

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ РЕАКЦИЙ

$p + \text{He} \rightarrow \text{H} + \text{He}^+$ И $p + \text{He} \rightarrow \text{H} + \text{He}^{++} + e$

ПРИ СВЕРХМАЛЫХ УГЛАХ РАССЕЯНИЯ ВОДОРОДА

Ю. В. Попов*

*Научно-исследовательский институт ядерной физики им. Д. В. Скобельцына
Московского государственного университета им. М. В. Ломоносова
119899, Москва, Россия*

О. Чулуунбаатар, С. И. Виноцкий**

*Объединенный институт ядерных исследований
141980, Дубна, Московская обл., Россия*

У. Анкарани*, К. Даль Капелло*****

Институт физики университета г. Метц, Франция

П. С. Виноцкий

*Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова
119899, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 18 марта 2002 г.

Рассмотрена гипотеза о том, что реакции $p + \text{He} \rightarrow \text{H} + \text{He}^+$ и $p + \text{He} \rightarrow \text{H} + \text{He}^{++} + e$ при сверхмалых углах рассеяния водорода можно использовать для целей угловой спектроскопии электронных корреляций в мишени. Показана несостоятельность этой гипотезы.

PACS: 71.10.-w, 34.10.+x

1. ВВЕДЕНИЕ

В течение нескольких последних лет был поставлен ряд достаточно тонких экспериментов по захвату электрона быстрым протоном из гелиевой мишени, в том числе и с одновременной ионизацией иона-остатка (transfer ionization process). С помощью уникального спектрометра COLTRIMS (cold target recoil ion momentum spectroscopy) были измерены все независимые кинематические характеристики конечных продуктов реакций: полярный и азимутальный углы водорода, а также импульс и энергия иона He^{++} [1–3]. При этом (азимутальный) θ_p угол рассеяния водорода составил всего

0.1–0.5 мрад, что примерно в 100 раз меньше, чем в случае ранее проведенных экспериментов подобного типа. Энергия протона варьировалась в пределах $E_p = 0.15\text{--}1.4$ МэВ.

Однократное дифференциальное сечение $d\sigma/d\theta_p$ рассматриваемых реакций в диапазоне $\theta_p = 10\text{--}1000$ мрад представляет собой достаточно плавно и быстро убывающую кривую, которая удовлетворительно описывается в рамках метода искаженных волн непрерывного спектра [4, 5]. При углах $\theta_p = 0.1\text{--}0.3$ мрад эта кривая достигает своего главного пика (не считая относительно небольших томасовских пиков при соответствующих углах рассеяния [6, 7], бóльших 0.5 мрад).

В работах авторов экспериментов [1–3] была высказана идея, что реакция $p + \text{He} \rightarrow \text{H} + \text{He}^{++} + e$ в указанном диапазоне сверхмалых углов рассеяния θ_p может быть использована для получения новой

*E-mail: popov@srdlan.npi.msu.su

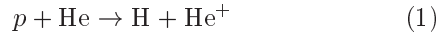
**O. Chuluunbaatar.

***L. U. Ancarani, C. Dal Cappello; Institute of Physics, University of Metz, Metz, France.

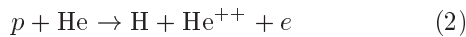
и неожиданной информации о структуре волновой функции мишени в импульсном представлении. Теоретическому анализу этой идеи и посвящена настоящая работа. В работе используются атомные единицы.

2. ТЕОРИЯ

В дальнейшем для краткости мы будем называть реакцию



реакцией простого захвата (simple capture, SC), а реакцию



реакцией захвата с ионизацией (transfer ionization, TI). Мы также используем следующие обозначения: $\mathbf{v}_p(\mathbf{p}_p)$ — скорость (импульс) протона, $\mathbf{v}_H(\mathbf{p}_H)$ — то же для водорода, \mathbf{k} — импульс испущенного электрона, \mathbf{K} — импульс иона-остатка, E — полная энергия системы. В атомных единицах масса протона $m = 1836.15$, масса иона $M \approx 4m$. Кроме того, вводится величина переданного импульса

$$\mathbf{q} = \mathbf{p}_H - \mathbf{p}_p = (m+1)\mathbf{v}_H - m\mathbf{v}_p.$$

