

УДК 530.145

## ИССЛЕДОВАНИЕ ВКЛАДА ЭФФЕКТОВ ВЫСШИХ ПОРЯДКОВ В ПРОЦЕСС $(e, 2e)$ НА АТОМЕ ВОДОРОДА

П. С. Виноцкий, К. А. Кузаков, Ю. В. Попов, К. Даль Каппелло

(кафедра физики атомного ядра и квантовой теории столкновений; НИИЯФ)

E-mail: vinitzky@srd.sinp.msu.ru

**Дано определение физического ряда теории возмущений в случае многочастичного кулоновского рассеяния и представлены результаты численных расчетов вклада высших борновских членов в амплитуду реакции квазиупругого выбивания электрона электроном из атома водорода с целью определения границ применимости базовой теории таких реакций.**

Впервые процесс квазиупругого выбивания электрона быстрым электроном из квантовой мишени (так называемый процесс  $(e, 2e)$  при большой передаче импульса) в качестве метода изучения одночастичной волновой функции электрона в среднем поле атома был предложен в работе [1] по аналогии с реакциями  $(p, 2p)$  в ядерной физике. В дальнейшем предложенный  $(e, 2e)$  метод интенсивно развивался теоретически и экспериментально (теоретические подходы, модели и экспериментальные реализации можно найти в обзоре [2]).

Традиционная теория рассматриваемого метода прямого зондирования атомных мишеней базируется на доминировании в  $(e, 2e)$ -амплитуде механизмов низшего порядка, а именно плосковолнового импульсного приближения (plane wave impulse approximation — PWIA), являющегося первым членом ряда Борна–Фаддеева и учитывающего искаженную волну лишь в  $ee$ -канале. Однако реальный вклад высших членов до сих пор серьезно не изучен. Для оценки применимости приближения первого порядка необходимо провести расчет по крайней мере членов второго порядка. Они, однако, описываются расходящимися интегралами. Процедура перенормировки таких интегралов, т.е. определенного выделения и отбрасывания расходящихся выражений, была предложена в работе [3]. Там же фактически было показано, что, вопреки широко распространенному мнению, PWIA не является адекватным приближением для описания квазиупругих атомных процессов, и лучше работать в рамках традиционных борновских приближений, где в качестве малых параметров выступают кулоновские числа каналов рассеяния. Близкие результаты были получены также Зорбасом [4].

Целью настоящей работы является проведение численных расчетов и оценка вклада второго борновского приближения (SBA, second Born approximation) в амплитуду для простейшей трехчастичной реакции  $H(e, 2e)H^+$ , так как в этом случае можно проверить полученные результаты на ряде анали-

тических тестов. В работе используются атомные единицы (а. е.)  $|e| = \hbar = m_e = 1$ .

Обозначим энергии и импульсы падающего и двух быстрых вылетающих электронов как  $(E_0, \mathbf{p}_0)$ ,  $(E_s, \mathbf{p}_s)$  и  $(E_e, \mathbf{p}_e)$  соответственно. Гамильтониан рассматриваемой системы имеет вид  $\hat{H} = \hat{h}_{01} + \hat{h}_{02} + W = \hat{H}_0 + W$ , где  $W = v_{1N} + v_{2N} + v_{12}$  — полный потенциал системы,  $v_{iN}$  и  $v_{12}$  — потенциалы взаимодействия электронов с неподвижным ядром (протоном) и друг с другом. Дифференциальное сечение процесса  $(e, 2e)$  (TDCS) записывается как

$$\frac{d^3\sigma}{dE_s d\Omega_s d\Omega_e} = \frac{p_s p_e}{(2\pi)^5 p_0} \times \left( \frac{1}{4} |T^{\text{dir}} + T^{\text{exch}}|^2 + \frac{3}{4} |T^{\text{dir}} - T^{\text{exch}}|^2 \right). \quad (1)$$

