ІНТЕГРАЛЬНІ РІВНЯННЯ ДОДДА-ГРАЙДЕРА В ЗАДАЧІ ПРО ОДНОЕЛЕКТРОННУ ПЕРЕЗАРЯДКУ

В.Ю. Лазур, Л.М. Халус

Ужгородський державний університет, 294000, Ужгород, вул. Волошина, 54

На основі інтегральних рівнянь Додда-Грайдера для оператора розсіяння з перерозподілом, розроблено шредінгерівський формалізм методу спотворених хвиль неперервного спектру для опису реакції одноелектронної перезарядки.

Вступ

Одноелектронні процеси перезарядки та іонізації

$$A^{Z_\alpha +} + B \langle \begin{array}{ll} A^{(Z_\alpha - 1)+} + B^+ & (1a) \\ A^{Z_\alpha +} + B^+ + e & (1b) \end{array}$$

стали останнім часом предметом інтенсивного експериментального та теоретичного дослідження в зв'язку із створенням та експлуатацією пристроїв для керованого термоядерного синтезу з магнітним утриманням плазми, розробкою нових типів лазерів, проектуванням і використанням прискорювачів важких іонів високих енергій, а також з огляду на необхідність правильної інтерпретації даних про ультражорсткі космічні промені [12,13]. Необхідні у цих галузях відомості про атомні процеси (1) не обмежуються даними про швидкості реакцій, але й включають більш детальні характеристики, такі як спектри і кутові розподіли продуктів реакцій і т.п. Це висуває підвищені вимоги як до повноти, так і до точності теоретичних і модельних розрахунків.

Детальне вивчення процесів перезарядки та іонізації необхідне для подальшого удосконалення теорії атомних зіткнень, а також для розуміння механізмів взаємодії іонів з речовинами. Причому на передній план вже висувається не якісне, а кількісне описання цих процесів.

У даній роботі приводяться результати наших досліджень процесу одноелектронної перезарядки (1а) при середніх та великих швидкостях відносного руху. Основна увага приділяється вивченню механізмів таких реакцій та їх зв'язку з кутовими розподілами продуктів. Теоретичному описанню процесу іонізації (1б) присвячено ряд фундаментальних робіт (див., наприклад, [12,13,15] та посилання там). Найбільш повно та ретельно цей процес досліджено в роботі [15]. Її змістом є узагальнення методу, сформульованого Келдишом [16] для іонізації атома в електромагнітному полі, на іон-атомні зіткнення. Наявні експериментальні дані з реакцій (1а) та (1б) узагальнені в оглядах [13,15,16]. Суттєве вдосконалення вимірювальної техніки та поява прискорювачів, здатних створювати інтенсивні монохроматичні пучки найрізноманітніших заряджених іонів, призвели до постановки великої кількості пучкових експериментів, в яких вдалося виміряти кутові та енергетичні залежності перерізів реакцій (1) в широкому інтервалі кутів і енергій. Теоретичний аналіз наявної експериментальної інформації показав [12], що при швидкостях $\vartheta \approx \vartheta_0 Z_\alpha^{1/2}$ перерізи перезарядки та іонізації є величинами одного порядку. В області $\vartheta \rangle \vartheta_0 Z_\alpha^{1/2}$ перерізи перезарядки швидко зменшуються із зростанням швидкості, і домінуючим процесом стає іонізація атома налітаючим іоном. Цей факт, здавалось би, закриває канал одноелектронного обміну (1а) тим сильніше, чим з більшою імовірністю відбувається збудження та іонізація атомів за час зіткнення. Насправді це не завжди так. При великій імовірності збудження та іонізації атома іоном стають можливими нові шляхи (механізми) для електронного захоплення, які вивчаються в даній роботі. Якісні оцінки відносно вкладу таких механізмів в переріз перезарядки показали [14], що в області проміжкових і великих швидкостей налітаючих частинок, домінуючими є прямий одноступінчатий механізм реакції (1а) і двоступінчатий (томасівський) механізм захоплення електрона через проміжковий стан, який знаходиться в дискретному або неперервному спектрах. Загальний результат цілого ряду досліджень за цією темою (див., наприклад, посилання в [14,17]) можна сформулювати так: внесок від прямого одноступінчатого механізму при помірних енергіях перевищує внесок від томасівського механізму захоплення електрона; при достатньо високих енергіях суттєвими становляться двоступінчаті процеси, для описання яких потрібні більш точні методи, ніж борнівське наближення плоских хвиль.

