangle. \quad (2.2)$$

В качестве возмущающего потенциала в этом случае берется потенциал кулоновского взаимодействия компонент мишени с налетающим электроном

$$V = V_{01} + V_{02} + V_{0N}. \quad (2.3)$$

Подставляя выражения (2.1)–(2.3) в (B.1), получим

$$T_{fi} = \frac{4\pi}{Q^2} M, \quad M = \int d^3r_1 d^3r_2 \varphi^{-*}(\mathbf{p}_3, \mathbf{r}_2; 2) e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_1} \Phi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2), \quad (2.4)$$

где $\mathbf{Q} = \mathbf{p}_0 - \mathbf{p}_s$, и кулоновская функция соответствует (1.5) с $Z_{\text{eff}} = 2$. В подынтегральном выражении оставлено единственное экспоненциально осциллирующее слагаемое, содержащее небольшие импульсы \mathbf{p}_3 и $\mathbf{q} = \mathbf{p}_s + \mathbf{p}_e - \mathbf{p}_0$. Именно небольшую величину импульса q при больших p_0, p_s, p_e и обеспечивает геометрия ЭИС: плоские углы θ_s и θ_e импульсов \mathbf{p}_s и \mathbf{p}_e по отношению к \mathbf{p}_0 равны примерно $\mp 45^\circ$, и $E_s \sim E_e \sim E_0/2$ (подробнее см. [7]).

Пятикратное дифференциальное сечение с учетом всех симметрий и обменов принимает вид

$$\frac{d^5\sigma}{dE_s dE_3 d\Omega_s d\Omega_e d\Omega_3} = \frac{8p_s p_e p_3}{(2\pi)^6 p_0} C |M|^2, \quad (2.5)$$

где

$$C = \frac{1}{|\mathbf{p}_0 - \mathbf{p}_s|^4} + \frac{1}{|\mathbf{p}_0 - \mathbf{p}_e|^4} - \frac{1}{|\mathbf{p}_0 - \mathbf{p}_s|^2 |\mathbf{p}_0 - \mathbf{p}_e|^2}.$$

При этом предполагается, что медленный электрон «отличен» от электронов s и e , что вполне оправданно при $E_s \sim E_e \gg E_3$.

Из формулы (2.4) видно, что при таких упрощениях интеграл M выглядит как двойной фурье-образ волновой функции атома гелия. Варьируя в разумных пределах импульсы \mathbf{p}_3 и \mathbf{q} , можно получить достаточно ценную информацию об электронных корреляциях в мишени, изучая дифференциальное сечение (2.5). Как следует из результатов работы [29], это свойство сохраняется, даже если не измерять на совпадение медленный электрон, т. е. проинтегрировать (2.5) по сферическому углу Ω_3 . При этом его энергия фиксируется законом сохранения $E_0 + E^{\text{He}} = E_s + E_e + E_3$ ($E^{\text{He}} \approx -2,9037$ — энергия связи атома гелия). Такой процесс называется $(e, 3-1e)$.

На рис. 2 изображена схема $(e, 3-1e)$ -эксперимента на атоме гелия в квазиупругой кинематике [8]. Геометрия некомпланарная, при этом плоские углы θ_s и θ_e составляют $\mp 45^\circ$, начальная энергия $E_0 = 2080$ эВ и $E_s = E_e$. На рис. 3 представлены расчеты дифференциальных сечений (triple differential cross section — TDCS), соответствующих однократной ионизации, оставляющей ион He^+ в основном состоянии, для шести пробных волновых функций атома гелия. Это $1s^2$ -функции Хиллерааса (Hu) [30]

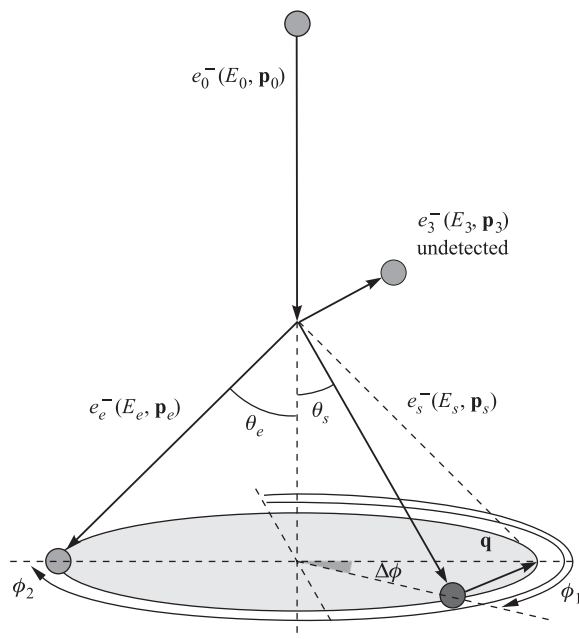


Рис. 2. Схема некомпланарного $(e, 3e)$ -эксперимента. Случай $\Delta\phi = 0$ соответствует плоской геометрии. Рисунок заимствован из работы [8]

($E_{\text{Hy}}^{\text{He}} = -2,8477$) и Руутан–Хартри–Фока (RHF) [31] ($E_{\text{RHF}}^{\text{He}} = -2,8617$), функция Хиллерааса–Экарта–Чандрасекара (HEC) с радиальными корреляциями [30, 32, 33] ($E_{\text{HEC}}^{\text{He}} = -2,8757$), 12-компонентная вариационная функция Чулуунбаатара–Пузынина–Виницкого (CPV) [34] ($E_{\text{CPV}}^{\text{He}} = -2,9030$), функция Митроя и др. в представлении взаимодействия конфигураций (CI) [35] ($E_{\text{CI}}^{\text{He}} = -2,9031$) и одна из функций Бонама и Коля (BK) [36] ($E_{\text{BK}}^{\text{He}} = -2,9035$). Явный вид всех функций представлен в работе [8]. Кроме того, были проведены расчеты в приближении искаженных волн (DWBA) с использованием функции CI и расчетной программы, предложенной в работах Уайголда и Мак-Карти [37] (см. также обзор [14] и ссылки там).

Эксперименты японской группы [8] не позволяют измерять абсолютные значения сечения для рассматриваемых процессов. Однако одинаковые условия экспериментов с различными состояниями конечного иона позволяют рассуждать о квазиабсолютной шкале. Идея квазинормировки основана на практическом совпадении FBA-расчетов между собой для различных пробных функций гелия как по форме, так и по абсолютной величине вплоть до $q \sim 2$ [7, 14, 15, 39]. Поэтому экспериментальное сечение нормировалось на

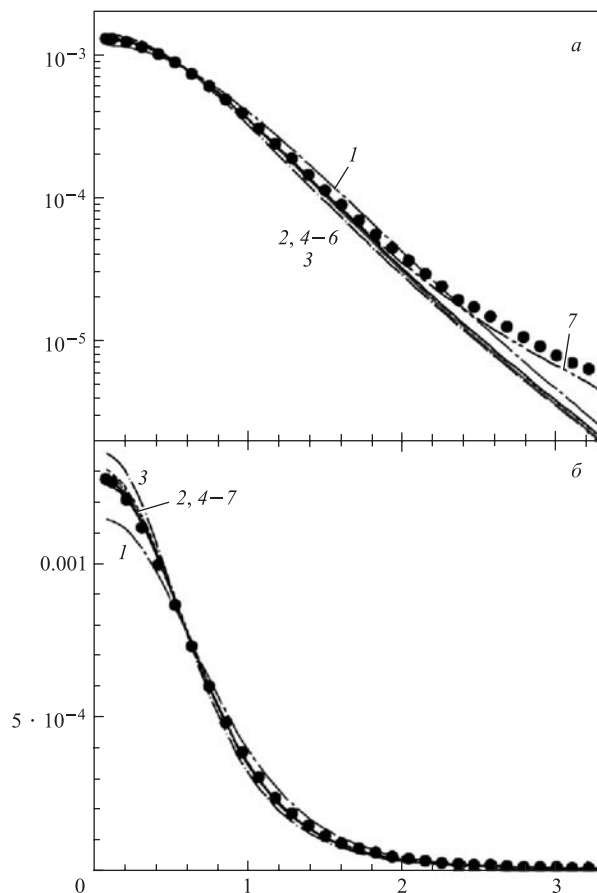


Рис. 3. TDCS для реакции $\text{He} + e \rightarrow \text{He}^+ + 2e$ в квазиупругой кинематике как функция импульса q . а) Логарифмическая шкала; б) линейная шкала. Кривая 1 — $\text{Nu} \times 1,17$; 2 — $\text{RHF} \times 1,02$; 3 — $\text{NEC} \times 0,94$; 4 — $\text{CPV} \times 1,01$; 5 — $\text{CI} \times 1,00$; 6 — $\text{BK} \times 1,00$; 7 — $\text{DWBA/CI} \times 0,79$. Все теоретические сечения после умножения на соответствующие коэффициенты практически совпадают между собой и с экспериментом в пределах $q \leq 2$ (подробности в тексте). Рисунок заимствован из работы [8]

FWA-расчеты с использованием волновой функции CI, а именно, вычислялась площадь под этой теоретической кривой вплоть до $q = 1,7$, и отношение аналогичных площадей для других пробных функций к данной «стандартной» площади определяло индивидуальный коэффициент пробной функции. На рис. 3, а представлены кривые $(e, 2e)$ -сечений как функции импульса q в логарифмической шкале, а на рис. 3, б — в линейной. Вычисленный нор-

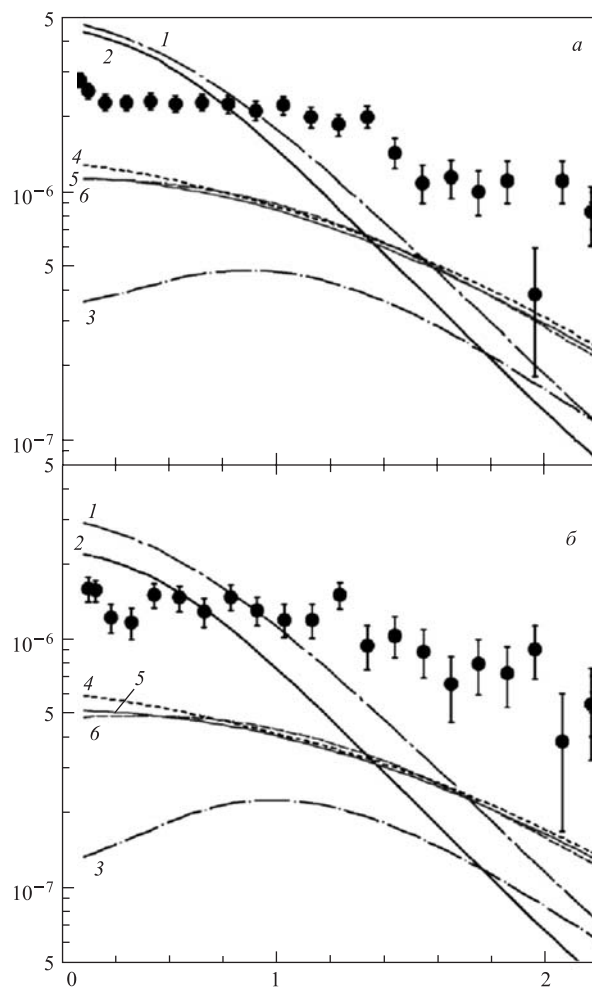


Рис. 4. 4DCS для реакции $\text{He} + e \rightarrow \text{He}^{++} + 3e$ в квазиупругой кинематике как функция импульса q : а) $E_3 = 10$ эВ; б) $E_3 = 20$ эВ. Электрон e_3 не детектируется. Обозначения те же, что на рис. 2. Рисунок заимствован из работы [8]

мировочный фактор использовался далее для $(e, 3-1e)$ -процессов. На рис. 4 помимо расчетов с функцией CI представлены расчеты сечений с использованием волновых функций Ну, HF, HEC, CPV и ВК, а также DWBA-расчеты, которые масштабированы с факторами 1,17, 1,02, 0,94, 1,01, 1,00 и 0,79 соответственно. На рис. 4, а энергия медленного электрона $E_3 = 10$ эВ, на рис. 4, б — 20 эВ.

На рис. 4 в отличие от рис. 3 наблюдается довольно пестрая картина импульсных распределений ($e, 3-1e$)-реакции. Кривые, полученные с использованием некоррелированных $1s^2$ -функций Ну и RHF, дают схожие между собой результаты, которые сильно отличаются от экспериментальных профилей при обеих энергиях $E_3 = 10$ и 20 эВ. Здесь также «выпадает» простая радиально-коррелированная функция НЕС: ее профиль не совпадает ни по форме, ни по квазиабсолютной величине с профилями от более развитых пробных функций. В свою очередь, «хорошие» пробные функции, с энергиями, близкими к E^{He} , дают (после умножения на соответствующие коэффициенты) совпадающие между собой и по форме с экспериментом профили, но по квазиабсолютной величине теория отличается от эксперимента почти в два раза. Это различие было покрыто расчетами во втором борновском приближении (SBA) [40]. SBA мы здесь подробно рассматривать не будем, скажем только, что главный вклад дают возбуждения промежуточного иона He^+ . Для нас же важно, что ($e, 3-1e$) квазиупругие процессы позволяют не только селективировать пробные волновые функции по их энергии связи, но и выделяют группу внешне различных функций с энергиями связи, близкими к эксперименту, дающих совпадающие между собой импульсные распределения.

2.2. Захват с одновременной ионизацией мишени. Реакции захвата быстрым протоном (с энергией несколько МэВ) электрона из мишени с одновременной ионизацией (transfer ionization, TI) относятся к процессам с перестройкой (В.2) и тоже могут быть отнесены к реакциям с двумя быстрыми частицами в конце (быстрый протон и захваченный им электрон). Возьмем снова гелиевую мишень и рассмотрим очень маленькие углы рассеяния образовавшегося водорода (доли мрад) в реакции $\text{He} + p \rightarrow \text{He}^{++} + \text{H} + e$. Это позволяет предположить, что реакция идет с относительно небольшой передачей импульса иону гелия и оставляет его ядро неподвижным в силу большой массы ядра, т. е. можно положить в лабораторной системе $\mathbf{r}_\text{N} \approx 0$. В этом случае конечное состояние системы записывается приближенно в виде

$$\langle \mathbf{r}_\text{p}, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 | \Psi_f^-(\mathbf{p}_\text{H}, \mathbf{k}) \rangle \approx \frac{1}{\sqrt{2}} [e^{i\mathbf{p}_\text{H}\mathbf{r}_\text{p}} \phi_\text{H}(\mathbf{r}_\text{p} - \mathbf{r}_1) \varphi^-(\mathbf{k}, \mathbf{r}_2; 2) + (1 \leftrightarrow 2)]. \quad (2.6)$$

В формуле (2.6) $\mathbf{r}_\text{p}, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$ — радиусы-векторы протона, первого и второго электронов соответственно; $\phi_\text{H}(\mathbf{r})$ — волновая функция образовавшегося водорода (как правило, основного состояния); $\varphi^-(\mathbf{k}, \mathbf{r}_2; 2)$ — кулоновская волна высвобождающегося электрона. Начальное состояние системы записывается в виде, аналогичном (2.2):

$$\langle \mathbf{r}_\text{p}, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 | \Psi_i^+(\mathbf{p}_\text{p}) \rangle = e^{i\mathbf{p}_\text{p}\mathbf{r}_\text{p}} \Phi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2). \quad (2.7)$$

Определим переданный импульс $\mathbf{q} = \mathbf{p}_\text{H} - \mathbf{p}_\text{p}$ и в качестве возмущающего потенциала выберем потенциал кулоновского взаимодействия компонент ми-

шени с налетающим протоном

$$V_i = V_{p1} + V_{p2} + V_{pN}. \quad (2.8)$$

Подставляя выражения (2.6)–(2.8) в (B.2), получим

$$\begin{aligned} \text{FBA} = -4\pi\sqrt{2} \int \frac{d\mathbf{x}}{(2\pi)^3} \frac{\tilde{\phi}_H(x)}{|\mathbf{v}_p - \mathbf{q} - \mathbf{x}|^2} [F(\mathbf{q}; 0; \mathbf{k}) + \\ + F(\mathbf{v}_p - \mathbf{x}; -\mathbf{v}_p + \mathbf{q} + \mathbf{x}; \mathbf{k}) - \\ - 2F(\mathbf{v}_p - \mathbf{x}; 0; \mathbf{k})] = A1 + A2 + A3, \quad (2.9) \end{aligned}$$

где для удобства введено обозначение

$$F(\mathbf{y}; \boldsymbol{\eta}; \mathbf{k}) = \int e^{-i\mathbf{y}\mathbf{r}_1 - i\boldsymbol{\eta}\mathbf{r}_2} \varphi^{-*}(\mathbf{k}, \mathbf{r}_2; 2) \Phi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2, \quad (2.10)$$

$\tilde{\phi}_H(x)$ — функция водорода в импульсном представлении и $\mathbf{v}_p = \mathbf{p}_p/m$ — скорость протона. Интеграл $A1$ легко вычисляется аналитически:

$$A1 = -\frac{4\sqrt{2\pi}}{1 + (\mathbf{v}_p - \mathbf{q})^2} F(\mathbf{q}; 0; \mathbf{k}), \quad (2.11)$$

остальные вычисляются численно.

