

P4-2002-134

О. Чулуунбаатар*, Ю. В. Попов*, С. И. Веницкий

**ФАКТОРИЗОВАННАЯ КОРРЕЛИРОВАННАЯ
ВАРИАЦИОННАЯ ФУНКЦИЯ В ПРИМЕНЕНИИ
К РАСЧЕТАМ $(e, 2e)$ - И $(e, 3e)$ -РЕАКЦИЙ
ИОНИЗАЦИИ АТОМА ГЕЛИЯ**

Направлено в журнал «Ядерная физика»

*НИИЯФ МГУ

1 Введение

Для практических расчетов дифференциальных сечений ($e, 2e$)- и ($e, 3e$)- реакций, которые дают возможность получить сравнительно прямую информацию о волновой функции мишени, обычно используют многопараметрические пробные функции атома, неплохо описывающие экспериментальные данные [1]. Однако эти функции не связаны прямым образом с асимптотиками формальных решений и корреляция электронов в атоме учитывается подгонкой значений вариационных параметров, что затрудняет спектроскопическую интерпретацию и построение физической модели некоторых экспериментов [2, 3]. Поэтому в данной работе сгенерирована 12-компонентная однопараметрическая вариационная функция, адекватно учитывающая корреляцию электронов и согласованная с лидирующим экспоненциальным членом в асимптотическом разложении формального решения ("точной" волновой функции мишени).

В предыдущей работе [4] был предложен метод генерации семейства функций связанных состояний атома гелия. Напомним, что функция атома гелия представима в виде

$$\tilde{\Phi}(s, v, w) = \sum_{i,j,k=0} C_{i,j,2k} U_i(s) V_j(v) W_{2k}(w), \quad (1)$$

где

$$s = r_1 + r_2, \quad v = \frac{r_{12}}{r_1 + r_2}, \quad w = \frac{r_1 - r_2}{r_{12}},$$

$$U_i(s) = N_i e^{-\alpha_i s} L_i^5(2\alpha_i s), \quad V_j(v) = \bar{N}_j P_j^{(0,2)}(2v - 1), \quad W_{2k}(w) = \hat{N}_{2k} P_{2k}^{(1,1)}(w), \quad (2)$$

и

$$N_i = \sqrt{\frac{i!(2\alpha_i)^6}{(i+5)!}}, \quad \bar{N}_j = \sqrt{2j+3}, \quad \hat{N}_{2k} = \sqrt{\frac{(k+1)(4k+3)}{2(2k+1)}}. \quad (3)$$

константы нормировки. В формулах (1) - (3) L_i^5 - обобщенные полиномы Лагерра, $P_j^{(q,t)}$ - полиномы Якоби и α_i - вариационные параметры. Выбирая единственный вариационный параметр α , имеем ортогональный набор базисных функций, нормированных условиями

$$\int_0^\infty s^5 U_n(s) U_m(s) ds = \delta_{n,m}, \quad \int_0^1 v^2 V_n(v) V_m(v) dv = \delta_{n,m},$$

$$\int_0^1 (1-w^2) W_{2n}(w) W_{2m}(w) dw = \delta_{n,m}.$$

Размер базиса этой функции определяется выбором вариационного параметра. Для функции, которую мы обозначаем аббревиатурой CPV, параметр $\alpha = 1.704$. В точной волновой функции основного состояния гелия $\alpha = \sqrt{E_0^{He}}$ [2] и приближенному значению энергии $E_0^{He} = 2.903$, используемому в практике расчетов ($e, 2e$)- и ($e, 3e$)- процессов [1], отвечает как раз величина $\alpha = 1.704$.

