

УДК 539.186

PACS: 03.65. –w; 34.50.-s; 34.80.Dp; 34.70.+e; 31.15.–p

DOI: 10.24144/2415-8038.2017.42.137-152

В. Ю. Лазур<sup>1</sup>, М. І. Карбованець<sup>1</sup>, В. В. Алексій<sup>1</sup>, С. І. Мигалина<sup>2</sup><sup>1</sup>Ужгородський національний університет, 88000, Ужгород, вул. Волошина, 54<sup>2</sup>Ужгородський національний університет, 88000, Ужгород, вул. Університетська, 14а

e-mail: volodymyr.lazur@uzhnu.edu.ua

## МЕТОД СПОТВОРЕНИХ ХВИЛЬ НЕПЕРЕРВНОГО СПЕКТРУ В ТЕОРІЇ ДВОЕЛЕКТРОННОЇ ПЕРЕЗАРЯДКИ

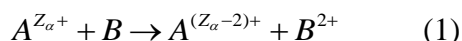
На основі інтегральних рівнянь Додда-Грайдера розроблено чотири-частинковий формалізм методу спотворених хвиль неперервного спектру, який використовується для описання процесів подвійної перезарядки у високоенергетичних іон-атомних зіткненнях. Для амплітуди реакції в наближенні механізму одночасного захоплення двох електронів знайдено загальний вираз, який враховує кулонівські ефекти в початковому і кінцевому станах. Застосування загальної теорії проілюстровано на прикладі реакції двоелектронної перезарядки при зіткненні атомів гелію з  $\alpha$ -частинками. Результати обчислень перерізів добре узгоджуються з експериментальними і теоретичними даними.

**Ключові слова:** двоелектронна перезарядка, іон-атомні зіткнення, кулонівська взаємодія, рівняння Додда-Грайдера.

### Вступ

При зіткненні з багатозарядними іонами атомів, більш складних ніж атом водню, крім двоелектронної перезарядки та іонізації, можуть відбуватися й інші процеси. Це, перш за все, процеси двоелектронного захоплення, захоплення з одночасною іонізацією чи збудження іона та ін.

У даній роботі ми зупинимося на проблемах теоретичного опису процесів двоелектронного захоплення:



в області проміжних і великих швидкостей зіткнення іонів  $A^{Z_{\alpha}^{+}}$  з атомами  $B$ . Перерізи двоелектронних процесів (1) досить великі (порядку  $10^{-18} - 10^{-16} \text{ см}^2$ ), тому внесок таких процесів в обдирання атомів при зіткненнях з іонами, взагалі кажучи, необхідно враховувати поряд з одноелектронною іонізацією і одноелектронною перезарядкою, особливо в області проміжних швидкостей зіткнення, де

перерізи перезарядки та іонізації є величинами одного порядку.

Точна постановка задачі про розсіяння в системі декількох частинок була сформульована Фаддєєвим ще в 1960 році [1]. На сьогодні розроблено ряд методів розв'язку рівнянь Фаддєєва, які застосовуються в ядерній задачі трьох тіл. Що ж стосується ядерної задачі більшого числа частинок, то розрахунки, засновані на інтегральних рівняннях Фаддєєва-Якубовського, проводились для чотирьох частинок, проте можливість розв'язку цих рівнянь для 5, 6 і більше частинок залишається проблематичною.

У задачах атомних зіткнень ситуація ускладнюється, і там результатів, отриманих за допомогою рівнянь Фаддєєва, значно менше. При великих енергіях налітаючих частинок, проблем немає. Налітаюча частинка пролітає повз атом настільки швидко, що не встигає значно змінити його стан, і в цій області енергій добре працюють високоенергетичні наближення Борна, Ситенко-Глаубера і т. д. Що ж

стосується області проміжних енергій, найбільш цікавої для практичних застосувань, то тут ситуація досить складна. Методи, які з успіхом використовуються при малих і великих енергіях, тут не застосовні. Цей висновок відноситься і до методу сильного зв'язку каналів, реалізація якого в області проміжних енергій ускладнюється необхідністю проведення трудомістких чисельних розрахунків. Це відноситься і до детально розроблених асимптотичних за великою між'ядерною відстанню методів теорії атомних зіткнень, оскільки при відносних швидкостях руху важких частинок, близьких до орбітальної швидкості зв'язаного електрона, навпаки, робочими є між'ядерні відстані, близькі до розміру атома.

Фізичні особливості процесів розсіювання атомних частинок при проміжних енергіях зумовлені сильним спотворенням електронних хвильових функцій внаслідок наявності далекодіючої кулонівської взаємодії між частинками, в результаті якої реальні переходи електронів з початкового в кінцевий стан супроводжуються масою інших, віртуальних, переходів. Для опису цих специфічних особливостей кулонівської взаємодії використовують різні наближені варіанти шредінгерівського формалізму, найбільш популярним з яких є метод спотворених хвиль неперервного спектру (CDW [2, 3]). Використання вказаного методу в задачах одноелектронної іонізації [4] і одноелектронної перезарядки [5] приводить до хорошого узгодження теорії з експериментальними даними при великих і середніх відносних швидкостях. Успішне застосування CDW-методу багато в чому пов'язано з правильним врахуванням кулонівських асимптотичних умов в обох каналах реакції.

Успіхи, досягнуті у вивченні одноелектронних процесів перезарядки та іонізації на основі CDW-методу [5-7], спонукали нас розробити шредінгерівський формалізм методу спотворених хвиль для опису процесів двоелектронного захоплення (1).

У даній роботі на основі інтегральних рівнянь Додда-Грайдера для системи чотирьох частинок описується простий формалізм, що використовується для аналізу процесу двоелектронної перезарядки при середніх і великих швидкостях відносного руху. Цей формалізм аналогічний формалізму CDW-методу [2, 3] для задачі одноелектронної перезарядки і виявляється лише трохи більш громіздким, ніж останній. Амплітуда реакції (1) розраховується в наближенні механізму одночасного захоплення налітаючою частинкою двох електронів мішені. Застосування загальної теорії проілюстровано на прикладі реакції двоелектронної перезарядки при зіткненні атомів гелію з  $\alpha$ -частинками.

### Інтегральні рівняння Додда-Грайдера як основа для побудови теорії процесів двоелектронного обміну

В рамках нерелятивістської квантової механіки розглянемо зіткнення в системі чотирьох частинок  $\alpha, \beta, \gamma_1$  і  $\gamma_2$ , в якому три частки як в початковому, так і в кінцевому станах зв'язані, тобто утворюють «складну» частинку

$$\alpha + (\beta; \gamma_1, \gamma_2) \rightarrow (\alpha; \gamma_1, \gamma_2) + \beta, \quad (2)$$

де символ  $(\lambda; \gamma_1, \gamma_2)$  позначає відповідну складову частинку ( $\lambda = \alpha, \beta$  – атомні ядра і  $\gamma_1, \gamma_2$  – електрони).

Без обмеження загальності спіни частинок можна не враховувати, оскільки кулонівські ефекти, які нас цікавлять, не залежать від спінів. Введемо повний гамільтоніан системи  $H_0 + V$ , де  $H_0$  – оператор кінетичної енергії чотирьох частинок в системі їх центра мас,

$$V = \sum_{k=1}^2 (V_{\alpha, \gamma_k} + V_{\beta, \gamma_k}) + V_{\gamma_1, \gamma_2} + V_{\alpha, \beta} \quad (3)$$

– повна взаємодія,  $V_{\alpha, \gamma_1}$  – оператор парної взаємодії частинок  $\alpha$  і  $\gamma_1$  і т.д.

Позначимо через  $V_\alpha (V_\beta)$  ефективну взаємодію, яка формує складну частинку в початковому (кінцевому) каналі реакції (2);  $H_\alpha = H_0 + V_\alpha$  ( $H_\beta = H_0 + V_\beta$ ) – гамільтоніан початкового (кінцевого) каналу;  $G(W) = [W - H]^{-1}$  – функція Гріна (резольвента) гамільтоніана  $H$ . Визначимо також оператор  $v_\lambda = V - V_\lambda$  ( $\lambda = \alpha, \beta$ ).

Амплітуда переходу  $T_{\alpha\beta}^-$  з каналу « $\alpha$ » в канал « $\beta$ » в *prior*-формалізмі визначається стандартним чином

$$T_{\alpha\beta}^- = \lim_{W \rightarrow E+i0} \langle \Phi_\beta | v_\alpha + v_\beta G(W) v_\alpha | \Phi_\alpha \rangle = \equiv \langle \Phi_\beta | U_{\alpha\beta}^- | \Phi_\alpha \rangle. \quad (4)$$

Тут  $U_{\alpha\beta}^-$  – оператор переходу з каналу  $\alpha$  в канал  $\beta$ ;  $\langle \Phi_\beta |$ ,  $| \Phi_\alpha \rangle$  – відповідно кінцевий і початковий асимптотичні стани системи, які є власними функціями операторів  $H_\beta$ ,  $H_\alpha$  з власними значеннями  $\tilde{E}_\beta$ ,  $\tilde{E}_\alpha$ . На енергетичній поверхні  $\tilde{E}_\beta = \tilde{E}_\alpha = E$ ,  $E$  – повна енергія чотиричастинкової системи.

