

[9] Литинская Л. Л., Векслер А. М., Оглобина Т. А., Лейкина М. И. // Биофизика. 1988. 303, № 1. С. 236. [10] Волькенштейн М. В. Биофизика. М., 1981. Гл. 10. [11] Кагава Я. Биомембраны. М., 1985. [12] Рубин А. Б. Биофизика. М., 1987. Кн. 2. [13] Гианик Т., Масарикова Д., Жорина Л. В., Порошина М. Ю., Черняева Е. Б. // Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 1992. 33, № 1. С. 59. [14] Böhmig R. M., Morstyn G. // Cancer Res. 1985. 45. P. 5328. [15] Степанова Н. В., Черняева Е. Б. // Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 1989. 30, № 6. С. 23.

Поступила в редакцию  
20.06.91

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3, ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ. 1992. Т. 33, № 1

## АТОМНАЯ И ЯДЕРНАЯ ФИЗИКА

УДК 539.17.015

### О РОЛИ ДВОЙНЫХ СТОЛКНОВЕНИЙ В ( $e, 2e$ ) ПРОЦЕССАХ

Ю. В. Попов, Н. М. Кузьмина

(НИИЯФ)

Рассматривается область эффективности второго борновского приближения (SBA) в теории ионизации атомов быстрыми электронами. Построена модель (ASBA) для приближенных вычислений вклада SBA в дифференциальное сечение  $d^3\sigma$ . Расчеты сравниваются с большим массивом экспериментальных значений  $d^3\sigma$  в реакции  $H(e, 2e)H^+$ .

1. Понятие двойных столкновений тесно связано со вторым борновским приближением в теории рассеяния (SBA), введенным в практику расчетов ионизационных процессов Джоашеном и соавторами [1, 2]. Если бы электроны взаимодействовали между собой и ядром посредством короткодействующих сил, то практически все двойные, тройные и т. д. соударения происходили бы внутри объема атома, а вылетевшие наружу электроны были бы свободными частицами, за исключением случаев очень специфических кинематик. Однако заряженные частицы продолжают взаимодействия и вне объема атома, что приводит к вполне наблюдаемым эффектам [3]. Такое взаимодействие называют послестолкновительным. Эффект послестолкновительного взаимодействия присутствует и в расчетах во втором борновском приближении, поэтому было件 полезно изучить область применимости SBA и роль двойных столкновений, т. е. повторных взаимодействий налетающего электрона с электроном или ядром мишени, происходящих внутри атома, как это наблюдается в случае короткодействующих сил. Этому и посвящена настоящая заметка.

2. Пусть гамильтониан трехчастичной системы (ограничимся для простоты атомом водорода) имеет вид

$$H = h_{10} + h_{20} + V_1 + V_2 + V_{12} = H_0 + H_{int}. \quad (1)$$

В координатном представлении (в атомных единицах, где  $\hbar = m_e = e = 1$ )

$$h_{10} = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial r_1^2}, \quad V_i = -\frac{1}{r_i}; \quad V_{12} = \frac{1}{|r_1 - r_2|}.$$

Уравнение Шрёдингера (VIII)

$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle, \quad (2)$$

где  $E$  — полная энергия ( $e, 2e$ )-столкновения, и в нашем случае

$$E = \frac{p_0^2}{2} - \varepsilon_0 = \frac{p_1^2}{2} + \frac{p_2^2}{2},$$

$\varepsilon_0$  — потенциал ионизации ( $\varepsilon_0 = 13,6$  эВ для водорода),  $p_0$  — импульс падающего на систему электрона  $p_1$  — импульс рассеянного и  $p_2$  — импульс эжектированного электронов.