Законы сохранения импульса

$$\mathbf{p}_p = \mathbf{p}_H + \mathbf{k} + \mathbf{K}, \quad (2.12a)$$

и энергии

$$E = \frac{p_p^2}{2m} + E^{\text{He}} = \frac{p_H^2}{2(m+1)} + \frac{k^2}{2} + \frac{K^2}{2M} + E^{\text{H}}, \quad (2.12b)$$

где \mathbf{K} — импульс иона, а $M \approx 4m$ — его масса, позволяют рассчитать величину переданного импульса q , если выбрать \mathbf{v}_p в качестве оси z :

$$q_z = \frac{v_p}{2} - \frac{k^2 - 2(E^{\text{He}} - E^{\text{H}})}{2v_p}, \quad q_{\perp} = mv_p \sin \theta_p \approx mv_p \theta_p. \quad (2.13)$$

Из соотношений (2.12) и (2.13) видно, что скорость протона при его энергии в несколько МэВ не превышает 10 атомных единиц, соответственно q_z того же порядка. Если энергия электрона в пределах даже нескольких сотен кэВ, то величина импульса иона K тоже порядка нескольких атомных единиц, тогда как масса протона $m = 1836,15$. Это позволяет с большой точностью положить энергию движения и скорость иона равной нулю. Что же касается q_{\perp} ,

то произведение $m\theta_p$ при углах рассеяния до 0,5 мрад не превышает единицы. Эти соображения определяют порядки характерных величин задачи.

Рассмотрим теперь физический смысл FBA-амплитуд. Амплитуда $A1$ представляет собой так называемое плосковолновое приближение Оппенгеймера-Бринкмана-Крамерса (ОВК). Его можно в рамках FBA интерпретировать как столкновение протона с электроном с последующим захватом того же электрона (быстрый конечный электрон, хотя и связанный с быстрой падающей частицей). Второй электрон испускается вследствие мгновенной перестройки потенциалов в атоме-мишени. Это типичный механизм стряхивания (shake off, SO), описанный, например, в работе [41]. Сравнение выражений (2.11) и (2.4) показывает полную идентичность их интегральных сомножителей, и, казалось бы, Т1 и прямые квазиупругие реакции с успехом могли бы дополнять друг друга при изучении электронных корреляций в мишени, тем более, что диапазон изменения импульса q в процессах захвата шире. Это соображение было высказано в работе [42]. Однако для такого вывода следует оценить вклады слагаемых $A2$ и $A3$.

Амплитуда $A3$ описывает касательное (большой прицельный параметр) столкновение тяжелых частиц, после чего происходит захват электрона протоном. По сути это тоже SO-механизм ионизации. Амплитуды $A1$ и $A3$ широко использовались в ранних расчетах быстрых процессов перезарядки (charge transfer, CT) (см., например, базу данных, собранную в НИИЯФ МГУ [43]).

Наконец, амплитуда $A2$ описывает процесс, когда протон сталкивается с одним активным электроном мишени и выбивает его, но захватывает другой активный электрон. По сути при рассеянии такой процесс следовало бы отнести к SBA, но здесь он часть FBA. Механизм, когда налетающая частица производит два действия с компонентами системы, называется TS2 (two-step-2) и описан в работе [44].

В эксперименте в случае простой перезарядки (без ионизации, с переходом иона-остатка He^+ в основное состояние), как правило, измеряется однократное дифференциальное сечение (SDCS)

$$\frac{d\sigma}{d\theta_p} = \frac{m^2\theta_p}{2\pi} |A1 + A2 + A3|^2, \quad (2.14)$$

где для расчета соответствующих амплитуд надо в (2.10) произвести замену $\varphi^{-*}(\mathbf{k}, \mathbf{r}_2; 2) \rightarrow \phi_{\text{He}^+}(\mathbf{r}_2)$ и в (2.13) $k^2 \rightarrow 2E^{\text{He}^+}$. Конечно, в реальном эксперименте в силу его возможностей по точности измерений следует учитывать и возбуждения иона, и возбуждения водорода, и производить соответствующие суммирования в формуле (2.14), так что это выражение теоретически минимальное при сравнении с экспериментом. Кроме того, сечение (2.14) должно быть подвергнуто так называемой операции конволюции, поскольку в реальном эксперименте угол измеряется как среднее в пределах некоего окна, т. е.

следует произвести необходимые усреднения и в сечении. Они, как правило, значительно сглаживают его возможные скачки. Мы на этих вопросах здесь останавливаться более подробно не будем.

В TI-процессах можно измерять двукратное дифференциальное сечение (DDCS)

$$\frac{d^2\sigma}{d\theta_p d\mathbf{k}} = \frac{m^2\theta_p}{(2\pi)^4} |A1 + A2 + A3|^2 \quad (2.15)$$

с амплитудами (2.9) и различные интегральные вариации, например, однократное дифференциальное сечение (SDCS)

$$\frac{d\sigma}{d\theta_p} = \frac{m^2\theta_p}{(2\pi)^4} \int |A1 + A2 + A3|^2 d\mathbf{k}, \quad (2.16)$$

когда вылетевший электрон не измеряется. В силу быстрого уменьшения амплитуд с ростом k реальное интегрирование в (2.16) ограничивается несколькими десятками атомных единиц. Большой объем экспериментального материала на совпадение по захвату на гелиевой мишени накоплен группой Шмидта–Бекинга [45–48].

На рис. 5 представлено SDCS как функция угла рассеяния θ_p для трех пробных функций гелия: $1s^2$ -функций Ну [30] и RHF [31], и коррелированной CI-функции [35]. Видно, что вклады слагаемых $A2$ и $A3$ значительно улучшают совпадение с экспериментом при углах $\theta_p \leq 0,2$ мрад по сравнению с ОБК ($A1$), причем вклад амплитуды $A2$ сравнительно мал. Расчеты приведены без применения к ним программы конволюции, которая сглаживает провал сечения в районе $\theta_p \sim 0,25$ мрад и дает лучшее согласие теории с экспериментом в этой области. Кроме того, расчеты всех трех FBA-слагаемых практически не зависят от вида волновой функции гелия, как это наблюдалось и в случае ($e, 2e$) ЭИС экспериментов (см. рис. 3). Главный вклад тут дает только $1s^2$ -составляющая волновой функции.

Объяснить этот эффект можно, если обратиться к координатному представлению интегралов $A2$ и $A3$ в случае простой перезарядки:

$$A3 = 2\sqrt{2} \int d\mathbf{r}_2 \phi_{\text{He}^+}(\mathbf{r}_2) J(\mathbf{r}_2; \mathbf{q}, \mathbf{v}_p - \mathbf{q}), \quad (2.17)$$

где

$$J(\mathbf{r}_2; \mathbf{q}, \mathbf{v}_p - \mathbf{q}) = \int \frac{d\mathbf{r}_0 d\mathbf{r}_1}{|\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}_1|} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_1} e^{-i(\mathbf{v}_p - \mathbf{q})\mathbf{r}_0} \phi_{\text{H}}(\mathbf{r}_0) \Phi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2), \quad (2.18)$$

и

$$A2 = -\sqrt{2} \int \frac{d\mathbf{r}_0 d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2}{|\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2|} \times \\ \times e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_1} e^{-i(\mathbf{v}_p - \mathbf{q})\mathbf{r}_0} \phi_{\text{He}^+}(\mathbf{r}_2) \phi_{\text{H}}(\mathbf{r}_0) \Phi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2). \quad (2.19)$$

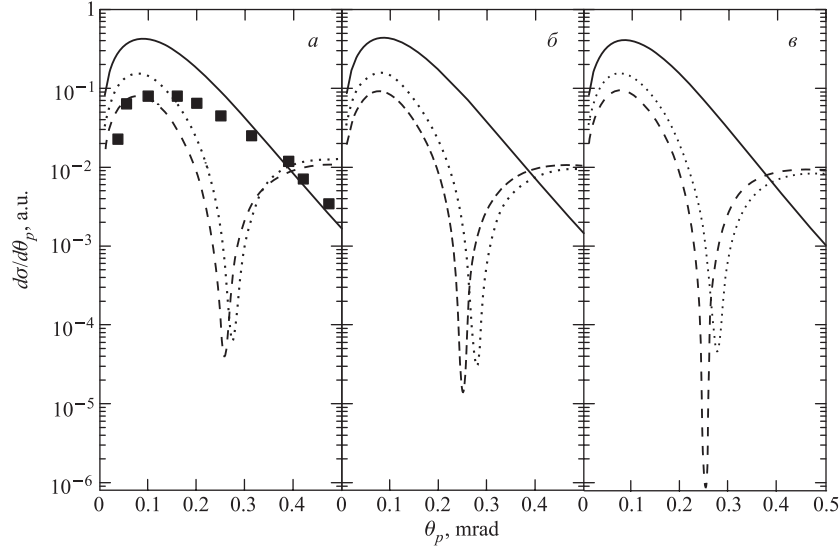


Рис. 5. SDCS для реакции $\text{He} + p \rightarrow \text{He}^+ + \text{H}$ как функция угла рассеяния θ_p : а) Ну; б) RHF; в) CI [35]. Сплошная кривая — A1; штриховая — A1 + A3; пунктирная — A1 + A2 + A3. Рисунок заимствован из работы [49]

Типичная CI-функция гелия (другое название — функция слэтеровского типа) имеет вид

$$\Phi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \sum_{l=0} \Psi_l(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2), \quad (2.20)$$

где

$$\begin{aligned} \Psi_l(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = & 4\pi \sum_{n \geq (l+1)} C_{nl} \psi_{nl}(r_1) \psi_{nl}(r_2) \times \\ & \times \sum_{m=-l}^l \langle l, m; l, -m | 0, 0 \rangle Y_{l,m}(\mathbf{r}_1) Y_{l,-m}(\mathbf{r}_2), \\ \psi_{nl}(r) = & r^l \sum_i d_i^{nl} \sqrt{\frac{(\epsilon_i^{nl})^3}{\pi}} e^{-\epsilon_i^{nl} r}. \end{aligned} \quad (2.21)$$

В частности, простейшая $1s^2$ Ну волновая функция записывается в виде

$$\Phi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{Z^3}{\pi} e^{-Z(r_1+r_2)}, \quad Z = 27/16 = 1,6875.$$

Из общих принципов интегрирования с быстроосциллирующими функциями при прочих гладких функциях, а величины $q, |\mathbf{v}_p - \mathbf{q}| \gtrsim v_p/2$ в (2.13) и (2.14) большие, следует, что основной вклад в эти интегралы вносят парциальные слагаемые с $l = 0$ в (2.21). Этот вывод подтверждается и численным интегрированием с оставлением только $1s^2$ -слагаемого $\Psi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ в СИ-функции Митроя и др. [35].

Ситуация кардинально меняется при рассмотрении процессов перезарядки с ионизацией. Оказывается, что слагаемое A_2 в (2.9) дает лидирующий вклад в ФВА-сумму независимо от вида пробной функции. Интересно отметить, что если совсем «выключить» электронные корреляции в гелиевой волновой функции, то это единственное слагаемое, которое останется ненулевым. Остальные исчезнут в силу ортогональности собственных функций иона гелия, принадлежащих к разным ветвям спектра. Именно поэтому $1s^2$ -слагаемые в (2.21) здесь дают достаточно малый вклад в полную ФВА-амплитуду.

На рис. 6 представлено SDCS, полученное численным интегрированием выражения (2.15). Теоретические кривые приведены без применения операции конволюции. «Хвосты» кривых при $\theta_p \gtrsim 0,2$ мрад как раз в основном определяются амплитудой A_2 , поскольку другие спадают быстрее. Интересно отметить снова совпадение сечений для «хороших» коррелированных пробных функций, несмотря на совершенно другой доминирующий механизм реакции, чем в случае $(e, 3e)$ квазиупругих реакций, и интегральный характер сечения (2.16). При этом «плохая» функция Ну дает заметно отличающийся результат.

На рис. 7 представлено дифференциальное сечение

$$\frac{d^2\sigma}{dE_e d\Omega_e} = \frac{m^2 k}{(2\pi)^5} \int |A_1 + A_2 + A_3|^2 d\Omega_p, \quad (2.22)$$

отражающее распределение ионизованного электрона в зависимости от его угла эмиссии θ_e (см. также аналогичный рис. 1 в работе [52]). Расчет опять проведен для коррелированной и $1s^2$ пробной функции. Конечно, мы полностью согласны с дискуссией о роли SBA-членов в работе Годунова и др. [52] (область в районе 100°). Однако хотим обратить внимание читателя на то, что сечения, рассчитанные с пробными волновыми функциями с разной степенью электронных корреляций, могут с успехом описывать различные части экспериментального распределения. Это обстоятельство может служить источником поспешных выводов.

2.3. Обсуждение результатов. В разд. 2 рассмотрены два достаточно различных ионизационных процесса с участием быстрой налетающей частицы и атома гелия. Строго говоря, это проблема четырех частиц, но присутствие двух быстрых же частиц в конце реакции (два электрона в квазиупругих реакциях, связанная (pe) -пара в реакциях захвата) позволяет существенно

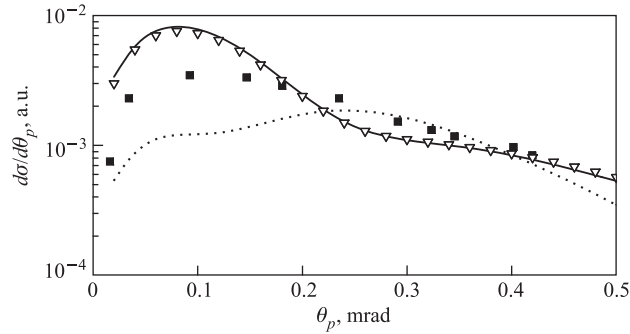


Рис. 6. SDCS для реакции $\text{He} + p \rightarrow \text{He}^{++} + \text{H} + e$ как функция угла рассеяния θ_p . Сплошная кривая — СИ-функция Митроя и др. [35]; треугольники — СИ-функция Несбета и Ватсона [50]; пунктирная — функция Хиллерааса Ну; квадраты — эксперимент [45]. Рисунок заимствован из работы [51]

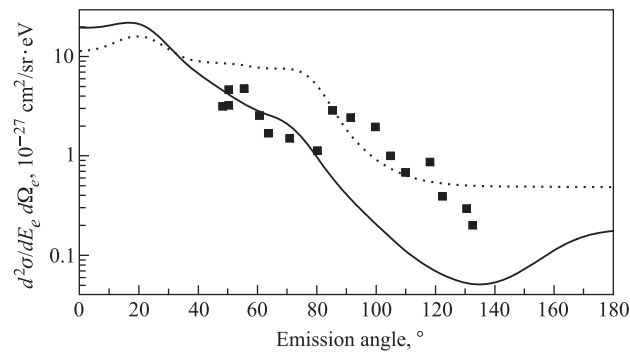


Рис. 7. DDCS для реакции $\text{He} + p \rightarrow \text{He}^{++} + \text{H} + e$ как функция угла эмиссии электрона θ_e . $E_e = 600$ эВ, $E_p = 1,0$ МэВ. Сплошная кривая — СИ-функция Митроя и др. [35]; пунктирная — функция Хиллерааса Ну; квадраты — эксперимент [53]. Рисунок заимствован из работы [51]

упростить описание конечных состояний таких процессов и рассматривать их в рамках ФВА. Такие реакции весьма информативны об электронных корреляциях в мишени, даже в случае реакций перезарядки с одновременной ионизацией.