Для оператора переходу в системі з трьох частинок можна записати інтегральне рівняння, вперше отримане Доддом і Грайдером [8]. Діючи за такою ж схемою, як і в тричастинковому випадку [8], можна виписати подібне рівняння і для оператора переходу в системі чотирьох частинок. З цією метою представимо каналну взаємодію  $v_\lambda$  ( $\lambda = \alpha, \beta$ ) у вигляді суми двох доданків  $v_\lambda = (v_\lambda - w_\lambda) + w_\lambda$  – явний вигляд яких дамо нижче. Тут  $w_\alpha$  і  $w_\beta$  – спотворюючі потенціали у вхідному і вихідному каналах реакції (2). Введемо відповідні цим потенціалам хвильові оператори Меллера

$$\omega_\alpha^+ = 1 + (E - H_\alpha - w_\alpha + i\varepsilon)^{-1} w_\alpha = = 1 + g_\alpha^+ w_\alpha, \quad (5a)$$

$$\omega_\beta^- = 1 + (E - H_\beta - w_\beta - i\varepsilon)^{-1} w_\beta = = 1 + g_\beta^- w_\beta, \quad (5b)$$

де  $\varepsilon$  – як зазвичай мале додатне число.

За аналогією з тричастинковим випадком, введемо в розгляд допоміжний потенціал  $v_\chi$ , що відповідає віртуальному проміжному каналу « $\chi$ », а також відповідний йому грінівський оператор  $g_\chi^+ = (E - H + v_\chi + i\varepsilon)^{-1}$ . Тоді рівняння для чотиричастинкового оператора переходу з урахуванням використаних позначень має вигляд

$$U_{\alpha\beta}^- = \omega_\beta^{-*} \left\{ [1 + (v_\beta - w_\beta) g_\chi^+] (v_\alpha - w_\alpha) \omega_\alpha^+ + + (v_\beta - w_\beta) g_\chi^+ v_\chi G_\beta^+ U_{\alpha\beta}^- \right\}. \quad (6)$$

Поки що це точне рівняння. Зробимо тепер наближення для оператора переходу  $U_{\alpha\beta}^-$ , а саме, в правій частині рівняння (6) утримаємо тільки нульову ітерацію. В результаті для амплітуди переходу  $T_{\alpha\beta}^-$  матимемо наступне представлення

$$T_{\alpha\beta}^- = \langle \Phi_\beta | \omega_\beta^{-*} [1 + g_\chi^+ (v_\beta - w_\beta)] (v_\alpha - w_\alpha) \omega_\alpha^+ | \Phi_\alpha \rangle = = T_{\alpha\beta}^- (DWB) + \langle \Phi_\beta | \omega_\beta^{-*} [g_\chi^+ (v_\beta - w_\beta)] \times \times (v_\alpha - w_\alpha) \omega_\alpha^+ | \Phi_\alpha \rangle, \quad (7)$$

де  $T_{\alpha\beta}^- (DWB) = \langle \Phi_\beta | \omega_\beta^{-*} (v_\alpha - w_\alpha) \omega_\alpha^+ | \Phi_\alpha \rangle$  амплітуда реакції (2) в борнівському наближенні спотворених хвиль (DWB). Перший член в правій частині (7) відповідає прямій передачі електронів від однієї атомної частинки до іншої без додаткових перерозсіань, в той час як другий член описує двоступінчаті переходи електронів через неперервний спектр з атома мішені в стани, зв'язані відносно швидкої частинки.

Для опису системи чотирьох частинок в координатному представленні виділимо два стандартних набори приведених координат  $\vec{r}_\alpha$ ,  $\vec{x}_\kappa'$  і  $\vec{r}_\beta$ ,  $\vec{s}_\kappa'$  ( $\kappa = 1, 2$ ). Ці величини виражаються через координати частинок  $\vec{r}_i$  і їх маси  $m_i$  ( $i = 1, 2, 3, 4$ ) формулами:

$$\vec{r}_\alpha = \vec{r}_3 - (\vec{r}_1 + \vec{r}_2 + m_\beta \vec{r}_4) / (m_\beta + 2) ,$$

$$\vec{x}_\kappa' = \vec{r}_\kappa - \left( m_\beta \vec{r}_4 + \sum_{i=1}^{\kappa-1} \vec{r}_i \right) / (m_\beta + \kappa - 1) , \quad (8)$$

$$\vec{r}_\beta = \vec{r}_4 - (\vec{r}_1 + \vec{r}_2 + m_\alpha \vec{r}_3) / (m_\alpha + 2) ,$$

$$\vec{s}_\kappa' = \vec{r}_\kappa - \left( m_\alpha \vec{r}_3 + \sum_{i=1}^{\kappa-1} \vec{r}_i \right) / (m_\alpha + \kappa - 1) , \quad (9)$$

де цифри 1, 2, 3, 4 нумерують частинки  $\gamma_1$ ,  $\gamma_2$ ,  $\alpha$ ,  $\beta$  відповідно,  $m_{\alpha,\beta} = m_{3,4} / m$  причому  $m_1 = m_2 = m$ . Введемо радіус-вектори  $\vec{x}_\kappa$  і  $\vec{s}_\kappa$ , що визначають положення  $\kappa$ -го електрона ( $\gamma_\kappa$ ) щодо ядер  $\beta$  і  $\alpha$  відповідно; їх різниця  $\vec{x}_\kappa - \vec{s}_\kappa = \vec{R}$  - відстань між ядрами  $\beta$  і  $\alpha$ . В цих позначеннях каналні взаємодії  $U_\alpha$  і  $U_\beta$  мають вигляд

$$U_\alpha = -\frac{Z_\alpha}{s_1} + \frac{Z_\alpha Z_\beta}{R} - \frac{Z_\alpha}{s_2} ,$$

$$U_\beta = -\frac{Z_\beta}{x_1} + \frac{Z_\alpha Z_\beta}{R} - \frac{Z_\beta}{x_2} , \quad (10)$$

де  $Z_\alpha$  і  $Z_\beta$  - заряди ядер  $\alpha$  і  $\beta$  відповідно.

Власні стани  $|\Phi_\alpha\rangle$  ( $|\Phi_\beta\rangle$ ) гамільтоніана  $H_\alpha$  ( $H_\beta$ ) мають вигляд добутку хвильової функції  $\varphi_\alpha(\vec{x}_1', \vec{x}_2')$  ( $\varphi_\beta(\vec{s}_1', \vec{s}_2')$ ) зв'язаного стану системи ( $\beta; \gamma_1, \gamma_2$ ) ( $(\alpha; \gamma_1, \gamma_2)$ ) і плоскої хвилі відносного руху частинок в початковому (кінцевому) стані:

$$\Phi_\alpha = \varphi_\alpha(\vec{x}_1', \vec{x}_2') \exp(i\vec{k}_\alpha \vec{r}_\alpha) ;$$

$$\Phi_\beta = \varphi_\beta(\vec{s}_1', \vec{s}_2') \exp(-i\vec{k}_\beta \vec{r}_\beta) , \quad (11)$$

де  $\vec{k}_\alpha$  ( $\vec{k}_\beta$ ) - імпульс налітаючої (розсіяної) частинки в СЦМ до (після) зіткнення.

Обговоримо тепер фізичний зміст операторів, які входять у формулу (7). Формально оператор  $\omega_\alpha^+$  ( $\omega_\beta^-$ ) можна розглядати як оператор, що переводить почат-

ковий (кінцевий) асимптотичний стан системи  $|\Phi_\alpha\rangle$  ( $|\Phi_\beta\rangle$ ) у спотворену хвилю  $|\chi_\alpha^+\rangle$  ( $|\chi_\beta^-\rangle$ ) у вхідному (у вихідному) каналі реакції

$$|\chi_\alpha^+\rangle = \omega_\alpha^+ |\Phi_\alpha\rangle , \quad (12)$$

$$|\chi_\beta^-\rangle = \omega_\beta^- |\Phi_\beta\rangle . \quad (13)$$

Нарешті,  $U_\alpha = U_\alpha - w_\alpha$  можна розглядати як оператор, що викликає перехід системи із початкового стану ( $\alpha$ ) в кінцевий ( $\beta$ ).

Введемо вектор стану  $|\Psi_\beta^-\rangle$ , визначивши його співвідношенням

$$|\Psi_\beta^-\rangle = [1 + g_\chi^{*+} (U_\beta - w_\beta)] |\chi_\beta^-\rangle . \quad (14)$$

У позначеннях (12)-(14) амплітуду переходу (7) можна представити у вигляді

$$T_{\alpha\beta}^- = \langle \Psi_\beta^- | U_\alpha | \chi_\alpha^+ \rangle . \quad (15)$$

Отримаємо явний вигляд диференціальних рівнянь для розрахунку спотворень у вхідному і у вихідному каналах реакції. Застосовуючи оператор  $(E - H_\alpha - \omega_\alpha)$  до обох частин рівності (12) і спрямовуючи  $\varepsilon \rightarrow 0^+$  отримаємо наступне рівняння для спотвореної хвилі у вхідному каналі:

$$(E - H_\alpha - w_\alpha) |\chi_\alpha^+\rangle = (E - H_\alpha) |\Phi_\alpha\rangle = 0 ;$$

$$E = E_\alpha + k_\alpha^2 / 2\mu_\alpha , \quad (16)$$

де символ  $\varepsilon \rightarrow 0^+$  означає, що параметр  $\varepsilon$  невід'ємний. Аналогічні рівняння можна отримати на основі (13) і для спотвореної хвилі у вихідному каналі:

$$(E - H_\beta - w_\beta) |\chi_\beta^-\rangle = (E - H_\beta) |\Phi_\beta\rangle = 0 ;$$

$$E = E_\beta + k_\beta^2 / 2\mu_\beta . \quad (17)$$

Тут  $E_\alpha$  і  $E_\beta$  - енергії зв'язаних станів складових частинок ( $\beta; \gamma_1, \gamma_2$ ) і ( $\alpha; \gamma_1, \gamma_2$ );  $\mu_\alpha = m_\alpha(m_\beta + 2)/M$ ,  $\mu_\beta = m_\beta(m_\alpha + 2)/M$  - добутки мас відповідних груп частинок,  $M = m_\alpha + m_\beta + 2$ .