У даній роботі на основі інтегральних рівнянь Додда-Грайдера [4] для трьох частинок, модифікованих для кулонівських взаємодій, розвинуто метод врахування кулонівських ефектів в реакціях одноелектронної перезарядки (1а). Амплітуда реакції отримана як перший член ітераційного ряду, що представляє розв'язок рівнянь Додда-Грайдера для квантово-механічного оператора розсіяння з перерозподілом в системі трьох кулонівських частинок. Одержані результати будуть використані в подальшому для розрахунків перерізів перезарядки в реакціях з протонами на атомах водню і буде показано, що без врахування ефектів кулонівського перерозсіяння електрона на іоні-залишку мішені не можна отримати пік Томаса в кутових розподілах продуктів цієї реакції.

Модифікація інтегральних рівнянь Додда-Грайдера для задачі одноелектронної перезарядки в системі трьох кулонівських частинок.

У даній роботі складна задача взаємодії атома та іона в реакції (1а) розглядається як ідеалізована задача взаємодії трьох нерелятивістських частинок α (налітаючої частинки A^{Z_α}), γ (активного електрона e$^-$) та іона β (іона-залишку мішені B$^+$) з масами m_α, m_γ і m_β відповідно. Рух центра мас вважається відділеним. У відповідності з можливістю розбиття системи трьох частинок на фрагменти

$(\beta,\gamma)+\alpha,\quad (\alpha,\gamma)+\beta,\quad (\alpha+\beta)+\gamma$

введемо, поряд з повним гамільтоніаном $H=H_0+V$, також канальні гамільтоніани $H_j = H_0 + V_j \quad (j=\alpha,\beta,\gamma)$, де H_0-оператор кінетичної енергії системи трьох частинок в системі їх центра мас, $V=\sum\limits_{j=\alpha,\beta,\gamma} V_j$ - повна взаємодія. Нижній індекс j в V_j позначає частинку, яка не бере участі в цій взаємодії (наприклад, V_α - оператор парної взаємодії частинок β і γ). Визначимо також канальну "взаємодію" $\vartheta_j = V - V_j$. Припускається, що вона може бути представлена у вигляді суми кулонівської і швидко спадаючої частин. Різні координати, що використовуються для описання відносного розміщеня різних частинок, визначені на мал. 1. Вони зв'язані наступними співвідношеннями (зведені маси $m_\gamma m_\beta/(m_\gamma+m_\beta)$ і $m_\gamma m_\alpha/(m_\gamma+m_\alpha)$ надалі для спрощення запису позначені через a і b відповідно):

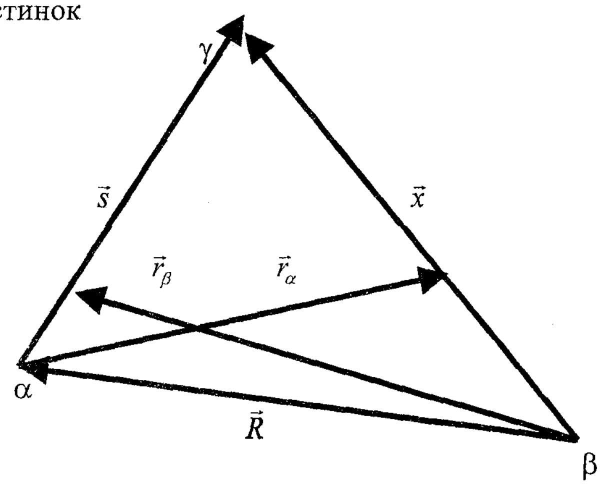
$$\vec{s}=(a/m_\gamma)\vec{x}-\vec{r}_\alpha,\quad \vec{x}=(b/m_\gamma)\vec{s}+\vec{r}_\beta,\quad \vec{R}=\vec{x}-\vec{s}. \tag{2}$$

У термінах відповідних якобівських координат вхідного і вихідного каналів реакції (1а) оператор кінетичної енергії H_0 може бути записаний у двох еквівалентних формах:

$$H_0 = -\frac{1}{2\mu_\alpha}\Delta_{\vec{r}_\alpha} - \frac{1}{2a}\Delta_{\vec{x}} = -\frac{1}{2\mu_\beta}\Delta_{\vec{r}_\beta} - \frac{1}{2\beta}\Delta_{\vec{s}}, \quad (3)$$

де $\Delta_{\vec{r}_\alpha}$, $\Delta_{\vec{x}}$, $\Delta_{\vec{r}_\beta}$ і $\Delta_{\vec{s}}$ - оператори Лапласа за змінними $\vec{r}_\alpha$, $\vec{x}$, $\vec{r}_\beta$ і $\vec{s}$ відповідно. Величини μ_α *і* μ_β позначають зведені маси відповідних груп частинок

$$\mu_\alpha = \frac{m_\alpha(m_\beta + m_\gamma)}{m_\alpha + m_\beta + m_\gamma}, \quad \mu_\beta = \frac{m_\beta(m_\alpha + m_\gamma)}{m_\alpha + m_\beta + m_\gamma}. \quad (4)$$



Мал. 1. Координатні вектори, що характеризують реакцію перезарядки.