Последнее обстоятельство достаточно удивительно, поскольку SDCS есть результат многократного интегрирования амплитуд и их сумм и, казалось бы, информация о тонких корреляционных процессах должна при этом нивелироваться. Кроме того, доминирующий вклад в ФВА-амплитуду здесь вносит не ОВК-член, полностью аналогичный амплитуде $(e, 3e)$ квазиупругого вы-

бывания, а наименее «информативный» член A_2 , дающий вклад даже при полном отсутствии ee -корреляций в квантовой мишени. Следует отметить, что о богатом информационном содержании ТI-экспериментов неоднократно говорилось в работах членов команды Шмидта–Бекинга [45–48].

Вообще следует сказать, что амплитуды A_2 и A_3 в случае как СТ-, так и ТI-реакций практически не допускают каких-либо приближенных выражений, связанных с большой скоростью налетающего протона, кроме упомянутых выше. Так называемое приближение MPI (multiple peaking approximation, см., например, [54]) не работает уже при углах $\theta_p \gtrsim 1,5$ мрад в случае перезарядки и совершенно не работает в случае ТI-реакций. Некоторые интегралы можно аналитически посчитать по Льюису [55]. Подробности можно найти в работе [51], и здесь на этом интересном вопросе мы останавливаться не будем.

К сожалению, дифференциальные сечения с двумя быстрыми фрагментами в конечном состоянии чрезвычайно малы по атомным меркам и достаточно быстро убывают с ростом энергии налетающей частицы. Особенно это относится к реакциям перезарядки. По этой причине экспериментаторы не слишком склонны к постановке таких экспериментов и предпочитают реакции с одной быстрой частицей в конце, к рассмотрению которых мы и переходим.

3. ОДНА БЫСТРАЯ ЧАСТИЦА В КОНЕЧНОМ СОСТОЯНИИ

Одна быстрая частица в конечном состоянии — это, как правило, налетающая на (нейтральную) мишень частица, отдавшая ей часть (небольшую) энергии и импульса. В рамках FBA факторизация конечной функции системы здесь тривиальна: для достаточно быстрой частицы ее волновая функция суть плоская волна, умноженная на волновую функцию конечного состояния мишени. Дальнейшее упрощение этой волновой функции представляется проблематичным, особенно при небольших (околопороговых) энергиях испущенных электронов, даже если он один.

Большинство теоретических и экспериментальных работ относятся к дипольным реакциям на гелии. Конечная волновая функция в этом случае описывает трехчастичный континуум двух медленных электронов в поле (неподвижного) ядра. Как говорилось во введении, даже эта простейшая задача не имеет решения, которое можно было бы использовать в практике численных расчетов. Об имеющихся здесь подходах мы подробнее поговорим ниже в данном разделе.

Среди приближений следует выделить так называемую 3С-функцию, представляющую произведение трех функций типа (1.5) [56] и различные вариации на эту тему. Пионерские расчеты с этой функцией в случае гелиевой мишени были проведены Даль Каппелло и Жулякяном [57] и показали высо-

кую чувствительность пятикратного дифференциального сечения к корреляциям конечных электронов. Сами же $(e, 3e)$ -эксперименты, где на совпадение измерялись все три конечных электрона, включая быстрый, были выполнены группой Ламам–Беннани [58], причем, по утверждению авторов, измерения представлены в абсолютной шкале, хотя на этот счет до сих пор не утихают споры.

Электронные корреляции в конечном состоянии играют, по-видимому, определяющую роль в дипольных реакциях. Яркой иллюстрацией тому является процесс многократной ионизации благородных газов быстрым электроном, который мы рассмотрим в следующем пункте.

3.1. Многократная ионизация атомов благородных газов быстрым электроном. Проблема неупругого взаимодействия быстрой заряженной частицы с атомом имеет долгую историю, представляя особо важное значение для физики прохождения частиц и излучений через вещество. Основополагающие работы в данной области принадлежат Бору [64] и Бете [65]. В этом пункте мы остановимся на n -кратной ионизации атома A электронным ударом, когда в конечном состоянии присутствуют один быстрый (рассеянный) и n достаточно медленных (испущенных) электронов. Конечную волновую функцию естественно представить в виде

$$|\Psi_f^-(\mathbf{p}_s, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \dots, \mathbf{k}_n; A^{n+})\rangle = |\mathbf{p}_s, \Phi_{A^{n+}}^-(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \dots, \mathbf{k}_n)\rangle. \quad (3.1)$$

Здесь \mathbf{p}_s — импульс быстрого рассеянного электрона; $\Phi_{A^{n+}}^-(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \dots, \mathbf{k}_n)$ — волновая функция конечного состояния мишени, описывающая движение n свободных медленных электронов в поле иона A^{n+} . В свою очередь, начальная волновая функция представляется произведением плоской волны быстрого падающего электрона на волновую функцию основного состояния атома

$$|\Psi_i^+(\mathbf{p}_i)\rangle = |\mathbf{p}_i, \Phi_A\rangle. \quad (3.2)$$

В качестве возмущающего потенциала в данном случае берется потенциал кулоновского взаимодействия компонент мишени с налетающим электроном

$$V = \sum_{j=1}^Z V_{0j} + V_{0N}, \quad (3.3)$$

где Z — заряд ядра атома. Подставляя выражения (3.2) и (3.3) в (В.1), получим

$$T_{fi} = \frac{4\pi}{Q^2} M_n(\mathbf{Q}), \quad (3.4)$$

$$M_n(\mathbf{Q}) = \langle \Phi_{A^{n+}}^-(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \dots, \mathbf{k}_n) | \sum_{j=1}^Z e^{i\mathbf{Q}\mathbf{r}_j} - Z | \Phi_A \rangle,$$

где $\mathbf{Q} = \mathbf{p}_i - \mathbf{p}_s$ суть переданный атому импульс. Дифференциальное сечение записывается как

$$d\sigma_n = \frac{4p_s}{p_i Q^4} |M_n(\mathbf{Q})|^2 \frac{d\mathbf{k}_1}{(2\pi)^3} \frac{d\mathbf{k}_2}{(2\pi)^3} \cdots \frac{d\mathbf{k}_n}{(2\pi)^3} d\Omega_s, \quad (3.5)$$

где $p_s = \sqrt{p_i^2 - 2I_n - \sum_{j=1}^n k_j^2}$ и I_n — потенциал n -кратной ионизации атома.

В общем случае измерение полностью дифференциального сечения (3.5) представляет собой трудноразрешимую экспериментальную задачу. Как правило, измеряется полное сечение σ_n в зависимости от энергии налетающего электрона. Если атом не поляризован, то сечение $d\sigma_n$ не зависит от азимутального угла φ_s , поэтому $d\Omega_s = 2\pi \sin \theta_s d\theta_s = \pi dQ^2 / (p_i p_s)$. Далее усреднение по начальным атомным состояниям (в дальнейшем не рассматривается) и интегрирование по конечным состояниям медленных электронов дает для полного сечения

$$\sigma_n = \frac{8\pi}{p_i^2} \int_{Q_{\min}}^{Q_{\max}} \frac{dQ}{Q^3} \mathcal{M}_n^2(Q), \quad (3.6)$$

где

$$\mathcal{M}_n^2(Q) = \int \frac{d\mathbf{k}_1}{(2\pi)^3} \int \frac{d\mathbf{k}_2}{(2\pi)^3} \cdots \int \frac{d\mathbf{k}_n}{(2\pi)^3} |M_n(\mathbf{Q})|^2 \quad (3.7)$$

представляет собой обобщенную силу осцилляторов для n -кратной ионизации [22]. Для пределов интегрирования в (3.6) имеем приближенно

$$Q_{\min} \simeq \frac{I_n}{p_i}, \quad Q_{\max} \simeq 2p_i - \frac{I_n}{p_i}.$$

В рамках теории Бете учитывается вклад только малых значений Q в интеграл (3.6), а (3.7) вычисляется в дипольном приближении. Опуская детали, которые можно найти в обзорной работе [22], получим известную асимптотическую формулу Бете для полного сечения:

$$\sigma_n = \frac{2\pi}{E_0} \left[\mathcal{M}_n^2 \ln \left(\frac{2\tilde{Q}_{\max}^2 E_0}{I_n^2} \right) + O \left(\frac{1}{E_0} \right) \right], \quad (3.8)$$

где

$$\begin{aligned} \mathcal{M}_n^2 = & \int \frac{d\mathbf{k}_1}{(2\pi)^3} \int \frac{d\mathbf{k}_2}{(2\pi)^3} \cdots \int \frac{d\mathbf{k}_n}{(2\pi)^3} \times \\ & \times |\langle \Phi_{A^{n+}}^-(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \dots, \mathbf{k}_n) | \sum_{j=1}^Z z_j |\Phi_A \rangle|^2, \quad (3.9) \end{aligned}$$

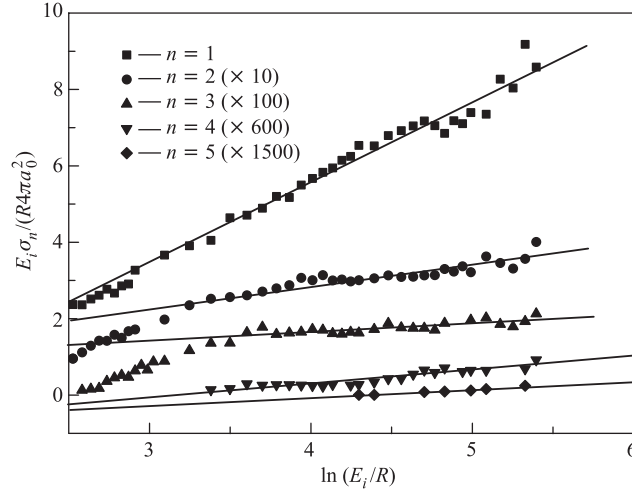


Рис. 8. График Фано в случае n -кратной ионизации атома Ne электроном. Данные взяты из работы [67]. R — постоянная Ридберга (27,2 эВ); a_0 — радиус Бора (1 а. е.)

и \tilde{Q}_{\max} — импульсный параметр теории Бете, ограничивающий сверху область применения дипольного приближения. Согласно формуле Бете (3.8) при достаточно больших значениях энергии налетающего электрона величина $E_0 \sigma_n$ должна линейно зависеть от $\ln E_0$ (так называемое построение Фано [66]). Наклон получающейся прямой определяется значением силы осцилляторов (3.9).

На рис. 8 и 9 представлены результаты измерений полных сечений n -кратной ионизации атома Ne и иона Ne^+ соответственно электронным ударом. Результаты в целом хорошо согласуются с асимптотической формулой Бете (3.8) в области достаточно высоких энергий налетающего электрона. Таким образом, борновское приближение по взаимодействию быстрого электрона с атомом (или ионом), т. е. однократное взаимодействие электрона с мишенью, оказывается вполне достаточным даже при $n \geq 2$. Это обстоятельство не столь очевидно, если принять во внимание слабую корреляцию электронов в том же неоне. Действительно, в модели независимых электронов согласно (3.4) возможна только однократная ионизация.

Альтернативный однократному взаимодействию механизм заключается в последовательном выбивании электронов из мишени пролетающим электроном. Этот механизм схематически показан на рис. 10. Очевидно, что в данном случае речь идет об n -м борновском приближении. Соответствующая амплитуда имеет вид

$$T_{fi} = \langle \mathbf{p}_s, \Phi_{A^{n+}}^-(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \dots, \mathbf{k}_n) | [VG_0(E)]^{n-1} V | \mathbf{p}_i, \Phi_A \rangle, \quad (3.10)$$

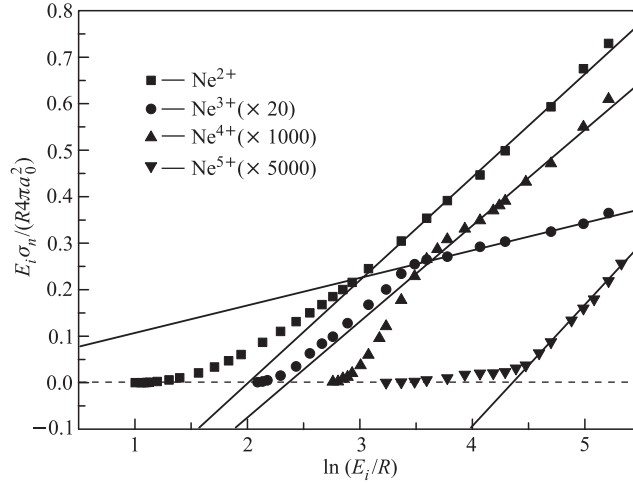


Рис. 9. График Фано в случае n -кратной ионизации иона Ne^+ электроном. Данные взяты из работы [68]

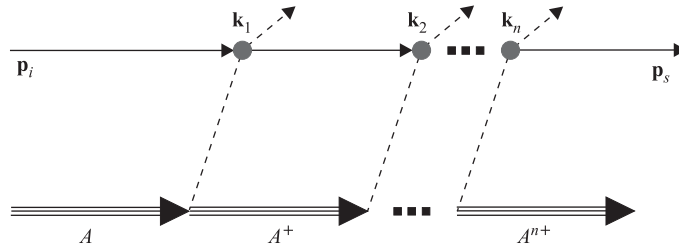


Рис. 10. Лестничная диаграмма, отвечающая последовательному выбиванию электронов из атома пролетающим электроном

где $G_0(E)$ — свободная функция Грина, $E = (1/2)p_i^2 + E_A$. Если электроны мишени независимы, то

$$\Phi_A = \frac{1}{\sqrt{Z!}} \hat{A} \prod_{j=1}^Z \phi_{i_j}(\xi_j), \quad (3.11a)$$

$$\Phi_{A^{n+}}^-(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \dots, \mathbf{k}_n) = \frac{1}{\sqrt{Z!}} \hat{A} \left[\prod_{j=1}^n \phi(\tilde{k}_j, \xi_j) \right] \left[\prod_{j=Z-n+1}^Z \phi_{f_j}(\xi_j) \right]. \quad (3.11b)$$

Здесь \hat{A} — оператор антисимметризации, $\tilde{k}_j = (\mathbf{k}_j, \tilde{\mu}_j)$, i_j и f_j обозначают наборы одноэлектронных квантовых чисел $(nlm\mu)_j$ и $(n'l'm'\mu')_j$ в начальном атомном и конечном ионном состояниях соответственно; $\xi_j = (\mathbf{r}_j, \sigma_j)$ — набор пространственных и спиновых переменных для j -го атомного электрона. Для энергий атомного и ионного состояний имеем

$$E_A = \sum_{j=1}^Z \varepsilon_{i_j}, \quad E_{A^{n+}} = \sum_{j=Z-n+1}^Z \varepsilon_{f_j},$$

где ε_{i_j} и ε_{f_j} — энергии одноэлектронных состояний. Подставляя (3.11) в (3.10) и используя эйкональное приближение [69, 70], получим

$$\begin{aligned} T_{fi} = & -ip_i \sum_{\mathcal{P}} (-1)^{\mathcal{P}} \hat{\mathcal{P}}_{i_j} \times \\ & \times \int d^2b \left[\prod_{j=1}^n \langle \phi(\tilde{k}_j, \xi_j) | \exp [iX(\mathbf{b}; \mathbf{r}_{j,\perp})] | \phi_{i_j}(\xi_j) \rangle \right] \times \\ & \times \left[\prod_{j=Z-n+1}^Z \langle \phi_{f_j}(\xi_j) | \exp [iX(\mathbf{b}; \mathbf{r}_{j,\perp})] | \phi_{i_j}(\xi_j) \rangle \right] \exp(i\mathbf{Qb}), \end{aligned} \quad (3.12)$$

где $\hat{\mathcal{P}}_{i_j}$ — оператор всевозможных перестановок индексов i_j ; b — прицельный параметр и эйконал

$$\begin{aligned} X(\mathbf{b}; \mathbf{r}_{j,\perp}) = & -\frac{1}{p_i} \int_{-\infty}^{\infty} dz_0 \left(\frac{1}{|\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}_j|} - \frac{1}{r_0} \right) = \\ = & -\frac{1}{p_i} \int_{-\infty}^{\infty} dz_0 \left(\frac{1}{\sqrt{(\mathbf{b} - \mathbf{r}_{j,\perp})^2 + (z_0 - z_j)^2}} - \frac{1}{\sqrt{b^2 + z_0^2}} \right) = \\ = & -\frac{2}{p_i} \ln \frac{b}{|\mathbf{b} - \mathbf{r}_{j,\perp}|} \end{aligned} \quad (3.13)$$

(см., например, [69]).