В подходе Джоашена в возмущающую часть гамильтониана выделяется сумма потенциалов  $V_1 + V_{12}$ , т. е.

$$H_0 = h_{10} + h_{20} + V_2; \quad H_{\text{int}} = V_1 + V_{12}.$$

Тогда УШ (2) принимает вид

$$(E - h_{10} - h_{20} - V_2) |\psi\rangle = (V_1 + V_{12}) |\psi\rangle. \quad (3)$$

Из (3), если применять обычный, принятый для короткодействующих потенциалов метод обращения операторов, следует

$$|\psi^+\rangle = |\varphi_0, \mathbf{p}_0\rangle + (E - h_2 - h_{10} + i0)^{-1} (V_1 + V_{12}) |\psi^+\rangle$$

или

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 | \psi^+ \rangle &= \varphi_0(\mathbf{r}_2) \exp\{i\mathbf{p}_0 \mathbf{r}_1\} + \\ &+ \sum ds_\alpha \int \frac{d^3 p'}{(2\pi)^3} \frac{\varphi_\alpha^-(\mathbf{r}_2) \exp\{i\mathbf{p}' \mathbf{r}_1\} \langle \varphi_\alpha^-, \mathbf{p}' | V_1 + V_{12} | \psi^+ \rangle}{E - E_\alpha - (1/2) p'^2 + i0}. \end{aligned} \quad (4)$$

Здесь  $\varphi_0$  — волновая функция атома водорода, символ  $\sum ds_\alpha$  означает сумму по всем состояниям спектра оператора  $h_2 = h_{20} + V_2$ . В соответствии с общим принципом исследования асимптотики интеграла (4) при  $r_1, r_2 \rightarrow \infty$ ,  $|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2| \rightarrow \infty$ , если бы величина  $\langle \varphi_\alpha^-, \mathbf{p}' | V_2 + V_{12} | \psi^+ \rangle$  не имела особенностей на действительной оси, то асимптотика (4) имела бы вид

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 | \psi^+ \rangle_{r \rightarrow \infty} &\approx \\ &\approx -\frac{1}{2\pi} \left( \frac{-ik}{2\pi} \right)^{3/2} \frac{\exp\{ik\rho + i\omega'\}}{\rho^{3/2}} \langle \varphi^-(\mathbf{p}_2), \mathbf{p}_1 | V_1 + V_{12} | \psi^+(\mathbf{p}_0) \rangle, \end{aligned} \quad (5)$$

где  $\omega' = (1/p_2) \ln 2k\rho$ ,  $k^2 = 2E$ ,  $\rho^2 = r_1^2 + r_2^2$ . Сравнивая (5) с «правильной» асимптотикой волновой функции трехчастичного развала [4], мы видим, что  $\omega'$  отличается от «правильной» фазы  $\omega$  слагаемым

$$\left( \frac{1}{p_1} - \frac{1}{|\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2|} \right) \ln 2k\rho,$$

что явно указывает на наличие особенностей (расходимостей) в матричном элементе  $\langle \varphi^-(\mathbf{p}_2), \mathbf{p}_1 | V_1 + V_{12} | \psi^+(\mathbf{p}_0) \rangle$ , что и есть на самом деле. Однако если  $p_1 \gg p_2$ , то различия между  $\omega$  и  $\omega'$  могут быть сколь угодно малы, поэтому в дипольном случае (при больших  $p_0, p_1$  и малом  $\mathbf{Q} = \mathbf{p}_0 - \mathbf{p}_1$ ) можно ожидать, что модель (5) может работать, особенно при правильно выбранном механизме устранения расходимостей [5].

Выражение для амплитуды  $T_{1,2}$  в форме

$$T_{1,2} \equiv T(\mathbf{p}_0, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2) = \langle \varphi^-(\mathbf{p}_2), \mathbf{p}_1 | V_1 + V_{12} | \psi^+(\mathbf{p}_0) \rangle$$

лежит в основе метода последовательных приближений по Джоашену. В таком подходе первое борновское приближение (FBA)  $T_{1,2}^{(1)}$  есть

$$T_{1,2}^{(1)} = \langle \varphi^-(\mathbf{p}_2), \mathbf{p}_1 | V_1 + V_{12} | \varphi_0, \mathbf{p}_0 \rangle, \quad (6)$$

а SBA есть

$$T_{1,2}^{(2)} = \langle \varphi^-(\mathbf{p}_2), \mathbf{p}_1 | V_{12} (E - h_2 - h_{10} + i0)^{-1} V_1 + V_1 (E - h_2 - h_{10} + i0)^{-1} V_{12} + V_{12} (E - h_2 - h_{10} + i0)^{-1} V_{12} | \varphi_0, \mathbf{p}_0 \rangle. \quad (7)$$