Коэффициенты разложения функции CPV приобретают следующие значения:

$$\begin{aligned}
 C_{2,0,0} &= 1.2527(-3), & C_{2,0,2} &= 2.4228(-3), & C_{2,1,0} &= -5.4914(-4), \\
 C_{2,1,2} &= 1.0809(-3), & C_{1,0,0} &= -3.5932(-2), & C_{1,0,2} &= -2.2368(-2), \\
 C_{1,1,0} &= -2.3084(-2), & C_{1,1,2} &= -9.6204(-3), & C_{0,0,0} &= 1.5613(-0), \\
 C_{0,0,2} &= 7.9653(-2), & C_{0,1,0} &= 1.6744(-1), & C_{0,1,2} &= 3.3650(-2).
 \end{aligned}
 \tag{4}$$

Функция CPV нормирована на шестимерный объем условием

$$2\pi^2 \int_0^\infty s^5 ds \int_0^1 v^2 dv \int_0^1 (1 - v^2 w^2) dw \tilde{\Phi}^2(s, v, w) = 1.
 \tag{5}$$

Для расчетов использовалась симметричная компланарная геометрия экспериментов, когда в конечном состоянии образуются два быстрых электрона с равными энергиями и углами разлета относительно траектории налетающего на атом быстрого электрона (т.н. бинарная (e,2e)- или (e,3e)- реакция, схематически представленные на рис. 1 и 2). Как известно, такая геометрия позволяет применить модель квазиупругого выбивания электрона электроном из мишени, которая в свою очередь дает наиболее прямую информацию о плотности одно-электронного либо двухэлектронного распределения в мишени [1, 5].

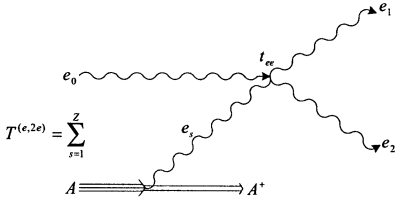


Рис. 1: Амплитуда квазиупругого (e,2e)- процесса в форме диаграммы

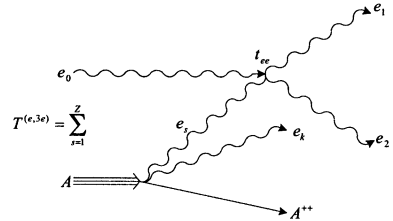


Рис. 2: Амплитуда квазиупругого (e,3e)- процесса в форме диаграммы

2 Теория

Приведем основные формулы для вычисления дифференциальных сечений реакций $He(e, 2e)He^+$ и $He(e, 3e)He^{++}$ в модели квазиупругого выбивания. Используются атомные единицы. Напомним, что (E_0, \vec{p}_0) , (E_1, \vec{p}_1) , (E_2, \vec{p}_2) , (E_k, \vec{k}) – соответственно энергии и импульсы падающего, рассеянного, первого и второго испущенных электронов.

В случае (e,2e)- реакции законы сохранения энергии и импульса принимают вид

$$\begin{aligned}
 E_{total} &= E_0 + E_0^{He} = E_1 + E_2 + E_0^{He+}, \\
 \vec{p}_0 &= \vec{p}_1 + \vec{p}_2 + \vec{q}.
 \end{aligned}
 \tag{6}$$

В (6) энергия $E_0^{He} = -2.903$, $E_0^{He^+} = -2.0$. Полезно ввести также передачу энергии $\Delta E = E_0 - E_1$ и импульса $\vec{Q} = \vec{p}_0 - \vec{p}_1$ от налетающего электрона атому. Трехкратное дифференциальное сечение квазиупругого ($e, 2e$) процесса (далее TDCS), представленного диаграммой (рис. 1), имеет вид

$$\frac{d^3\sigma}{dE_2 d\Omega_1 d\Omega_2} = f(x)C(y) \frac{p_1 p_2}{\pi^3 Q^4 p_0} |F_0(q)|^2 \left(\frac{1}{2Ry} \right), \quad (7)$$

где

$$F_0(q) = (4\pi)^2 \int_0^\infty r_1^2 r_2^2 j_0(qr_1) \varphi_0(r_2) \Phi_0(r_1, r_2) dr_1 dr_2, \quad (8)$$

$\vec{q} = \vec{p}_0 - \vec{p}_1 - \vec{p}_2$ – импульс отдачи иона.

$$f(x) = \frac{2\pi x}{e^{2\pi x} - 1}, \quad x = |\vec{p}_1 - \vec{p}_2|^{-1} \quad (9)$$

$$C(y) = 1 + y^4 - y^2 \cos(2x \ln y), \quad y = \frac{|\vec{p}_0 - \vec{p}_1|}{|\vec{p}_0 - \vec{p}_2|}, \quad (10)$$

$\varphi_0(r) = \sqrt{\frac{8}{\pi}} \exp(-2r)$ – волновая функция основного состояния иона He^+ .