Проведемо розбиття канальних потенціалів ϑ_j $(j = \alpha, \beta)$ на дві частини:

$$\vartheta_j = V - V_j = U_j + W_j, \quad (5)$$

одна з яких W_j (її називають "збурюючим" потенціалом) – виділяє малий за величиною далекодіючий кулонівський фон, який визначає асимптотичну поведінку хвильових функцій задачі розсіяння на великих відстанях, а друга - U_j - дає залишок, викликаний короткодіючою частиною потенціалу ϑ_j, який викликає переходи електрона і вважається збуренням. Точний зміст такого твердження і мета розбиття будуть зрозумілими з подальших міркувань. Але у двох словах ідею можна анонсувати такими фізичними міркуваннями. Процеси розсіяння частинок відбуваються за рахунок тих частин канальних потенціалів ϑ_j, які зосереджені в обмеженій області конфігураційного простору, де частинки сильно взаємодіють. Навпаки, в областях, в яких $x \langle\langle r_\alpha$ *і* $s \langle\langle r_\beta$, частинки рухаються майже вільно, і їх траєкторії лише незначно спотворюються слабким за величиною кулонівським полем.

Із визначення канального гамільтоніану $H_\alpha(H_\beta)$ випливає, що він описує асимптотичну ситуацію, коли частинка $\alpha(\beta)$ ні з чим не взаємодіє, а дві інші знаходяться у зв'язаному стані в потенціалі $V_\alpha(V_\beta)$. Таким чином, власні стани $|\Phi_i^\alpha\rangle(|\Phi_f^\beta\rangle)$ гамільтоніану $H_\alpha(H_\beta)$ мають вигляд добутку:

$$|\Phi_i^\alpha\rangle = |\varphi_i(\vec{x})\exp(i\vec{k}_\alpha\vec{r}_\alpha)\rangle, \quad |\Phi_f^\beta\rangle = |\varphi_f(\vec{s})\exp(i\vec{k}_\beta\vec{r}_\beta)\rangle, \quad (6)$$

де $\varphi_i(\varphi_f)$ - хвильова функція зв'язаного стану пари $(\beta,\gamma)((\alpha,\gamma))$, $\exp(i\vec{k}_\alpha\vec{r}_\alpha)(\exp(i\vec{k}_\beta\vec{r}_\beta))$ - плоска хвиля, що описує відносний рух вільних частинок $\alpha(\beta)$ та $(\beta,\gamma)((\alpha,\gamma))$ в початковому (кінцевому) стані з відносним імпульсом $\vec{k}_\alpha(\vec{k}_\beta)$. Точно кажучи, у випадку заряджених частинок в (6) плоскі хвилі у початковому і кінцевому станах повинні збурюватись фазовими множниками, які логарифмічно залежать від відстані між частинками [3,6]. Це збурення обумовлене фізичними обставинами, які вже відзначалися вище: асимптотичний рух частинок в кулонівському полі ніколи не буває вільним, і частинки слабо взаємодіють при як завгодно великих відстанях між ними. Звідси випливає, що у випадку далекодії наведені визначення канальних гамільтоніанів вимагають модифікації.

Враховуючи зроблені зауваження, введемо в розгляд модифіковані канальні асимптотичні стани $|\Phi_i^{\alpha+}\rangle$ та $|\Phi_f^{\beta-}\rangle$, які, на відміну від $|\Phi_i^\alpha\rangle$ і $|\Phi_f^\beta\rangle$, правильно описують ефекти далекодіючого кулонівського поля в процесах перезарядки. Опишемо їх будову. Нехай $\xi_\alpha = r_\alpha - \hat{\vec{k}}_\alpha\vec{r}_\alpha\left(\xi_\beta = r_\beta + \hat{\vec{k}}_\beta\vec{r}_\beta\right)$ - параболічні координати частинки $\alpha(\beta)$ до (після) зіткнення; $\hat{\vec{k}}_j (j=\alpha,\beta)$ - одиничний вектор в напрямку вектора $\vec{k}_j$: $\hat{\vec{k}}_j = \vec{k}_j\cdot k_j^{-1}$. Функції $\Phi_i^{\alpha+}(\Phi_f^{\beta-})$ є добутком хвильової функції зв'язаного стану пари $(\beta,\gamma)((\alpha,\gamma))$ та збуреної плоскої хвилі $f_\alpha^+(f_\beta^-)$ з одиничною амплітудою:

$$\Phi_i^{\alpha+} = \varphi_i(\vec{x})f_\alpha^+(\vec{r}_\alpha) \equiv \varphi_i(\vec{x})exp\{i\vec{k}_\alpha\vec{r}_\alpha + i\sigma_\alpha\}, \tag{7}$$

$$\Phi_f^{\beta-} = \varphi_f(\vec{s})f_\beta^-(\vec{r}_\beta) \equiv \varphi_f(\vec{s})\exp\{i\vec{k}_\beta\vec{r}_\beta - i\sigma_\beta\}, \tag{8}$$