Рассмотрим вначале реакцию TI. В указанных обозначениях законы сохранения энергии и импульса в лабораторной системе координат принимают вид:

$$\mathbf{K} + \mathbf{k} + \mathbf{q} = 0, \quad (3)$$

$$E = \frac{p_p^2}{2m} + E_0^{\text{He}} = \frac{p_H^2}{2(m+1)} + \frac{k^2}{2} + \frac{K^2}{2M} + E_0^{\text{H}}. \quad (4)$$

В (3) и (4) $E_0^{\text{He}} = -2.903$ и $E_0^{\text{H}} = -0.5$. Для удобства введем величину $Q = E_0^{\text{He}} - E_0^{\text{H}} = -2.403$.

Энергия протона изменяется в пределах $E_p = 0.15\text{--}1.4$ МэВ, что соответствует $v_p = 2.45\text{--}7.49$. В то же время из экспериментов следует, что измеряемые импульсы иона, а также переданный импульс при сверхмалых углах θ_p составляют всего несколько атомных единиц, что позволяет пренебречь энергиями $K^2/2M$ и $q^2/2m$ по сравнению с остальными величинами в уравнении (4). Подчеркнем, что это возможно сделать только при очень малых углах $\theta_p = 0.1\text{--}0.5$ мрад, когда ион гелия не сдвигается с места. При больших углах рассеяния протон-нуклонное (pN) кулоновское взаимодействие начинает играть все более значимую роль, что

ведет к существенному росту переданного импульса и импульса иона-остатка, который начинает двигаться. При сделанных приближениях из (4) следует

$$\mathbf{v}_p \mathbf{q} = \frac{1}{2} v_p^2 - \frac{1}{2} k^2 + Q. \quad (5)$$

Если вектор скорости протона выбрать в качестве оси z , то $\mathbf{q} = (\mathbf{q}_\perp, q_z)$, где

$$q_z = \frac{v_p}{2} - \frac{k^2 - 2Q}{2v_p} \quad (6)$$

и $q_\perp = m v_p \sin \theta_p \approx m v_p \theta_p$. Заметим попутно, что уравнения (3), (4) и (5) позволяют определить полностью импульс электрона, если измерен импульс иона, получить соответствующие ограничения и т. п.

Для реакции SC уравнения (3) и (4) принимают вид

$$\mathbf{K} + \mathbf{q} = 0, \quad (7)$$

$$\frac{p_p^2}{2m} + E_0^{\text{He}} = \frac{p_H^2}{2(m+1)} + \frac{K^2}{2(M+1)} + E_0^{\text{H}} + E_0^{\text{He}^+}, \quad (8)$$

где $E_0^{\text{He}^+} = -2$. Здесь удобно ввести величину $Q' = E_0^{\text{He}} - E_0^{\text{H}} - E_0^{\text{He}^+} = -0.403$. Уравнение (6) модифицируется следующим образом:

$$q_z = \frac{v_p}{2} + \frac{Q'}{v_p}. \quad (9)$$

Перейдем теперь к динамике процессов. Гамильтониан системы $p + \text{He}$ запишем в виде

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_p + \mathcal{H}_{\text{He}} + V_{p\text{He}}, \quad (10)$$

где

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_p &= p_p^2/2m, \\ \mathcal{H}_{\text{He}} &= k_1^2/2 + k_2^2/2 + V_{Ne_1} + V_{Ne_2} + V_{ee}, \\ V_{p\text{He}} &= V_{pe_1} + V_{pe_2} + V_{Np}, \\ V &= V_{p\text{He}} + V_{Ne_1} + V_{Ne_2} + V_{ee}. \end{aligned} \quad (11)$$

Далее используются следующие обозначения: $|\Phi_0\rangle$ — волновая функция покоящегося атома гелия в основном состоянии, $|\mathbf{p}_H, \varphi_H\rangle$ — функция атома водорода в основном состоянии, движущегося со скоростью \mathbf{v}_H , $|\mathbf{K}, \varphi^-(\mathbf{k})\rangle$ — волновая функция электрона в поле иона He^{++} , имеющего импульс \mathbf{K} (в случае реакции SC вместо $|\varphi^-(\mathbf{k})\rangle$ следует взять функцию $|\varphi_0\rangle$ связанного электрона).

