

ЭФФЕКТ ПЕННИНГА ПРИ СТОЛКНОВЕНИИ
С ВОЗБУЖДЕННЫМ ИОНОМ ГЕЛИЯ. I

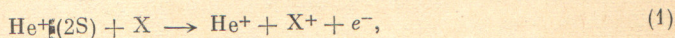
В. А. Кэливидзе и П. А. Светин

В приближении метода прицельного параметра рассчитана реакция $\text{He}^+(2S) + \text{H}(1S) \rightarrow \text{He}^+(1S) + \text{H}^+ + e^-$. Развал автоионизационного состояния осуществляется в основном из состояния, асимптотически соответствующего $2P$ -состоянию He^+ , переход в которое происходит за счет смешивания четырех состояний с $n=2$. Переходы в $2P$ -состояние учитываются как прямые, так и через промежуточные состояния, соответствующие второму порядку по электростатическому взаимодействию сталкивающихся партнеров. Расчет сечений проведен в интервале от сотых долей до десятков электрон-вольт, сечения при этом лежат в диапазоне $10^{-14} - 10^{-15} \text{ см}^2$ соответственно. При низких энергиях основной вклад в сечение дает орбитирование партнеров.

Важную роль при изучении процессов в газовых лазерах играют пеннинговские процессы. Так, при исследовании инверсной заселенности низших уровней иона гелия выяснилось, что при определенных условиях основным процессом, осуществляющим опустошение уровня с $n=2$, является пеннинговская ионизация [1, 2].

Подобного рода процессы представляют интерес и для астрофизических задач.

Ниже нами будет рассчитано сечение эффекта Пеннинга в реакции



где в качестве партнера X в данной работе будет рассмотрен атом водорода.

Расчет будет проведен в приближении метода прицельного параметра. Система единиц — атомная.

1. Предварительно обсудим постановку задачи и приближения, используемые в расчетах.

Поскольку область энергий относительного движения, рассмотренная нами, распространяется от нескольких десятков электронвольт до комнатных температур, следует учитывать искривления траекторий. Здесь, однако, будет применен более грубый подход, при котором все траектории были разделены на две области по прицельному параметру ρ , а именно, на орбитирующие от 0 до ρ_0 (с вероятностью реакции $P=1$) и на прямолинейные от ρ_0 и выше.

В соответствии с таким подходом сечение принимает вид

$$\sigma = \pi \rho_0^2 + 2\pi \int_{\rho_0}^{\infty} P(\rho, v) \rho d\rho, \quad (2)$$

где $\rho_0 = (4\beta/\mu v^2)^{1/2}$, поскольку захват на орбиту осуществляется в поле поляризационного потенциала (β — поляризуемость партнера X , μ — приведенная масса).

Дальнейшие обсуждения будут связаны с вычислением вероятности $P(\rho, v)$ в случае прямолинейных траекторий.

В качестве базисных волновых функций выбирались $\psi_{ki} = u_k(\text{He}^+) v_i(X)$, где $u_k(\mathbf{r}_1)$ и $v_i(\mathbf{r}_2)$ в данном случае обе одноэлектронные функции. Поскольку $2S$ - и $2P$ -уровни He^+ очень близки, то в u_k учитывались четыре состояния по n, l, m , точнее линейные комбинации состояний $2, S, 0; 2, P, 0; 2, P, +1$ и $2, P, -1$, а в v_i только основное состояние атома водорода.

Таким образом,

$$\left. \begin{aligned} \psi_1 &= \frac{1}{\pi} \exp(-r_1 - r_2) (1 - r_1), \\ \psi_2 &= \frac{1}{\pi} \exp(-r_1 - r_2) r_1 \cos \theta_1, \\ \psi_3 &= \frac{1}{\pi} \exp(-r_1 - r_2) r_1 \sin \theta_1 \sin \varphi_1, \\ \psi_4 &= \frac{1}{\pi} \exp(-r_1 - r_2) r_1 \sin \theta_1 \cos \varphi_1. \end{aligned} \right\} \quad (3)$$

В дальнейшем будем использовать подвижную систему координат, связанную с межъядерной осью, таким образом, что ось z направлена по ней, а ось x — перпендикулярна плоскости столкновений.

Поскольку электростатическое взаимодействие значительно превышает спин-орбитальное, то расщепление, связанное с тонкой структурой термина не учитывалось.