Кулонівські фази σ_α *і* σ_β, що збурюють плоскі хвилі, задаються рівностями:

$$\sigma_\alpha = \nu_\alpha\ln(k_\alpha\xi_\alpha),\quad \nu_\alpha = n_\alpha/\vartheta,\quad \vec{\vartheta} = \vec{k}_\alpha/\mu_\alpha, \tag{9}$$

$$\sigma_\beta = \nu_\beta\ln(k_\beta\xi_\beta),\quad \nu_\beta = n_\beta/\vartheta',\quad \vec{\vartheta}' = \vec{k}_\beta/\mu_\beta. \tag{10}$$

Параметр $n_\alpha(n_\beta)$, що характеризує величину ефективної кулонівської взаємодії, дорівнює добутку заряду пари $(\beta,\gamma)((\alpha,\gamma))$ на заряд третьої частинки:

$$n_\alpha = z_\alpha(z_\beta + z_\gamma),\quad n_\beta = z_\beta(z_\alpha + z_\gamma). \tag{11}$$

Тут z_j заряд j-ої частинки $(j=\alpha,\beta,\gamma)$; $z_j = -1$.

Наступні побудови будемо проводити на основі розбиття збурюючих потенціалів W_α *і* W_β на дві частини:

$$W_\alpha = w_\alpha + W_{\alpha d},\quad W_\beta = w_\beta + W_{\beta d}, \tag{12}$$

де w_α *і* w_β - довільні короткодіючі потенціали, які залежать тільки від відносних координат $\vec{r}_\alpha$ *і* $\vec{r}_\beta$ відповідно; припускається, що ці потенціали достатньо швидко зменшуються при $r_j \to \infty$, хоча б, як степінь $r_j^{-1-\varepsilon}$, $\varepsilon > 0$. Припускаємо також, що при достатньо великих r_j, потенціали W_{jd} співпадають з чисто кулонівськими:

$$W_{\alpha d} \underset{r_\alpha\to\infty}{\to} W_{\alpha d}^c \equiv \frac{n_\alpha}{r_\alpha},\quad W_{\beta d} \underset{r_\beta\to\infty}{\to} W_{\beta d}^c \equiv \frac{n_\beta}{r_\beta}, \tag{13}$$

де $W_{\alpha d}^c(W_{\beta d}^c)$ - ефективний кулонівський потенціал, що діє між частинкою $\alpha(\beta)$ і центром мас системи $(\beta,\gamma)((\alpha,\gamma))$. Позначимо через $H_{\alpha d}(H_{\beta d})$ модифікований канальний гамільтоніан, який породжений потенціалом $W_{\alpha d}(W_{\beta d})$:

$$H_{\alpha d} = H_\alpha + W_{\alpha d},\quad H_{\beta d} = H_\beta + W_{\beta d} \tag{14}$$

і будемо будувати $W_{\alpha d}(W_{\beta d})$ з таким розрахунком, щоб задовільнити рівняння Шредінгера:

$$\left(H_{\alpha d}-E\right)\Phi_i^{\alpha+}=0,\quad E=E_i+k_\alpha^2/2\mu_\alpha, \tag{15}$$

$$\left(H_{\beta d}-E\right)\Phi_f^{\beta-}=0,\quad E=E_f+k_\beta^2/2\mu_\beta. \tag{16}$$

Тут $E_i(E_f)$ - енергія зв'язаного стану пари $(\beta,\gamma)((\alpha,\gamma))$, Е – повна енергія системи трьох частинок. Введення гамільтоніану $H_{\alpha d}(H_{\beta d})$ має дуже глибокі фізичні причини. Електрон в довільній точці простору відчуває вплив кулонівського поля кожного центру – факт, добре відомий із загальної квантово-механічної задачі про розсіяння на кулонівському потенціалі, який збурює фазу частинки, що розсіюється у всій області руху. Тому збурення $W_{\alpha d}$, $W_{\beta d}$, які апроксимують потенціал віддаленого кулонівського центра, повинні врахуватись в канальному (тобто нульовому) гамільтоніані.