Рассматривается гелий в синглетном состоянии, поэтому амплитуду TI с учетом всех необходимых симметрий удобно представить следующим образом:

$$\mathcal{T} = \langle \mathbf{p}_p \Phi_0 | V_{p\text{He}} [1 + G(E) V_{out}] | \Psi_{out} \rangle, \quad (12)$$

где

$$G(E) = (E - \mathcal{H}_p - \mathcal{H}_{He} - V + i\varepsilon)^{-1}$$

— полная функция Грина задачи, а $|\Psi_{out}\rangle$ определяется из уравнения

$$[E - H_0 - (V - V_{out})]|\Psi_{out}\rangle = 0,$$

где $V_{out} = V_{ee} + V_{pN}$.

Амплитуда (12) — точная, и конечное состояние представляет собой волновую функцию двух взаимодействующих электронов в поле двух центров, движущихся относительно друг друга. Мы рассмотрим здесь приближение этой сложной функции ее асимптотическим значением, т. е. симметричной по координатам электронов и нормированной комбинацией функций

$$\langle \mathbf{r}_p, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_N | \mathbf{p}_N, \varphi_N; \mathbf{K}, \varphi^-(\mathbf{k}) \rangle.$$

Даже такое упрощение оставляет проблему корректной нормировки, которая требует ортогонализации всех компонент. Однако, рассматривая скорость v_p как большой параметр в задаче, можно пренебречь кросс-членами в нормировочном интеграле и приближенно получить нормировочный множитель $N = 1/\sqrt{2}$.

Формула (12) ясно показывает, что член в первом борновском приближении по V_{pHe} в задачах с перестройкой в значительной степени определяется выбором выходного потенциала V_{out} , т. е. взаимодействием в конечном состоянии, поэтому он даже при большой энергии E не является подходящим приближением для амплитуды \mathcal{T} . Однако мы рассмотрим этот член, поскольку именно он включает в себя простейший механизм, когда один электрон непосредственно захватывается протоном из атома, а другой излучается ионом He^+ вследствие встряски внутреннего электрического поля в атоме (shake-off process). Действительно, оставляя только V_{pHe} в (12) и вычисляя матричный элемент, получим

$$\begin{aligned} \mathcal{T}_0 = & -4\pi\sqrt{2} \int \frac{d\mathbf{x}}{(2\pi)^2} \frac{\tilde{\varphi}_N(\mathbf{x})}{|\mathbf{v}_p - \mathbf{q} - \mathbf{x}|^2} [F(\mathbf{q}; 0; \mathbf{k}) + \\ & + F(\mathbf{v}_p - \mathbf{x}; -\mathbf{v}_p + \mathbf{q} + \mathbf{x}; \mathbf{k}) - 2F(\mathbf{v}_p - \mathbf{x}; 0; \mathbf{k})], \end{aligned} \quad (13)$$

где

$$\begin{aligned} F(\mathbf{y}; \boldsymbol{\eta}; \mathbf{k}) = & \int \exp(-i\mathbf{y} \cdot \mathbf{r}_1 - i\boldsymbol{\eta} \cdot \mathbf{r}_2) \times \\ & \times \varphi^{-*}(\mathbf{k}, \mathbf{r}_2) \Phi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 = \\ & = \int \frac{d\boldsymbol{\xi}}{(2\pi)^3} \tilde{\varphi}_N^{-*}(\mathbf{k}, \boldsymbol{\xi}) \tilde{\Phi}_0(\mathbf{y}, \boldsymbol{\eta} + \boldsymbol{\xi}) \end{aligned} \quad (14)$$

(тильда над функциями означает их импульсное представление). Вспомогая уравнение для водородной волновой функции в импульсном представлении:

$$\left(E_0^H - \frac{x^2}{2}\right) \tilde{\varphi}_N(\mathbf{x}) = \int \frac{d\mathbf{x}'}{(2\pi)^3} \frac{-4\pi}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|^2} \tilde{\varphi}_N(\mathbf{x}'), \quad (15)$$