Выразим прямую амплитуду реакции  $T^{\text{dir}}$  через трехчастичную функцию Грина  $G^+(E) = (E - H + i0)^{-1}$ , где  $E$  — полная энергия в виде

$$T^{\text{dir}} = \langle \psi_f^- | W - V_f | \psi_i^+ \rangle + \langle \psi_f^- | (W - V_f) G^+(E) (W - V_i) | \psi_i^+ \rangle. \quad (2)$$

В формуле (2) конечная  $\psi_f^\pm(\mathbf{p}_s, \mathbf{r}_1; \mathbf{p}_e, \mathbf{r}_2)$  и начальная  $\psi_i^\pm(\mathbf{p}_0, \mathbf{r}_1; \mathbf{r}_2)$  волновые функции удовлетворяют уравнениям Шрёдингера

$$\left( \frac{p_s^2}{2} + \frac{p_e^2}{2} - H_0 - V_f \right) | \psi_f^\pm \rangle = 0, \\ \left( \varepsilon_0 + \frac{p_0^2}{2} - H_0 - V_i \right) | \psi_i^\pm \rangle = 0.$$

Поскольку амплитуда  $T^{\text{exch}}$  может быть получена из  $T^{\text{dir}}$  перестановкой импульсов  $\mathbf{p}_s$ ,  $\mathbf{p}_e$ , то далее для удобства будем рассматривать только амплитуду  $T^{\text{dir}}$ , опуская верхний индекс. Используя базис плоских волн, запишем борновский ряд для амплитуды рассеяния в виде суммы  $T = \sum_{n=0}^{\infty} T^{(n)}$ , где член  $n = 0$  соответствует первому борновскому при-

ближению (FBA, first Born approximation),  $n = 1$  — SBA и так далее. Напоминаем, что все члены, кроме  $T^{(0)}$ , описываются расходящимися интегралами при использовании базиса плоских волн, что обусловлено дальнедействующим характером кулоновских сил. По сути это означает, что плоские волны не являются физическими асимптотическими состояниями рассеянных частиц, хотя и крайне удобны для проведения численных расчетов.

Было установлено [3], что при определенных условиях расходящиеся части можно некоторым образом вычестить из интегралов и просуммировать. При этом амплитуда рассеяния представляется произведением двух сомножителей, один из которых сходится при переходе на энергетическую поверхность, когда  $E \rightarrow (E_s + E_e)$ , а другой расходится. Введем величину  $\Delta = E - E_s - E_e > 0$  и запишем борновский ряд при  $\Delta \rightarrow +0$ , выделяя из каждого его члена расходящуюся часть согласно процедуре, предложенной в работе [3]:

$$T(\Delta) = \sum_{n=0}^{\infty} T^{(n)}(\Delta) \equiv T^{\text{FBA}} + \sum_{n=1}^{\infty} T^{(n)}(\Delta) = \mathcal{R}(\Delta) \left[ T^{\text{FBA}} + \sum_{n=1}^{\infty} T_{\mathcal{R}}^{(n)} \right]. \quad (3)$$

Все слагаемые в квадратных скобках в (3) остаются конечными, если  $\Delta \rightarrow +0$ , а все расходимости собраны в сомножителе  $\mathcal{R}$ .

Физическая амплитуда определяется как [5]

$$T = \frac{e^{-\eta\pi/2+iA}}{\Gamma(1-i\eta)} \lim_{\Delta \rightarrow 0} \left[ e^{-i\eta \ln \Delta} \mathcal{R}(\Delta) \right] \left[ T^{\text{FBA}} + \sum_{n=1}^{\infty} T_{\mathcal{R}}^{(n)} \right], \quad (4)$$

где величина  $\eta = \eta_s + \eta_e + \eta_{se}$  — полный кулоновский параметр ( $\eta_s = -p_s^{-1}$ ,  $\eta_e = -p_e^{-1}$  и  $\eta_{se} = |\mathbf{p}_s - \mathbf{p}_e|^{-1}$  — кулоновские параметры каналов),  $A = \eta_s \ln(2p_s^2) + \eta_e \ln(2p_e^2) + \eta_{se} \ln |\mathbf{p}_s - \mathbf{p}_e|^2$  — фаза Долларда [6].