В случае симметричной кинематики $|\vec{p}_1| = |\vec{p}_2| = p$ и углы разлета электронов $\theta_1 = \theta_2 = \theta$. Из (6), (9) и (10) при этом следует

$$p^2 = E_0 + E_0^{He} - E_0^{He^+}, \quad y = 1, \quad C(y) = 1, \quad x = \frac{1}{2p \sin \theta}, \quad (11)$$

$$Q^2 = |\vec{p}_0 - \vec{p}_1|^2 = p_0^2 + p^2 - 2p_0 p \cos \theta, \quad q = |p_0 - 2p \cos \theta|.$$

В случае ($e, 3e$)- реакции законы сохранения энергии и импульса принимают вид

$$E_{total} = E_0 + E_0^{He} = E_1 + E_2 + E_k, \quad (12)$$

$$\vec{p}_0 = \vec{p}_1 + \vec{p}_2 + \vec{q} + \vec{k}.$$

Пятикратное дифференциальное сечение квазиупругого ($e, 3e$)- процесса (далее 5DCS), представленного диаграммой (рис. 1), имеет вид

$$\frac{d^5\sigma}{dE_2 dE_k d\Omega_1 d\Omega_2 d\Omega_k} = \frac{8p_1 p_2 k}{(2\pi)^6 p_0 Q^4} f(x)C(y) |F(\vec{\Delta}, \vec{k})|^2 \left(\frac{1}{2Ry} \right)^2 \quad (13)$$

где

$$F(\vec{\Delta}, \vec{k}) = \int \int d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 e^{i\vec{\Delta}\vec{r}_1} \varphi^{-*}(\vec{r}_2, \vec{k}) \Phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2), \quad (14)$$

$$\vec{\Delta} = \vec{p}_0 - \vec{p}_1 - \vec{p}_2 = \vec{k} + \vec{q},$$

$\varphi^{-}(\vec{k}, \vec{r})$ – кулоновская функция движения электрона в поле иона He^{++} .

Выражения (14) можно упростить, если воспользоваться разложением входящих в него векторных величин по парциальным волнам, в результате чего

$$F(\vec{\Delta}, \vec{k}) = \sum_{l=0}^{l_{max}} (2l+1) e^{-i\delta_l} P_l(\cos(\angle(\vec{\Delta}, \vec{k}))) F_l(\Delta, k), \quad (15)$$

где

$$F_l(\Delta, k) = (4\pi)^2 \int_0^\infty \int_0^\infty r_1^2 r_2^2 j_l(\Delta r_1) R_l(k, r_2) \Phi_l(r_1, r_2) dr_1 dr_2, \quad (16)$$

В формулах (15) и (16) кулоновская парциальная функция

$$R_l(k, r) = C_l(\eta)(kr)^l e^{-ikr} M(l+1-i\eta, 2l+2, 2ikr) = R_l^*(k, r), \quad (17)$$

в которой

$$\exp(2i\delta_l) = \frac{\Gamma(l+1+i\eta)}{\Gamma(l+1-i\eta)}, \quad C_l(\eta) = \frac{\sqrt{l^2 + \eta^2}}{l(2l+1)} C_{l-1}, \quad C_0(\eta) = \sqrt{\frac{2\pi\eta}{e^{2\pi\eta} - 1}}, \quad \eta = -\frac{2}{k}.$$