В обозначениях (6) с учетом резкой асимметрии дипольной кинематики сечение

$$d^2\sigma = \frac{p_1 p_2}{p_0} \frac{1}{(2\pi)^3} \left| \frac{1}{2\pi} T_{1,2} \right|^2, \quad \text{где } T_{1,2} = T_{1,2}^{(1)} + T_{1,2}^{(2)}. \quad (8)$$

Раскрывая (7), можно представить амплитуду  $T_{1,2}^{(2)}$  в нескольких формах, удобных для дальнейшей работы.

Например,

$$T_{1,2}^{(2)} = (4\pi)^2 \int \frac{d^3\xi}{(2\pi)^3} \int d^3r_1 d^3r_2 \varphi^{*-}(\mathbf{r}_2, \mathbf{p}_2) \frac{[1 - \exp\{i(\mathbf{Q} - \xi) \cdot \mathbf{r}_2\}]}{(\mathbf{Q} - \xi)^2} \times \\ \times g_c^+(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1; E(\xi)) \cdot \frac{[1 - \exp\{i\xi \cdot \mathbf{r}_1\}]}{\xi^2} \varphi_0(\mathbf{r}_1), \quad (9)$$

$E(\xi) = \gamma + \mathbf{p}_0 \cdot \xi - \xi^2/2 - \varepsilon_0 + i0$ . В формуле (9)  $g_c^+$  — кулоновская функция Грина, явный вид которой также хорошо известен.

В приведенных выше формулах параметр  $\gamma = E - p_0^2/2 + \varepsilon_0 = E - p_1^2/2 - p_2^2/2$  стремится к нулю на энергетической поверхности, однако мы его пока не приравняем к нулю из соображений сходимости интегралов.

Существует еще одно полезное представление  $T_{1,2}^{(2)}$ :

$$T_{1,2}^{(2)} = \Sigma ds_\alpha \int d^3r_1 d^3r_2 \varphi^{*-}(\mathbf{r}_2, \mathbf{p}_2) \varphi_\alpha^-(\mathbf{r}_2) \Gamma_\alpha(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1; \mathbf{Q}, \mathbf{p}_0) \varphi_\alpha^{*-}(\mathbf{r}_1) \varphi_0(\mathbf{r}_1). \quad (10)$$

Здесь

$$\Gamma_\alpha(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1; \mathbf{Q}, \mathbf{p}_0) = (4\pi)^2 \int \frac{d^3\xi}{(2\pi)^3} \cdot \frac{[1 - \exp\{i\xi \cdot \mathbf{r}_1\}]}{\xi^2} \times \\ \times \frac{[1 - \exp\{i(\mathbf{Q} - \xi) \cdot \mathbf{r}_2\}]}{(\mathbf{Q} - \xi)^2} \frac{1}{\gamma + \mathbf{p}_0 \cdot \xi - \xi^2/2 - (\varepsilon_0 + E_\alpha) + i0}. \quad (11)$$

Упрощенное второе борновское приближение (SSBA) [1] следует из (10), если в (11) заменить  $\varepsilon_0 + E_\alpha$  на усредненную энергию  $\varepsilon_0$ . Тогда, используя условие ортогональности кулоновских функций

$$\Sigma ds_\alpha \varphi_\alpha^{*-}(\mathbf{r}_1) \varphi_\alpha^-(\mathbf{r}_2) = \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2),$$

получим из (10)

$$T_{1,2}^{(2)} = \frac{2}{\pi} \int \frac{d^3\xi}{\xi^2 (\mathbf{Q} - \xi)^2} \cdot \frac{[M_0^*(\mathbf{Q}, \mathbf{p}_2) - M_0(\mathbf{Q} - \xi, \mathbf{p}_2) - M_0(\xi, \mathbf{p}_2)]}{\gamma + \mathbf{p}_0 \cdot \xi - \xi^2/2 - \varepsilon_0 + i0}, \quad (12)$$

где можно положить  $\gamma = 0$ , так как в представлении (12) расходимостей уже не возникает.