Учитывая, что $1/p_i \ll 1$, мы можем записать приближенно

$$\exp [iX(\mathbf{b}; \mathbf{r}_{j,\perp})] \simeq 1 + iX(\mathbf{b}; \mathbf{r}_{j,\perp})$$

и оставить в (3.12) только ненулевые члены низшего порядка по p_i^{-1} . Таким образом, мы получим

$$T_{fi} = -i^{n+1} p_i \sum_{\mathcal{P}} (-1)^p \hat{\mathcal{P}}_{i_j} \int d^2 b \left[\prod_{j=1}^n \langle \phi(\tilde{k}_j, \xi_j) | X(\mathbf{b}; \mathbf{r}_{j,\perp}) | \phi_{i_j}(\xi_j) \rangle \right] \times \\ \times \left[\prod_{j=Z-n+1}^Z \delta_{f_j i_j} \right] \exp(i\mathbf{Q}\mathbf{b}). \quad (3.14)$$

Использование (3.14) при расчете полного сечения дает

$$\sigma_n = \frac{2\pi}{p_i^{2n-1}} \sum_{\tilde{\mu}_1, \tilde{\mu}_2, \dots, \tilde{\mu}_n} \int \frac{d^3 Q}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3 k_1}{(2\pi)^3} \times \\ \times \int \frac{d^3 k_2}{(2\pi)^3} \dots \int \frac{d^3 k_n}{(2\pi)^3} \int d^2 b \int d^2 b' \times \\ \times \sum_{\mathcal{P}} (-1)^{p+p'} \hat{\mathcal{P}}_{i_j} \hat{\mathcal{P}}_{i'_j} \left[\prod_{j=1}^n u_{i_j i'_j}(\tilde{k}_j) \right] \left[\prod_{j=Z-n+1}^Z \delta_{i_j i'_j} \right] \exp[i\mathbf{Q}(\mathbf{b} - \mathbf{b}')] \times \\ \times \delta \left(p_i Q_z + \sum_{j=1}^n \varepsilon_{i_j} - \frac{Q^2}{2} - \sum_{j=1}^n \frac{k_j^2}{2} \right), \quad (3.15)$$

где

$$u_{i_j i'_j}(\tilde{k}_j) = \delta_{\tilde{\mu}_j \mu'_j} \delta_{\tilde{\mu}_j \mu_j} \langle \phi_{(n'l'm'_l)_j} | \ln \frac{b'^2}{|\mathbf{b}' - \mathbf{r}'_{j,\perp}|^2} | \phi^-(\mathbf{k}_j) \rangle \times \\ \times \langle \phi^-(\mathbf{k}_j) | \ln \frac{b^2}{|\mathbf{b} - \mathbf{r}_{j,\perp}|^2} | \phi_{(nlm_l)_j} \rangle. \quad (3.16)$$

Интегрируя по Q_z в пределе больших p_i , а затем по \mathbf{Q}_\perp и b' , получим

$$\sigma_n = \frac{1}{(2E_0)^n} \sum_{\tilde{\mu}_1, \tilde{\mu}_2, \dots, \tilde{\mu}_n} \int d^2 b \sum_{\mathcal{P}} \hat{\mathcal{P}}_{i_j} \left[\prod_{j=1}^n \delta_{\tilde{\mu}_j \mu_j} w_{(nlm_l)_j} \right], \quad (3.17)$$

где

$$w_{(nlm_l)_j} = \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \left| \langle \phi^-(\mathbf{k}) | \ln \frac{b^2}{|\mathbf{b} - \mathbf{r}_\perp|^2} | \phi_{(nlm_l)_j} \rangle \right|^2.$$

Заметим, что в (3.17) мы опустили интерференционные члены, что эквивалентно пренебрежению антисимметризацией [71].

Как следует из (3.17), полное сечение n -кратной ионизации в рамках механизма последовательного выбивания электронов атома ведет себя как $\sim E_0^{-n}$. Этот результат очевидно не согласуется с формулой Бете (3.8) и с экспериментальными наблюдениями даже в случае такой слабо коррелированной системы, как атом неона. Данный вывод заставляет предположить сильную корреляцию медленных электронов в конечном состоянии реакции, что требует отдельного исследования. Попытка такого учета была сделана в работе [72] в рамках теории эффективных зарядов и выглядит плодотворной, но пока сложной для конкретных расчетов.

3.2. ЗС-функция и расчеты с ней. Положим в (3.4) $n = 2$. Принципиальная часть матричного элемента при этом примет вид

$$M_2(\mathbf{Q}) = \langle \Phi^-(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) | e^{i\mathbf{Q}\mathbf{r}_1} + e^{i\mathbf{Q}\mathbf{r}_2} - 2 | \Phi_0 \rangle. \quad (3.18)$$

Точные функции начального и конечного состояния должны быть ортогональны $\langle \Phi^-(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) | \Phi_0 \rangle = 0$ как принадлежащие разным областям спектра одного и того же гамильтониана. Приближенные функции в рамках ФВА можно ортогонализировать по методу Грамма, что приведет к замене двойки в операторе перехода (3.18) на $2F(Q)$, где $F(Q) = \langle \Phi_0 | e^{i\mathbf{Q}\mathbf{r}} | \Phi_0 \rangle$ — так называемый формфактор атома.

Несимметризованная ЗС-функция записывается в виде

$$\begin{aligned} \Phi_{3C}^{-*}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = e^{i\mathbf{k}_{12}\mathbf{r}_{12}} \varphi^{-*}(\mathbf{k}_1, \mathbf{r}_1; 2) \varphi^{-*}(\mathbf{k}_2, \mathbf{r}_2; 2) \times \\ \times \varphi_{12}^{-*}(\mathbf{k}_{12}, \mathbf{r}_{12}; -1/2), \end{aligned} \quad (3.19)$$

и кулоновские волновые функции определены в (1.5). Эта функция позволяет существенно снизить количество интегрирований в 6D матричном элементе (3.18) в двух случаях выбора пробной функции атома гелия: слэтеровского типа и с явным заданием корреляций посредством комбинации r_{12} . Последний случай мы рассмотрим подробнее.

Зададим пробную волновую функцию атома гелия следующим образом:

$$\begin{aligned} \Phi_{\text{corr}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \sum_j D_j [\exp(-\alpha_j r_1 - \beta_j r_2) + \\ + \exp(-\alpha_j r_2 - \beta_j r_1)] \exp(-\gamma_j r_{12}). \end{aligned} \quad (3.20)$$

Техника вычисления интеграла (3.18) с функцией ВК [36] представлена в работе [59], а подробности вычисления такой функции, которая дает энергию связи $E_{\text{corr}}^{\text{He}} = -2,90372$ и к тому же удовлетворяет условиям Като [60] в

вариационной форме, можно найти в работе [61]. Введем вспомогательную функцию

$$g_j^*(\mathbf{k}_{12}, \mathbf{k}) = \int d^3 r_{12} e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{k}_{12})\mathbf{r}_{12}} e^{-\gamma_j r_{12}} \varphi^{-*}(\mathbf{k}_{12}, \mathbf{r}_{12}; -1/2) \quad (3.21)$$

и запишем

$$M_2(\mathbf{Q}) = \sum_j D_j \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} g_j^*(\mathbf{k}_{12}, \mathbf{k}) \int d^3 r_1 d^3 r_2 e^{-i\mathbf{p}\mathbf{r}_1} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_2} \times \\ \times \varphi^{-*}(\mathbf{k}_1, \mathbf{r}_1; 2) \varphi^{-*}(\mathbf{k}_2, \mathbf{r}_2, 2) (e^{i\mathbf{Q}\mathbf{r}_1} + e^{i\mathbf{Q}\mathbf{r}_2} - 2) \times \\ \times (e^{-a_j r_1 - b_j r_2} + e^{-a_j r_2 - b_j r_1}). \quad (3.22)$$

Это позволяет получить следующее выражение для матричного элемента в виде уже 3D-интеграла:

$$M_2(\mathbf{Q}) = - \sum_j D_j \frac{\partial^3}{\partial \alpha_j \partial \beta_j \partial \gamma_j} \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} I_{12}(\gamma_j; \mathbf{k}_{12}, \mathbf{k} + \mathbf{k}_{12}) \times \\ \times [I_1(\alpha_j; \mathbf{k}_1, \mathbf{Q} - \mathbf{k}) I_2(\beta_j; \mathbf{k}_2, \mathbf{k}) + I_1(\alpha_j; \mathbf{k}_1, -\mathbf{k}) I_2(\beta_j; \mathbf{k}_2, \mathbf{Q} + \mathbf{k}) - \\ - 2I_1(\alpha_j; \mathbf{k}_1, -\mathbf{k}) I_2(\beta_j; \mathbf{k}_2, \mathbf{k}) + (\alpha_j \leftrightarrow \beta_j)], \quad (3.23)$$

где

$$I_\tau(\lambda; \mathbf{k}_\tau, \mathbf{k}) = \int \frac{d^3 r}{r} \varphi^{-*}(\mathbf{k}_\tau, \mathbf{r}; \tau) e^{-\lambda r + i\mathbf{k}\mathbf{r}} = \\ = 4\pi R(\xi_\tau) \frac{[(\lambda - ik_\tau)^2 + k^2]^{i\xi_\tau}}{[(\mathbf{k} - \mathbf{k}_\tau)^2 + \lambda^2]^{1+i\xi_\tau}}. \quad (3.24)$$

В (3.24) $\tau = 1, 2, (12)$, $\xi_1 = -2/k_1$, $\xi_2 = -2/k_2$, $\xi_{12} = 1/2k_{12}$ суть кулоновские числа, и $R(\xi) = e^{-\pi\xi/2}\Gamma(1+i\xi)$.

ФВА пятикратное дифференциальное сечение (FDSCS, 5DCS) с функциями (3.19) и (3.20) записывается как

$$\frac{d^5 \sigma}{dE_a dE_b d\Omega_a d\Omega_b d\Omega_s} = \frac{8p_s k_1 k_2}{(2\pi)^6 p_i Q^4} |M_2|^2, \quad (3.25)$$

и соответствующие расчеты представлены на рис. 11 в сравнении с экспериментальными данными [58]. Напоминаем, что геометрия эксперимента плоская. Энергия начального электрона $E_0 = 5599$ эВ, энергия и угол рассеянного электрона соответственно $E_s = 5500$ эВ и $\theta_s = -0,45^\circ$. Энергии

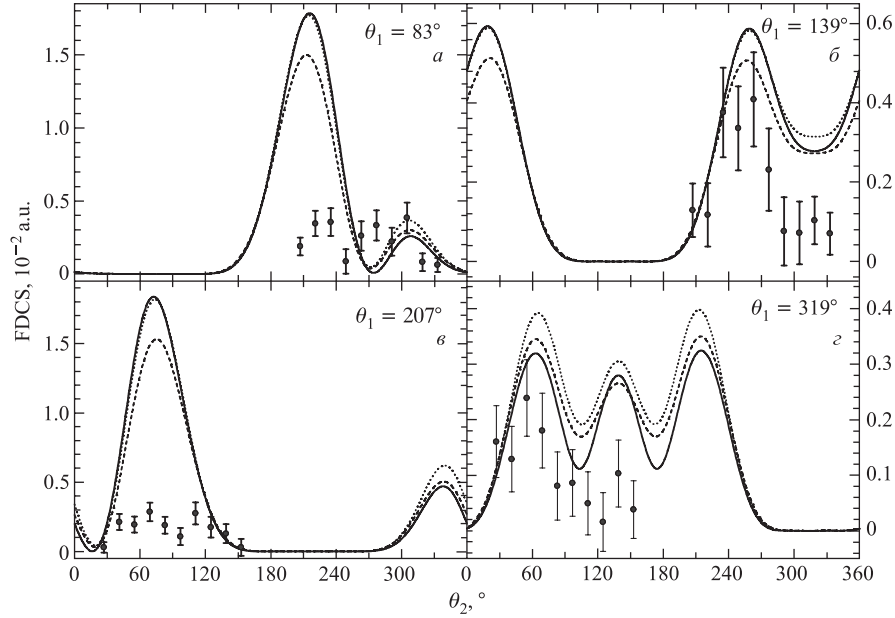


Рис. 11. FDCS в зависимости от угла вылета электрона θ_2 при фиксированных углах θ_1 . Энергии электронов $E_1 = E_2 = 10$ эВ, $E_s = 5500$ эВ. Сплошная линия — расчет с функцией (3.20); штриховая — с функцией ВК [63]; пунктирная — с функцией Ле Сека [62]. Экспериментальные точки из работы [58]. Рисунок заимствован из работы [61]

испущенных электронов $E_1 = E_2 = 10$ эВ. Как видно из рисунка, результаты для всех трех пробных (сравнительно «хороших») функций близки между собой вне зависимости от того, удовлетворяют они условиям Като точно [62], интегрально [61] или приближенно [36]. Также наблюдается значительное расхождение всех расчетов с экспериментом при углах $\theta_1 = 83^\circ$ и $\theta_1 = 207^\circ$, которое следует отнести к качеству функции конечного состояния.

До сих пор мы исходили из приближения (3.1) для конечной волновой функции, т. е. описывали рассеянный электрон плоской волной в рамках конечного 4-частичного состояния. Непертурбативный подход к описанию конечного состояния может быть реализован в модели 6С, которая представляет собой следующее произведение шести кулоновских функций (сравни с (3.19)):

$$\begin{aligned} \Phi_{6C}^{-*}(\mathbf{p}_s, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2; \mathbf{r}_0, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = & e^{i\mathbf{k}_{12}\mathbf{r}_{12}} e^{i\mathbf{k}_{1s}\mathbf{r}_{10}} e^{i\mathbf{k}_{2s}\mathbf{r}_{20}} \times \\ & \times \varphi^{-*}(\mathbf{p}_s, \mathbf{r}_0; 2) \varphi^{-*}(\mathbf{k}_1, \mathbf{r}_1; 2) \varphi^{-*}(\mathbf{k}_2, \mathbf{r}_2; 2) \times \\ & \times \varphi_{12}^{-*}(\mathbf{k}_{12}, \mathbf{r}_{12}; -1/2) \varphi_{1s}^{-*}(\mathbf{k}_{1s}, \mathbf{r}_{10}; -1/2) \varphi_{2s}^{-*}(\mathbf{k}_{2s}, \mathbf{r}_{20}; -1/2). \end{aligned} \quad (3.26)$$

Численные расчеты с этой функцией чрезвычайно сложны и по этой причине редко проводятся на практике (см., например, [73]). Обойти численные трудности позволяет метод эффективных зарядов и концепция динамического экранирования [74]. Полный потенциал взаимодействия представляется в виде ($Z_T = 2$)

$$-\frac{Z_T}{r_0} - \frac{Z_T}{r_1} - \frac{Z_T}{r_2} + \frac{1}{r_{10}} + \frac{1}{r_{20}} + \frac{1}{r_{12}} = -\frac{Z_1}{r_1} - \frac{Z_2}{r_2} + \frac{Z_{12}}{r_{12}},$$

где Z_1 , Z_2 и Z_{12} суть эффективные заряды, подлежащие определению. Процедура нахождения эффективных зарядов подробно изложена в [74], здесь же мы приведем конечный результат:

$$Z_{1,2} = Z_T + \frac{Z_T}{2} \frac{k_{1,2}}{p_s} - \frac{k_{1,2}}{|\mathbf{k}_{1,2} - \mathbf{p}_s|}, \quad Z_{12} = 1. \quad (3.27)$$

Таким образом, 6С-функция (3.26) сводится к 3С-функции с зарядами (3.27). Кстати, именно эта схема применялась в теоретической обработке экспериментов группы Ламам–Беннани [58], упоминавшихся ранее.