Для наочності знайдемо $W_{\alpha d}$. Відзначимо, що з визначення $H_{\alpha d}$ виходить рівність: $W_{\alpha d}=H_{\alpha d}-H_\alpha$. Діючи на $\left|\Phi_i^{\alpha+}\right\rangle$ диференціальним оператором $\left(H_{\alpha d}-H_\alpha\right)$ і враховуючи співвідношення (3), (7) та (15), знайдемо, що

$$W_{\alpha d}\left|\Phi_i^{\alpha+}\right\rangle=\left(H_{\alpha d}-H_\alpha\right)\left|\Phi_i^{\alpha+}\right\rangle=\varphi_i(\vec{x})(k_\alpha^2/2\mu_\alpha+\Delta_{\vec{r}_\alpha}/2\mu_\alpha)\left|f_\alpha^+(\vec{r}_\alpha)\right\rangle=\left(n_\alpha/r_\alpha\right)\left[1-\left(v_\alpha/\left(k_\alpha\xi_\alpha\right)\right)\right]\left|\Phi_i^{\alpha+}\right\rangle. \tag{17}$$

До аналогічних формул прийдемо і для потенціалу $W_{\beta d}$:

$$W_{\beta d}\left|\Phi_f^{\beta-}\right\rangle=\left(H_{\beta d}-H_\beta\right)\left|\Phi_f^{\beta-}\right\rangle=\left(n_\beta/r_\beta\right)\left[1-(v_\beta/(k_\beta\xi_\beta))\right]\left|\Phi_f^{\beta-}\right\rangle. \tag{18}$$

Зауважимо, що представлення (7) ((8)) несправедливе в околі особливого напрямку, тобто в околі напрямку розсіяння вперед $(\hat{\vec{r}}_\alpha=\hat{\vec{k}}_\alpha,\ \xi_\alpha=0)$ $((\hat{\vec{r}}_\beta=\hat{\vec{k}}_\beta,\ \xi_\beta=0))$, де фаза $\sigma_\alpha(\sigma_\beta)$ обертається у безмежність. Ця обставина безпосередньо зв'язана з існуванням особливостей полюсного характеру в енергозалежних потенціалів $W_{\alpha d}$ та $W_{\beta d}$ в точках $\xi_\alpha=0$ і $\xi_\beta=0$ відповідно. В особливих напрямках асимптотику функцій $\Phi_i^{\alpha+}$ і $\Phi_f^{\beta-}$ можна описати в термінах спеціальних функцій [3].

Визначимо тепер повну функцію Гріна (резольвенту) системи трьох частинок:

$$G^\pm(E)=(E-H\pm i\varepsilon)^{-1}. \tag{19}$$

Позначимо через $G_{\alpha d}^+(G_{\beta d}^-)$ функцію Гріна модельного канального гамільтоніану $H_{\alpha d}(H_{\beta d})$:

$$G_{\alpha d}^+=(E-H_{\alpha d}+i\varepsilon)^{-1},\quad G_{\beta d}^-=(E-H_{\beta d}-i\varepsilon)^{-1}, \tag{20}$$

де ε - як завгодно мале додатне число. Розглянемо хвильовий оператор Мйоллера $\omega_\alpha^+(\omega_\beta^-)$:

$$\omega_\alpha^+=1+g_{\alpha d}^+w_\alpha\equiv1+(E-H_{\alpha d}-w_\alpha+i\varepsilon)^{-1}w_\alpha, \tag{21}$$

$$\omega_\beta^-=1+g_{\beta d}^-w_\beta\equiv1+(E-H_{\beta d}-w_\beta-i\varepsilon)^{-1}w_\beta, \tag{22}$$

який перетворює канальну власну функцію $\Phi_i^{\alpha+}(\Phi_f^{\beta-})$ у збурену хвилю $\chi_i^{\alpha+}(\chi_f^{\beta-})$ у вхідному (вихідному) каналі реакції (1а):

$$\left|\chi_i^{\alpha+}\right\rangle=\omega_\alpha^+\left|\Phi_i^{\alpha+}\right\rangle, \tag{23}$$

$$\left|\chi_f^{\beta-}\right\rangle=\omega_\beta^-\left|\Phi_f^{\beta-}\right\rangle. \tag{24}$$

Введемо тепер оператори $U_{\alpha\beta}^\pm$ [7]:

$$U_{\alpha\beta}^+=\omega_\beta^{-*}\left(\vartheta_\beta-W_\beta\right)\left[1+G^+\left(\vartheta_\alpha-W_\alpha\right)\right]\omega_\alpha^+, \tag{25}$$

$$U_{\alpha\beta}^-=\omega_\beta^{-*}\left[1+\left(\vartheta_\beta-W_\beta\right)G^+\right](\vartheta_\alpha-W_\alpha)\omega_\alpha^+, \tag{26}$$