В выражении (11) введено обозначение

$$M_0(\mathbf{Q}, \mathbf{p}) = \int d^3\mathbf{r} \varphi^{-*}(\mathbf{r}, \mathbf{p}_2) \exp\{i\mathbf{Q}\mathbf{r}\} \varphi_0(\mathbf{r}), \quad (13)$$

а  $\varphi^{-*}(\mathbf{r}, \mathbf{p}_2)$  и  $\varphi_0(\mathbf{r})$  суть кулоновские волновые функции.

3. Параметр  $\varepsilon_0$  в (12) играет роль подгоночного. Например, при  $E_0 = 250$  эВ и  $E_2 = 5$  эВ  $\varepsilon_0 \sim 0,5 \varepsilon_0$ . Если  $E_0$  велико, т. е. формально стремится к бесконечности, зависимость  $T_{1,2}^{(2)}$  от  $\varepsilon_0$  исчезает. Вместе с тем при больших  $E_0$  амплитуда  $T_{1,2}^{(2)}$  может быть выражена в виде однократного интеграла, что чрезвычайно важно с точки зрения численных расчетов. Поэтому возникает проблема более детального исследования возможности упрощения  $T_{1,2}^{(2)}$  с сохранением преимуществ асимптотического подхода и наличия свободного параметра в теории.

С этой целью заметим, что интегрирование по  $\mathbf{r}_1$  в (9) ограничено размером первой боровской орбиты  $r_0$ , поэтому интеграл по  $\mathbf{r}_2$  представим в виде суммы двух: от 0 до  $r_0$  и от  $r_0$  до  $\infty$ . Вклад в первый интеграл вносит область интегрирования по средним, порядка единицы, величинам переменной  $\xi$ . При этом  $E(\xi)$  велико, т. е. можно приближенно положить

$$g_c^+(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1; E(\xi)) \approx q_0^+(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1; E(\xi)) \approx -\frac{1}{2\pi} \exp\{ik(\xi)|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1|\}/|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1|,$$

где  $k(\xi) = \sqrt{2E(\xi)}$ . Допустим также, что при этом условии основной вклад в интеграл (9) вносит область  $k(\xi)|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1| \ll \delta$ , где  $\delta > 0$  — свободный параметр. Тогда из (9) следует

$$\begin{aligned} T_{1,2}^{(2)} &\approx -\frac{1}{\pi^2} \int d^3\xi d^3\mathbf{r} \varphi^{-*}(\mathbf{r}, \mathbf{p}_2) \frac{[1 - \exp\{i(\mathbf{Q} - \xi)\mathbf{r}\}]}{(\mathbf{Q} - \xi)^2} \times \\ &\times \frac{[1 - \exp\{i\xi\mathbf{r}\}]}{\xi^2} \varphi_0(\mathbf{r}) \int_0^{\delta/k} d^3\mathbf{r}' \frac{\exp\{ik(\xi)\mathbf{r}'\}}{r'} \approx \\ &\approx \frac{2c}{\pi} \int \frac{d^3\xi}{(\mathbf{Q} - \xi)^2 \xi^2} \cdot \frac{[M(\mathbf{Q}, \mathbf{p}_2) - M(\mathbf{Q} - \xi, \mathbf{p}_2) - M(\xi, \mathbf{p}_2)]}{p_0 \xi - \xi^2/2 - \varepsilon_0 + i0}. \end{aligned} \quad (14)$$

В (14)  $C = 1 + (i\delta - 1) \exp\{i\delta\}$ . Имея свободный параметр  $\delta$ , мы теперь можем отбросить второй интеграл от  $r_0$  до  $\infty$ , учитывая его эффект в  $\delta$ . Теперь в (14) при больших  $p_0$  можно выделить ведущую асимптотику и убедиться, что в смысле учета основного по  $p_0^{-1}$  члена в  $SBA$  сделанные выше допущения вполне самосогласованны. Такой путь приводит к приближению  $(ASBA)_c$ , и мы здесь выпишем окончательную формулу для расчета амплитуды:

$$T_{1,2}^{(2)} = \frac{4c}{p_0} \left[ \ln p_0 \int_{-\infty}^{\infty} \xi F(n_{p_0}\xi) d\xi + \int_{-\infty}^{\infty} \xi \ln(\xi) F(n_{p_0}\xi) d\xi - i\pi \int_0^{\infty} \xi F(-n_{p_0}\xi) d\xi \right], \quad (15)$$