Перейдем к рассмотрению  $(e, 2e)$  реакции на атоме водорода в рамках приведенного общего подхода. Положим в (2)  $V_f = V_i = v_{2N}$ . Раскладывая функцию Грина в ряд по собственным функциям гамильтониана  $H$ , получим

$$T = \langle \mathbf{p}_s, \varphi^-(\mathbf{p}_e) | v_{1N} + v_{12} | \mathbf{p}_0, \varphi_0 \rangle + \sum_{\alpha} \frac{\langle \mathbf{p}_s, \varphi^-(\mathbf{p}_e) | v_{1N} + v_{12} | \Psi_{\alpha}^{-} \rangle \langle \Psi_{\alpha}^{-} | v_{1N} + v_{12} | \mathbf{p}_0, \varphi_0 \rangle}{E - E_{\alpha} + i0}. \quad (5)$$

Здесь  $|\Psi_{\alpha}^{-}\rangle$  — симметризованная трехчастичная волновая функция задачи (с признаками сходящейся сферической волны в случае, если хотя бы один электрон находится в непрерывном спектре).

В случае квазиупругих реакций при большой начальной энергии налетающей частицы импульсы

$\mathbf{p}_0$ ,  $\mathbf{p}_s$ ,  $\mathbf{p}_e$ , так же как и переданный импульс  $\mathbf{Q} = \mathbf{p}_0 - \mathbf{p}_s$ , достаточно велики. Благодаря этому мы можем сделать ряд допущений и упрощений. Во-первых, будем пренебрегать слагаемыми, в которых координаты, соответствующие быстрым частицам, входят в связанные промежуточные состояния, поскольку вероятность для быстрой частицы оказаться в связанном состоянии на некоторое время достаточно мала. Во-вторых, мы оставляем только те элементарные процессы второго порядка, которые убывают с ростом энергии не быстрее, чем  $Q^{-2} p_i^{-1}$ , где индекс  $i$  пробегает значения  $0, s, e$ .

Обратимся теперь к первому слагаемому в выражении (5). Из-за ортогональности собственных функций атома водорода  $\langle \varphi^-(\mathbf{p}_e) | v_{1N} | \varphi_0 \rangle = 0$ , принадлежащих разным частям спектра, можно опустить член, соответствующий взаимодействию  $v_{1N}$ . Используем разложение кулоновской функции непрерывной части спектра  $\langle \varphi^-(\mathbf{p}_e) |$  по потенциалу  $v_{2N}$  в первом порядке:

$$\langle \varphi^-(\mathbf{p}_e) | \approx \langle \mathbf{p}_e | \left[ 1 + v_{2N} G_0^+ \left( E - \frac{p_s^2}{2} \right) \right], \quad (6)$$

$$G_0^+(E) = E - h_{20} + i0)^{-1},$$

и подставим (6) в первое слагаемое в (5), которое теперь выглядит как сумма FBA + TS1:

$$\text{FBA} = \langle \mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e | v_{12} | \mathbf{p}_0, \varphi_0 \rangle = \frac{32\pi\sqrt{\pi}}{(\mathbf{p}_0 - \mathbf{p}_s)^2 (1 + q^2)^2} \quad (\mathbf{q} = \mathbf{p}_s + \mathbf{p}_e - \mathbf{p}_0).$$

Аббревиатурой TS1 (two-step 1) мы обозначаем один из механизмов второго порядка. Он описывает процесс, когда электрон 2 (его индекс  $e$ ) после столкновения с налетающим электроном 1 ( $0, s$ ) вторично взаимодействует с ионом и соответствует искажению волны атомного электрона ядром до второго порядка включительно:

$$\text{TS1} = \langle \mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e | v_{2N} G_0^+ \left( E - \frac{p_s^2}{2} \right) v_{12} | \mathbf{p}_0, \varphi_0 \rangle = - \frac{4\pi}{(\mathbf{p}_0 - \mathbf{p}_s)^2} \int \frac{d^3\mathbf{x}}{(2\pi)^3} \frac{\varphi_0(\mathbf{q} - \mathbf{x})}{E - \frac{p_s^2}{2} - \frac{(\mathbf{p}_e - \mathbf{x})^2}{2} + i0} \frac{4\pi}{x^2}. \quad (7)$$

Этот интеграл расходится на энергетической поверхности в области  $x \sim 0$ . Если же  $\Delta > 0$ , то интеграл сходится.