де зірочка * означає ермітове спряження. Оператори $U_{\alpha\beta}^\pm$ мають ту властивість, що їх матричні елементи між кулонівськими асимптотичними станами $\left|\Phi_i^{\alpha+}\right\rangle$ і $\left|\Phi_f^{\beta-}\right\rangle$

є на масовій поверхні фізичними амплітудами переходу $T^{\pm}_{\alpha\beta}$ із каналу α в канал β в "post" і "prior" – формалізмах відповідно:

$$T^{\pm}_{\alpha\beta} = \left\langle \Phi_f^{\beta-} \middle| U^{\pm}_{\alpha\beta} \middle| \Phi_i^{\alpha+} \right\rangle. \tag{27}$$

Ці дві форми для амплітуди переходу, еквівалентні для точного розв'язку задачі розсіяння, дають в різних наближених схемах розрахунку (наприклад, при апроксимації $U^{\pm}_{\alpha\beta}$ наближеними виразами) неоднакову точність, і виникає post-prior розбіжність [8].

Для операторів переходу $U^{\pm}_{\alpha\beta}$ можуть бути записані інтегральні рівняння, отримані і розглянуті вперше Доддом та Грайдером [7]. Маючи на увазі наступний якісний аналіз, запишемо для ілюстрації рівняння для оператора $U^{-}_{\alpha\beta}$:

$$U^{-}_{\alpha\beta} = \omega_{\beta}^{-^{*}}\left(\vartheta_{\alpha} - W_{\alpha}\right)\omega^{+}_{\alpha} + \omega_{\beta}^{-^{*}}(\vartheta_{\beta} - W_{\beta})G^{-}_{\alpha\beta}U^{-}_{\alpha\beta}. \tag{28}$$

В prior-формалізмі теорії, що розглядається, потенціал W_{β} - довільний, а потенціал W_{α} не повинен приводити до перебудови в каналі β, тобто $\lim\limits_{\varepsilon\to 0} i\varepsilon\left\langle \Phi_f^{\beta-} \middle| \omega^{+}_{\alpha} \middle| \Phi_i^{\alpha+} \right\rangle = 0$. Перший член в правій частині рівняння (28) приводить до амплітуди

$$T^{-}_{\alpha\beta}(DWB) = \left\langle \Phi_f^{\beta-} \middle| \omega_{\beta}^{-^{*}}\left(\vartheta_{\alpha} - W_{\alpha}\right)\omega^{+}_{\alpha} \middle| \Phi_i^{\alpha+} \right\rangle \equiv$$
$$\equiv \left\langle \chi_f^{\beta-} \middle| \left(\vartheta_{\alpha} - W_{\alpha}\right) \middle| \chi_i^{\alpha+} \right\rangle \tag{29}$$

в борнівському наближенні із збуреними хвилями.

Хоча формально рівняння (28) є точним, його розв'язок неможливо отримати, базуючись на підході, пов'язаному з використанням стандартних методів розв'язку інтегральних рівнянь. Справа в тому, що ядро інтегральних рівнянь (28) містить незв'язні діаграми, які відповідають процесам, в яких одна з частинок не взаємодіє з іншими двома. В результаті інтегральне рівняння (28) містить сингулярності, що виникають через наявність дельта-функцій, які виражають збереження імпульсу частинок, що не взаємодіють з виділеною парою. Тому аргументи, приведені в роботі [7], ставлять під сумнів збіжність борнівського ряду методу збурених хвиль, тобто ітераційного розкладу рівняння (28). Слід відмітити, що аргументи, використані в [7], можуть бути безпосередньо використані і у випадку ітераційного ряду для оператора переходу $U^{+}_{\alpha\beta}$ в post-формалізмі і також приводять до висновку про його розбіжність. По суті, ці висновки узагальнюють результати авторів [9], які стосуються розбіжності борнівських ітераційних рядів у представленні плоских хвиль для задачі розсіяння з перебудовою трьох тіл.

Всі ці обставини диктують необхідність певної модифікації рівнянь (28), подібно до тої, яка робиться при виведенні рівнянь теорії багаторазового розсіяння [10] і рівнянь Фаддєєва [1,2]. Отримані в результаті модифікації інтегральні рівняння, на відміну від (28), не містять у своїх ядрах незв'язних діаграм і можуть бути розв'язані стандартними методами. Ми не будемо тут описувати громіздкі конструкції, які відповідають такій модифікації рівняння (28) – вони детально розглядались в роботі [4]. Приведемо лише кінцевий результат. З цією метою введемо в розгляд допоміжний потенціал $\vartheta_{æ}$, який відповідає віртуальному проміжковому "æ", а також відповідний йому грінівський оператор $g_{æ}^{+}=(E - H + \vartheta_{æ} + i\varepsilon)^{-1}$. В цих позначеннях модифіковане (з врахуванням далекодіючої природи кулонівських взаємодій) рівняння Додда-Грайдера для квантово-механічного оператора $U^{-}_{\beta\beta}$ розсіяння трьох частинок з перебудовою приймає кінцевий вигляд:

$$U^{-}_{\alpha\beta} = I + K \cdot U^{-}_{\alpha\beta}, \tag{30}$$

де

$$I = \omega_{\beta}^{-*}\left[1 + \left(\vartheta_{\beta} - W_{\beta}\right)g_{\chi}^{+}\right]\left(\vartheta_{\alpha} - W_{\alpha}\right)\omega_{\alpha}^{+};$$
$$K = \omega_{\beta}^{-*}\left(\vartheta_{\beta} - W_{\beta}\right)g_{\chi}^{+}\vartheta_{\chi}G_{\beta\mathit{æ}}^{+}. \tag{31}$$

Основна перевага рівняння (30) перед рівнянням (28) полягає в тому, що довільність у виборі потенціалів $\vartheta_{æ}$ і W_{β} можна використати для отримання рівняння з наперед заданими властивостями. Так у випадку, коли маса однієї із частинок набагато менша (набагато більша) мас двох інших, можна вибрати допоміжні потенціали $\vartheta_{æ}$ і W_{β} так, що ядро K перебудованого інтегрального рівняння (30) буде неперервним у деякому банахівському просторі, тобто не буде містити незв'язних діаграм, а всі функції Гріна, які входять до цього рівняння, є розв'язками рівнянь з розділеними змінними і можуть бути обчислені явно. Неоднорідний член I рівняння (30) при цьому відрізняється від неоднорідного члена рівняння (28) і є нульовим наближенням для збіжного, взагалі кажучи, ітераційного ряду, який представляє розв'язок рівняння (30). Використовуючи (30), амплітуду переходу $T_{\alpha\beta}^{-}$ (7) можна представити у вигляді:

$$T_{\alpha\beta}^{-} = \left\langle \Phi_{f}^{\beta-}\middle|U_{\alpha\beta}^{-}\middle|\Phi_{i}^{\alpha+}\right\rangle = \left\langle \Phi_{f}^{\beta-}\middle|I\middle|\Phi_{i}^{\alpha+}\right\rangle +$$
$$+\left\langle \Phi_{f}^{\beta-}\middle|KU_{\alpha\beta}^{-}\middle|\Phi_{i}^{\alpha+}\right\rangle = \left\langle \Phi_{f}^{\beta-}\middle|I\middle|\Phi_{i}^{\alpha+}\right\rangle \tag{32}$$

плюс члени, які враховують багаторазове перерозсіяння, де остача $\left\langle \Phi_{f}^{\beta-}\middle|U_{\alpha\beta}^{-}\right|$, згідно (31), містить члени, як мінімум, з трьома послідовними перерозсіяннями. Якщо вважати, що процеси з багаторазовими перерозсіяннями не впливають суттєво на форму кутового розподілу, другий член в (32) можна опустити. У цьому випадку амплітуда реакції (1а) в prior-формалізмі задається виразом:

$$T_{\alpha\beta}^{-} = \left\langle \Phi_{f}^{\beta-}\middle|\omega_{\beta}^{-*}\left[1 + g_{\chi}^{+}\left(\vartheta_{\beta} - W_{\beta}\right)\right]\left(\vartheta_{\alpha} - W_{\alpha}\right)\omega_{\alpha}^{+}\middle|\Phi_{i}^{\alpha+}\right\rangle =$$
$$= T_{\alpha\beta}^{-}(DWB) + \left\langle \Phi_{f}^{\beta-}\middle|\omega_{\beta}^{-*}\left[g_{\chi}^{+}\left(\vartheta_{\beta} - W_{\beta}\right)\right]\times\right.$$
$$\left.\times\left(\vartheta_{\alpha} - W_{\alpha}\right)\omega_{\alpha}^{+}\middle|\Phi_{i}^{\alpha+}\right\rangle. \tag{33}$$

Порівняння (29) і (33) показує, що перший член $T_{\alpha\beta}^{-}$(DWB) у правій частині (33) виділяє амплітуду прямого одноступінчатого механізму перезарядки в рамках борнівського наближення із збуреними хвилями. Другий член у (33) безпосередньо описує двоступінчатий механізм захоплення електрону через проміжковий стан, який знаходиться в дискретному або неперервному спектрі. Аналогічний результат має місце і для амплітуди переходу $T_{\alpha\beta}^{+}$ в post-формалізмі:

$$T_{\alpha\beta}^{+} = \left\langle \Phi_{f}^{\beta-}\middle|\omega_{\beta}^{-*}\left(\vartheta_{\beta} - W_{\beta}\right)\left[1 + g_{\chi}^{+}\left(\vartheta_{\alpha} - W_{\alpha}\right)\right]\omega_{\alpha}^{+}\middle|\Phi_{i}^{\alpha+}\right\rangle. \tag{34}$$