В основі подальших виведень лежить одна «технічна» вимога, яка допоможе знайти явний розв'язок розглянутої нами задачі. Фактично мова йтиме про спеціальний вибір функції  $\chi_\beta^-$ , заснований на простих фізичних міркуваннях. Вимагатимемо, щоб розв'язок рівняння (17) представився у факторизованому вигляді

$$|\chi_\beta^- \rangle = |\varphi_\beta(\vec{s}_1', \vec{s}_2') f(\vec{r}_\beta) \rangle, \quad (18)$$

де функція описує асимптотичну рух зв'язаної системи з трьох частинок ( $\alpha; \gamma_1, \gamma_2$ ) в кулонівському полі, який створюється четвертою частинкою  $\beta$ .

Ця вимога, природна на перший погляд, насправді є додатковим припущенням. Справа в тому, що представлення для багаточасткової хвильової функції  $\chi_\beta^-$  у формі (18) застосовується, якщо відносна швидкість руху важких частинок більше орбітальної швидкості зв'язаного електрона. Однак, якщо швидкість зіткнення невелика і ядро  $\beta$  досить довго взаємодіє з частинками  $\alpha, \gamma_1, \gamma_2$ , то така факторизація навряд чи обґрунтована.

Диференціальне рівняння (17) має бути доповнене граничною умовою, яка в цьому випадку має вигляд

$$\chi_\beta^- \xrightarrow{r_\beta \rightarrow \infty} \varphi_\beta(\vec{s}_1', \vec{s}_2') \exp\left\{-i\vec{k}_\beta \vec{r}_\beta - i \frac{Z_\beta(Z_\alpha - 2)}{v'} \ln(k_\beta r_\beta - \vec{k}_\beta \vec{r}_\beta)\right\}, \quad \vec{v}' = \vec{k}_\beta / k_\beta. \quad (19)$$

Виконання вимог, які ми пред'явили до функції  $\chi_\beta^-$  легко досягти відповідним вибором спотворюючого потенціалу  $\omega_\beta$  в

рівнянні (17). В якості  $\omega_\beta$  можна вибрати, наприклад, потенціал  $\omega_\beta^{(0)} = Z_\beta(Z_\alpha - 2)/r_\beta$ , тоді функцію  $f(\vec{r}_\beta)$  можна явно виразити через вироджену гіпергеометричну функцію. Однак ми не будемо наводити відповідні формули, так як явний вигляд  $f(\vec{r}_\beta)$  тут несуттєвий.

Перейдемо тепер від рівняння (14) до його диференціальної форми. Застосовуючи до обох частин рівності (14) оператор  $(E - H_\alpha + v_\chi^*)$  і з врахуванням (17), отримаємо (в границі  $\varepsilon \rightarrow 0^+$ ) його диференціальний аналог

$$(E - H_\alpha + v_\chi^*) |\Psi_\beta^- \rangle = v_\chi^* |\chi_\beta^- \rangle. \quad (20)$$

Оскільки розв'язок неоднорідного рівняння (20) з реалістичним локальним потенціалом справа дуже складна, то логічно замінити цей потенціал оператором, вибравши його так, щоб

$$v_\chi^* |\chi_\beta^- \rangle = 0, \quad (21)$$

і надати розв'язку рівняння (20) форму, аналогічну (18),

$$|\Psi_\beta^- \rangle = |\varphi_\beta(\vec{s}_1', \vec{s}_2') \mathfrak{T}^- \rangle, \quad (22)$$

де невідома поки що функція  $\mathfrak{T}^-$  описує спотворення хвильової функції  $\varphi_\beta(\vec{s}_1', \vec{s}_2')$  зв'язаного стану системи ( $\alpha; \gamma_1, \gamma_2$ ) за рахунок її взаємодії з ядром  $\beta$  у вихідному каналі.

Завдяки умові (21) рівняння (20) зводиться до однорідного

$$\left[ E - H_0 + \sum_{\kappa=1}^2 \left( \frac{Z_\beta}{x_\kappa} + \frac{Z_\alpha}{s_\kappa} \right) - \frac{Z_\alpha Z_\beta}{R} - \frac{1}{|\vec{s}_1 - \vec{s}_2|} + v_\chi^* \right] |\Psi_\beta^- \rangle = 0. \quad (23)$$

Використовуючи описані вище два набори приведених відносних координат,

запишемо оператор  $H_0$  в двох еквівалентних формах

$$H_0 = -\frac{1}{2\mu_\alpha} \Delta_{\vec{r}_\alpha} - \sum_{\kappa=1}^2 \frac{1}{2\mu_{\beta\kappa}} \Delta_{\vec{x}_\kappa} = -\frac{1}{2\mu_\beta} \Delta_{\vec{r}_\beta} - \sum_{\kappa=1}^2 \frac{1}{2\mu_{\alpha\kappa}} \Delta_{\vec{s}_\kappa}, \quad (24)$$

де

$$\mu_{\beta\kappa} = (m_\beta + \kappa - 1) / (m_\beta + \kappa),$$

$$\mu_{\alpha\kappa} = (m_\alpha + \kappa - 1) / (m_\alpha + \kappa).$$

На перший погляд може здатися, що проблема розв'язку рівняння (23) взагалі тривіальна. Насправді, це не так. Ускладнення виникають через те, що потенціали взаємодії і оператор  $H_0$ , що фігурують в цьому рівнянні, залежать від різних комбінацій відносних змінних, які використовуються у задачі (наприклад, координат Якобі  $\vec{r}_\alpha$ ,  $\vec{x}_\kappa$  або  $\vec{r}_\beta$ ,  $\vec{s}_\kappa$ , від яких залежить оператор  $H_0$ , і координат  $\vec{x}_\kappa$ ,  $\vec{s}_\kappa$ ,  $\vec{R}$ , від яких залежать потенціали взаємодії). Щоб уникнути цих труднощів, розглянемо наближений спосіб розділення змінних в рівнянні (23), який заснований на явному наближенні, що маси частинок  $\gamma_1$ ,  $\gamma_2$  (електронів) набагато менші мас двох інших часток  $\alpha$  і  $\beta$  (атомних ядер), тобто,  $m_1 = m_2 \ll m_{3,4}$ . В цьому випадку у виразах (8) і (9) можна знехтувати членами, що містять відношення мас  $m_\kappa / m_{3,4}$  ( $\kappa=1, 2$ ), в результаті чого координати Якобі  $\vec{x}_\kappa$ ,  $\vec{r}_\alpha$ ,  $\vec{s}_\kappa$  і  $\vec{r}_\beta$  близькі до координат  $\vec{x}_\kappa$ ,  $\vec{R}$ ,  $\vec{s}_\kappa$  і  $-\vec{R}$  відповідно, тобто

$$\vec{x}_\kappa \cong \vec{x}_\kappa, \quad \vec{s}_\kappa \cong \vec{s}_\kappa,$$

$$\vec{r}_\alpha = \vec{R}, \quad \vec{r}_\beta = -\vec{R}. \quad (25)$$

Підставляючи в рівняння (23) хвильову функцію  $\Psi_\beta^-$  у вигляді (22)

отримуємо, із врахуванням (17) і (25), рівняння відносно  $\mathfrak{Z}^-$

$$\varphi_\beta (E - E_\beta - H_0 - \nu_\beta) \mathfrak{Z}^- + \sum_{\kappa=1,2} \frac{1}{\mu_{\alpha,\beta}} \vec{\nabla}_{\vec{s}_\kappa} \varphi_\beta \vec{\nabla}_{\vec{s}_\kappa} \mathfrak{Z}^- + \nu_\chi^* (\varphi_\beta \mathfrak{Z}^-) = 0. \quad (26)$$

Це рівняння ми повинні розв'язати, враховуючи згадані вище додаткові умови (21), а також граничну умову, що конкретизує динаміку, буде сформульовано нижче. В якості  $\nu_\chi$  в останньому рівнянні виберемо оператор  $\nu_\chi^{(0)}$ , дія якого на довільну функцію  $\Psi$  від  $\vec{r}_\beta$  і  $\vec{s}_\kappa$  ( $\kappa=1,2$ ) описується відношенням

$$\nu_\chi^{(0)} \Psi = - \sum_{\kappa=1,2} (\mu_{\alpha\kappa})^{-1} \vec{\nabla}_{\vec{s}_\kappa} \varphi_\beta \vec{\nabla}_{\vec{s}_\kappa} [\Psi / \varphi_\beta]. \quad (27)$$