нормированное решение которого хорошо известно:

$$\tilde{\varphi}_N(\mathbf{x}) = \frac{8\sqrt{\pi}}{(1 + x^2)^2}, \quad (16)$$

получаем

$$\mathcal{T}_0^{(1)} = -\frac{4\sqrt{2\pi}}{1 + |\mathbf{v}_p - \mathbf{q}|^2} F(\mathbf{q}; 0; \mathbf{k}). \quad (17)$$

Это — не что иное, как первое слагаемое в сумме (13), которое соответствует механизму встряски, описанному выше. Заметим, что подхватываемый протоном электрон имеет импульс \mathbf{q} и процесс, описываемый формулой (17), — чисто квантовый, не имеющий отношения к классическому резонансному захвату. Второе слагаемое в (13) — это обменный член, и третье соответствует кулоновскому взаимодействию протона с ядром в рамках первого борновского приближения.

Мы ограничиваемся здесь рассмотрением амплитуды (17), так как величина

$$\begin{aligned} F(\mathbf{q}; 0; \mathbf{k}) = & \int \exp(-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_1) \times \\ & \times \varphi^{-*}(\mathbf{k}, \mathbf{r}_2) \Phi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \end{aligned} \quad (18)$$

представляет фурье-образ координатной волновой функции атома гелия, и, в соответствии с гипотезой авторов экспериментов, именно этот член должен доминировать в общей амплитуде (12) и предоставлять информацию о корреляционной структуре волновой функции $\Phi_0(\mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2)$ в области сверхмалых углов рассеяния θ_p . Отметим, что функция типа (18) появляется в амплитуде процесса $(e, 3e)$ [8, 9], применение которого, как было показано, является мощным методом угловой спектроскопии электронных корреляций в исследуемой мишени.

В случае реакции SC амплитуда имеет вид (17), однако в интеграле (18) следует $\varphi^{-*}(\mathbf{k}, \mathbf{r})$ заменить на $\phi_0(r) = \sqrt{(8/\pi)} \exp(-2r)$.

Дифференциальное сечение процесса TI записывается в виде

$$d^5\sigma = \frac{|\mathcal{T}|^2}{v_p^2} \frac{d\mathbf{q}_\perp}{(2\pi)^2} \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} = \frac{m^2}{(2\pi)^5} |\mathcal{T}|^2 d\Omega_N d\mathbf{k}. \quad (19)$$