где

$$F(\xi) = \frac{[M(\mathbf{Q}, \mathbf{p}_2) - M(\mathbf{Q} - \xi, \mathbf{p}_2) - M(\xi, \mathbf{p}_2)]}{(\mathbf{Q} - \xi)^2 \xi^2} \quad \text{и} \quad n_{p_0} = p_0/p_0.$$

Кстати, учет ведущей асимптотики в (12) приводит к модели  $(ASBA)_1$ , не содержащей свободных параметров, и она несколько хуже  $(ASBA)_c$ .

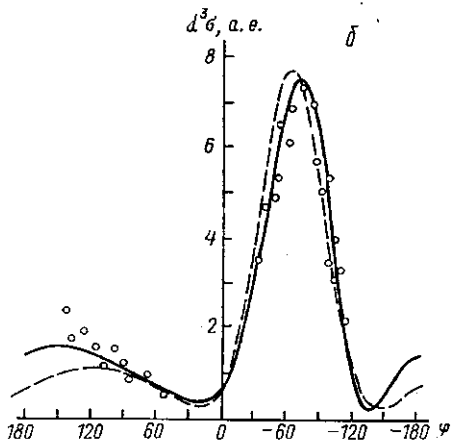
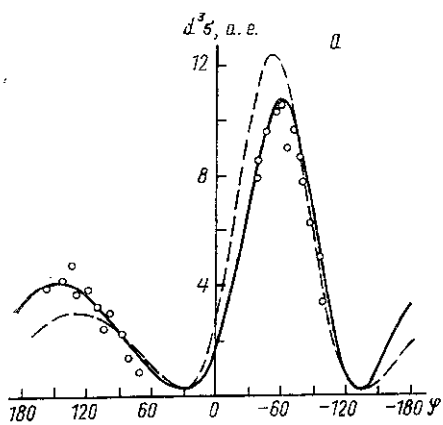


Рис. 1. Сечение  $d^3\sigma$  процесса  $H(e, 2e)H^+$  для энергии налетающего электрона  $E_0=250$  эВ, энергии эжектированного электрона  $E_2=5$  эВ и угла рассеяния  $\alpha=3^\circ$  (а),  $5^\circ$  (б) и  $8^\circ$  (в): штриховая линия — первое борновское приближение (FBA), сплошная — (ASBA), кружки — экспериментальные точки из [6, 7] ( $1 \text{ а. е.} = 28 \cdot 10^{-22} \text{ м}^2 \cdot \text{ср}^{-2} \cdot \text{эВ}^{-1}$ ),  $\varphi$  — угол вылета эжектированного электрона

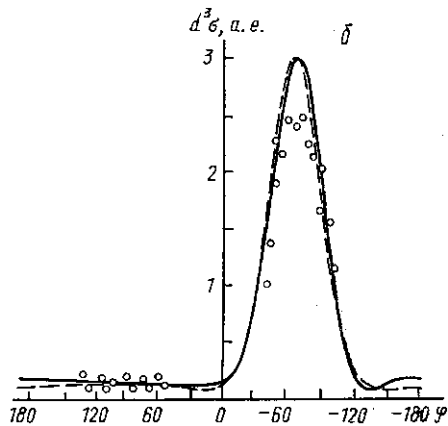
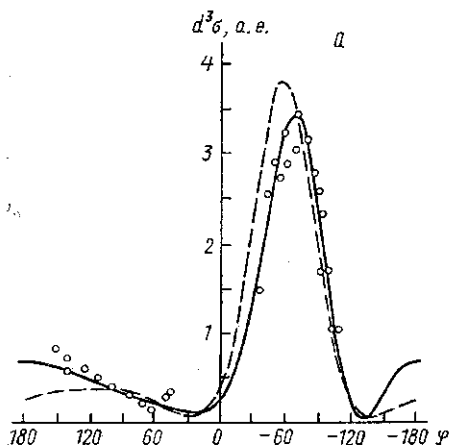
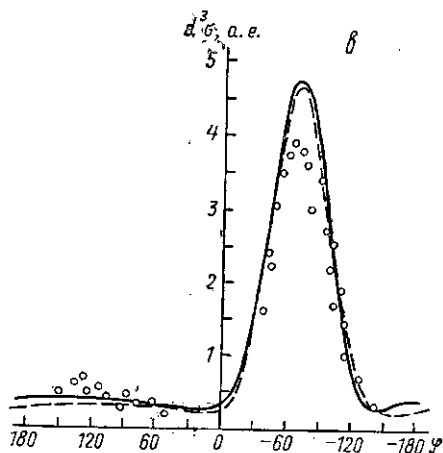