Підставляючи вираз (27) для  $\nu_\chi^{(0)}$  в (26) і враховуючи (25) отримуємо рівняння для  $\mathfrak{Z}^-$  такого вигляду:

$$\left[ E - E_\beta + \frac{1}{2\mu_\alpha} \Delta_{\vec{r}_\alpha} + \sum_{\kappa=1,2} \left( \frac{1}{2\mu_{\beta\kappa}} \Delta_{\vec{x}_\kappa} + \frac{Z_\beta}{x_\kappa} \right) - \frac{Z_\alpha Z_\beta}{r_\alpha} \right] \mathfrak{Z}^- = 0. \quad (28)$$

Далі будемо шукати розв'язок рівняння (28), яке на нескінченності має вигляд спотвореної плоскої хвилі з одиничною амплітудою

$$\mathfrak{Z}^- \xrightarrow{r_\beta \rightarrow \infty} f(\vec{r}_\beta) \xrightarrow{r_\beta \rightarrow \infty} \exp \left\{ -i \vec{k}_\beta \vec{r}_\beta - i \frac{Z_\beta (Z_\alpha - 2)}{\nu} \ln(k_\beta r_\beta - \vec{k}_\beta \vec{r}_\beta) \right\}. \quad (29)$$

Розв'язуючи рівняння (28) методом розділення змінних, знайдемо, що

$$\mathfrak{Z}^- = C^- \Lambda^{(-)}(\vec{r}_\alpha) \prod_{\kappa=1}^2 \Lambda_\kappa^{(-)}(\vec{x}_\kappa),$$

$$C^- = const, \quad (30)$$

де двочастинкові кулонівські спотворюючі функції  $\Lambda_{\kappa}^{(-)}(\vec{x}_{\kappa}')$  і  $\Lambda^{(-)}(\vec{r}_{\alpha})$  описуються в термінах вироджених гіпергеометричних функцій співвідношеннями

$$\Lambda_{\kappa}^{(-)}(\vec{x}_{\kappa}') = N^{(+)}(v'_{\beta\kappa}) \exp(i\vec{q}_{\kappa}\vec{x}_{\kappa}') \times F(-iv'_{\beta\kappa}, 1, -i\vec{q}_{\kappa}\xi_{\kappa}), \quad (31)$$

$$\Lambda^{(-)}(\vec{r}_{\alpha}) = N^{(-)}(v'_{\alpha}) \exp(i\vec{q}_{\alpha}\vec{r}_{\alpha}) \times F(iv'_{\alpha}, 1, -iq_{\alpha}\xi_{\alpha}). \quad (32)$$

Тут  $N^{(\pm)}(v) = \Gamma(1 \pm iv) \exp(\pm \pi v / 2)$  - коефіцієнти нормування;  $\xi_{\kappa} = x'_{\kappa} + \hat{q}_{\kappa} \vec{x}_{\kappa}'$ ,  $\xi_{\alpha} = x'_{\alpha} + \hat{q}_{\alpha} \vec{r}_{\alpha}$  - двочастинкові параболічні змінні;  $\hat{q}_{\kappa}$  і  $\hat{q}_{\alpha}$  - одиничні вектори, напрямлені вздовж векторів  $\vec{q}_{\kappa}$  і  $\vec{q}_{\alpha}$ ;  $v'_{\beta\kappa} = Z_{\beta} \mu_{\beta\kappa} / q_{\kappa}$ ,  $v'_{\alpha} = Z_{\alpha} Z_{\beta} \mu_{\alpha} / q_{\alpha}$  - характерні кулонівські параметри. Із закону збереження енергії випливає, що імпульсні змінні  $\vec{q}_{\kappa}$  і  $\vec{q}_{\alpha}$  повинні задовольняти рівнянню

$$E - E_{\beta} = \frac{k_{\beta}^2}{2\mu_{\beta}} = \frac{q_{\alpha}^2}{2\mu_{\alpha}} + \sum_{\kappa=1,2} \frac{q_{\kappa}^2}{2\mu_{\beta\kappa}}. \quad (33)$$

Далі враховуючи асимптотичний вигляд функції  $F(a, b, x)$  при  $x \rightarrow \infty$ , знайдемо із умов зшивання асимптотики функції (30) з ейкональною асимптотикою (29), що

$$\sum_{\kappa=1,2} \vec{q}_{\kappa} \vec{x}_{\kappa}' + \vec{q}_{\alpha} \vec{r}_{\alpha} = -\vec{k}_{\beta} \vec{r}_{\beta}, \quad (34)$$

$$C^{-} \exp \left\{ i \sum_{\kappa=1,2} v'_{\beta\kappa} \ln(q_{\kappa} \xi_{\kappa}) - i v'_{\alpha} \ln(q_{\alpha} \xi_{\alpha}) \right\} \xrightarrow{r_{\beta} \rightarrow \infty} \exp \left\{ i \frac{Z_{\beta}(Z_{\alpha} - 2)}{v} \times \ln(k_{\beta} r_{\beta} - \vec{k}_{\beta} \vec{r}_{\beta}) \right\}. \quad (35)$$

Виразимо  $\vec{r}_{\beta}$  через координати  $\vec{r}_{\alpha}$ ,  $\vec{x}'_1$  і  $\vec{x}'_2$  за допомогою формули

$$\vec{r}_{\beta} = -a_2 \vec{r}_{\alpha} - \sum_{\kappa=1,2} \frac{b_{\kappa}}{\mu_{\beta}} \vec{x}'_{\kappa};$$

$$\begin{aligned} a_{\kappa} &= m_{\alpha} / (m_{\alpha} + \kappa); \\ b_{\kappa} &= m_{\beta} / (m_{\beta} + \kappa). \end{aligned} \quad (36)$$

Підставимо тепер (36) в праву частину рівності (34) і прирівняємо в обох її частинах члени при  $\vec{r}_{\alpha}$ ,  $\vec{x}'_1$  і  $\vec{x}'_2$ . Отримаємо

$$\begin{aligned} \vec{q}_{\kappa} &= \vec{k}_{\beta} b_{\kappa} / \mu_{\beta} \equiv b_{\kappa} \vec{v}' \xrightarrow{m_{\beta} \rightarrow \infty} \vec{v}', \quad (\kappa=1,2), \\ \vec{q}_{\alpha} &= a_2 \vec{k}_{\beta} \xrightarrow{m_{\alpha} \rightarrow \infty} \vec{k}_{\beta}. \end{aligned} \quad (37)$$

З врахуванням асимптотичної оцінки

$$-i \frac{Z_{\beta}}{v'} \ln \left( \frac{k_{\beta} r_{\beta} - \vec{k}_{\beta} \vec{r}_{\beta}}{v' x'_{\kappa} + \vec{v}' \cdot \vec{x}'_{\kappa}} \right) \xrightarrow{r_{\beta} \rightarrow \infty} \ln(\mu_{\beta}^{-iZ_{\beta}/v'}) \quad (\kappa=1,2), \quad (38)$$

знайдемо з умови зшивання (35), що  $C^{-} = \mu_{\beta}^{2iZ_{\beta}/v'}$ . Із формул (30)-(32) і (37) випливає, що спотворюючу функцію  $\mathfrak{T}^{-}$  у вихідному каналі можна представити у вигляді

$$\begin{aligned} \mathfrak{T}^{-} &= \mu_{\beta}^{2iv'_{\beta}} N^{(-)}(v') [N^{(+)}(v'_{\beta})]^2 \exp(-i\vec{k}_{\beta} \vec{r}_{\beta}) \times \\ &\quad \times F(iv', 1, -ik_{\beta} r_{\alpha} - i\vec{k}_{\beta} \vec{r}_{\alpha}) \times \\ &\quad \times \prod_{\kappa=1}^2 F(-iv'_{\beta}, 1, -iv' x'_{\kappa} - i\vec{v}' \cdot \vec{x}'_{\kappa}), \end{aligned} \quad (39)$$

де  $v'_{\beta} = Z_{\beta} / v'$ ,  $v' = Z_{\alpha} Z_{\beta} / v'$ .

Отже, побудована хвильова функція кінцевого стану  $\Psi_{\beta}^{-}$  (визначається формулами (22), (39)), яка в розглянутій задачі описує розсіювання зарядженої частинки  $\beta$  на зв'язаному комплексі трьох частинок  $\alpha$ ,  $\gamma_1$ ,  $\gamma_2$ . Важливим є те, що ефекти парних кулонівських взаємодій в ній проявляються мультиплікативним чином. Далі опишемо хвильову функцію початкового стану. Цю функцію можна отримати, розв'язавши диференціальне рівняння (16). Доповнимо вказане рівняння граничною умовою на нескінченності

$$\chi_{\alpha}^{+} \xrightarrow{r_{\alpha} \rightarrow \infty} \varphi_{\alpha}(\vec{x}_1', \vec{x}_2') \times \exp \left\{ i \vec{k}_{\alpha} \vec{r}_{\alpha} + i \frac{Z_{\alpha}(Z_{\beta} - 2)}{\nu} \ln(k_{\alpha} r_{\alpha} - \vec{k}_{\alpha} \vec{r}_{\alpha}) \right\},$$

$$\vec{\nu} = \vec{k}_{\alpha} / \mu_{\alpha}. \quad (40)$$

Підставимо функцію у вигляді добутку

$$\chi_{\alpha}^{+} = \varphi_{\alpha}(\vec{x}_1', \vec{x}_2') \mathfrak{T}^{+} \quad (41)$$