Второе слагаемое в (5) называется TS2 механизмом (two-step 2) и описывает два последовательных взаимодействия налетающего электрона 1 с системой. Специфика квазиупругих реакций позволяет сразу исключить из рассмотрения связанные промежуточные состояния иона  $\text{H}^-$ , поскольку такие матричные элементы будут пренебрежимо малы в случае быстрых процессов  $(e, 2e)$ . Выделим в сумме группу функций  $|\Psi_{\alpha}^{-}\rangle = |\mathbf{p}, \varphi_g\rangle$ ,  $g \rightarrow (n, l, m)$  с асимптотикой, соответствующей одному свободному электрону в континууме и одному связанному.

Так как рассматриваемое слагаемое уже включает два последовательных взаимодействия (необходимый критерий SBA), то можно полагать любой свободный электрон плоской волной. Определим механизм TS<sub>21</sub>:

$$TS_{21} = \sum_g \int \frac{d^3\mathbf{x}}{(2\pi)^3} \frac{4\pi}{(\mathbf{p}_0 - \mathbf{p}_s + \mathbf{x})^2} \times \\ \times \frac{[F_g(\mathbf{x}) - \delta_{n1}] \varphi_g(\mathbf{q} - \mathbf{x})}{E - \varepsilon_g - \frac{(\mathbf{p}_0 + \mathbf{x})^2}{2} + i0} \frac{4\pi}{x^2}, \\ F_g(\mathbf{x}) = \int \frac{d^3\mathbf{y}}{(2\pi)^3} \varphi_0(\mathbf{y}) \varphi_g^*(\mathbf{y} - \mathbf{x}).$$

Как легко убедиться, этот интеграл не является расходящимся на энергетической поверхности.

Теперь во втором слагаемом в (5) выделим в сумме промежуточные состояния с двумя асимптотическими свободными электронами. Сначала положим  $|\Psi_\alpha^-\rangle = |\mathbf{p}, \varphi^-(\mathbf{p}')\rangle$ , а затем в конце вычислений заменим кулоновскую волну плоской (это позволяет избавиться от некоторых нефизических эффектов, возникающих лишь из-за используемых приближений). В результате определяются еще два механизма:

$$TS_{221} = - \int \frac{d^3\mathbf{x}}{(2\pi)^3} \frac{4\pi}{(\mathbf{p}_0 - \mathbf{p}_s + \mathbf{x})^2} \times \\ \times \frac{\varphi_0(\mathbf{q} - \mathbf{x})}{E - \frac{p_e^2}{2} - \frac{(\mathbf{p}_s - \mathbf{x})^2}{2} + i0} \frac{4\pi}{x^2}, \quad (8)$$

$$TS_{222} = \varphi_0(\mathbf{q}) \int \frac{d^3\mathbf{x}}{(2\pi)^3} \frac{4\pi}{(\mathbf{p}_0 - \mathbf{p}_s + \mathbf{x})^2} \times \\ \times \frac{1}{E - \frac{(\mathbf{p}_s - \mathbf{x})^2}{2} - \frac{(\mathbf{p}_e + \mathbf{x})^2}{2} + i0} \frac{4\pi}{x^2}. \quad (9)$$

Эти интегралы являются расходящимися на энергетической поверхности при  $x \sim 0$ .

Чтобы получить физическую амплитуду, необходимо правильно произвести перенормировку интегралов (7), (8) и (9), т.е. определенным образом вычесть расходящиеся части, чтобы остаток соответствовал физической амплитуде рассеяния до второго порядка включительно. Формула (4) позволяет это сделать в полной мере, учитывая, что каналные кулоновские числа как раз и являются малыми параметрами разложения в борновские ряды. В целях экономии места мы опускаем детали этой процедуры. Упомянем лишь, что в выражениях (7), (8) и (9) одновременно добавляется и вычитается соответствующее слагаемое, которое аналитически вычисляется при  $\Delta > 0$  и одновременно компенсирует расходимость в интеграле при переходе на энергетическую поверхность. Полученные таким образом выражения сравниваются с эталонной амплитудой (4), разложенной в борновский ряд до второго порядка по кулоновским параметрам.