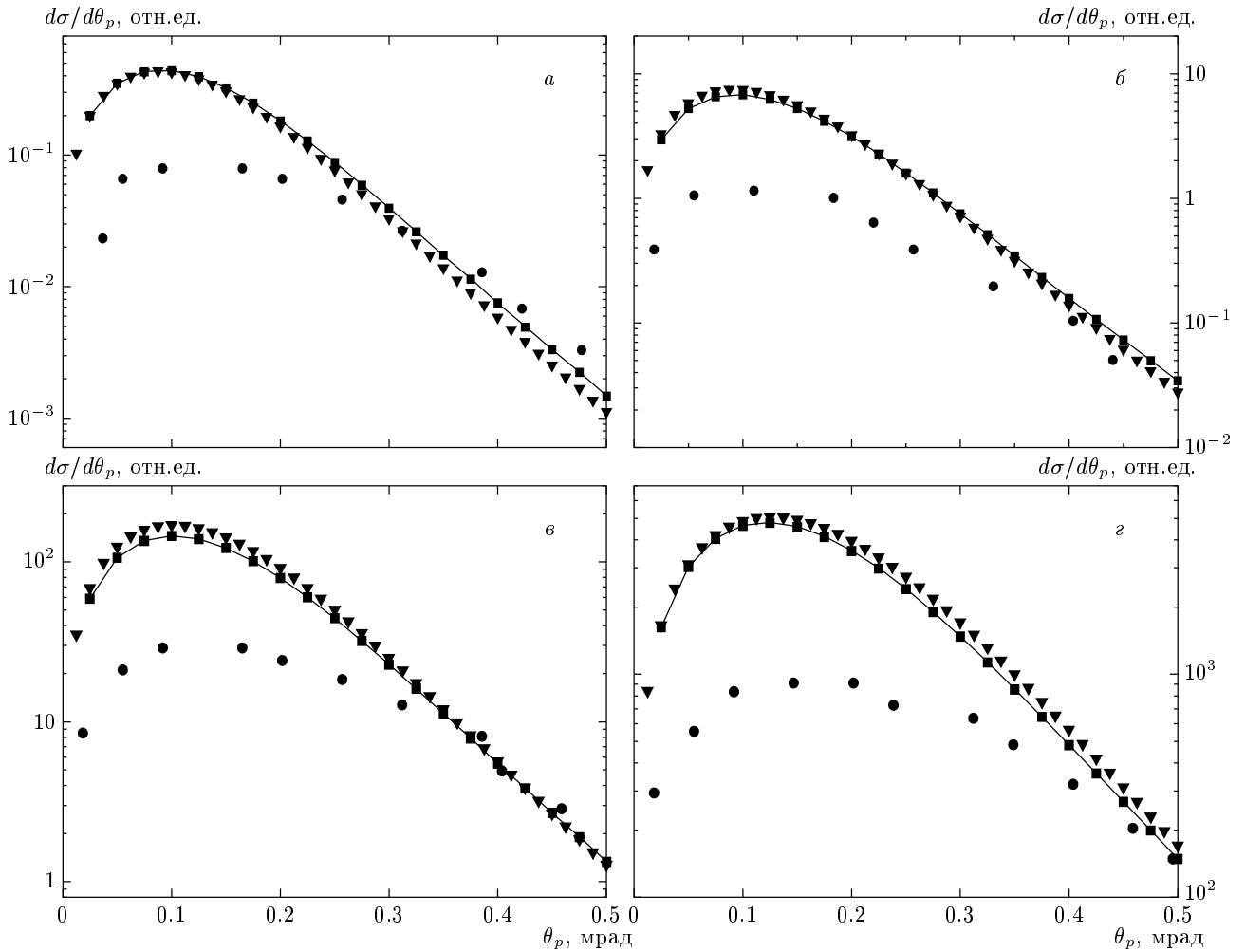


Рис. 1. Однократное дифференциальное сечение $d\sigma/d\theta_p$ для реакции $p + \text{He} \rightarrow \text{H} + \text{He}^+$, рассчитанное с использованием функций CPV (сплошная кривая), ВК (квадраты), Ну (треугольники) при четырех различных энергиях столкновения E_p : а — 1.4 МэВ; б — 0.8 МэВ; в — 0.4 МэВ; г — 0.15 МэВ. Относительная погрешность эксперимента (кружки) в случае а не превышает 10% в указанном диапазоне углов

Однократное дифференциальное сечение, которое мы считали, следует из (19):

$$\frac{d\sigma}{d\theta_p} = \frac{m^2 \theta_p}{(2\pi)^4} \int |\mathcal{T}|^2 d\mathbf{k}. \quad (20)$$

Для реакции SC формула (20) трансформируется в

$$\frac{d\sigma}{d\theta_p} = \frac{m^2 \theta_p}{2\pi} |\mathcal{T}|^2. \quad (21)$$

3. РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

На рис. 1 и 2 представлены результаты расчетов сечений (20) и (21) с амплитудой $\mathcal{T}_0^{(1)}$. Для расчетов использовались три функции $\Phi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$:

1) простейшая из функций Хиллерааса [10]

$$\Phi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{Z^3}{\pi} \exp[-Z(r_1 + r_2)], \quad Z = \frac{27}{16}$$

(обозначена аббревиатурой Ну);

2) одна из лучших функций Бонама и Коля [11] (номер 17, обозначена как ВК);

3) факторизованная двенадцатикомпонентная коррелированная вариационная функция [12], обозначаемая как CVP, смоделированная авторами специально для данной работы. Экспериментальные точки взяты из работы [1].