в рівняння (16) і здійснюючи прості перетворення, отримуємо рівняння для  $\mathfrak{T}^{+}$ :

$$\varphi_{\alpha}(E - E_{\alpha} - H_0 - \nu_{\alpha}) \mathfrak{T}^{+} + \sum_{\kappa=1,2} (\mu_{\beta\kappa})^{-1} \vec{\nabla}_{\vec{x}'_{\kappa}} \varphi_{\alpha} \vec{\nabla}_{\vec{x}'_{\kappa}} \mathfrak{T}^{+} + U_{\alpha}(\varphi_{\alpha} \mathfrak{T}^{+}) = 0. \quad (42)$$

Для обчислень в подальшому нам буде потрібно конкретний вигляд оператора  $U_{\alpha} = \varphi_{\alpha} - \omega_{\alpha}$ . При виборі  $U_{\alpha}$  можна навести лиш найзагальніші міркування. По-перше, зрозуміло, що цей оператор повинен бути таким, щоб рівняння (42) мало розв'язок у класі спеціальних або елементарних функцій. При цьому необхідно стежити за тим, щоб хвильова функція початкового стану  $\chi_{\alpha}^{+}$  володіла правильною асимптотичною поведінкою (40) на великих відстанях. По-друге, оператор  $U_{\alpha}$  потрібно підібрати так, щоб спотворення у вхідному ( $\mathfrak{T}^{+}$ ) і в вихідному ( $\mathfrak{T}^{-}$ ) каналах реакції (2) трактувалися однаково. Річ у тому, що несиметричний вибір  $\nu_{\chi}$  і  $U_{\alpha}$  в рівняннях (26) і (42) призводить до несиметричного визначення спотворень в початковому і кінцевому станах, що суперечить основній ідеї CDW-методу [2]. Крім того, якщо відома якась апріорна інформація про хвильові функції розсіяння  $\Psi_{\beta}^{-}$  і  $\chi_{\alpha}^{+}$ , то вона також може бути врахована при виборі  $\nu_{\chi}$  і  $U_{\alpha}$  в рівняннях (26) і (42) відповідно.

Грунтуючись на цих міркуваннях, виберемо в якості  $U_{\alpha}$  оператор  $U_{\alpha}^{(0)}$ , дія якого на довільну функцію  $\Psi$  від  $\vec{r}_{\alpha}$ ,  $\Psi_{\beta}^{-}$ ,  $\vec{x}_1'$  і  $\vec{x}_2'$  описується співвідношенням

$$U_{\alpha}^{(0)} \Psi = - \sum_{\kappa=1,2} (\mu_{\beta\kappa})^{-1} \vec{\nabla}_{\vec{x}'_{\kappa}} \varphi_{\alpha} \vec{\nabla}_{\vec{x}'_{\kappa}} (\Psi / \varphi_{\alpha}). \quad (43)$$

Після підстановки (43) в (42) отримаємо рівняння для  $\mathfrak{T}^{+}$ , яке для подальшого зручно записати у вигляді

$$\left[ E - E_{\alpha} + \frac{1}{2\mu_{\beta}} \Delta_{\vec{r}_{\beta}} + \sum_{\kappa=1,2} \left( \frac{1}{2\mu_{\alpha\kappa}} \Delta_{\vec{s}'_{\kappa}} + \frac{Z_{\alpha}}{s_{\kappa}} \right) - \frac{Z_{\alpha} Z_{\beta}}{r_{\beta}} \right] \mathfrak{T}^{+} = 0. \quad (44)$$

Розв'язок цього рівняння однозначно визначається шляхом порівняння його асимптотики з відповідним ейкональним наближенням. Однак ми не будемо проводити подальшу формалізацію цих міркувань. Необхідна для цього техніка була досить докладно описана вище при побудові розв'язку  $\mathfrak{T}^{-}$  аналогічного рівняння (28). Опускаючи досить громіздкі проміжні викладки, запишемо відразу кінцевий результат (в границі  $m_{3,4} \gg m_1 = m_2$ ):

$$\mathfrak{T}^{+} = \mu_{\alpha}^{-2i\nu_{\alpha}} N^{(-)*}(\nu) \left[ N^{(+)*}(\nu_{\alpha}) \right]^2 \times \exp(i \vec{k}_{\alpha} \vec{r}_{\alpha}) F(-i\nu, 1, i k_{\alpha} r_{\alpha} + i \vec{k}_{\alpha} \vec{r}_{\alpha}) \times \prod_{\kappa=1}^2 F(i\nu_{\alpha}, 1, i\nu s'_{\kappa} + i \vec{\nu} \vec{s}'_{\kappa}), \quad (45)$$

де  $\nu_{\alpha,\beta} = Z_{\alpha,\beta} / \nu$ ,  $\nu = Z_{\alpha} Z_{\beta} / \nu$ .

Далі необхідно підставити вирази (22), (39), (41), (43) і (45) в (15), після чого амплітуду реакції  $T_{\alpha\beta}^{-}$  можна записати у вигляді суми двох доданків, що описують одночасне захоплення двох електронів швидкими іонами при зіткненні їх з атомами:



$$T_{\alpha\beta}^- = -[N^{(+)*}(\nu_\alpha)N^{(+)*}(\nu_\beta)]^2 \iiint d\vec{x}'_1 d\vec{x}'_2 d\vec{r}'_\alpha \exp(i\vec{k}'_\alpha \vec{r}'_\alpha + i\vec{k}'_\beta \vec{r}'_\beta) \mathfrak{R}(\vec{r}'_\alpha, \vec{r}'_\beta) \varphi_\beta^*(\vec{s}'_1, \vec{s}'_2) \times \\ \times \prod_{j=1}^2 F(i\nu'_\beta, 1, i\nu'_j x'_j + i\vec{v}'_j \vec{x}'_j) \sum_{\kappa=1,2} \vec{\nabla}_{\vec{x}'_\kappa} \varphi_\alpha(\vec{x}'_1, \vec{x}'_2) \vec{\nabla}_{\vec{s}'_\kappa} [F(i\nu'_\alpha, 1, i\nu'_1 s'_1 + i\vec{v}'_1 \vec{s}'_1) F(i\nu'_\alpha, 1, i\nu'_2 s'_2 + i\vec{v}'_2 \vec{s}'_2)]. \quad (46)$$

В формулі (46) використано позначення

$$\mathfrak{R}(\vec{r}'_\alpha, \vec{r}'_\beta) = \mu_\alpha^{-2i\nu'_\alpha} \mu_\beta^{-2i\nu'_\beta} N^{(-)*}(\nu) N^{(-)*}(\nu') \times \\ \times F(-i\nu, 1, i\vec{k}'_\alpha \vec{r}'_\beta + i\vec{k}'_\alpha \vec{r}'_\alpha) \times \\ \times F(-i\nu', 1, i\vec{k}'_\beta \vec{r}'_\alpha + i\vec{k}'_\beta \vec{r}'_\beta). \quad (47)$$

Отриманий складний вираз (46) легко спрощується. Насамперед помічаємо, що в разі швидких зіткнень (при  $k_\alpha^2/2\mu_\alpha \gg |E_\beta - E_\alpha|$ ) налітаючі частинки розсіюються в основному вперед, тобто, на досить малі кут  $\hat{k}'_\beta \cong \hat{k}'_\alpha$ . Саме ця область кутів розсіювання внесе домінуючий вклад в повний переріз реакції (2), так як при великих кутах розсіювання (переданих імпульсах) амплітуда переходу стає малою через швидкі осциляції експоненціального фактора  $\exp(i\vec{k}'_\alpha \vec{r}'_\alpha + i\vec{k}'_\beta \vec{r}'_\beta)$  під інтегралом в (46). Фізично це означає, що при малих кутах розсіювання траєкторії можуть вважатися майже прямолінійними і рух ядер відбувається з постійним вектором швидкості. У цьому випадку вектор  $\vec{R}$  може бути представлений у вигляді ортогональної суми  $\vec{R} = \vec{\rho} + \vec{z}$ ,  $\vec{\rho} \vec{z} = 0$ . Врахувавши, що  $\vec{v}' \cong \vec{v}$  і  $m_1 = m_2 = m \ll m_3 \approx m_4$  для показника експоненти в (46) легко встановити наступне співвідношення:

$$\vec{k}'_\alpha \vec{r}'_\alpha + \vec{k}'_\beta \vec{r}'_\beta \cong \vec{p}(\vec{x}'_1 + \vec{x}'_2) + \vec{q}(\vec{s}'_1 + \vec{s}'_2), \quad (48)$$

де

$$-2\vec{p} = \vec{\eta} + \left( \nu - \frac{E_\beta - E_\alpha}{\nu} \right) \hat{v},$$

$$2\vec{q} = \vec{\eta} - \left( \nu - \frac{E_\beta - E_\alpha}{\nu} \right) \hat{v}; \quad \hat{v} = \frac{\vec{v}}{\nu}, \quad (49)$$

$\vec{\eta}$ -ортогональна щодо вектора  $\vec{v}$  компонента вектора переданого імпульсу ( $\vec{\eta} \vec{v} = \vec{\eta} \vec{z} = \vec{\rho} \vec{v} = \vec{\rho} \vec{z} = 0$ ).