Для проведения расчетов выбрана геометрия экспериментов ( $e, 2e$ ) на гелиевой мишени, проведенных группой Такахаши [7], где энергия вылетающих электронов была равна  $E_s - E_e - 1$  KeV и полярные углы  $\theta_s = \theta_e = 45^\circ$  фиксировались относительно направления импульса налетающего электрона. Менялся лишь азимутальный угол одного из вылетевших электронов (импульс  $\mathbf{p}_e$  выходил из плоскости импульсов  $\mathbf{p}_0$  и  $\mathbf{p}_s$ ), что при большой начальной энергии приводило к изменению импульса  $q$  в широком диапазоне. В рассматриваемых экспериментах измерялось дифференциальное сечение (TDCS) как функция  $q$ .

На рис. 1, а представлены результаты расчетов дифференциального сечения (1) как в приближении FBA, так и с учетом вкладов некоторых механизмов второго порядка — TS1 (7), TS<sub>21</sub> (8) и TS<sub>22</sub> (9) (их сумма обозначена как SBA<sup>simple</sup>). Они достаточ-

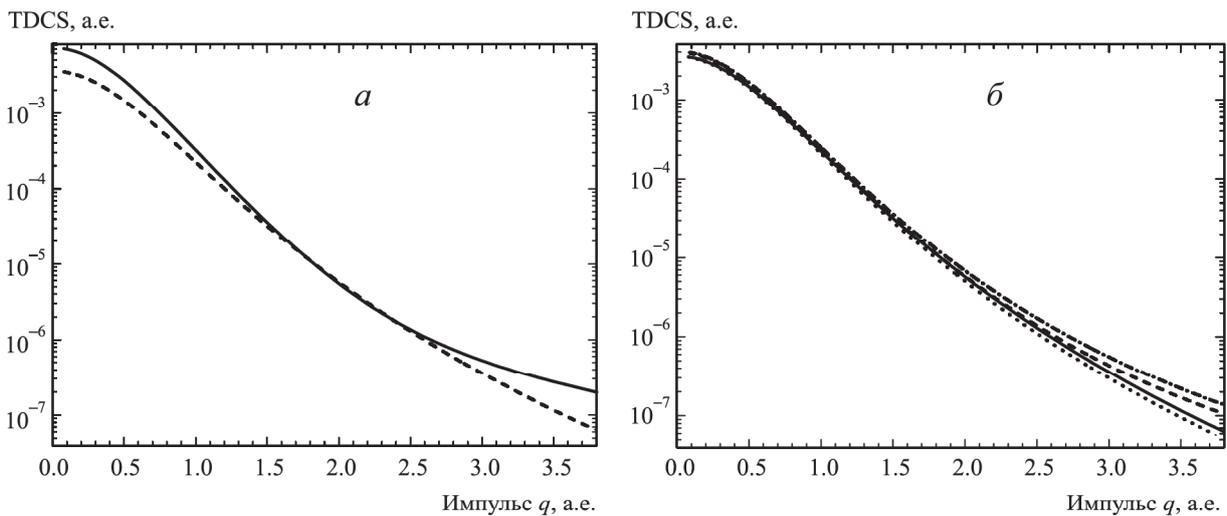


Рис. 1. Трехкратное дифференциальное сечение реакции  $H(e, 2e)H^+$  в приближениях: а — FBA (штриховая линия) и SBA<sup>simple</sup> (сплошная); б — FBA (сплошная линия) и с учетом вкладов различных механизмов SBA<sup>simple</sup> (штриховая линия — TS1, штрихпунктирная — TS<sub>21</sub>, пунктирная — TS<sub>22</sub>)