Далее, относительно сильное дальнедействующее взаимодействие накладывает необходимость, хотя бы приближенного, учета связи $2S$ - и $2P$ -состояний с высоковозбужденными состояниями, что в основном определяет смешивание их, т. е. $2S$ - и $2P$ -состояний.¹

Развал автоионизационных состояний, приводящий к ионизации партнера X , учитывается в членах, ответственных за взаимодействие с непрерывным спектром.

Система уравнений для амплитуд в заданной постановке задачи имеет вид

$$i \frac{dC_n}{dt} = \sum_{k=1}^4 \left[V_{nk} + W_{nk} - \frac{i}{2} \Gamma_{nk} + \omega (\hat{L}_x)_{nk} \right] C_k, \quad (4)$$

где $n, k=1, 2, 3, 4$. Потенциал взаимодействия иона и атома

$$V = \frac{2}{R} - \frac{2}{|R + \mathbf{r}_2|} - \frac{1}{|R - \mathbf{r}_1|} + \frac{1}{|R + \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1|}, \quad (5)$$

где R — межъядерное расстояние, а $\mathbf{r}_1$ и $\mathbf{r}_2$ — радиус-векторы электронов иона и атома соответственно.

Матричные элементы в системе (4) учитывают следующие процессы:

а) V_{nk} — прямые переходы и поправки первого порядка к энергии выделенных состояний;

б) $W_{nk} = \sum_m' \frac{V_{nm} V_{mk}}{E_k - E_m}$ — переходы через промежуточный уровень между выделенными состояниями и поправки второго порядка к энергии этих состояний (штрих над суммой означает суммирование по всем состояниям гамильтониана атомов $\hat{H}_0 = \hat{H}_0^{\text{He}^+} + \hat{H}_0^{\text{H}}$, кроме выделенных четырех состояний);

в) $\Gamma_{nk} = 2\pi \sum'' V_{nm} V_{mk}$ — матричные элементы оператора ширины уровней, описывающие распад квазимолекулы (два штриха над суммой означают суммирование по всем собственным состояниям гамильтониана, но относящихся к собственному значению E_0 — начальной энергии атомов без учета их относительной кинетической энергии, — кроме выделенных четырех состояний).

2. $(\hat{L}_x)_{nk}$ — переходы, связанные с вращением межъядерной оси. Угловая скорость $\omega = v \rho / R^2$.

¹ В лабораторной плазме смешивание осуществляется за счет микрополей плазмы.

Вывод системы уравнений для амплитуд (4) не представляет принципиальных затруднений, поэтому мы его проводить не будем. Сошлемся только на работу [3], где получена система для переходов между стационарными состояниями.

Система (4) может быть получена аналогичным методом, однако в рассуждаемой здесь задаче эти состояния являются квазистационарными, что приводит к появлению в системе новых членов — матричных элементов Γ_{nk} , учитывающих переходы в непрерывный спектр. С другой стороны, в случае одноуровневой системы, например, если пренебречь всеми состояниями, кроме C_2 , система (4) приобретает известный вид (см. [4]).

Учет матричных элементов оператора $\hat{\Gamma}$ ширины уровня квазимолекулы приводит к тому, что в системе (4) неявным образом учитываются амплитуды автоионизационных переходов. Поэтому вероятность ионизации, обусловленной распадом квазистационарных состояний, будет иметь вид

$$P(\rho) = 1 - \sum_{i=1}^4 |C_i(+\infty)|^2. \quad (6)$$

3. Матричные элементы V_{nk} первого порядка являются интегралами кулоновского типа и равны

$$\left. \begin{aligned} \langle \psi_1 | V | \psi_1 \rangle &= -e^{-2R} \left(\frac{3}{40} R^4 + \frac{5}{24} R^3 + \frac{5}{48} R^2 + \frac{1}{4} R - \frac{15}{8} - \frac{2}{R} \right), \\ \langle \psi_2 | V | \psi_2 \rangle &= -e^{-2R} \left(\frac{1}{20} R^4 + \frac{82}{240} R^3 + \frac{46}{240} R^2 + \frac{1}{8} R - \frac{31}{16} - \frac{2}{R} \right), \\ \langle \psi_3 | V | \psi_3 \rangle &= -e^{-2R} \left(\frac{19}{240} R^3 + \frac{59}{480} R^2 + \frac{1}{8} R - \frac{31}{16} - \frac{2}{R} \right), \\ \langle \psi_1 | V | \psi_2 \rangle &= -e^{-2R} \left(\frac{1}{20} R^4 + \frac{11}{40} R^3 - \frac{1}{8} R^2 - \frac{1}{16} R \right), \\ \langle \psi_4 | V | \psi_4 \rangle &= \langle \psi_3 | V | \psi_3 \rangle. \end{aligned} \right\} \quad (7)$$

Остальные матричные элементы V равны нулю.