Для функції  $\mathfrak{R}(\vec{r}'_\alpha, \vec{r}'_\beta)$  в цьому наближенні справедлива асимптотична оцінка

$$\lim_{m_{\alpha,\beta} \rightarrow \infty} \mathfrak{R}(\vec{r}'_\alpha, \vec{r}'_\beta) = \mu^{-2i(\nu_\alpha + \nu_\beta - \nu)} (\rho\nu)^{2i\nu}, \\ \mu = \frac{m_\alpha m_\beta}{m_\alpha + m_\beta}. \quad (50)$$

Тоді з точністю до несуттєвого фазового множника наш вираз для амплітуди розсіювання (тобто перезарядки (2)) на малі кути набуде вигляду

$$T_{\alpha\beta}^- = -[N^{(+)*}(\nu_\alpha)N^{(+)*}(\nu_\beta)]^2 \sum_{\kappa=1,2} I_{\alpha\beta}^{(\kappa)}, \quad (51)$$

де через  $I_{\alpha\beta}^{(\kappa)}$  позначені матричні елементи

$$I_{\alpha\beta}^{(\kappa)} = \iiint d\vec{x}_1 d\vec{x}_2 d\vec{s}_1 \exp\{i\vec{p}(\vec{x}_1 + \vec{x}_2) + i\vec{q}(\vec{s}_1 + \vec{s}_2)\} \varphi_{\beta}^*(\vec{s}_1, \vec{s}_2) \prod_{j=1}^2 F(i\nu_{\beta}, 1, i\nu x_j + i\bar{\nu} \vec{x}_j) \vec{\nabla}_{\vec{x}_k} \varphi_{\alpha}(\vec{x}_1, \vec{x}_2) \times \\ \times \vec{\nabla}_{\vec{s}_k} [F(i\nu_{\alpha}, 1, i\nu s_1 + i\bar{\nu} \vec{s}_1) F(i\nu_{\beta}, 1, i\nu s_2 + i\bar{\nu} \vec{s}_2)]. \quad (52)$$

Будемо вважати, що активні електрони системи  $(\lambda; \gamma_1, \gamma_2)$ ,  $\lambda = \alpha, \beta$  рухаються в заданому полі остова і їх рух описується гамільтоніаном з розділеними змінними. Тоді хвильову функцію  $\varphi_{\alpha}(\vec{x}_1, \vec{x}_2)$  ( $\varphi_{\beta}(\vec{s}_1, \vec{s}_2)$ ) початкового (кінцевого) стану можна представити у вигляді добутку однакових (так як у випадку зіткнення атома гелію з  $\alpha$ -частинкою початковим і кінцевим станами є  $S^2$ -стани) одноелектронних функцій

$$\varphi_{\alpha}(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = \varphi_{\alpha}(\vec{x}_1) \varphi_{\alpha}(\vec{x}_2), \\ \varphi_{\beta}(\vec{s}_1, \vec{s}_2) = \varphi_{\beta}(\vec{s}_1) \varphi_{\beta}(\vec{s}_2), \quad (53)$$

де  $\varphi_{\alpha}(\vec{x}_k)$  і  $\varphi_{\beta}(\vec{s}_k)$  - водневоподібні хвильові функції в полі ядер з ефективними зарядами  $\alpha = Z_{\beta} - 0,3125$  і  $\beta = Z_{\alpha} - 0,3125$  :

$$\varphi_{\alpha}(\vec{x}_k) = (\alpha^3 / \pi)^{1/2} \exp(-\alpha x_k), \\ \varphi_{\beta}(\vec{s}_k) = (\beta^3 / \pi)^{1/2} \exp(-\beta s_k).$$

Приступимо тепер до обчислення матричного елемента (52). Покажемо, як це можна зробити на прикладі одного з доданків в (51), записавши його в імпульсному представленні

$$I_{\alpha\beta}^{(1)} = (2\pi)^{-3} \int d\vec{\tau} \vec{R}_{\beta}^{(1)}(\vec{q} - \vec{\tau}) \vec{R}_{\alpha}^{(1)}(\vec{p} + \vec{\tau}) \times \\ \times \vec{R}_{\beta}^{(2)}(\vec{q} + \vec{\tau}) \vec{R}_{\alpha}^{(2)}(\vec{p} - \vec{\tau}). \quad (54)$$

Тут ми ввели позначення

$$\vec{R}_{\beta}^{(j)}(\vec{k}) = \int d\vec{s}_j \exp(i\vec{k}\vec{s}_j) \varphi_{\beta}^*(\vec{s}_j) \vec{\nabla}_{\vec{s}_j} \times \\ \times F(i\nu_{\alpha}, 1, i\nu s_j + i\bar{\nu} \vec{s}_j), \quad (55)$$

$$\vec{R}_{\alpha}^{(j)}(\vec{k}) = \int d\vec{x}_j \exp(i\vec{k}\vec{x}_j) \varphi_{\beta}^*(\vec{x}_j) \times \\ \times F(i\nu_{\beta}, 1, i\nu x_j + i\bar{\nu} \vec{x}_j) [\vec{\nabla}_{\vec{x}_j} \varphi_{\alpha}(\vec{x}_j)], \quad (56)$$

$$R_{\beta}^{(j)}(\vec{k}) = \int d\vec{s}_j \exp(i\vec{k}\vec{s}_j) \varphi_{\beta}^*(\vec{s}_j) \times \\ \times F(i\nu_{\alpha}, 1, i\nu s_j + i\bar{\nu} \vec{s}_j), \quad (57)$$

$$R_{\alpha}^{(j)}(\vec{k}) = \int d\vec{x}_j \exp(i\vec{k}\vec{x}_j) \varphi_{\alpha}(\vec{x}_j) \times \\ \times F(i\nu_{\beta}, 1, i\nu x_j + i\bar{\nu} \vec{x}_j). \quad (58)$$

Підінтегральний вираз в (54) локалізовано в чотирьох областях простору імпульсів  $\vec{\tau}$  :

$$|\vec{p} - \vec{\tau}| \leq 1/a, \quad |\vec{q} + \vec{\tau}| \leq 1/a, \quad |\vec{p} + \vec{\tau}| \leq 1/a, \\ |\vec{q} - \vec{\tau}| \leq 1/a, \quad (59)$$

де  $a$ - характерний радіус потенціалів парної взаємодії. Так як  $\vec{R}_{\beta}^{(1)}(\vec{\tau})$  і  $\vec{R}_{\alpha}^{(1)}(\vec{\tau})$  зменшуються швидше, ніж  $\vec{R}_{\beta}^{(2)}(\vec{\tau})$  і  $\vec{R}_{\alpha}^{(2)}(\vec{\tau})$ , то легко зрозуміти, що вклад в величину інтеграла (54) від третьої і четвертої з областей в (59) несуттєвий і його величина повністю визначається вкладом лише першої і другої областей в (59). При цьому у виразі (54) для  $I_{\alpha\beta}^{(1)}$  можна винести за знак інтеграла функцію  $\vec{R}_{\beta}^{(1)}(\vec{q} - \vec{\tau}) \vec{R}_{\alpha}^{(1)}(\vec{p} + \vec{\tau}) \equiv R_{\alpha\beta}(\tau)$ , що повільно

змінюється в областях різкого зростання решти підінтегрального виразу. Застосовуючи потім теорему про згортку і

виконуючи інтегрування за  $\bar{x}$  відповідно до техніки методу контурного інтегрування Нордсіка [9], отримуємо

$$I_{\alpha\beta}^{(1)} = -\frac{N_\alpha N_\beta}{2} \left[ \bar{R}_\beta^{(1)}(\bar{q} - \bar{p}) \bar{R}_\alpha^{(1)}(2\bar{p}) + \bar{R}_\beta^{(1)}(2\bar{q}) \bar{R}_\alpha^{(1)}(\bar{p} - \bar{q}) \right] \frac{\partial}{\partial \alpha} \Gamma(\alpha + \beta, \bar{p} + \bar{q}, \nu_\alpha, \nu_\beta, \bar{v}_1, \bar{v}_2), \quad (60)$$

де

$$\Gamma(\lambda, \bar{k}, \nu_1, \nu_2, \bar{v}_1, \bar{v}_2) = \int d\bar{x} x^{-1} \exp(-\lambda x + i\bar{k}\bar{x}) F(i\nu_1, 1, i\nu_1 x + i\bar{v}_1 \bar{x}) F(i\nu_2, 1, i\nu_2 x + i\bar{v}_2 \bar{x}) =$$

$$= 4\pi(k^2 + \lambda^2)^{-1} \left[ 1 + 2(\bar{k}\bar{v}_1 - i\lambda\nu_1)/(k^2 + \lambda^2) \right]^{i\nu_1} \left[ 1 + 2(\bar{k}\bar{v}_2 - i\lambda\nu_2)/(k^2 + \lambda^2) \right]^{i\nu_2} F(i\nu_1, i\nu_2, 1, W),$$

$$W = \frac{4(\bar{k}\bar{v}_1 - i\lambda\nu_1)(\bar{k}\bar{v}_2 - i\lambda\nu_2) - 2(\lambda^2 + k^2)(\bar{v}_1\bar{v}_2 - \nu_1\nu_2)}{[k^2 + \lambda^2 + 2(\bar{k}\bar{v}_1 - i\lambda\nu_1)][k^2 + \lambda^2 + 2(\bar{k}\bar{v}_2 - i\lambda\nu_2)]}; \quad N_\gamma = \left( \frac{\gamma^3}{\pi} \right)^{1/2}, \quad \gamma = \alpha, \beta. \quad (61)$$

Інтерпретація співвідношень (60), (61) наступна. Матричний елемент  $(\bar{R}_\beta^{(1)} \bar{R}_\alpha^{(1)})$  описує двоступеневий (томасівський) механізм захоплення електрона ( $\gamma_1$ ) через неперервний спектр з атома мішені ( $\beta, \gamma_1, \gamma_2$ ) в стани, зв'язані відносно швидкої частинки  $\alpha$ . Множник  $\partial\Gamma/\partial\alpha$ , що відповідає інтегруванню в  $I_{\alpha\beta}^{(1)}$  за координатами другого електрона ( $\gamma_2$ ), зводиться до інтегралу перекриття.