3.3. Обсуждение результатов. В случае одной быстрой частицы в конечном состоянии, даже если мы приближаем ее волновую функцию плоской волной, остаются значительные трудности в приближении конечной функции мишени с несколькими медленными электронами. Метод эффективных зарядов, как мы выяснили в разд. 1, позволяет «убрать» сингулярность амплитуды рассеяния в импульсном представлении, полученной из решения уравнения Липпмана–Швингера в базисе плоских волн, но в координатном представлении асимптотика волновой функции трехчастичного развала, которая может быть записана следующим образом:

$$\Psi^{(\pm)}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|_{r_1, r_2, r_{12} \rightarrow \infty} \sim e^{i(\mathbf{r}_1 \mathbf{k}_1 + \mathbf{r}_2 \mathbf{k}_2 + W^\pm)}, \quad (3.28)$$

с фазой

$$W^\pm = \mp \frac{Z}{k_1} \ln(k_1 r_1 \mp \mathbf{k}_1 \mathbf{r}_1) \mp \frac{Z}{k_2} \ln(k_2 r_2 \mp \mathbf{k}_2 \mathbf{r}_2) \pm \frac{1}{2k_{12}} \ln(k_{12} r_{12} \mp \mathbf{k}_{12} \mathbf{r}_{12}) \quad (3.29)$$

формально не соответствует координатной асимптотике произведения кулоновских функций (1.4) с условием (1.3), что легко проверить. В то же время, исходить из координатного представления зачастую удобнее и привычнее, особенно при численном счете.

3С-функция имеет асимптотику (3.28) и этим выгодно отличается от метода эффективных зарядов, но эта функция сугубо асимптотическая, она не

может быть свободным членом для уравнения с локальным короткодействующим потенциалом для волновой функции $|\Psi^{(\pm)}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2)\rangle$ (см., например, [75]). Правда, в последнее время появились работы, которые указывают направление решения этой проблемы [76, 77].

Вместе с тем при собственно многократной ионизации $n > 2$ наблюдается с нашей точки зрения удивительный эффект, когда такое количество ионизованных электронов появляется в рамках FBA. По сути FBA — это сумма матричных элементов, каждый из которых описывает однократное взаимодействие быстрой частицы с компонентом мишени. Получается, что один вылетевший медленный электрон «вытягивает» все остальные только за счет внутренних корреляций. И это в основном кулоновские корреляции в конечном состоянии. Этот эффект требует дальнейшего пристального изучения.

4. ИОНИЗАЦИЯ МОЛЕКУЛ ЭЛЕКТРОННЫМ УДАРОМ: ПРИБЛИЖЕНИЯ

В последние 30–40 лет молекулярная физика завоевывает все большее пространство в квантовой теории рассеяния. Теория однократной ионизации молекул под действием быстрой частицы очень сложна, даже в случае простейшей молекулы водорода мы имеем дело с квантовой системой пяти тел (исключение составляет фотоионизация). Без разумных приближений тут не обойтись, даже при численном решении задачи в рамках FBA.

В случае ионизации молекулы водорода с одновременной диссоциацией детектирование рассеянного и испущенных электронов, как и одного из протонов, может дать эксклюзивную информацию об электронной структуре мишени, механизмах ионизации и диссоциации. Такой тип детектирования «на совпадение» обсуждается, например, в работах [78–80], посвященных столкновениям молекул водорода и заряженных ионов (см. также ссылки там). Также открывается возможность исследования зависимости углового дифференциального сечения от ориентации молекулы [81].

Одна из основных трудностей математического моделирования подобных экспериментов состоит в правильном описании состояний непрерывного спектра испущенных электронов, движущихся в кулоновском поле двух ядер (например, двух протонов — ядер молекулы водорода). За последние несколько лет был предложен ряд моделей для описания динамики одного медленного испущенного электрона в дипольном ($e, 2e$)-эксперименте. Так, в работе [82] для реакции $\text{H}_2^+ + e \rightarrow \text{H}^+ + \text{H}^+ + e + e$ использовалась приближенная однопараметрическая волновая функция в виде произведений двух кулоновских функций в поле неподвижного (за эффективное время реакции) центра H_2^{++} (так называемое приближение 2C). В других теоретических работах получены чисто численные результаты в методе эволюции волнового пакета в

сферических [83] и вытянутых сфероидальных координатах [84,85]. Эти методы дают близкие между собой дифференциальные сечения, в ряде случаев серьезно отличающиеся от вычисленных в методе 2С. Однако использование сфероидальных функций для разложения плоской волны при заданном направлении импульса рассеянного электрона требует суммирования большого числа парциальных решений в расчетах сечений ионизации, что приводит к громоздким и медленно сходящимся вычислениям и тем самым ставит вопрос более эффективного приближения конечной функции реакции. Рассмотрим этот вопрос подробнее (излагается в основном по материалам докторской диссертации [90]).

4.1. Общие формулы. Для процессов однократной и двукратной ионизации двухатомной молекулы с двумя активными электронами налетающим быстрым электроном выполняются законы сохранения импульса и энергии

$$\mathbf{K} = \mathbf{p}_i - \mathbf{p}_s - \mathbf{k}_1, \quad E_i = E_s + E_1 + I_1, \quad (4.1a)$$

$$\mathbf{K} = \mathbf{p}_i - \mathbf{p}_s - \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2, \quad E_i = E_s + E_1 + E_2 + I_2. \quad (4.1b)$$

Здесь (E_i, \mathbf{p}_i) , (E_s, \mathbf{p}_s) , (E_1, \mathbf{k}_1) и (E_2, \mathbf{k}_2) — энергии и импульсы падающего, рассеянного и испущенных электронов соответственно; \mathbf{K} — импульс отдачи иона; I_1 — потенциал однократной и I_2 — потенциал двукратной ионизации молекулы.

На рис. 12 показаны схемы векторов скоростей электронов и ориентации молекулы. Здесь \mathbf{R} — радиус-вектор быстрого рассеянного электрона; \mathbf{r}_1 и \mathbf{r}_2 — радиусы-векторы испущенных электронов; $\boldsymbol{\rho}$ — радиус-вектор, соединяющий ядра a и b двухатомной молекулы, задает ориентацию оси вращения молекулы; \mathbf{R}_a , \mathbf{R}_b и \mathbf{r}_{ja} , \mathbf{r}_{jb} — радиусы-векторы падающего электрона и j -го испущенного электрона относительно ядер a и b соответственно; \mathbf{r}_{jp} — радиус-вектор падающего электрона относительно j -го испущенного электрона; $\mathbf{Q} = \mathbf{p}_i - \mathbf{p}_s$ — переданный импульс. Из рис. 12 видно, что

$$\mathbf{R}_a = \mathbf{R} + \frac{\boldsymbol{\rho}}{2}, \quad \mathbf{r}_{1p} = \mathbf{R} - \mathbf{r}_1, \quad \mathbf{r}_{1a} = \mathbf{r}_1 + \frac{\boldsymbol{\rho}}{2}, \quad \mathbf{r}_{2a} = \mathbf{r}_2 + \frac{\boldsymbol{\rho}}{2}, \quad (4.2a)$$

$$\mathbf{R}_b = \mathbf{R} - \frac{\boldsymbol{\rho}}{2}, \quad \mathbf{r}_{2p} = \mathbf{R} - \mathbf{r}_2, \quad \mathbf{r}_{1b} = \mathbf{r}_1 - \frac{\boldsymbol{\rho}}{2}, \quad \mathbf{r}_{2b} = \mathbf{r}_2 - \frac{\boldsymbol{\rho}}{2}. \quad (4.2b)$$

Трех- и пятикратные дифференциальные сечения (ТДКС и 5ДКС) реакций $(e, 2e)$ и $(e, 3e)$ с одним быстрым (начальным) электроном при фиксированной ориентации молекулы в рамках ФВА задаются выражениями

$$\sigma^{(3)}(\boldsymbol{\rho}) = \frac{d^3 \sigma}{d\Omega_s d\Omega_1 dE_1} = \frac{p_s k_1}{(2\pi)^5 p_i} |T_{fi}|^2, \quad (4.3a)$$

$$\sigma^{(5)}(\boldsymbol{\rho}) = \frac{d^5 \sigma}{d\Omega_s d\Omega_1 d\Omega_2 dE_1 dE_2} = \frac{p_s k_1 k_2}{(2\pi)^8 p_i} |T_{fi}|^2. \quad (4.3b)$$

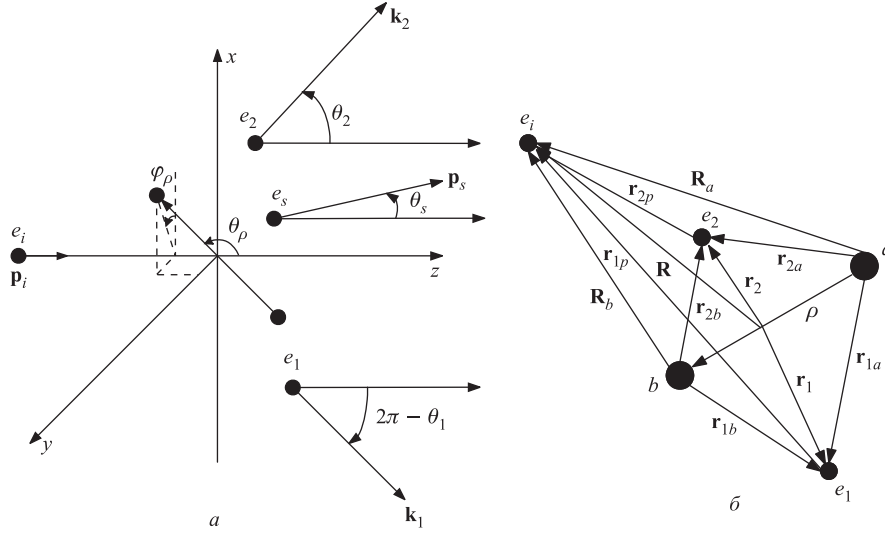


Рис. 12. Схемы векторов скоростей (лабораторная система координат) (а) и координат электронов (молекулярная система координат) (б)

Как обычно, в случае одной быстрой частицы мы пренебрегаем обменом между падающим и испущенным электронами, а также полагаем чрезвычайно малой вероятность захвата быстрой частицы мишенью с последующим испусканием ею двух активных электронов. Интегрируя по всем направлениям молекулярной оси, получаем усредненные трех- и пятикратные дифференциальные сечения:

$$\bar{\sigma}^{(3)} = \frac{1}{4\pi} \int d\Omega_\rho \sigma^{(3)}(\rho), \quad (4.4a)$$

$$\bar{\sigma}^{(5)} = \frac{1}{4\pi} \int d\Omega_\rho \sigma^{(5)}(\rho). \quad (4.4б)$$

4.2. Мишень с одним активным электроном. Рассмотрим уравнение Шредингера для j -го испущенного электрона, движущегося в поле двух фиксированных ядер с зарядами Z_a и Z_b :

$$\left(H - \frac{k^2}{2}\right) \Psi(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = 0, \quad H = -\frac{1}{2}\Delta_{\mathbf{r}} - \frac{Z_a}{r_a} - \frac{Z_b}{r_b}, \quad (4.5)$$

где $\mathbf{k} \equiv \mathbf{k}_j$, $\mathbf{r} \equiv \mathbf{r}_j$ и $\mathbf{r}_l \equiv \mathbf{r}_{jl}$, $l = a, b$. Его решение будем искать в виде произведения двух функций:

$$\Psi(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = \Psi_a(\mathbf{k}, \mathbf{r}_a) \Psi_b(\mathbf{k}, \mathbf{r}_b), \quad \Psi_l(\mathbf{k}, \mathbf{r}_l) = \exp\left(\frac{i\mathbf{k}\mathbf{r}_l}{2}\right) \psi(\mathbf{k}, \mathbf{r}_l), \quad (4.6)$$

что навеяно соображениями метода эффективных зарядов. Подставляя функцию (4.6) в уравнение (4.5), получаем следующее уравнение:

$$\begin{aligned} & \left[\frac{1}{2} \Delta_{\mathbf{r}_a} \psi(\mathbf{k}, \mathbf{r}_a) + \left(i\mathbf{k} + \beta_a \frac{\nabla_{\mathbf{r}_b} \psi(\mathbf{k}, \mathbf{r}_b)}{2\psi(\mathbf{k}, \mathbf{r}_b)} \right) \times \right. \\ & \quad \left. \times \nabla_{\mathbf{r}_a} \psi(\mathbf{k}, \mathbf{r}_a) + \frac{Z_a}{r_a} \psi(\mathbf{k}, \mathbf{r}_a) \right] \psi(\mathbf{k}, \mathbf{r}_b) + \\ & + \left[\frac{1}{2} \Delta_{\mathbf{r}_b} \psi(\mathbf{k}, \mathbf{r}_b) + \left(i\mathbf{k} + \beta_b \frac{\nabla_{\mathbf{r}_a} \psi(\mathbf{k}, \mathbf{r}_a)}{2\psi(\mathbf{k}, \mathbf{r}_a)} \right) \times \right. \\ & \quad \left. \times \nabla_{\mathbf{r}_b} \psi(\mathbf{k}, \mathbf{r}_b) + \frac{Z_b}{r_b} \psi(\mathbf{k}, \mathbf{r}_b) \right] \psi(\mathbf{k}, \mathbf{r}_a) = 0, \quad (4.7) \end{aligned}$$

где β_a и β_b — коэффициенты разделения, $\beta_a + \beta_b = 2$.

Теперь предположим, что каждое слагаемое в квадратных скобках равно нулю, например:

$$\frac{1}{2} \Delta_{\mathbf{r}_a} \psi(\mathbf{k}, \mathbf{r}_a) + \left(i\mathbf{k} + \beta_a \frac{\nabla_{\mathbf{r}_b} \psi(\mathbf{k}, \mathbf{r}_b)}{2\psi(\mathbf{k}, \mathbf{r}_b)} \right) \nabla_{\mathbf{r}_a} \psi(\mathbf{k}, \mathbf{r}_a) + \frac{Z_a}{r_a} \psi(\mathbf{k}, \mathbf{r}_a) = 0, \quad (4.8)$$

и рассмотрим следствия такого предположения.

Допустим, что «двухэтажная» конструкция в круглых скобках мала по какой-то причине, и этим отношением можно пренебречь. Тогда оставшееся уравнение (4.8) имеет аналитическое решение

$$\psi(\mathbf{k}, \mathbf{r}_a) = Q(\alpha_a, \mathbf{k}, \mathbf{r}_a) \equiv {}_1F_1(i\alpha_a, 1, -i(kr_a + \mathbf{k}\mathbf{r}_a)), \quad (4.9)$$

где $\alpha_a = -Z_a/k$ — параметр Зоммерфельда. Волновая функция $\Psi(\mathbf{k}, \mathbf{r})$ при этом принимает вид

$$\begin{aligned} \Psi(\mathbf{k}, \mathbf{r}) &= \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}) \prod_{l=a}^b N(\alpha_l) Q(\alpha_l, \mathbf{k}, \mathbf{r}_l), \\ N(\alpha_l) &= \exp\left(-\frac{\pi\alpha_l}{2}\right) \Gamma(1 - i\alpha_l), \end{aligned} \quad (4.10)$$

удовлетворяет условию нормировки [86]

$$\langle \Psi(\mathbf{k}) | \Psi(\mathbf{k}') \rangle = \int d\mathbf{r} \Psi^*(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \Psi(\mathbf{k}', \mathbf{r}) = (2\pi)^3 \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \quad (4.11)$$

и асимптотическому условию Редмонда

$$\lim_{kr \rightarrow \infty} \Psi(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \longrightarrow \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}) \exp(-i(\alpha_a + \alpha_b) \ln(kr + \mathbf{k}\mathbf{r})). \quad (4.12)$$

Функция (4.10) называется волновой функцией 2С (или ТСС, two-center coulomb) [82]. При больших значениях kr она удовлетворяет уравнению (4.8) с точностью $O((kr)^{-2})$, что нетрудно проверить подстановкой. Следует отметить, что полученная функция имеет ожидаемую физическую асимптотику (4.12), поскольку падающая под большим прицельным параметром частица «видит» одноцентровую молекулу. Функция (4.10) является произведением искаженных волн, и тем самым учтено многократное перерассеяние электрона на каждом центре.