Рис. 2. Сечение  $d^3\sigma$  процесса  $H(e, 2e)H^+$  для энергии налетающего электрона  $E_0=250$  эВ, энергии эжектированного электрона  $E_2=10$  эВ и угла рассеяния  $\alpha=5^\circ$  (а) и  $8^\circ$  (б). Обозначения — как на рис. 1

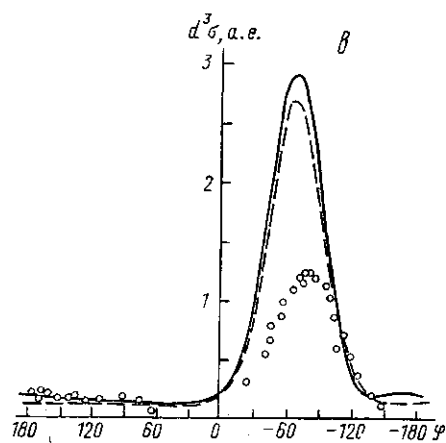
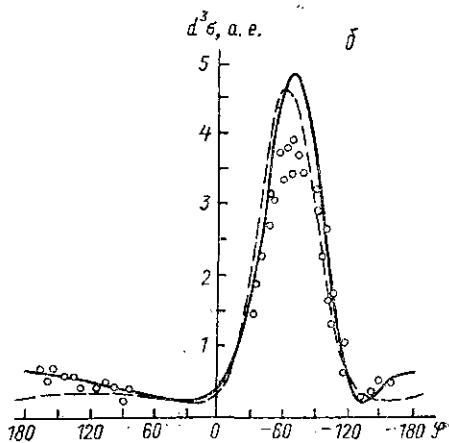
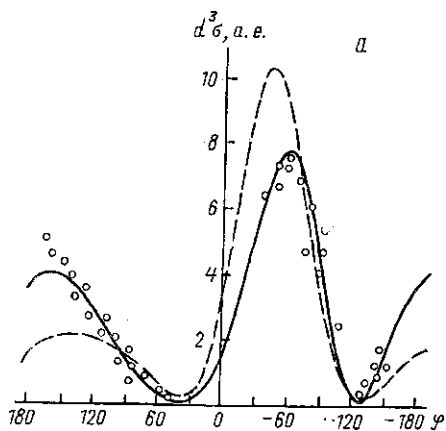


Рис. 3. Сечение  $d^3\sigma$  процесса  $H(e, 2e)H^+$  для энергии налетающего электрона  $E_0=150$  эВ, энергии эжектированного электрона  $E_2=5$  эВ и угла рассеяния  $\alpha=4^\circ$  (а),  $10^\circ$  (б) и  $16^\circ$  (в). Обозначения — как на рис. 1