Аналогічні за структурою співвідношення виходять і для матричного елемента  $I_{\alpha\beta}^{(2)}$ . При цьому видно, що для резонансної двоелектронної перезарядки обидва матричних елемента в (51) переходять один в одного при перестановці електронів. Отже, їх вклад в амплітуду  $T_{\alpha\beta}^-$  однаковий.

### Результати розрахунків

Розглянемо застосування викладеного вище формалізму до розрахунку перерізів двоелектронної перезарядки при зіткненні атома гелію з  $\alpha$ -частинками:



Цей процес має важливе значення у зв'язку з проблемами нагріву дейтерій-третієвої плазми  $\alpha$ -частинками [10]. Один із способів діагностики  $\alpha$ -компоненти плазми заснований на подвійній перезарядці (62) мегаелектронвольтних пучків атомів гелію  $\text{He}(1S^2)$  на швидких  $\alpha$ -частинках.

Процес (62) досліджувався раніше як теоретично [11, 12], так і експериментально [13]. Більшість теоретичних робіт [11, 12] використовують модель незалежних подій, в якій перезарядка інтерпретується як подія, що складається з двох незалежних: одноелектронної – захоплення одного електрона і «не захоплення» іншого, двоелектронної – незалежне захоплення обох електронів. Оскільки ймовірність захоплення якогось електрона, як одноступінчатого процесу, визначається рівністю

$$P(\bar{\rho}) = |A_{\alpha\beta}^{(1)}(\bar{\rho})|^2, \quad (63)$$

де  $A_{\alpha\beta}^{(1)}(\bar{\rho})$  – амплітуда переходу в квазікласичному наближенні, то ймовірність одноелектронної перезарядки буде рівна –  $P^2$ .

Правомірність використання моделі незалежних подій обговорювалась в роботі [12], де для реакції (62) при енергіях

зіткнення 0,2 - 0,4 MeV/a.o.m. були розраховані перерізи двоелектронного захоплення. Подвійна перезарядка (62) є істотно двоелектронний процес, в якому велику роль відіграють електронні кореляції, тому обмеження моделі незалежних електронів призводить до розбіжностей між розрахованими і експериментально вимірними перерізами. Кореляційні ефекти впливають як на величину перерізів, так і на характер їх залежності від енергії зіткнення [12].

У зв'язку з цим певної уваги заслуговує корельована версія наближення спотворених хвиль неперервного спектру (Pluvinage correlated continuum distorted wave (PCCDW) approximation), розвинута Крозерсом і Мак-Керролом [11]. У цьому наближенні захоплення електрона – як і раніше незалежна подія, але самі електрони вважаються сильно взаємодіючими в початковому каналі. Амплітуда одноелектронного захоплення  $A_{\alpha\beta}^{(1)}(\vec{\rho})$  у формулі (63) визначається в стандартному CDW-наближенні [2], а в якості незбуреної хвильової функції

початкового стану береться однопараметрична корельована двоелектронна функція Плювінажа [14]. У своїй моделі Крозерс і Мак-Керролл вважають [11], що під час зіткнення відбувається захоплення електрона з тієї частини оболонки мішені, яка повернена до снаряду. Другий електрон інертний і знаходиться по іншу сторону мішені в силу кореляцій Плювінажа. Таким чином, збурення до зіткнення потенціалом снаряда і збурення після зіткнення потенціалом мішені відчуває лише захоплюваний електрон. Незбурена хвильова функція кінцевого стану представляється у вигляді добутку двох водневих орбіталей.

Результати наших розрахунків перерізів резонансної перезарядки (62), виконаних в формалізмі спотворених хвиль з амплітудою (51), представлені в Таблиці 1 разом з результатами розрахунків авторів [11, 12]. В цій же таблиці приведені оригінальні результати з роботи [13], що містять експериментальні дані по перерізах подвійного захоплення (62) при високих енергіях.

Таблиця 1. Переріз двоелектронного захоплення іонами He<sup>2+</sup> в гелії (в см<sup>2</sup>)

E, keV	Експеримент [13]	Наші розрахунки	Теорія [12]	Теорія [11]	
				I	II
500	5,1*10 <sup>-18</sup>	5,0*10 <sup>-18</sup>	1,6*10 <sup>-17</sup>	5,5*10 <sup>-18</sup>	5,8*10 <sup>-18</sup>
750	9,5*10 <sup>-19</sup>	6,8*10 <sup>-19</sup>	1,8*10 <sup>-18</sup>	7,8*10 <sup>-19</sup>	7,4*10 <sup>-19</sup>
1000	2,6*10 <sup>-19</sup>	2,4*10 <sup>-19</sup>	3,1*10 <sup>-19</sup>	1,5*10 <sup>-19</sup>	1,5*10 <sup>-19</sup>
1400	3,6*10 <sup>-20</sup>	3,5*10 <sup>-20</sup>	3,4*10 <sup>-20</sup>	2,0*10 <sup>-20</sup>	2,1*10 <sup>-20</sup>

З таблиці добре видно типові риси розрахунку, заснованого на використанні при обчисленні амплітуди чотиричастинкових інтегральних рівнянь Додда-Грайдера – незначне заниження розрахованих перерізів в області середніх енергій і порівняно добре узгодження з експериментальними даними при високих енергіях. При цьому, як бачимо, результати обчислень в наближенні незалежних електронів [12] завищені не тільки відносно наших розрахунків і розрахунків [11], але також і

щодо експерименту [13]. Ця обставина може бути зв'язана з тим, що при зменшенні швидкості зіткнення наближення незалежних електронів стає некоректним. У двох останніх стовпчиках таблиці представлені також результати двох найбільш точних варіантів розрахунку, виконаних Крозерсом і Мак-Керролом в наближенні PCCDW [11]. При цьому дані (II) отримані з урахуванням кулонівських спотворень електронних хвильових функцій в обох каналах реакції (62), а дані (I) –

результати розрахунку з урахуванням кулонівських ефектів тільки у вхідному каналі. Бачимо, що при  $E = 500$  кеВ розрахунки [11] добре узгоджуються з експериментальними даними в обох згаданих випадках. Проте в області високих енергій ( $E \geq 1000$  кеВ) проведені в [11] розрахунки призводять до заниження перерізів, а запропонований в даній роботі метод врахування кулонівських ефектів в моделі чотирьох тіл краще узгоджується з експериментальними даними.

### Висновок

В даній роботі на основі інтегральних рівнянь Додда-Грайдера розроблений шредінгерівський формалізм CDW-методу, який використовується для опису процесів подвійної перезарядки при великих та середніх швидкостях відносного руху. Привабливою стороною запропонованого формалізму є послідовний розгляд асимптотики хвильових функцій в обох каналах реакції, що враховує далекодіючу природу кулонівських взаємодій. Знайдено загальний вираз для амплітуди реакції в наближенні механізму одночасного захо-

плення двох електронів з урахуванням кулонівських ефектів в початковому і кінцевому станах. Адекватність розвинутого підходу підтверджується збігом теоретичних результатів з результатами точних вимірювань повних перерізів двоелектронного захоплення реакції (62). Розрахунки проводились нами в припущенні, що основний внесок в амплітуду реакції (62) в розглядуваній області енергій дає механізм одночасного захоплення двох електронів. З іншого боку, процеси перезарядки в двоелектронних системах можна розглядати як двоступеневі процеси послідовного захоплення двох електронів. Безумовно, одночасне врахування механізмів, зазначених вище, є досить складною задачею і потребує подальших експериментальних і теоретичних зусиль. Наступним кроком у розвитку теорії буде оцінка вкладів від знехтуваних нами кореляційних ефектів. Можна сподіватись, що дані про кореляції не тільки суттєво доповнять теоретичний матеріал, але і виявляться тестом, чутливим до правильності тої або іншої моделі.

### СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1. Faddeev L.D. Scattering theory for a three-particle system // *Sov. Phys. JETP*. – 1961. – V. 12. – №5 – PP. 1014-1019.
2. Belkic Dz., Gayet R., Salin A. Electron capture in high-energy ion-atom collisions // *Phys. Rep.* – 1979. – V.56. – №6. – PP.279-369.
3. Lazur V.Yu., Khoma M.V. Distorted wave theories for one- and two- electron capture in fast atomic collisions // *Advances in Quantum Chemistry*. – 2013. – Vol. 65. – PP. 363-405.
4. Belkic Dz., *Quantum theory of high-energy ion-atom collisions*. – London: Taylor & Francis, 2009. – 416p.
5. Lazur V.Yu., Aleksey V.V., Myhalyna S.I., Pop V.V. The Dodd-Greider integral equation for one-electron charge exchange between hydrogen-like atoms and bare nuclei: The 18-th Small Triangle Meeting on theoretical physics (October 16-19, 2016, Ptičie, Slovakia), Košice: IEP SAS, 2017 – 225 p.
6. Лазур В.Ю., Алексій В.В., Хома М.В. Шредінгерівський формалізм методу спотворених хвиль у задачі одноелектронного захоплення з одночасною іонізацією // *Науковий вісник Ужгородського університету. Серія Фізика*. – 2014. – Вип. 36. – С. 151-160.