Рассмотрим теперь уравнение (4.8), в котором вместо $\nabla_{\mathbf{r}_b} \psi(\mathbf{k}, \mathbf{r}_b) / \psi(\mathbf{k}, \mathbf{r}_b)$ подставлено его асимптотическое выражение

$$\frac{\nabla_{\mathbf{r}_b} \psi(\mathbf{k}, \mathbf{r}_b)}{\psi(\mathbf{k}, \mathbf{r}_b)} \approx \alpha_b \frac{k(\mathbf{r}_b/r_b) + \mathbf{k}}{i(kr_b + \mathbf{k}\mathbf{r}_b)} q(\mathbf{k}, \mathbf{r}_b) + O((kr_b)^{-2}), \quad (4.13)$$

где

$$q(\mathbf{k}, \mathbf{r}_b) = 1 - \exp(-i(kr + \mathbf{k}\mathbf{r}_b)) \frac{f^*(\mathbf{k}, \mathbf{r}_b)}{f(\mathbf{k}, \mathbf{r}_b)},$$

$$f(\mathbf{k}, \mathbf{r}_b) = \frac{\exp(-i\alpha_b \ln(kr_b + \mathbf{k}\mathbf{r}_b))}{\Gamma(1 - i\alpha_b)}.$$

Подставим (4.13) в (4.8), заменим в нем величину $\alpha_b \beta_b q(\mathbf{k}, \mathbf{r}_b)$ некоторой константой ε_a и, считая ее небольшим варьируемым параметром, подлежащим дальнейшему определению с помощью подходящего критерия, запишем это уравнение с точностью $O(r_a^{-2})$:

$$\frac{1}{2} \Delta_{\mathbf{r}_a} \psi(\mathbf{k}, \mathbf{r}_a) + \left(i\mathbf{k} - \frac{i\varepsilon_a}{2} \frac{k\hat{\mathbf{r}}_a + \mathbf{k}}{kr_a + \mathbf{k}\mathbf{r}_a} \right) \nabla_{\mathbf{r}_a} \psi(\mathbf{k}, \mathbf{r}_a) + \frac{Z_a}{r_a} \psi(\mathbf{k}, \mathbf{r}_a) = 0, \quad (4.14)$$

где вектор \mathbf{r}_b в круглых скобках заменен на \mathbf{r}_a , поскольку $r_b^{-1} = r_a^{-1} + O(r_a^{-2})$. Полученное таким образом уравнение имеет точное решение, зависящее от параметра ε_a :

$$\psi(\mathbf{k}, \mathbf{r}_a) = Q(\alpha_a, \varepsilon_a, \mathbf{k}, \mathbf{r}_a) \equiv {}_1F_1(i\alpha_a, 1 - i\varepsilon_a, -i(kr_a + \mathbf{k}\mathbf{r}_a)), \quad (4.15)$$

и это решение совпадает с (4.9) при $\varepsilon_a = 0$. С помощью (4.15) получаем выражение для новой волновой функции, называемой модифицированной двух-центральной кулоновской функцией (МТСС, modified two-center coulomb):

$$\Psi(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}) \prod_{l=a}^b N(\alpha_l, \varepsilon_l) Q(\alpha_l, \varepsilon_l, \mathbf{k}, \mathbf{r}_l), \quad (4.16)$$

где нормировочный фактор

$$N(\alpha, \varepsilon) = \exp(-\pi\alpha/2) \frac{\Gamma(1 - i\alpha - i\varepsilon)}{\Gamma(1 - i\varepsilon)}.$$

Основное различие между функциями (4.10) и (4.16) заключается в том, что в последней относительное движение электрона в поле одного из кулоновских центров зависит от параметра Зоммерфельда другого центра. Эта функция была получена и использовалась впервые в работе [87].

С физической точки зрения наиболее важен случай, когда $Z_a = Z_b = Z$. Он требует симметричного представления функции (4.16), которую запишем в виде ($\alpha_a = \alpha_b = \alpha$)

$$\chi(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = \frac{1}{2} \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}) N(\alpha, \varepsilon_a) N(\alpha, \varepsilon_b) \times \\ \times [Q(\alpha, \varepsilon_a, \mathbf{k}, \mathbf{r}_a) Q(\alpha, \varepsilon_b, \mathbf{k}, \mathbf{r}_b) + Q(\alpha, \varepsilon_a, \mathbf{k}, \mathbf{r}_b) Q(\alpha, \varepsilon_b, \mathbf{k}, \mathbf{r}_a)]. \quad (4.17)$$

Если положить $\varepsilon_a = \varepsilon_b$, то (4.17) совпадает с (4.16).

4.3. Однократная ионизация положительного иона молекулы водорода быстрым электроном. Читателя, который хочет освежить свои знания в области квантовой химии (адиабатическое приближение, построение МОЛКАО и их обозначения, молекулярные симметрии и т. п.), мы отсылаем к замечательной книге Грибова [88] и обзору [89]. Мы же будем здесь использовать принятую терминологию без дополнительных ссылок.

Простейшая волновая функция $\Phi_{2\Sigma_g^+}(\mathbf{r})$, описывающая основное состояние $2\Sigma_g^+$ иона H_2^+ , получена по методу МОЛКАО вариацией по двум параметрам f и g [82]:

$$\Phi_{2\Sigma_g^+}(\mathbf{r}) = N(\exp(-fr_a - gr_b) + \exp(-gr_a - fr_b)), \quad (4.18)$$

где $f = 0,224086$ и $g = 1,13603$ — вариационные параметры, и $N(\rho) = 0,6217$ — нормировочная константа. Энергия связи иона $I_1 = 30$ эВ, равновесное межъядерное расстояние $\rho = 2$.

Потенциал взаимодействия мишени с налетающим электроном выбираем в виде

$$V(\mathbf{R}, \mathbf{r}; \rho) = -\frac{1}{R_a} - \frac{1}{R_b} + \frac{1}{|\mathbf{R} - \mathbf{r}|} \quad (4.19)$$

и записываем искомый матричный элемент

$$\begin{aligned} T_{fi}(\rho) &= \langle \mathbf{p}_s, \chi(\mathbf{k}) | V(\rho) | \mathbf{p}_i, \Phi_{2\Sigma_g^+} \rangle = \\ &= \frac{4\pi}{Q^2} \int d\mathbf{r} \chi^*(\mathbf{k}; \mathbf{r}) \left[e^{i\mathbf{Q}\mathbf{r}} - e^{i\mathbf{Q}\rho/2} - e^{-i\mathbf{Q}\rho/2} \right] \Phi_{2\Sigma_g^+}(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (4.20)$$

В этой записи быстрый падающий на мишень электрон описывается плоской волной, хотя возможно его представление и кулоновской волной, поскольку ион заряжен положительно. Кроме того, в рамках ФВА можно произвести формальную ортогонализацию начального и конечного состояний мишени, в результате чего (4.20) преобразуется к виду

$$T_{fi}(\rho) = \frac{4\pi}{Q^2} \int d\mathbf{r} \chi^*(\mathbf{k}; \mathbf{r}) [e^{i\mathbf{Q}\mathbf{r}} - F(\mathbf{Q}, \rho)] \Phi_{2\Sigma_g^+}(\mathbf{r}), \quad (4.21)$$

где $F(\mathbf{Q}, \rho) = \langle \Phi_{2\Sigma_g^+} | e^{i\mathbf{Q}\mathbf{r}} | \Phi_{2\Sigma_g^+} \rangle$ — молекулярный формфактор.

Мы не будем здесь останавливаться на деталях вычислений, отметим лишь, что необходимо прибегать к численному интегрированию. С деталями же можно подробно ознакомиться в диссертации [90]. Рассматривается случай равных зарядов $Z_a = Z_b = 1$ и значений энергии $E_i = 2$ кэВ, $E_k = 50$ эВ [82–84]. При такой начальной энергии в какой-то мере оправданно пренебрежение обменом между рассеянным и испущенным электронами в сечении, описание быстрого электрона плоской волной и предположение о «замороженности» протонов в процессе ионизации. Последнее ведет к фиксации ρ в конечном состоянии его значением в ионе молекулы.

Сначала рассмотрим сечение TDCS в двух случаях ориентации оси молекулы: $\varphi_\rho = 0^\circ$, $\theta_\rho = 0^\circ$ и $\varphi_\rho = 0^\circ$, $\theta_\rho = 90^\circ$. При этом определим параметры $\varepsilon_a = -Z_3/k$ и $\varepsilon_b = -Z_4/k$ по аналогии с α , но с некоторыми эффективными зарядами Z_3, Z_4 . Положим их равными из общих соображений. Для того чтобы определить оптимальное значение $Z_3 = Z_4$, было проведено сравнение максимумов результатов вычислений сечения с использованием (4.21) и полученных численными расчетами в вытянутых сфероидальных координатах [84]. Этот максимум достигается в ситуации, когда импульс испущенного электрона равен и параллелен переданному импульсу, т. е. $\mathbf{k} = \mathbf{Q}$. Это так называемый «гребень Бете», когда импульс отдачи $\mathbf{K} = 0$ и наблюдается абсолютный максимум сечения. Требуемое значение $Z_3 = Z_4$ определялось минимальным значением разницы сечений в окрестности этого максимума. В результате применения такого «вариационного принципа» было найдено, что $Z_3 = Z_4$ не превышает 0,2. Также было отмечено, что функция $Z_3 = Z_4 = f(\theta_s)$ слабо зависит как от угла рассеяния, так и от угла ориентации молекулы θ_ρ .

На рис. 13, *a* и *b* показаны сечения TDCS как функции угла рассеянного электрона при $\mathbf{k} \parallel \mathbf{Q}$ для двух направлений оси молекулы: $\varphi_\rho = 0^\circ$, $\theta_\rho = 0^\circ$

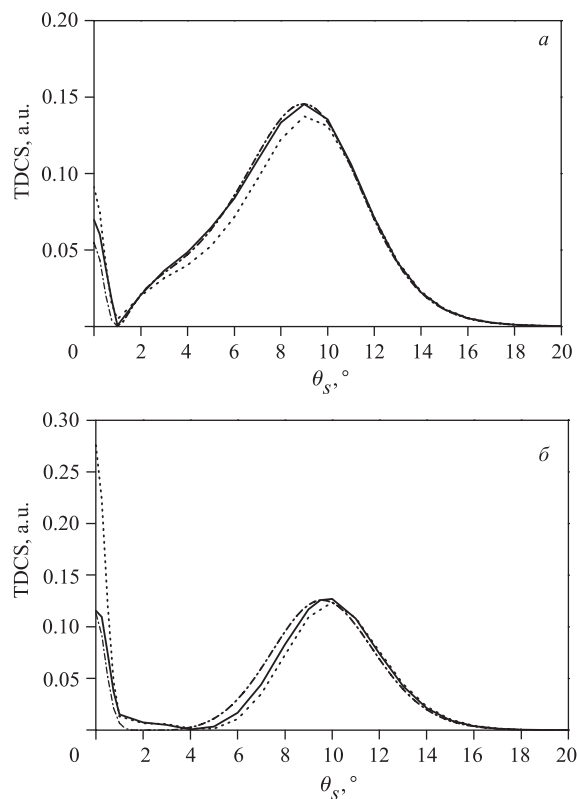


Рис. 13. Трехкратные дифференциальные сечения реакции $(e, 2e)$ на ионе H_2^+ как функция угла рассеянного электрона θ_s с оптимальными значениями $Z_3 = Z_4$, полученными нормировкой на максимум при $\mathbf{k} \parallel \mathbf{Q}$ (сплошная линия), $Z_3 = Z_4 = 0$ (пунктирная линия) и [84] (штрихпунктирная линия). а) $\varphi_\rho = 0^\circ$, $\theta_\rho = 0^\circ$; б) $\varphi_\rho = 0^\circ$, $\theta_\rho = 90^\circ$. Рисунок заимствован из работы [87]

и $\varphi_\rho = 0^\circ$, $\theta_\rho = 90^\circ$. В случае $\mathbf{k} \parallel \mathbf{Q}$ импульс отдачи достигает минимального значения, и максимум энергии столкновения передается испущенному электрону. Из рис. 13 видно, что введение дополнительного параметра ε несколько улучшает соответствие с результатами [84], особенно в области малых углов рассеяния, где двухцентровая модель, предложенная в [82], плохо работает.

Чтобы видеть эффект введения параметров Z_3 и Z_4 более детально, рассмотрим TDSC в зависимости от угла испущенного электрона для двух направлений рассеянного электрона $\theta_s = 3^\circ$ (рис. 14, а) и $\theta_s = 9^\circ$ (рис. 14, б) при ориентации оси молекулы $\varphi_\rho = 0^\circ$, $\theta_\rho = 0^\circ$. Улучшение приближен-

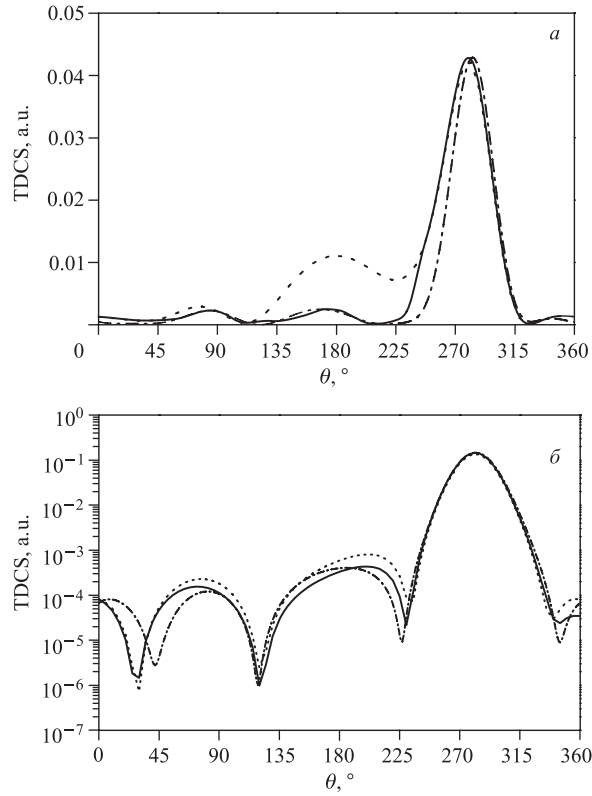
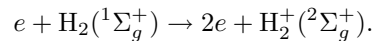


Рис. 14. Трехкратные дифференциальные сечения реакции $(e, 2e)$ как функция угла испущенного электрона θ со значениями $Z_3 = Z_4$, полученными нормировкой на главный максимум (сплошная линия), $Z_3 = Z_4 = 0$ (пунктирная линия) и [84] (штрихпунктирная линия). Здесь $\varphi_\rho = 0^\circ$, $\theta_\rho = 0^\circ$, $\theta_s = 3^\circ$ (а), $\theta_s = 9^\circ$ (б). Рисунок заимствован из работы [87]

ной волновой функции введением дополнительных параметров ε_l очевидно из рис. 14, а, б в области $100 < \theta < 240^\circ$. Некоторые несогласия сохраняются в области $0 < \theta < 100^\circ$ (видно из рис. 14, б), которые трудны для интерпретации, поскольку дифференциальное сечение здесь падает почти на три порядка по сравнению с абсолютным максимумом, и несоответствие можно отнести к определенной грубости аппроксимации волновой функции (4.16).

4.4. Однократная ионизация молекулы водорода электронным ударом.

Рассмотрим теперь однократную ионизацию молекулы водорода (H_2) электронным ударом



Трехкратное дифференциальное сечение $\sigma^{(3)}$ вычисляется по формуле (4.4а), потенциал однократной ионизации молекулы $I = 16$ эВ, ее равновесное межъядерное расстояние $\rho = 1,4354$ а.е., и амплитуда T_{fi} для неполяризованного быстрого электрона имеет вид

$$T_{fi} = \sqrt{2} \int d\mathbf{R} \int d\mathbf{r}_1 \int d\mathbf{r}_2 \exp(i\mathbf{Q}\mathbf{R}) \chi^*(\mathbf{k}_1; \mathbf{r}_1) \times \\ \times \Phi_{2\Sigma_g^+}(\mathbf{r}_2) V \Phi_{1\Sigma_g^+}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2). \quad (4.22)$$

Потенциал V определяет взаимодействие падающего электрона и мишени H_2 при значении зарядов ядер $Z_a = Z_b = 1$:

$$V = -\frac{Z_a}{R_a} - \frac{Z_b}{R_b} + \frac{1}{r_{1p}} + \frac{1}{r_{2p}}. \quad (4.23)$$

Волновые функции $\Phi_{1\Sigma_g^+}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ и $\Phi_{2\Sigma_g^+}(\mathbf{r}_2)$, описывающие основные состояния $1\Sigma_g^+$ и $2\Sigma_g^+$ молекулы H_2 и молекулярного иона H_2^+ , взяты из вариационного расчета [91]:

$$\Phi_{1\Sigma_g^+}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = N_i \varphi(1) \varphi(2), \quad (4.24a)$$

$$\varphi(j) = \exp(-\beta_1 r_{ja} - \beta_2 r_{jb}) + \exp(-\beta_2 r_{ja} - \beta_1 r_{jb}),$$

$$\Phi_{2\Sigma_g^+}(\mathbf{r}_2) = N_f (\exp(-\alpha r_{2a}) + \exp(-\alpha r_{2b})), \quad (4.24b)$$

где $\beta_1 = 0,07112$, $\beta_2 = 1,12023$, $\alpha = 1,23$, $N_i = 0,169937$ и $N_f = 0,423547$. Волновая функция $\chi(\mathbf{k}_1; \mathbf{r}_{1a}, \mathbf{r}_{1b})$, описывающая состояние непрерывного спектра медленного испущенного электрона, выражается формулой (4.17).