При вычислении матричных элементов $\hat{W}$ второго порядка потенциал взаимодействия V разлагался по мультиполям и учитывались члены, спадающие на больших расстояниях, не быстрее, чем $1/R^4$.

Таким образом, в разложении учитывались члены типа заряд диполь, заряд квадруполь, диполь-диполь и диполь квадруполь

$$V = V_{эд} + V_{зк} + V_{дл} + V_{дк}, \quad (8)$$

где $V_{эд} = r_2 \cos \theta_2 / R^2$, $V_{зк} = -r_2^2 P_2(\cos \theta_2) / R^3$, $V_1 \equiv V_{эд} + V_{зк}$, а θ_2 — угол между $\mathbf{R}$ и $\mathbf{r}_2$; $V_{дл} = (x_1 x_2 + y_1 y_2 - 2z_1 z_2) / R^3$, $V_{дк} = [z_2(-6z_1^2 + 3x_1^2 + 3y_1^2) + z_1(6z_2^2 - 3x_2^2 - 3y_2^2) + 6(x_1 x_2 + y_1 y_2)z_1 z_2] / 2R^4$.

В результате вычислений (см. Приложение) получим следующие значения для матричных элементов:

$$\left. \begin{aligned} \langle \psi_1 | W | \psi_1 \rangle &= -\frac{\beta}{2R^4} - \frac{\gamma_{11}}{R^6}, \quad \gamma_{11} = 41.75; \\ \langle \psi_2 | W | \psi_2 \rangle &= -\frac{\beta}{2R^4} - \frac{\gamma_{22}}{R^6}, \quad \gamma_{22} = 0.5; \\ \langle \psi_3 | W | \psi_3 \rangle &= \langle \psi_4 | W | \psi_4 \rangle = -\frac{\beta}{2R^4} - \frac{\gamma_{33}}{R^6}, \quad \gamma_{33} = 41.35; \\ \langle \psi_1 | W | \psi_2 \rangle &= \langle \psi_2 | W | \psi_1 \rangle = \frac{\gamma_{12}}{R^6}, \quad \gamma_{12} = 13.5. \end{aligned} \right\} \quad (9)$$

Остальные матричные элементы оператора $\hat{W}$ равны нулю.

Матричные элементы оператора $\hat{\Gamma}$ имеют вид

$$\Gamma_{ik} = 2\pi \sum_l \sum_{m=-l}^{m=l} \Gamma_i^{lm} \Gamma_k^{lm} \quad i, k \leq 4, \quad (10)$$

где

$$\Gamma_i^{lm} = \int v(r_2) Q_i F(k_0, l, m; r_2) d^3 r_2, \quad (11)$$

$$Q_i = \int u_0(r_1) \frac{1}{|R + r_2 - r_1|} u_i(r_1) d^3 r_1, \quad (12)$$

$v(r_2)$ — волновая функция $H(1S)$, u_0, u_i — волновые функции He^+ с главным квантовым числом $n=1$ и $n=2$ соответственно; $F(k_0, l, m; r_2)$ кулоновская волновая функция электрона в поле H^+ с энергией $E'_0 = k_0^2/2 = 1$ ат. ед., моментом l и проекцией момента m .

Кулоновский интеграл Q_i содержит степенную и экспоненциальную части, последней, т. е. экспоненциальной частью $\sim e^{-3(R+r_2)}$, мы будем пренебрегать. В этом приближении Q_1 , а следовательно, и $\Gamma_{11}=0$. Таким образом, прямые переходы из основного состояния квазимолекулы ψ_1 в непрерывный спектр из-за экспоненциальной малости соответствующего матричного элемента нами не учитывались.

При вычислении диагональных матричных элементов Γ_{22} и Γ_{33} были использованы дополнительные упрощения. Суммирование по l производилось только до $l=2$. Далее можно показать, что

$$\Gamma_i^{lm} \sim \frac{a_{lm}}{R^{l+2}} + g_i(l, R) e^{-R},$$

где $g_i(l, R)$ — ограниченная функция при $R \rightarrow \infty$, для которой получено асимптотическое разложение по степеням $1/R$ и удержаны только два члена. При указанных упрощениях