7. Lazur V.Yu., Aleksiy V.V. Consideration of the relativistic effects in reactions with redistribution: Book of abstracts of the International Conference of Students and Young Scientists in Theoretical and Experimental Physics HEUREKA-2015 (May 13-15, 2015, Lviv, Ukraine), Lviv: I.Franko National University of Lviv, 2015. – 136 p.
8. Dodd L.R., Greider K.R. Rigorous Solution of Three-Body Scattering Processes in the Distorted-Wave Formalism // Phys. Rev. A. – 1966. – Vol. 146. – PP. 675-686.
9. Nordsieck A. Reduction of an integral in the theory of Bremsstrahlung // Phys. Rev. – 1954. – Vol. 93. – No. 3. – PP. 785-787.
10. Barnett C.F., Harrison M.F.A. Plasmas: Applied Atomic Collision Physics. – London: Academic Press, 1984. – 516 p.
11. Crothers D.S.F., McCarroll R. Correlated continuum distorted-wave resonant double electron capture in  $\text{He}^{2+}$ -He collision // J. Phys. B. – 1987. – V. 20. – No. 12. – PP. 2835-2842.
12. Gayet R., Rivarola R.D., Salin A. Double electron capture by fast nuclei // J. Phys. B. – 1981. – Vol. 14. – No. 9. – PP. 2421-2427.
13. De Castro Faria N.V., Freire F.L.Jr., de Pinho A.G. Electron loss and capture by fast helium ions in noble gases // Phys. Rev. A. – 1988. – Vol. 37. – No. 1. – PP. 280-283.
14. Pluvillage P. Fonction d'onde approchée a un parametre pour l'état fondamental des atomes a deux electrons // Ann. Phys. (Paris). – 1950. – Vol. 5. – PP.145-152.

Стаття надійшла до редакції 22.12.2017.

В. Ю. Лазур<sup>1</sup>, М. И. Карбованец<sup>1</sup>, В. В. Алексей<sup>1</sup>, С. И. Мигалина<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Ужгородский национальный университет, 88000, Ужгород, ул. Волошина, 54

<sup>2</sup>Ужгородский национальный университет, 88000, Ужгород, вул. Университетская, 14а  
e-mail: volodymyr.lazur@uzhnu.edu.ua

## МЕТОД ИСКАЖЕННЫХ ВОЛН НЕПРЕРЫВНОГО СПЕКТРА В ТЕОРИИ ДВУХЭЛЕКТРОННОЙ ПЕРЕЗАРЯДКИ

На основе интегральных уравнений Додда-Грайдера разработан четырех-частичный формализм метода искаженных волн непрерывного спектра, который используется для описания процессов двойной перезарядки в высоко-энергетических ион-атомных столкновениях. Для амплитуды реакции в приближении механизма одновременного захвата двух электронов найдено общее выражение, учитывающее кулоновские эффекты в начальном и конечном состояниях. Применение общей теории проиллюстрировано на примере реакции двухэлектронной перезарядки при столкновениях атомов гелия с  $\alpha$ -частицами. Результаты вычислений сечений хорошо согласуются с экспериментальными и теоретическими данными.

**Ключевые слова:** двухэлектронная перезарядка, ион-атомные столкновения, кулоновское взаимодействие, уравнение Додда-Грайдера.

PACS: 03.65. –w; 34.50. –s; 34.80.Dp; 34.70.+e; 31.15.–p

DOI: 10.24144/2415-8038.2017.42.137-152

V.Yu. Lazur<sup>1</sup>, M.I. Karbovanets<sup>1</sup>, V.V. Aleksey<sup>1</sup>, S.I. Myhalyna<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Uzhhorod National University, 88000, Uzhhorod, Voloshin Str., 54,

<sup>2</sup>Uzhhorod National University, 88000 Uzhhorod, 14A Universytetska Str.

e-mail: volodymyr.lazur@uzhnu.edu.ua

## CONTINUUM DISTORTED-WAVE METHOD IN THE TWO-ELECTRON CHARGE EXCHANGE THEORY

**Introduction.** In the case of collisions with multi-charged ions of atoms, more complex than the hydrogen atom, other than single-electron charge exchange and ionization, other processes may occur. These are, first of all, the processes of two-electron capture, capture with simultaneous ionization or ion excitation and others. We shall stop on the problems of the theoretical description of the processes of two-electron capture in the region of intermediate and high collision velocities of ions with atoms.

**Purpose.** Research the interactions of multi-charged ions with atoms in the region of intermediate and high collision velocities using theoretical methods.

**Methods.** To describe the double charge exchange processes in high-energy ion-atom collisions a four-part formalism of continuum distorted-wave method (CDW-method), based on the integral Dodd-Graider's equations, were developed.

**Results.** We obtained a matrix element that describes the two-step (Thomas) mechanism of electron capture through a continuous spectrum from a target atom into bound states relative to the fast  $\alpha$ -particle. For the reaction amplitude, in the approximation of the mechanism of simultaneous capture of two electrons, a general expression that takes into account Coulomb effects in the initial and final states is found.

**Conclusion.** The application of the general theory is illustrated by the example of a two-electron charge exchange reaction in collisions of helium atoms with  $\alpha$ -particles. The results of calculations of the cross sections are in good agreement with the experimental and theoretical data. An attractive side of the proposed formalism is the consistent consideration of the asymptotics of wave functions in both channels of the reaction, which takes into account the long-range nature of the Coulomb interactions.

**Keywords:** two-electron charge exchange, ion-atom collisions, Coulomb interaction, Dodd-Graider equation.

### REFERENCES

1. Faddeev, L.D. (1961), "Scattering theory for a three-particle system", Sov. Phys. JETP, Vol. 12, No. 5, pp. 1014-1019.
2. Belkic, Dz., Gayet, R., Salin, A. (1979), "Electron capture in high-energy ion-atom collisions", Phys. Rep., Vol. 56, No. 6, pp.279-369.
3. Lazur, V.Yu., Khoma, M.V. (2013), "Distorted wave theories for one- and two-electron capture in fast atomic collisions", Advances in Quantum Chemistry, Vol. 65, pp. 363-405.
4. Belkic, Dz. (2009), "Quantum theory of high-energy ion-atom collisions", Taylor & Francis, London, 416p.
5. Lazur, V.Yu., Aleksey, V.V., Myhalyna, S.I., Pop, V.V. (2017), "The Dodd-Graider integral equation for one-electron charge exchange between hydrogen-like atoms and bare nuclei: The 18-th Small Triangle Meeting on theoretical physics" (October 16-19, 2016, Ptičie, Slovakia), IEP SAS, Košice, 225 p.

6. Lazur, V.Yu., Aleksiy, V.V., Khoma M.M. (2014), "Schrodinger's formalism of distorted-wave method in the problem of single-electron capture with simultaneous ionization" ["Shredinherivskyi formalizm metodu spotvorenykh khvyl u zadachi odnoelektronnogo zakhoplenia z odnochasnoiu ionizatsiieiu"], Scientific Herald of Uzhhorod University. Series Physics [Nauk. Visn. Uzhhorod. Univ. Ser. Fiz.], No 36, pp. 151-160.
7. Lazur, V.Yu., Aleksiy, V.V. (2015), "Consideration of the relativistic effects in reactions with redistribution: Book of abstracts of the International Conference of Students and Young Scientists in Theoretical and Experimental Physics HEU-REKA-2015" (May 13-15, 2015, Lviv, Ukraine), LNU im. I.Franka, Lviv, 136 p.
8. Dodd, L.R., Greider, K.R. (1966), "Rigorous Solution of Three-Body Scattering Processes in the Distorted-Wave Formalism", Phys. Rev. A, Vol. 146, pp. 675-686.
9. Nordsieck, A. (1954), "Reduction of an integral in the theory of Bremsstrahlung", Phys. Rev., Vol. 93, No 3, pp. 785-787.
10. Barnett, C.F., Harrison, M.F.A. (1984), "Plasmas: Applied Atomic Collision Physics", Academic Press, London, 516 p.
11. Crothers, D.S.F., McCarroll, R. (1987), "Correlated continuum distorted-wave resonant double electron capture in He<sup>2+</sup>-He collision", J. Phys. B, Vol. 20, No 12, pp. 2835-2842.
12. Gayet, R., Rivarola, R.D., Salin, A. (1981), "Double electron capture by fast nuclei", J. Phys. B, Vol. 14, No 9, pp.2421-2427.
13. De Castro Faria, N.V., Freire, F.L.Jr., de Pinho, A.G. (1988), "Electron loss and capture by fast helium ions in noble gases", Phys. Rev. A, Vol. 37, No 1, pp.280-283.
14. Pluvinaige, P. (1950), "Fonction d'onde approchee a un parametre pour l'etal fundamental des atomes a deux electrons", Ann. Phys. (Paris), Vol. 5, pp.145-152.

© Ужгородський національний університет