Накінець, ще раз зупинимося на принциповій властивості рівняння (30). З формальної точки зору його настільки важко розв'язати, наскільки і рівняння фаддєєвського типу [3]. Але точно розв'язувати рівняння (30) немає необхідності. Суть розглядуваного методу полягає в тому, що достатньо лише ітеративного наближення для оператора, який описує модифікацію системи. Перетворення рівняння (28) у рівняння (30) типу методу збурених хвиль дозволяє отримати ітераційні ряди (як правило їх називають квазіборнівськими або кулон-борнівськими рядами) для оператора переходу, які, як показують розрахунки, (всі вони узагальнені в огляді [5] і книзі [11]), мабуть, збігаються, тобто вже перші ітерації відповідних інтегральних рівнянь дозволяють отримати результат, який практично співпадає з точним розв'язком

1. Л.Д. Фаддеев Теория рассеяния для системы из трех частиц //ЖЭТФ.-(1960)-т.39, вып.5.-с.1459-1467.
2. . Л.Д. Фаддеев Математические вопросы квантовой теории рассеяния для системы трех частиц //Тр.МИАН СССР.-М.:Наука, (1963)-т.69.-122с.
3. . С.П. Меркурьев, Л.Д. Фаддеев Квантовая теория рассеяния для систем нескольких частиц.-М.:Наука, (1985)-398с.
4. . L.R. Dodd, K.R. Greider Rigorous solution of three-body scattering processes in the distorted-wave formalism //Phys.Rev.-(1996)-vol.146, N 3.-p.675-686.
5. Dz. Belkic, R. Gayet, A. Salin Electron capture in high-energy ion-atom collisions //Phys.Rep.-(1979)-vol.56, N6.-p.279-369.
6. . S.P. Merkuriev On the three-body Coulomb scattering problem //Ann.Phys.-(1980)-vol.130, N2.-p.395-426.
7. . K.R. Greider, L.R. Dodd Divergence of the distorted-wave Born series for rearrangement scattering//Phys.Rev.-(1966)-vol.146, N3.-p.671-675.
8. . R.A. Mapleton Theory of charge exchange.-New York, (1972)-395p.
9. . R. Aaron, R.D. Amado, B.W. Lee Divergence of the Green's function series for rearrangement collisions //Phys.Rev.-(1961)-vol.121, N1.-p.319-323.
10. . М. Гольдбергер, К. Ватсон Теория столкновений.- М.:Мир, (1966)-824с.
11. . В.И. Лендьел, В.Ю. Лазур, М.И. Карбованец, Р.К. Янев Введение в теорию атомных столкновений.-Львов: Высш. шк. Изд-во при Львов. ун-те, (1989)- 192с.
12. . Л.П. Пресняков, В.П. Шевелько, Р.К. Янев. Элементарные процессы с участием многозарядных ионов.-М.: Энергоатомиздат, (1986) – 200с.
13. . R.K. Janev, L.P.Presnyakov. Collision processes of multiply charged ions with atoms//Phys.Rep.-(1981)- vol. 70, N1.-p.1-107.
14. . А.В. Богданов, А.С. Геворкян, Г.В. Дубровский. Квазиклассическая асимптотика и механизмы перестройки с участием кулоновских частиц//ЯФ.-(1986)-т.41, №1.-с.101-114.
15. . Л.П. Пресняков, Д.Б. Усков. Ионизация и перезарядка при столкновении атома с многозарядными ионами//ЖЭТФ.-(1984)-т.86, вып.3.-с.882-895.
16. . Л.В. Келдыш. Ионизация в поле сильной электромагнитной волны// ЖЭТФ.-(1964)-т.47, вып.5.-с.1945-1957.
17. . А.Л. Годунов, Ш.Д. Куникеев, В.С. Сенашенко. Дифференциальные сечения захвата электрона протонами в водороде и гелии//Физ. плазмы. – (1986)-т.12, вып.11.-с.1355-1361.

DODD-GRAIDER INTEGRAL EQUATION IN THE CHARGE EXCHANGE PROBLEM

V.U. Lazur, L.M. Khalus

Uzhgorod State University, 294000, Uzhgorod, Voloshin, 54

The Schrödinger formalism of continuum distorded-wave method for the description of the charge exchange reaction has been developed in the framework Dodd-Graider integral equation for the collision operator.