Следует сразу отметить несколько особенностей рассматриваемых процессов. Во-первых, значение $v_p \approx 7$ на верхнем пределе диапазона энергий прото-

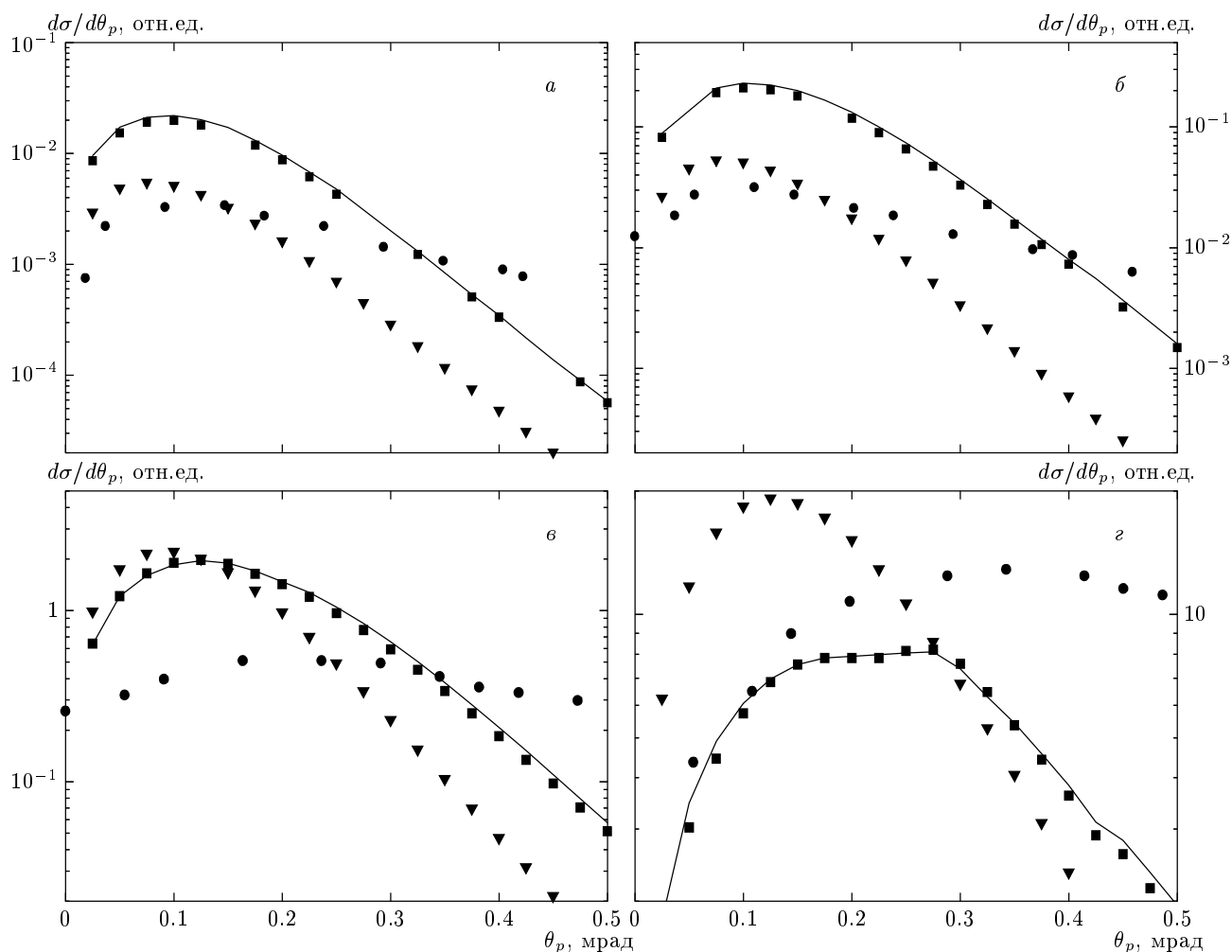


Рис. 2. То же, что на рис. 1 для реакции $p + \text{He} \rightarrow \text{H} + e + \text{He}^{++}$. Относительная погрешность эксперимента в случае *а* не превышает 20 % в указанном диапазоне углов

на позволяет рассматривать скорость протона как большой параметр в задаче. Переданный импульс $q \geq v_p/2$ тоже большая величина, что отличает реакцию захвата от бинарных реакций $(e, 2e)$ и $(e, 3e)$, где эта величина невелика ($q \sim 0-2$). С другой стороны, если, следуя аналогии с процессами $(e, 2e)$ и $(e, 3e)$, пересчитать скорость v_p на энергию начального электрона, то на верхнем пределе она будет соответствовать 700 эВ, что явно недостаточно, чтобы ограничиться импульсным приближением.