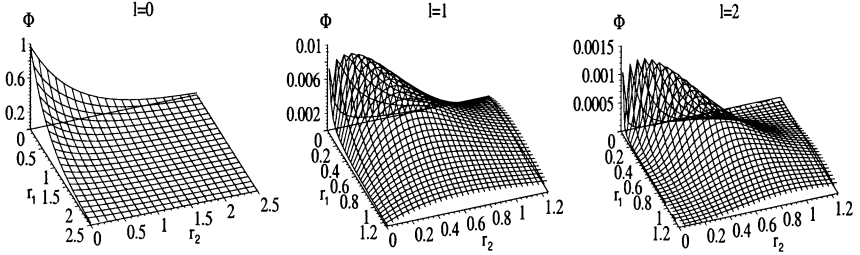


Рис. 3: Парциальные компоненты $\Phi_l(r_1, r_2)$ однопараметрической вариационной функции (1) основного состояния атома гелия при значениях орбитального момента электрона $l=0,1,2$

Если сечение (13) проинтегрировать по $d\Omega_k$, то в результате получим четырехкратное дифференциальное сечение (4DCS) т.н. (e,3-1e)- процесса, в котором не измеряется телесный угол медленного электрона:

$$\frac{d^4\sigma}{dE_2 dE_k d\Omega_1 d\Omega_2} = f(x)C(y) \frac{p_1 p_2 k}{2\pi^5 Q^4 p_0} \sum_{l=0}^{l_{max}} (2l+1) |F_l(\Delta, k)|^2 \left(\frac{1}{2Ry} \right)^2. \quad (18)$$

Как следует из (8) и (14), в выражения для матричных элементов $F(q)$ и $F(\vec{\Delta}, \vec{k})$ входят парциальные компоненты волновой функции гелия, которые можно получить из (1) следующим образом. Пусть

$$\tilde{\Phi}(s, v, w) = \Phi(r_1, r_2, \cos\theta_{12}) = \sum_{l=0}^{l_{max}} (2l+1) \Phi_l(r_1, r_2) P_l(\cos\theta_{12}), \quad (19)$$

тогда

$$\Phi_l(r_1, r_2) = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 \tilde{\Phi}(s, v, w) P_l(y) dy. \quad (20)$$

В (19) и (20) $P_l(y)$ - полиномы Лежандра.

Парциальные функции $\Phi_l(r_1, r_2)$ при $l = 0, 1, 2$, изображены на рис. 3 и табулированы в форме фортрановских подпрограмм.

3 Результаты и их обсуждение

Помимо CPV- функции мы использовали в расчетах для сравнения еще две пробные функции. Это одна из лучших функций Бонама и Коля (BK) [6]:

$$\Phi^{BK}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = N [\phi(a, b)(1 + Ar_{12} \exp(-\lambda r_{12})) + \phi(c, d)(B + C \exp(-\mu r_{12})) + D\phi(e, f)], \quad (21)$$

где $\phi(a, b) = \exp(-ar_1) \exp(-br_2) + \exp(-ar_2) \exp(-br_1)$, и вариационные параметры имеют следующие значения:

$$\begin{aligned} N &= 0.740417, \quad a = 1.3511, \quad b = 2.2541, \quad A = 0.1190, \quad \lambda = 1.0956, \\ c &= 1.5596, \quad d = 1.7065, \quad B = 0.6153, \quad C = -0.7787, \\ \mu &= 0.3481, \quad e = 2.0741, \quad f = 3.9535, \quad D = 0.0927, \end{aligned}$$

Энергия связи $E_0^{He}(BK) = -2.903$.