На рис. 15 представлены трехкратные дифференциальные сечения ионизации атома гелия и молекулы водорода, рассчитанные при $E_s = 500$ эВ, $E_1 = 37, 74$ и 205 эВ и $\theta_s = 6^\circ$. Теоретические вычисления выполнены для атома гелия с использованием одной из разновидностей метода сильной связи каналов (ССС, convergent close coupling) [93], а для молекулы водорода — в приближениях ФВА и искаженных волн (МЗДВ, molecular three-body distorted wave) с усреднением по ориентации оси молекулы [94, 95]. В приближениях ФВА подгоночный параметр $Z_3 = Z_4$ определялся нормировкой бинарного максимума к эксперименту.

Сначала проанализируем результаты для атома гелия, представленные на рис. 15, а–в. Наблюдается хорошее согласие между экспериментом и теорией как по форме кривой распределения в целом, так и в положении бинарных пиков. Вместе с тем более детальное сравнение показывает сдвиг бинарного пика в пределах 10° от направления переданного импульса θ_Q . Эта особенность хорошо известна из исследований однократной ионизации атома

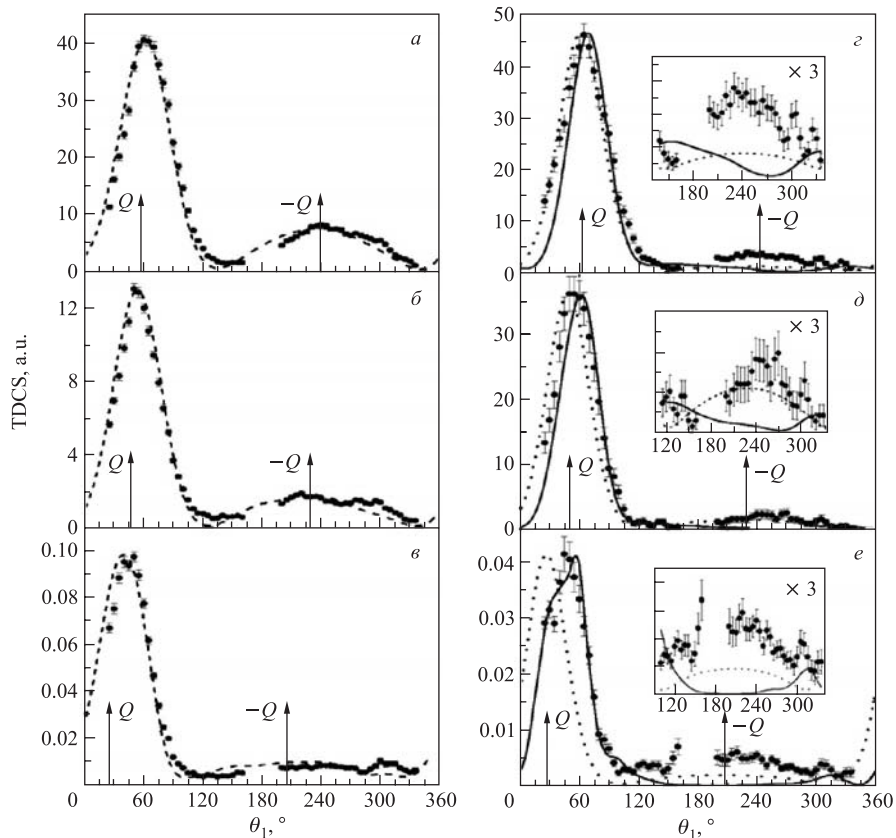


Рис. 15. Трехкратные дифференциальные сечения реакции $(e, 2e)$ на атоме гелия и молекуле H_2 как функции угла вылета испущенного электрона θ_1 (отсчитан по часовой стрелке) для атома гелия (левая колонка) и молекулы водорода (правая колонка). Штриховая линия — CCC; пунктирная — FBA; сплошная — M3DW. Экспериментальные данные взяты из работы [92] при значениях энергии $E_1 = 37$ эВ (a, z), 74 эВ (b, d) и 205 эВ (v, e). $E_s = 500$ эВ. Рисунок заимствован из работы [92]

гелия [12, 96] и отражает недостаточность приближения FBA, когда энергии испущенного и рассеянного электронов становятся сравнимы.

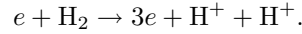
В случае молекулы водорода (рис. 15, $z-e$) сравнение эксперимента и теории менее удовлетворительно. Некоторое согласие FBA- и M3DW-расчетов наблюдается при небольших значениях энергии испущенного электрона (рис. 15, z и d), тогда как M3DW-модель лучше описывает окрестность бинарного пика при больших значениях энергии (рис. 15, e). Отметим, что

M3DW-модель предсказывает плечо в бинарном пике при $E_1 = 205$ эВ (рис. 15, *e*), наблюдать которое, однако, не удастся из-за недостаточной статистики эксперимента.

Из рис. 15 следует, что трехкратные дифференциальные сечения реакций ($e, 2e$) для атома гелия и молекулы водорода в целом похожи по форме, особенно в области бинарного пика при небольших энергиях ионизованного электрона. Это легко понять, поскольку при таких условиях реакция происходит при большом прицельном параметре (малая передача энергии) и, следовательно, оба протона молекулы воспринимаются налетающим электроном как слитые в точку с тем же зарядом, что и ядро атома гелия. Вместе с тем наблюдаются заметные отличия в области пика отдачи, т. е. в направлении, противоположном направлению переданного импульса $\theta_{-Q} = \theta_Q + \pi$, поскольку здесь играют роль механизмы, затрагивающие внутреннюю область мишени.

4.5. Двукратная ионизация молекулы водорода электронным ударом.

Наконец, обратимся к двукратной ионизации молекулы водорода (H_2) электронным ударом



Усредненное по направлениям оси молекулы пятикратное дифференциальное сечение $\bar{\sigma}^{(5)}$ выражается формулой (4.46). В этом случае потенциал двукратной ионизации $IP = 51$ эВ, расстояние между ядрами $\rho = 1,4354$ а. е., и амплитуда T_{fi} имеет вид

$$T_{fi} = \sqrt{2} \int d\mathbf{R} \int d\mathbf{r}_1 \int d\mathbf{r}_2 \times \\ \times \exp(i\mathbf{QR}) \chi_f^*(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) V \Phi_{1\Sigma_g}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2). \quad (4.25)$$

Потенциал V тот же, что и в (4.23).

Пробная трехпараметрическая волновая функция основного состояния молекулы $\Phi_{1\Sigma_g}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ несколько отличается от (4.24а) [97]:

$$\Phi_{1\Sigma_g}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = N(\phi(1)\psi(2) + \psi(1)\phi(2)), \quad (4.26)$$

где

$$\begin{aligned} \phi(j) &= x_a(j) + \epsilon x_b(j), & \psi(j) &= \epsilon x_a(j) + x_b(j), \\ x_a(j) &= \exp(-\beta\xi_j - \gamma\eta_j), & x_b(j) &= \exp(-\beta\xi_j + \gamma\eta_j), \end{aligned}$$

а также $\xi_j = (r_{ja} + r_{jb})/\rho$, $\eta_j = (r_{ja} - r_{jb})/\rho$; $\beta = 0,835$, $\gamma = 0,775$, $\epsilon = 0,137$ — вариационные параметры, $N = 0,255$ — нормировочная константа.

Несимметризованная волновая функция $\chi_f(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ конечного состояния двух медленных испущенных электронов в поле двух фиксированных

ядер представляется в виде суммы произведений двух МТСС (4.17), умноженных на так называемый гамовский фактор:

$$\chi_f(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = N(\alpha_{12})\chi(\mathbf{k}_1, \mathbf{r}_1)\chi(\mathbf{k}_2, \mathbf{r}_2),$$

$$N(\alpha_{12}) = \exp\left(-\frac{\pi\alpha_{12}}{2}\right)\Gamma(1 - i\alpha_{12}), \quad \alpha_{12} = \frac{1}{|\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2|}. \quad (4.27)$$

Обозначим также малые параметры $\varepsilon_1 = \varepsilon_{1a} = \varepsilon_{1b}$ и $\varepsilon_2 = \varepsilon_{2a} = \varepsilon_{2b}$.

Следует заметить, что учет межэлектронных корреляций в сепарированной функции конечного состояния посредством фактора Гамова — не самый лучший способ для медленных электронов, хотя и распространенный для оценок. Как правило, его введение в расчет сечения заметно его «сажает», хотя мы и получаем физически правильное поведение сечения (равенство его нулю) при $\mathbf{k}_1 = \mathbf{k}_2$.

Интегрирование по координате \mathbf{R} быстрого падающего электрона тривиально, а оставшийся 6D-интеграл преобразуется к нескольким 3D-интегралам от произведения функций типа (3.24), которые вычисляются численно. Подробности можно найти в [90], и мы их опускаем.

Выберем значения энергий падающего и испущенных электронов 612, 51 и 10 эВ соответственно, как в работе [98]. На рис. 16 представлено 5DCS (4.36) как функция углов рассеянного электрона θ_s и ориентации молеку-

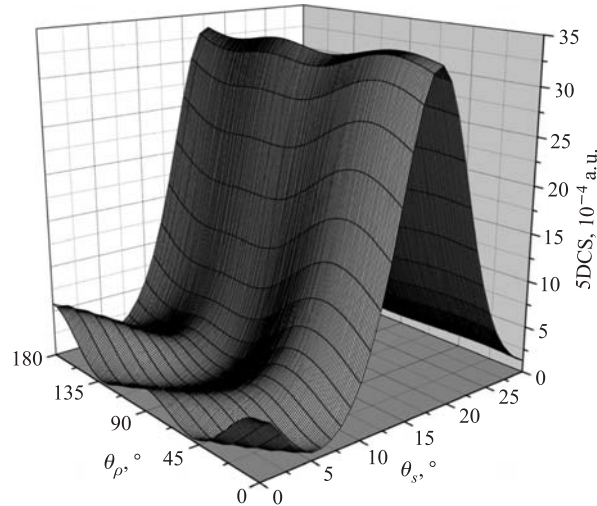


Рис. 16. Пятикратное дифференциальное сечение реакции $(e, 3e)$ как функция углов рассеянного электрона θ_s и ориентации молекулы θ_ρ при $\mathbf{k}_1 \uparrow \uparrow \mathbf{Q}$ и $\mathbf{k}_2 \downarrow \uparrow \mathbf{Q}$. Здесь $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 0$ и $E_i = 612$ эВ. Рисунок заимствован из работы [100]

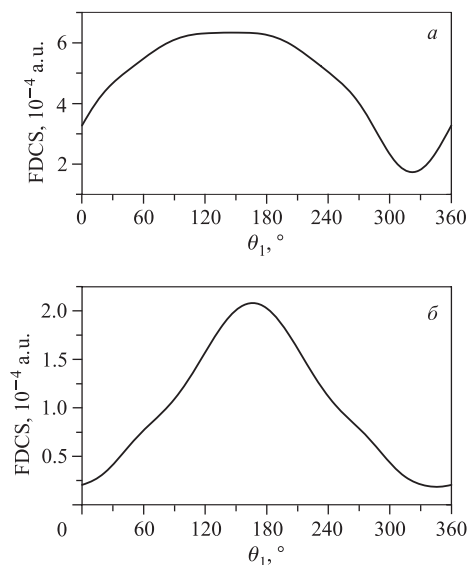


Рис. 17. Усредненные пятикратные дифференциальные сечения реакции ($e, 3e$) как функция угла испущенного электрона θ_1 при $\mathbf{k}_2 \uparrow \uparrow \mathbf{Q}$. *a*) $E_i = 5612$ эВ, $\theta_s = 0,45^\circ$ и $\theta_2 = 322^\circ$; *б*) $E_i = 612$ эВ, $\theta_s = 1,5^\circ$ и $\theta_2 = 346^\circ$. Здесь $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 0$. Рисунок заимствован из работы [100]

лярной оси θ_ρ при противоположных направлениях медленных электронов, причем \mathbf{k}_1 параллелен \mathbf{Q} . Наблюдаются два пика при $\theta_\rho = 170$ и 80° в области малых углов рассеяния $0-5^\circ$. Эти области соответствуют ориентации молекулы параллельно и перпендикулярно к переданному импульсу \mathbf{Q} . Заметим, что в выбранной геометрии эксперимента импульс отдачи \mathbf{K} параллелен \mathbf{Q} , что следует из закона сохранения импульса

$$\mathbf{Q} = \mathbf{p}_i - \mathbf{p}_s = \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 + \mathbf{K}.$$

При увеличении угла рассеяния электрона видно, что эти два пика следуют по направлениям переданного импульса, пока сечение не достигает максимума при $\theta_s = 16,5^\circ$. Можно убедиться, что при этом $\mathbf{Q} = \mathbf{k}_1$, т.е. при всех значениях ориентации молекулы θ_ρ выполняется условие $\mathbf{k}_2 = -\mathbf{K}$. Расчеты показывают, что 5DCS относительно менее чувствительно к изменению угла θ_ρ , чем угла рассеяния θ_s . Такая ситуация полностью соответствует так называемому «гребню Бете» в однократной ионизации ($e, 2e$), когда импульс отдачи мишени мал по сравнению с переданным импульсом, и ядро молекулы практически не участвует в реакции.

Теперь рассмотрим сечение FDCS (4.46), усредненное по ориентации молекулы. Здесь исследуются большое (5612 эВ) и среднее (612 эВ) значения энергии падающего электрона при тех же значениях энергии испущенных электронов 51 и 10 эВ. На рис. 17, *a* и *б* представлено FDCS как функция угла первого испущенного электрона θ_1 при $\theta_s = 0,45^\circ$ ($E_i = 5612$ эВ)

и $\theta_s = 1,5^\circ$ ($E_i = 612$ эВ), причем \mathbf{k}_2 параллелен \mathbf{Q} . Можно отметить, что противоположные направления испущенных электронов в обоих случаях обеспечивают максимум FDCS.

Оба приведенных здесь расчета носят качественный характер, поскольку, как нам известно, ($e, 3e$)-экспериментов на молекулах, тем более ориентированных, не проводилось.

4.6. Обсуждение результатов. В данном разделе мы обсуждали не столько физические результаты одно- и двукратной ионизации простейшей молекулы (положительного иона H_2^+) водорода электронным ударом, сколько возможность простого и адекватного представления сложной четырех- и пятичастичной конечной волновой функции квантовой системы. С этой целью была разработана модель искаженных волн, описывающая поведение каждого молекулярного электрона в кулоновском поле двух тяжелых центров.

Модель, в принципе, имеет два подгоночных параметра, число которых можно свести к одному, как в модели эффективных зарядов. Она неплохо работает в случае однократной ионизации и конкурирует не только с другими приближенными схемами, но и с серьезными численными расчетами в широком диапазоне углов и энергий испущенного электрона.