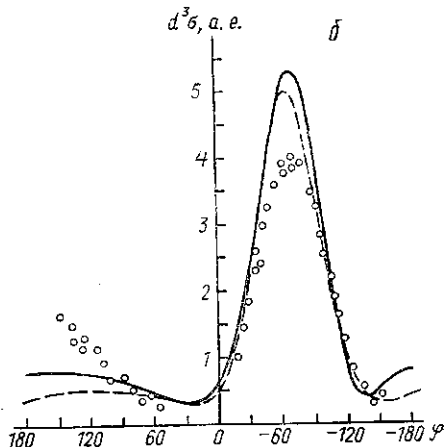
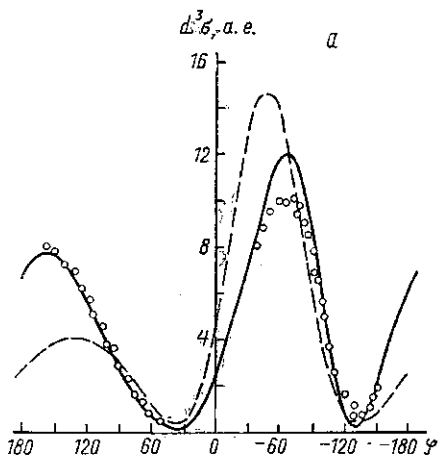


Рис. 4. Сечение  $d^3\sigma$  процесса  $H(e, 2e)H^+$  для энергии налетающего электрона  $E_0=150$  эВ, энергии эжектированного электрона  $E_2=3$  эВ и угла рассеяния  $\alpha=4^\circ$  (а) и  $10^\circ$  (б). Обозначения — как на рис. 1

В принципе в основе как модели *SSBA* (12), так и *(ASBA)<sub>c</sub>* (15) лежит предположение об «одновременности» последовательных соударений внутри атома. Действительно, формально формулу (12) можно получить, если в (9) положить

$$g_c^+(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1; E(\xi)) = \frac{\delta(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1)}{E(\xi) + (\varepsilon_0 - \varepsilon_0)},$$

а формулу (14) — если представить

$$g_c^+(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1; E(\xi)) = \frac{C}{E(\xi)} \delta(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1).$$

Конечно, само по себе такое представление функции Грина довольно спорно, но наличие физически обоснованного свободного параметра в качестве множителя значительно выгоднее с точки зрения упрощающих интеграл асимптотических соображений, чем его присутствие в качестве добавки к большой величине  $E(\xi)$ .

4. Сравнение результатов расчетов модели *(ASBA)<sub>c</sub>*, являющейся логическим упрощением *SSBA*, с экспериментом в области начальных энергий  $E_0 = 150$  и  $250$  эВ, которые, вообще говоря, являются критическими для асимптотической модели, показывает, что определенным выбором параметра  $\delta$  можно добиться очень хороших результатов лишь при переданных импульсах  $Q$ , близких к  $Q_{\min} = p_0 - p_1 \approx (E_p + \varepsilon_0)/p_0$ , если  $p_2^2 \ll p_0^2$ . Результаты расчетов представлены на рис. 1—4. Видно, что с ростом  $Q$  или  $p_2$  качество модели падает, что косвенно указывает на влияние эффектов поствзаимодействия, которые «сидят» в отброшенном интеграле.

Таким образом, двойные столкновения в случае дипольной кинематики являются основным механизмом, улучшающим *FBA* при малых переданных импульсах  $Q$ . При росте  $Q$  начинают сказываться как перерасcеяния более высокой кратности, так и послестолкновительные эффекты. В частности, и это уже хорошо установленный факт, в случае бинарной кинематики (большие  $Q$ ) импульсное приближение, где учитываются многократные перерасcеяния, работает значительно лучше *FBA* и *FBA + SBA*.

#### ЛИТЕРАТУРА

- [1] Вугон F. W., Jr., Joachain J., Piraux B. // *J. Phys. B.* 1980. 13. P. L673. [2] Вугон F. W., Jr., Joachain J., Piraux B. // *J. Phys. B.* 1983. 16. P. L769. [3] Роров Ю. В., Венауон J. J. // *J. Phys. B.* 1981. 14. P. 3513. [4] Merkuriev S. P. // *Ann. of Phys. (N. Y.)*. 1980. 130. P. 395; Меркурьев С. П., Фаддеев Л. Д. Квантовая теория рассеяния для систем нескольких частиц. М., 1985. [5] Роров Ю. В. // *J. Phys. B.* 1981. 14. P. 2449; Роров Ю. В., Ванг J., Венауон J. J. // *J. Phys. B.* 1981. 14. P. 4637.

Поступила в редакцию  
26.04.91