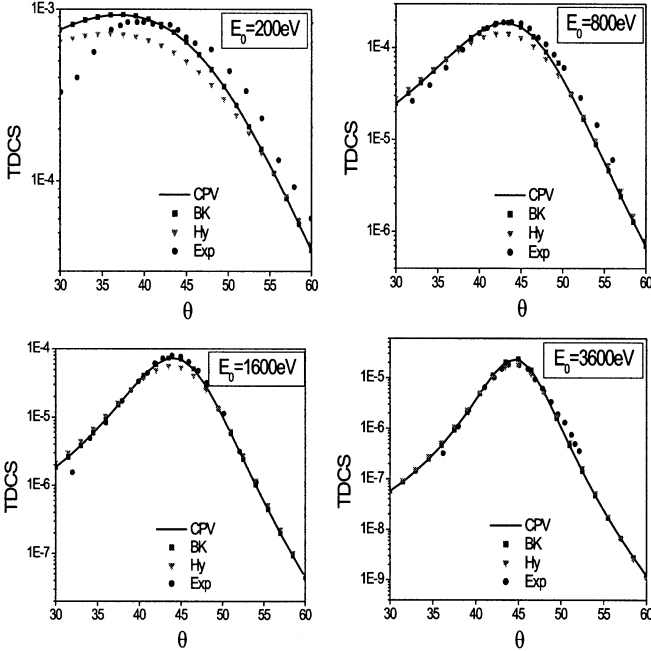


Рис. 4: Сечение TDCS для $(e, 2e)$ - ионизации гелия в симметричной компланарной геометрии. Экспериментальные точки взяты из работы [7]

Кроме того, была использована простейшая однокомпонентная функция Хиллерааса (Hy) [7], принадлежащая семейству (1),

$$\Phi^{Hy}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{\alpha^3}{\pi} \exp(-\alpha s) = \frac{\alpha^3}{\pi} \exp(-\alpha(r_1 + r_2)), \quad (22)$$

при значении вариационного параметра $\alpha = 27/16$, что соответствует энергии $E_0^{He}(Hy) = -2.848$.

На рис. 4 представлены TDCS (7) как функции угла разлета электронов для всех трех пробных функций. Как видно из рисунка, для $E_0 \geq 1.6$ кэВ все функции дают результаты, совпадающие между собой и с экспериментом. В этом нет ничего удивительного, поскольку, как следует из (8), в формировании сечения участвует только s -парциальная волна функции гелия, спроектированная на очень компактную функцию иона He^+ . Все интересные корреляционные эффекты, отличающие пробные функции, на формфактор $F_0(q)$ не влияют.

Следует отметить, что CPV при всех представленных начальных энергиях электрона практически везде совпадает с ВК, хотя по форме они выглядят разными. Функция ВК включает сильную радиальную корреляцию, означающую следующее: электрон 1 "видит" заряд ядра $Z = 2$ и занимает соответствующую орбиталь в атоме, тогда как электрон 2 "видит" уже эффективный заряд $Z = 1$ и занимает более высокую орбиталь. У функции CPV экспоненциальный член симметричен по r_1 и r_2 , так что тот же эффект радиальной корреляции достигается за счет угловых переменных v и w .

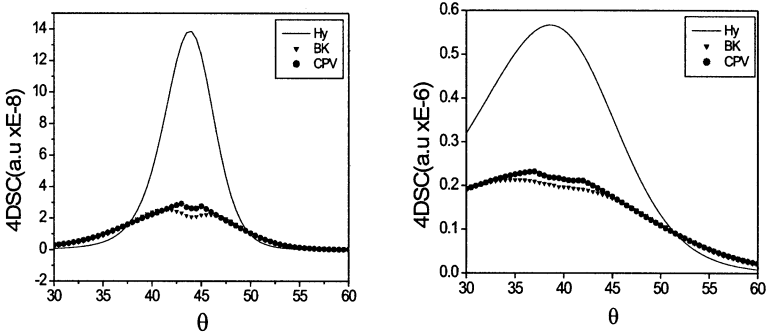


Рис. 5: Сечение 4DCS для $(e, 3-1e)$ ионизации гелия в симметричной компланарной геометрии при $E_0 = 3000$ эВ, $E_k = 20$ эВ и $E_0 = 500$ эВ, $E_k = 1$ эВ