В случае двукратной ионизации здесь представлен вариант, не в полной мере учитывающий ee -корреляцию в конечном состоянии. Тем не менее и здесь возможности модели вполне удовлетворительны, хотя бы на качественном уровне. Так, рассмотрим экспериментальные результаты ($e, 3-1e$)-реакции на молекулярной мишени [98]. В этих экспериментах исследуется двукратная ионизация молекулы водорода, в которой детектируются «на совпадение» рассеянный и только один из испущенных электронов. С экспериментальной точки зрения такие измерения позволяют значительно поднять уровень полезного сигнала над фоном и обеспечить таким образом надежность полученных результатов. Для сравнения эксперимента (в относительной шкале) с теорией достаточно проинтегрировать FDCS по сферическому углу Ω_2 второго медленного испущенного электрона

$$\bar{\sigma}^{(4)} = \int d\Omega_2 \bar{\sigma}^{(5)}$$

и соответствующим образом «промасштабировать» эксперимент. Из рис. 18 следует, что рассмотренная модель при любом выборе ε_i воспроизводит форму экспериментального распределения с двумя максимумами и двумя минимумами, которые, однако, несколько сдвинуты относительно эксперимента. Все теоретические результаты дают доминирующий максимум сечения, близкий к направлению \mathbf{Q} при $\theta_1 = 350^\circ$. Определенные расхождения между представленной FBA-теорией и экспериментом также наблюдаются и в случае однократной ионизации, особенно при промежуточных значениях энергии

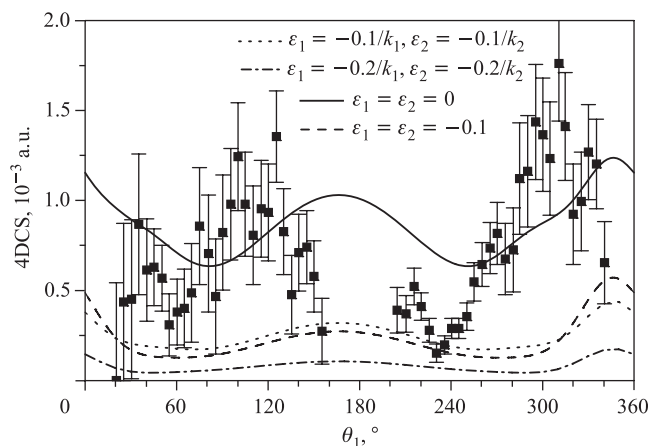


Рис. 18. Четырехкратное дифференциальное сечение реакции $(e, 3-1e)$ как функция угла испущенного электрона θ_1 при $\theta_s = 1,5^\circ$. Экспериментальные результаты заимствованы из работы [98] и масштабированы к теории при $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 0$ в области максимума бинарного пика (около 300°). $E_i = 612$ эВ, $E_1 = 51$ эВ, $E_2 = 10$ эВ. Рисунок заимствован из работы [100]

падающего электрона. При больших значениях энергии падающего электрона это рассогласование исчезает [99]. Это с определенностью указывает на необходимость SBA-расчетов в дальнейшем.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящем обзоре мы постарались осветить лишь некоторые теоретические подходы к проблеме многократной ионизации атомной или молекулярной мишени быстрой заряженной частицей. «За бортом» остались такие популярные и мощные (с вычислительной точки зрения) теоретические концепции, как метод связанных каналов (ССС), метод J -матрицы и т. п. Как было сказано во введении, «нельзя объять необъятное». Поэтому мы руководствовались идеей изложения скорее подходов и приближений, «наполненных» и понятных с точки зрения физики, нежели каких-либо «голых» численных схем, позволяющих добиться хорошего согласия с экспериментом. Конечно, и на таком пути невозможно дать полную картину рассматриваемых физических моделей. Наша цель заключалась прежде всего в освещении сути этих моделей и демонстрации их практических возможностей.

Эксперименты по многократной ионизации с измерением «на совпадение» энергий и углов вылета конечных фрагментов очень информативны, но

и в то же время очень сложны. Тем не менее в этом направлении наблюдается заметный прогресс в последние десятилетия: становятся доступными для изучения новые кинематические области, которые ранее представлялись практически недостижимыми. Это, в свою очередь, требует выхода за рамки привычных приближений (таких как ГВА).

Следует отметить, что в последнее время атомные процессы привлекают внимание как теоретиков, так и экспериментаторов из, казалось бы, такой далекой по энергиям области, как физика высоких энергий (см., например, обзор [101], посвященный проведению экспериментов в области атомной физики на циклических и линейных ускорителях). Следует также упомянуть о появлении возможности исследования процессов многократной ионизации квантовой мишени заряженной частицей в присутствии интенсивного поля лазера. Таким образом, развитие эксперимента ставит перед теорией новые задачи.

Работа выполнена в рамках темы ОИЯИ 09-6-1060-2005/2010 «Математическая поддержка экспериментальных и теоретических исследований, проводимых ОИЯИ» и при поддержке РФФИ, грант 08-01-00604-а «Математическое моделирование динамики легких атомов и молекул под действием быстрых частиц, лазерных импульсов и магнитных полей». Авторы выражают благодарность С. И. Виницкому, В. В. Серову и Б. Жулякяну за полезные замечания и стимулирующие обсуждения.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Фаддеев Л. Д.* Математические вопросы квантовой теории рассеяния для системы трех частиц // Тр. МИАН СССР. 1963. Т. 69.
2. *Меркурьев С. П., Фаддеев Л. Д.* Квантовая теория рассеяния для систем нескольких частиц. М.: Наука, 1985.
3. *Меркурьев С. П.* // ТМФ. 1977. Т. 32. С. 187;
Merkuriev S. P. // Acta Physica Austriaca. Suppl. 1981. V. XXIII. P. 65.
4. *Шаблов В. Л. и др.* // ЭЧАЯ. 2010. Т. 41. С. 607.
5. *Kheifets A. et al.* // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 1999. V. 32. P. 5047.
6. *Lahmat-Bennani A. et al.* // Phys. Rev. A. 1999. V. 59. P. 3548.
7. *Неудачин В. Г., Попов Ю. В., Смирнов Ю. Ф.* // УФН. 1999. Т. 169. С. 1111.
8. *Watanabe N. et al.* // Phys. Rev. A. 2005. V. 72. P. 032705.
9. *Петеркоп Р. К.* // Оптика и спектроскопия. 1962. Т. 13. С. 153.
10. *Петеркоп Р. К.* Теория ионизации атомов электронным ударом. Рига: Зинатне, 1975;
Peterkop R. K. Theory of Ionization of Atoms. Colorado Associated Univ. Press, 1977.
11. *Rudge M. R. H., Seaton M. J.* // Proc. Roy. Soc. London. Ser. A. 1965. V. 283. P. 262.
12. *Lahmat-Bennani A.* // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 1991. V. 24. P. 2401.
13. *Berakdar J., Lahmat-Bennani A., Dal Cappello C.* // Phys. Rep. 2003. V. 374. P. 91.

14. *Weigold E., McCarthy I. E.* Electron Momentum Spectroscopy. N. Y.: Kluwer, 1999.
15. *Coplan M. A., Moore J. H., Doering J. P.* // Rev. Mod. Phys. 1994. V. 66. P. 985.
16. *Briggs J. S., Schmidt M.* // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 2000. V. 33. P. R1.
17. *Sadeghpour H. R.* // Can. J. Phys. 1996. V. 74. P. 727.
18. *Lambropoulos P., Maragakis P., Zhang J.* // Phys. Rep. 1998. V. 305. P. 203.
19. *Лендъел В. М. и др.* Введение в теорию атомных столкновений. Львов: Выща шк., 1989.
20. *Belkić Dž., Gayet R., Salin A.* // Phys. Rep. 1979. V. 56. P. 279.
21. *Belkić Dž., Mančev I., Hanssen J.* // Rev. Mod. Phys. 2008. V. 80. P. 249.
22. *Inokuti M.* // Rev. Mod. Phys. 1971. V. 43. P. 297.
23. *Dollard J. D.* // J. Math. Phys. 1964. V. 5. P. 729.
24. *Комаров В. В., Попова А. М., Шаблов В. Л.* Динамика систем нескольких квантовых частиц. М.: Изд-во Моск. гос. ун-та, 1996.
25. *Шаблов В. Л., Билык В. А., Попов Ю. В.* // Фундаментальная и прикладная математика. 1998. Т. 4. С. 1207.
26. *Shablov V. L., Bilyk V. A., Popov Yu. V.* // Many-Particle Spectroscopy of Atoms, Molecules, Clusters, and Surfaces / Eds. Berakdar J. and Kirshner J. N. Y., 2001. P. 71.
27. *Erhardt H. et al.* // Phys. Lett. A. 1985. V. 110. P. 92.
28. *Schlemmer P. et al.* // Phys. Rev. Lett. 1989. V. 63. P. 252.
29. *Popov Yu. V., Dal Cappello C., Kouzakov K.* // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 1996. V. 29. P. 5901.
30. *Hylleraas E. A.* // Zeit. Physik. A. 1929. V. 54. P. 347.
31. *Clementi E., Roetti C.* // At. Data Nucl. Data Tables. 1974. V. 14. P. 177.
32. *Eckart C.* // Phys. Rev. 1930. V. 36. P. 878.
33. *Chandrasekhar S.* // Astrophys. J. 1944. V. 100. P. 176.
34. *Chuluunbaatar O., Puzynin I. V., Vinitzky S. I.* // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 2001. V. 34. P. L425.
35. *Mitroy J., McCarthy I. E., Weigold E.* // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 1985. V. 18. P. 4149.
36. *Bohnam R. A., Kohl D. A.* // J. Chem. Phys. 1966. V. 45. P. 2471.
37. *Hood S. T. et al.* // Phys. Rev. A. 1973. V. 8. P. 2494.
38. *Leung K. T.* // Theoretical Models of Chemical Bonding. Part. 3 / Ed. Maksic Z. B. Berlin, 1991.
39. *Lerner N. et al.* // Can. J. Phys. 1996. V. 74. P. 748.
40. *Watanabe N. et al.* // Phys. Rev. A. 2008. V. 77. P. 032725.
41. *Tweed R.* // Z. Phys. D. 1992. V. 23. P. 309.
42. *Попов Ю. В. и др.* // ЖЭТФ. 2002. Т. 122. С. 717.
43. *Novikov N. V., Teplova Ya. A.* Charge-Changing Cross Sections in Ion-Atom Collisions. <http://cdfc.sinp.msu.ru/services/cccs/cccs.htm>
44. *Carlson T. A., Krause M. A.* // Phys. Rev. 1965. V. 140. P. 1057.
45. *Mergel V. et al.* // Phys. Rev. Lett. 2001. V. 86. P. 2257.
46. *Schmidt-Böcking H. et al.* // Rad. Phys. Chem. 2003. V. 68. P. 41.

47. Schmidt-Böcking H. et al. // Many-Particle Quantum Dynamics in Atomic and Molecular Fragmentation / Eds.: Ullrich J. and Shevelko V. P. Springer, 2003.
48. Schöffler M. et al. // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 2005. V. 38. P. L123.
49. Houamer S. et al. // Nucl. Instr. Meth. B. 2009. V. 267. P. 802.
50. Nesbet R. K., Watson R. E. // Phys. Rev. 1958. V. 110. P. 1073.
51. Houamer S., Popov Yu. V., Dal Cappello C. // Phys. Rev. A. 2010. V. 81. P. 032703.
52. Godunov A. L. et al. // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 2006. V. 39. P. 987.
53. Pàalinkàs J. et al. // Phys. Rev. Lett. 1989. V. 63. P. 2464.
54. Alston S. // Phys. Rev. A. 1990. V. 42. P. 331.
55. Lewis R. R., Jr. // Phys. Rev. 1956. V. 102. P. 537.
56. Brauner M., Briggs J. S., Klar H. // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 1989. V. 22. P. 2265.
57. Joulakian B., Dal Cappello C. // Phys. Rev. A. 1993. V. 47. P. 3788.
58. Lahmam-Bennani A. et al. // Phys. Rev. A. 1999. V. 59. P. 3548.
59. Kornberg M. A., Miraglia J. E. // Phys. Rev. A. 1993. V. 48. P. 3714.
60. Kato T. // Commun. Pure Appl. Math. 1957. V. 10. P. 151.
61. Chuluunbaatar O. et al. // Phys. Rev. A. 2006. V. 74. P. 014703.
62. Le Sech C. // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 1997. V. 30. P. L47.
63. Ancarani L. U., Montagnese T., Dal Cappello C. // Phys. Rev. A. 2004. V. 70. P. 012711.
64. Bohr N. // Phil. Mag. 1913. V. 25. P. 10; 1915. V. 30. P. 581.
65. Bethe H. // Ann. Phys. 1930. V. 5. P. 325; Z. Phys. 1932. V. 76. P. 293.
66. Fano U. // Phys. Rev. 1954. V. 95. P. 1198.
67. Almeida D. P., Fontes A. C., Godinho C. F. L. // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 1995. V. 28. P. 3335.
68. Lecointre J., Jureta J. J., Defrance P. // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 2008. V. 41. P. 095204.
69. McGuire J. H. et al. // Phys. Rev. A. 1973. V. 7. P. 973.
70. Roy A. C., Das A. K., Sil N. C. // Phys. Rev. A. 1981. V. 23. P. 1662.
71. Sidorovich V. A. // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 1981. V. 14. P. 4805.
72. Defrance P. et al. // J. Phys. A: Math. Theor. 2009. V. 42. P. 025202.
73. Malcherek A. W., Briggs J. S. // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 1997. V. 30. P. 4419; Malcherek A. W., Rost J.-M., Briggs J. S. // Phys. Rev. A. 1997. V. 55. P. R3979.
74. Berakdar J. // Phys. Lett. A. 1996. V. 220. P. 237; 2000. V. 277. P. 35; Phys. Rev. A. 1997. V. 55. P. 1994.
75. Berakdar J. // Phys. Rev. A. 1996. V. 54. P. 1480.
76. Zaytsev S. A. // J. Phys. A: Math. Theor. 2008. V. 41. P. 265204.
77. Zaytsev S. A. // J. Phys. A: Math. Theor. 2009. V. 42. P. 015202.
78. Wang Y. D., McGuire J. H., Rivarola R. D. // Phys. Rev. A. 1989. V. 40. P. 3673.
79. Corchs S. E. et al. // Phys. Rev. A. 1993. V. 47. P. 201.
80. Corchs S. E. et al. // Physica Scripta. 1994. V. 50. P. 469.
81. Takahashi M. et al. // J. Electron Spectroscopy and Related Phenomena. 2004. V. 141. P. 83.

82. *Joulakian B. et al.* // Phys. Rev. A. 1996. V. 54. P. 1473.
83. *Serov V. V. et al.* // Phys. Rev. A. 2001. V. 63. P. 062711.
84. *Serov V. V. et al.* // Phys. Rev. A. 2002. V. 65. P. 062708.
85. *Serov V. V., Joulakian B. B.* // Phys. Rev. A. 2009. V. 80. P. 062713.
86. *Weck P. F. R.* PhD Thesis. Univ. Metz, France, 2001.
87. *Chuluunbaatar O. et al.* // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 2004. V. 37. P. 2607.
88. *Грибов Л. А.* Введение в молекулярную спектроскопию. М.: Наука, 1976.
89. *Chen G. et al.* // Adv. At. Mol. Opt. Phys. 2005. V. 51. P. 93.
90. *Чулуунбаатар О.* Дис... д-ра физ.-мат. наук. Дубна: ОИЯИ, 2010.
91. *Berencz F.* // Acta Phys. Acad. Sc. Hung. 1957. V. 6. P. 423.
92. *Staicu Casagrande E. M. et al.* // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 2008. V. 41. P. 025204.
93. *Bray I. et al.* // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 2002. V. 35. P. R117.
94. *Gao J. F., Madison D. H., Peacher J. L.* // Phys. Rev. A. 2005. V. 72. P. 020701.
95. *Gao J. F., Madison D. H., Peacher J. L.* // J. Chem. Phys. 2005. V. 123. P. 204314.
96. *Ehrhardt H. et al.* // Phys. D. 1986. V. 1. P. 3.
97. *Mueller C., Eyring H.* // J. Chem. Phys. 1951. V. 19. P. 1495.
98. *Lahmat-Bennani A., Duguet A., Roussin S.* // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 2002. V. 35. P. L59.
99. *Weck P. F. et al.* // Phys. Rev. A. 2002. V. 66. P. 012711.
100. *Chuluunbaatar O. et al.* // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 2008. V. 41. P. 015204.
101. *Артемов А. С.* // ЭЧАЯ. 2008. Т. 39. С. 735.