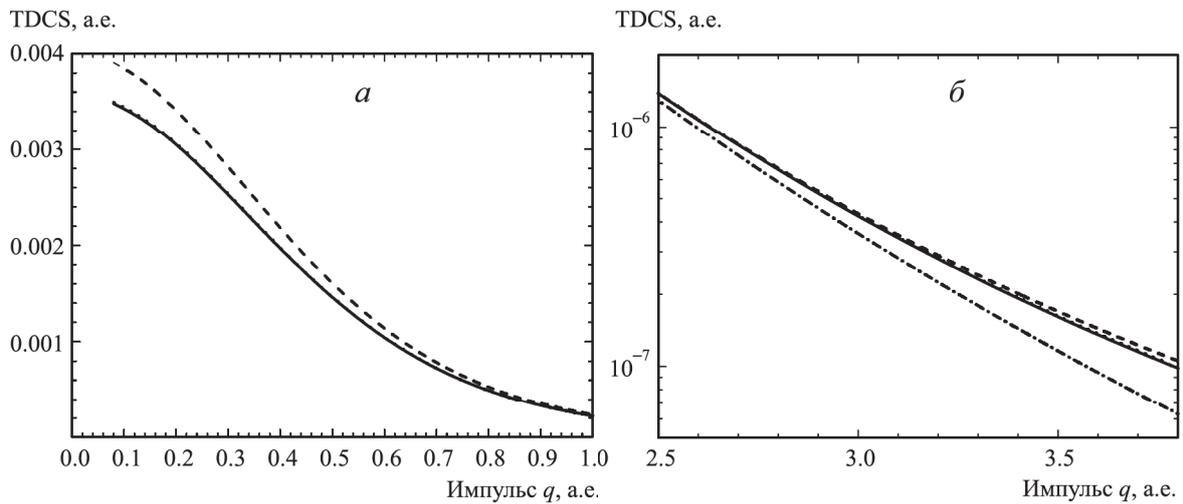


Рис. 2. Трехкратное дифференциальное сечение реакции  $H(e, 2e)H^+$  в приближениях FBA (штрихпунктирная линия) и CWBA (сплошная линия — точный расчет; штриховая линия — приближенно вплоть до второго порядка; пунктирная линия — приближенно вплоть до третьего порядка) в линейной (а) и логарифмической (б) шкалах

но заметно завышают FBA как при малых, так и при больших  $q$ . Напомним, что эти механизмы приводят к искажению плоских волн быстрых электронов в конечном состоянии. Механизмы  $TS_{2_1}$  и  $TS_1$  отвечают за искажение плоской волны одного из конечных электронов полем ядра, что существенно завышает сечение, тогда как  $TS_{2_2}$  отвечает за искажение волн за счет их кулоновского отталкивания и уменьшает сечение, как показано на рис. 1, б.

В случае атома водорода имеется ряд аналитических тестов, позволяющих не только проверить качество численных расчетов, но и сделать определенные выводы о качестве второго борновского приближения. Первое слагаемое в (5), которое мы обозначим как CWBA (Coulomb wave Born approximation), может быть вычислено аналитически (см., напр., [8]). Плосковолновые приближения второго и третьего порядков для CWBA получаются соответствующими разложениями в ряд Тэйлора по кулоновскому параметру  $\eta_e$ . Абсолютно такие же результаты получаются в случае применения процедуры перенормировки (4). При этом заметим, что интеграл  $TS_1$  относится к так называемым интегралам типа Льюиса [9] и вычисляется аналитически. Результаты описанного теста представлены на рис. 2 (а — в линейной шкале, б — в логарифмической). Кривые сечения с учетом FBA и CWBA практически совпадают в диапазоне небольших импульсов отдачи  $q$ , а (FBA+ $TS_1$ ) расположено почти на 20% выше CWBA при  $q_{min}$ . Из этого следует парадоксальный вывод, что учет механизмов искажения волн в рамках SBA не улучшает, а ухудшает результаты. Более того, если посмотреть на рис. 1, где представлены вклады отдельных механизмов и их сумма, то ввиду интерференции их совместное действие еще дальше отдаляет SBA от FBA. Этот негативный эффект всецело следует отнести к качеству прибли-

жения кулоновской функции непрерывного спектра плоской волной: для этого требуется больше членов ряда Тейлора, чем два.