На рис. 5 представлено сечение 4DCS (экспериментов в данной области углов и энергий пока нет, но проведение таких экспериментов планируется в настоящее время). Здесь мы уже видим существенное влияние радиальных корреляций, поскольку, как следует из (14), функция $\Phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ здесь проектируется

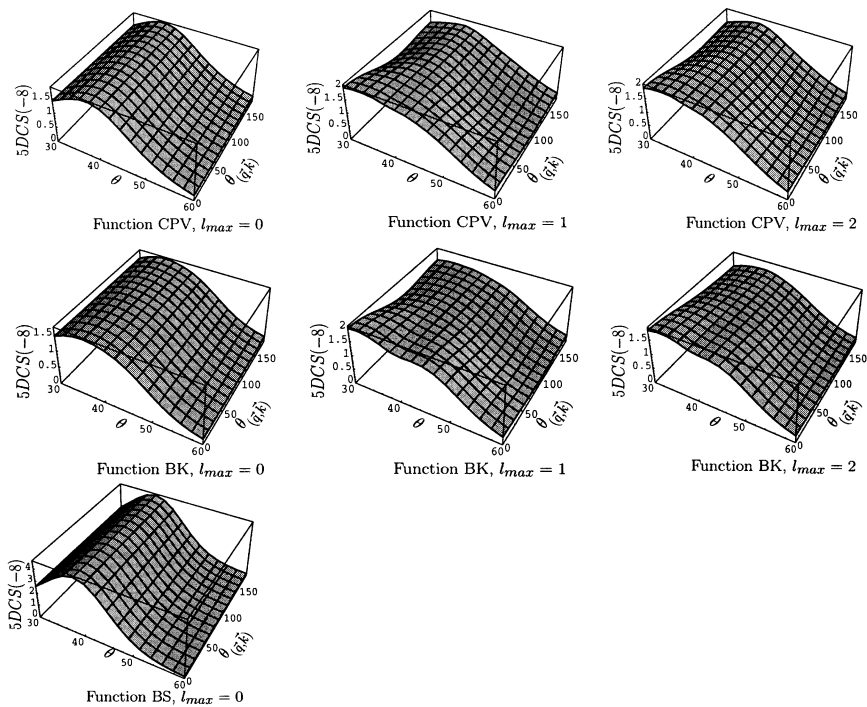


Рис. 6: Сечение 5DCS для (e, 3e) ионизации гелия в симметричной компланарной геометрии. $E_0 = 500$ эВ, $E_k = 1$ эВ. Показаны относительные вклады отдельных парциальных компонент $l_{max} = 0, 1, 2$ волновой функции (19) атома гелия в сечение ионизации

уже на собственную функцию континуума иона He^+ . Однако и в этом случае функции CPV и BK дают практически совпадающие результаты. На рис. 6 представлены трехмерные распределения сечения 5DCS как функции угла разлета θ и угла вылета медленного электрона θ_k относительно вектора \vec{p}_0 . Вдоль оси θ , как и на рис. 5, мы видим эффект радиальных корреляций, тогда как вдоль оси θ_k наблюдается эффект угловых корреляций, т.е. виден вклад высших парциальных волн функции гелия (в основном p-волны), который у большинства пробных функций не превышает 1 – 2%. Действительно, как следует из (15), если нет высших парциальных волн, а присутствует лишь s-волна ($l = 0$), то зависимость от угла между векторами $\vec{\Delta}$ (коллинеарен \vec{p}_0 в случае симметричной кинематики) и \vec{k} отсутствует, и мы видим вдоль оси θ_k прямую линию. Отклонение от этой прямой визуально характеризует угловую корреляцию электронов в атоме. И сожалению, такие эксперименты пока тоже отсутствуют в силу их сложности.