$$\Gamma_{22} = \Gamma_{22}^{l=0} + \Gamma_{22}^{l=1}, \quad (13)$$

где

$$\Gamma_{22}^{l=0} = 2\pi \left| 0.124 \frac{e^{-R}}{R} \left[\left(1 - \frac{0.51}{R}\right) \cos \alpha + \left(1.41 - \frac{1.1}{R}\right) \sin \alpha \right] \right|^2, \quad (14)$$

$$\Gamma_{22}^{l=1} = 2\pi \left| \frac{0.58}{R^3} + \frac{e^{-R}}{R} 2.18 \left[\left(1.5 + \frac{7}{3R}\right) \cos \alpha - \frac{\sqrt{2}}{4} \frac{\sin \alpha}{R} \right] \right|^2. \quad (15)$$

$$\Gamma_{33} = \Gamma_{33}^{l=0} + \Gamma_{33}^{l=1}, \quad \Gamma_{44} = \Gamma_{33}, \quad (16)$$

$$\Gamma_{33}^{l=0} = 0, \quad (17)$$

$$\Gamma_{33}^{l=1} = 2\pi \left| \frac{0.29}{R^6} + \frac{e^{-R}}{R^2} 2.1 \left(\frac{7}{9} \cos \alpha + \frac{14\sqrt{2}}{9} \sin \alpha \right) \right|^2, \quad (18)$$

где $\alpha = \sqrt{2}R + \frac{1}{\sqrt{2}} \ln 2\sqrt{2}R - \arg \Gamma\left(\frac{i}{\sqrt{2}}\right)$.

Недиагональные матричные элементы $\Gamma_{13} = \Gamma_{23} = 0$ точно.

Вращение межъядерной оси приводит к связи состояний ψ_2 и ψ_3 , причем соответствующие матричные элементы.

$$\langle \psi_2 | \omega \hat{L}_x | \psi_3 \rangle = i\omega, \quad \langle \psi_3 | \omega \hat{L}_x | \psi_2 \rangle = -i\omega. \quad (19)$$

4. Как и следовало ожидать, все матричные элементы, соответствующие связи с состоянием ψ_4 , равны нулю. Таким образом, в системе (4) отщепляется уравнение для C_4 . Полученная система для трех амплитуд аналитически не может быть решена. Численное решение ее и вычисления сечения с использованием (6) и (2) приводят к следующим результатам:

Приложение

При вычислении матричных элементов второго порядка взаимодействия W удобно представить в виде суммы

$$W = W_1 + W_2 + W_3 + W_4 + W_5,$$

$$W_1 = \sum_n' \frac{V_1 |n\rangle \langle n| V_1}{E_0 - E_n}, \quad W_2 = \sum_n' \frac{2V_1 |n\rangle \langle n| V_{\text{дл}}}{E_0 - E_n},$$

$$W_3 = \sum_n' \frac{2V_1 |n\rangle \langle n| V_{\text{дл}}}{E_0 - E_n}, \quad W_4 = \sum_n'' \frac{V_{\text{дл}} |n\rangle \langle n| V_{\text{дл}}}{E_0 - E_n},$$

$$W_5 = \sum_n' \frac{V_{\text{дл}} |n\rangle \langle n| V_{\text{дл}}}{E_0 - E_n} - W_4 = \sum_n''' \frac{V_{\text{дл}} |n\rangle \langle n| V_{\text{дл}}}{E_0 - E_n}.$$

Здесь $|n\rangle$ — волновая функция суммы гамильтонианов иона гелия и водорода. $\sum''$ означает суммирование по состояниям, в которых ион He^+ находится в состоянии $2S$ или $2P$ (при этом суммирование по состояниям, соответствующих амплитудам C_i , отсутствует). Взаимодействие W_1 имеет только диагональные матричные элементы отличные от нуля, которые равны друг другу

$$\langle \psi_i | W_1 | \psi_i \rangle = -\frac{\beta}{2R^4} - \frac{9}{4R^6}, \quad i=1, 2, 3, 4,$$

β — поляризуемость атома водорода.

W_2 — имеет нулевые диагональные элементы и единственный ненулевой элемент между состояниями ψ_1 и ψ_2

$$\langle \psi_1 | W_2 | \psi_2 \rangle = -\frac{2\langle 2s | z | 2pz \rangle \beta}{R^5} = \frac{27}{2R^5},$$

$\langle 2s | z | 2pz \rangle$ — матричный элемент перехода в He^+ .