Учет вкладов промежуточных возбуждений  $n = 1, 2$  представлен на рис. 3 (кривая  $SBA^{ext}$ ). Как можно видеть, их учет практически не меняет сечение при небольших  $q$ . Вклад  $1s$ -перехода, отвечающего за искажение в начальном состоянии (упругое перерассеяние), проявляет себя уже начиная с  $q = 2$  и становится заметен на фоне существенного убывания самого сечения, рассчитанного в FBA. Учет переходов в  $2s$  и  $2p$  практически не дает вклада.

В заключение можно сформулировать ряд выводов. Во-первых, непосредственный учет промежуточного континуума в расчетах процессов второго порядка при рассматриваемых энергиях ухудшает качество приближения в случае процессов квазиупругого выбивания. Во-вторых, проведенный учет

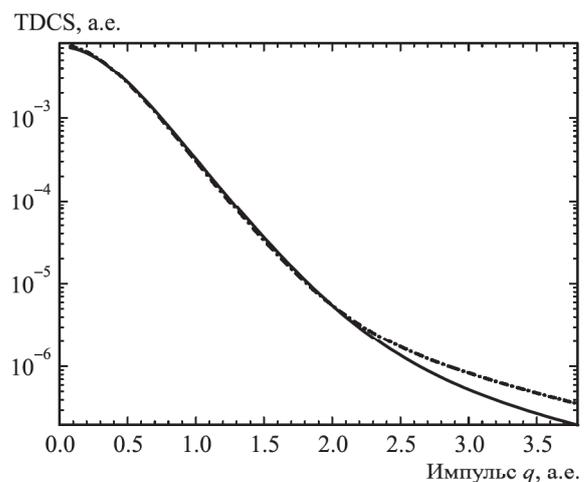


Рис. 3. Трехкратное дифференциальное сечение реакции  $H(e, 2e)H^+$  в приближениях  $SBA^{simple}$  (сплошная линия) и  $SBA^{ext}$  (штрихпунктирная)

промежуточных возбуждений показал, что вклад  $1s$ -состояния, отвечающего за искажение в начальном состоянии, заметен начиная с  $q = 2$ , а вклад  $2s$ - и  $2p$ -возбуждений практически равен нулю. Эффект «задирания хвоста» импульсного распределения при больших  $q$  в расчетах DWBA хорошо известен [7], однако чисто численные схемы никогда не давали возможность связать его именно с упругим промежуточным перерассеянием. В-третьих, проведенные тесты на основе разложения в ряд Тейлора по кулоновским параметрам точных матричных элементов показывают их полное совпадение с результатами теории перенормировок. Оценка третьего порядка разложения в ряд Тейлора говорит о недостаточности учета членов даже второго порядка при рассматриваемой энергии 1 КэВ на улетающий электрон. Для подавляющего доминирования первого борновского приближения FBA, которое несет основную информацию о волновой функции мишени, необходимо увеличить энергию по крайней мере раза

в три, что приведет к существенному уменьшению сечения и, следовательно, к трудностям экспериментального характера.

#### Литература

1. Смирнов Ю.Ф., Неудачин В.Г. // Письма в ЖЭТФ. 1966. **3**. Р. 298.
2. Неудачин В.Г., Попов Ю.В., Смирнов Ю.Ф. // УФН. 1999. **169**. Р. 1111.
3. Попов Ю. // J. Phys. B. 1981. **14**. Р. 2449.
4. Zorbas J. // Int. J. Theor. Phys. 1981. **20**. Р. 921.
5. Shablov V.L., Bilyk V.A., Popov Yu. V. // Phys. Rev. A. 2002. **65**. Р. 042719.
6. Dollard J.D. // J. Math. Phys. 1964. **5**. Р. 729.
7. Watanabe N. et al. // Phys. Rev. 2005. **A72**. Р. 032705.
8. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика. М.: Наука, 1974.
9. Lewis R.R. // Phys. Rev. 1956. **102**. Р. 537.

Поступила в редакцию  
05.02.07