В заключение можно сформулировать следующие положения, подчеркивающие ценность функции CPV основного состояния атома гелия для физических приложений:

- функция CPV не имеет ни одного вариационного параметра, поскольку он фиксируется равным 1.704, что соответствует точности энергии $E_0^{He} = -2.903$, достаточной для практических расчетов в теории рассеяния, и определяет размер базиса в количестве всего 12 членов;

- функция CPV имеет правильный показатель экспоненты $\alpha = \sqrt{-E_0^{He}}$, соответствующий асимптотике точной волновой функции атома гелия;

- функция CPV составлена на основе ортонормированного базиса, что удобно для расчетов;

- практически полное совпадение расчетов широкого круга физических процессов, где в той или иной форме возможно прямое измерение импульсного (фурье) представления волновой функции атома с использованием функции CPV и других лучших вариационных функций, указывает на достаточность ее базиса для решения и других задач рассеяния.

Работа поддержана грантами РФФИ № 00-01-00617, № 00-02-16337.

Список литературы

- [1] V.G. Neudatchin, Yu.V. Popov and Yu.F. Smirnov. *Physics Uspekhi* **42**, 1017 (1999)
- [2] Yu.V. Popov and L.U. Ancarani. *Phys. Rev. A* **62**, 42702 (2000)
- [3] Popov Yu.V., Chuluunbaatar O., Vinitzky S.I. et al., Preprint JINR, E4-2002-140, Dubna, 2002.
- [4] O. Chuluunbaatar, I.V. Puzynin, and S.I. Vinitzky. *J. Phys. B* **34**, L425 (2001)
- [5] Yu.V. Popov, C.D. Cappello and K. Kuzakov. *J. Phys. B* **29**, 5901 (1996)
- [6] R.A. Bonham and D.A. Kohl, *J. Chem. Phys.* **45**, 2471 (1966)
- [7] H.A. Bethe and E.E. Salpeter, "Quantum mechanics of one and two electron atoms", Springer-Verlag, Berlin, 1957.
- [8] A. Giardini-Guidoni, R. Camilloni, G. Stefani in "Coherence and correlation in atomic collisions" Eds H. Kleinpoppen and J. M. Williams, Plenum Publ. Corp., NY, 1979, p. 13

Получено 10 июня 2002 г.

Чулуунбаатар О., Попов Ю. В., Виницкий С. И.
Факторизованная коррелированная вариационная функция
в применении к расчетам $(e, 2e)$ - и $(e, 3e)$ -реакций ионизации
атома гелия

P4-2002-134

Факторизованная вариационная функция, учитывающая корреляции электронов в атоме, анонсированная ранее [3], применена для расчетов дифференциальных сечений процессов ударной однократной и двукратной ионизации основного состояния атома гелия быстрыми электронами. Сгенерирован оптимальный однопараметрический набор ортогональных базисных функций, обеспечивающий уверенное совпадение с известными экспериментами по электронной спектроскопии гелия и с вычислениями, использующими альтернативные многопараметрические пробные функции.

Работа выполнена в Лаборатории информационных технологий и в Лаборатории теоретической физики им. Н. Н. Боголюбова ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна, 2002

Перевод авторов

Chuluunbaatar O., Popov Yu. V., Vinitsky S. I.
Uncoupled Correlated Variational Function in $(e, 2e)$ and $(e, 3e)$
Calculations for Ionization of the Helium Atom

P4-2002-134

The uncoupled correlated variational function of the helium atom ground state declared earlier is examined in calculations of differential cross sections of fast electron impact single and double binary ionization processes. An optimal one-parametric set of orthogonal basic functions is generated to provide the considerable coincidence with the experiment and calculations with the alternative multiparametric trial wave functions.

The investigation has been performed at the Laboratory of Information Technologies and at the Bogoliubov Laboratory of Theoretical Physics, JINR.

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna, 2002

Редактор *М. И. Зарубина*
Макет *Е. В. Сабавой*

ЛР № 020579 от 23.06.97.

Подписано в печать 26.06.2002.

Формат 60 × 90/16. Бумага офсетная. Печать офсетная.

Усл. печ. л. 0,5. Уч.-изд. л. 0,63. Тираж 360 экз. Заказ № 53395.

Издательский отдел Объединенного института ядерных исследований
141980, г. Дубна, Московская обл., ул. Жолио-Кюри, 6.