Взаимодействия W_3 и W_4 имеют только диагональные элементы отличные от нуля $\langle \psi_1 | W_3 | \psi_1 \rangle = 0$,

$$\langle \psi_2 | W_3 | \psi_2 \rangle = \frac{1}{R^6} \sum_n' \frac{\langle \psi_2 | z_2 | n \rangle \langle n | z_2 (-6z_1^2 + 3x_1^2 + 3y_1^2) | \psi_2 \rangle}{E_0 - E_n} =$$

$$= -\frac{3}{2R^6} \langle 2pz | x^2 + y^2 - 2z^2 | 2pz \rangle \beta = \frac{40.5}{R^6}.$$

Аналогично

$$\langle \psi_3 | W_3 | \psi_3 \rangle = \langle \psi_4 | W_3 | \psi_4 \rangle = -\frac{3}{2R^6} \langle 2py | x^2 + y^2 - 2z^2 | 2py \rangle \beta = -\frac{20.25}{R^6},$$

$\langle 2p | x^2 + y^2 - 2z^2 | 2p \rangle$ — матричные элементы иона гелия.

$$\langle \psi_1 | W_4 | \psi_1 \rangle = -\frac{3|\langle 2s | z | 2pz \rangle|^2 \beta}{R^6} = -\frac{30.36}{R^6},$$

$$\langle \psi_2 | W_4 | \psi_2 \rangle = -\frac{4|\langle 2s | z | 2pz \rangle|^2 \beta}{2R^6} = -\frac{20.25}{R^6},$$

$$\langle \psi_3 | W_4 | \psi_3 \rangle = \langle \psi_4 | W_4 | \psi_4 \rangle = -\frac{|\langle 2s | z | 2pz \rangle|^2 \beta}{2R^6} = -\frac{5.06}{R^6}.$$

Для вычисления матричных элементов W_5 введены величины A_1, A_2 и A_3 , которые определялись следующим образом:

$$A_1 = \sum_n''' \frac{\langle \psi_1 | z_1 z_2 | n \rangle \langle n | z_1 z_2 | \psi_1 \rangle}{E_0 - E_n},$$

$$A_2 = \sum_n''' \frac{\langle \psi_2 | z_1 z_2 | n \rangle \langle n | z_1 z_2 | \psi_2 \rangle}{E_0 - E_n},$$

$$A_3 = \sum_n''' \frac{\langle \psi_3 | z_1 z_2 | n \rangle \langle n | z_1 z_2 | \psi_3 \rangle}{E_0 - E_n}.$$

Интересующие нас матричные элементы могут быть выражены следующим образом:

$$\begin{aligned}\langle \psi_1 | W_5 | \psi_1 \rangle &= 6A_1, \quad \langle \psi_2 | W_5 | \psi_2 \rangle = 4A_2 + 2A_3, \\ \langle \psi_3 | W_5 | \psi_3 \rangle &= \langle \psi_4 | W_5 | \psi_4 \rangle = A_2 + 5A_3.\end{aligned}$$

Вычисление A_i можно свести, как известно, к нахождению стационарных значений функционалов

$$A_i = \text{St} (\langle \varphi_i | E_0 - H_0 | \varphi_i \rangle + 2 \langle \varphi_i | z_1 z_2 | \psi'_i \rangle),$$

где

$$\psi'_i = \psi_i - \sum_{k=1}^4 \langle \psi_k | z_1 | \psi_i \rangle \psi_k, \quad i = 1, 2, 3, 4.$$

Если воспользоваться результатами работы [5], то φ_i можно искать в следующем виде:

$$\varphi_i = \sum_{n, m=0}^{n_0, m_0} \frac{b_{nm}}{(E_{01} - \hat{H}_0^{\text{He}^+})^n (E_{02} - \hat{H}_0^{\text{H}})^m} (z_1 z_2) | \psi'_i \rangle.$$

Ограничимся значением $n_0 = 1$ и $m_0 = 1$. В этом приближении получим $A_1 = -1.32$, $A_2 = -3.36$ и $A_3 = -2.42$.

Окончательно получим значения матричных элементов взаимодействия W , приведенные в (9). В данном приближении состояние ψ_4 не смешивается с другими состояниями.

Литература

- [1] Ю. К. Земцов. Автореф. канд. дисс., М., 1970.
- [2] Л. И. Гудзенко, Ю. К. Земцов, С. И. Яковленко. Письма в ЖЭТФ, 12, 247, 1965.
- [3] M. R. Flannery. J. Phys., B3, 798, 1970.
- [4] K. Katsuma. J. Chem. Phys., 42, 3771, 1965.
- [5] W. D. Davison. J. Phys., B1, 602, 1968.

Поступило в Редакцию 23 января 1973 г.