Во-вторых, нетрудно показать, что $\mathcal{T}_0^{(1)} \propto v_p^{-6}$ в случае простейшей сепарабельной функции Ну. Такой же порядок малости сохранится и для других, более коррелированных, функций. Однако, если исследовать, даже качественно, второе борновское приближение [13], либо более аккуратно посчитать двухцентровую функцию Ψ_{out} в (12), то можно убе-

диться, что там имеются слагаемые того же порядка малости. Таким образом, даже при асимптотически больших v_p не следует ожидать, что $\mathcal{T}_0^{(1)}$ является подходящим приближением.

Проявление отмеченных особенностей мы и наблюдаем на рисунках. В случае реакций SC все расчеты практически совпадают, но достаточно заметно отличаются от эксперимента: 1) абсолютные величины в пике при $E_p = 1.4$ МэВ расходятся примерно в шесть раз; 2) сам пик сдвинут влево по углу рассеяния; 3) форма кривых не совпадает (экспериментальная кривая после пика убывает значительно медленнее).

То же относится и к реакциям TI, хотя результаты расчетов для коррелированных и некоррелированных функций различаются, что и следовало ожидать.

Из сравнения теории с экспериментом следует, что даже при сверхмалых углах, где, по-видимому, амплитуда $\mathcal{T}_0^{(1)}$ все же доминирует и несет некоторую эксклюзивную информацию об электрон-электронных корреляциях в мишени, поправки от других механизмов в рамках первого и второго борновских приближений все же достаточно велики, чтобы говорить о реакции $p + A \rightarrow H + e + A^{++}$ как о полезной для метода угловой спектроскопии корреляций.

Авторы благодарны Х. Шмидт-Бекингу (H. Schmidt-Böcking) за полезные дискуссии. Работа выполнена при частичном финансировании федеральной целевой научно-технической программы «Фундаментальная спектроскопия» Минпромнауки РФ (контракт 108-39(00)-П).

ЛИТЕРАТУРА

1. A. Mergel, PhD Thesis, Univ. Frankfurt/Main, Shaker Verlag (1996).
2. A. Mergel, R. Dörner, M. Achler et al., Phys. Rev. Lett. **79**, 387 (1997).
3. A. Mergel, R. Dörner, Kh. Khayyat et al., Phys. Rev. Lett. **86**, 2257 (2001).
4. Dr. Belkić, R. Gayet, and A. Salin, Phys. Rep. **56**, 281 (1979).
5. В. И. Лендъел, В. Ю. Лазур, М. И. Карбованец, Р. К. Янев, *Введение в теорию атомных столкновений*, Выща школа, Львов (1989), гл. 5.
6. L. H. Thomas, Proc. Roy. Soc. London, Ser. B **114**, 561 (1927); J. S. Briggs and K. Taulbjerg, J. Phys. B **12**, 2565 (1979).
7. S. G. Tolmanov and J. H. McGuire, Phys. Rev. A **62**, 32711 (2000).
8. В. Г. Неудачин, Ю. В. Попов, Ю. Ф. Смирнов, УФН **169**, 1111 (1999).
9. Yu. V. Popov, C. Dal Cappello, and K. Kouzakov, J. Phys. B **29**, 5901 (1996).
10. Г. Бете, Э. Солпитер, *Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами*, Физматгиз, Москва (1960).
11. R. A. Bonham and D. A. Kohl, J. Chem. Phys. **45**, 2471 (1966).
12. О. Чулуунбаатар, I. V. Puzynin, and S. I. Vinitzky, J. Phys. B **34**, L425 (2001).
13. А. М. Бродский, В. С. Потапов, В. В. Толмачев, ЖЭТФ **58**, 264 (1970).