

ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА



М-335

20/5-75

P4 - 8231

164/2-75

А.В.Матвеевко, Л.И.Пономарев

ОСЦИЛЛЯЦИИ ОРБИТИРОВАНИЯ
В ПОЛНОМ СЕЧЕНИИ ПЕРЕЗАРЯДКИ
 $p + H(1s) \longrightarrow H(1s) + p$

1974

ЛАБОРАТОРИЯ
ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

P4 - 8231

А.В.Матвеевко, Л.И.Пономарев

ОСЦИЛЛЯЦИИ ОРБИТИРОВАНИЯ
В ПОЛНОМ СЕЧЕНИИ ПЕРЕЗАРЯДКИ
 $p + H(1s) \longrightarrow H(1s) + p$

Направлено в ЖЭТО

Матвеевко А.В., Пономарев Л.И.

P4 - 8231

Осцилляции орбитирования в полном сечении перезарядки

Проведен подробный расчет реакции перезарядки протонов на атомах водорода в области энергий столкновения $10^{-2} \leq E \leq 0,7$ эВ. В полном сечении перезарядки обнаружены осцилляции с амплитудой $\sim 0,1$ от средней величины сечения. Установлено, что колебательная структура сечения объясняется явлением орбитирования вблизи вершины центробежных барьеров эффективных потенциалов задачи. Проведен фазовый анализ сечения перезарядки.

Препринт Объединенного института ядерных исследований.
Дубна, 1974

Matveenko A.V., Ponomarev L.I.

P4 - 8231

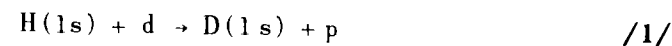
Orbiting Oscillations in the Total Charge
Exchange Cross Section

The reaction of the proton charge exchange on hydrogen atoms in the region of collision energies of $10^{-2} \leq E \leq 0,7$ eV has been calculated in detail. In the total charge exchange cross section there were observed the oscillations with the amplitude of about 0.1 from the average cross section value. It has been established that oscillation structure of the cross section is explained by orbiting near the peak of the centrifugal barriers of the effective potentials of the problem. The phase analysis of the charge exchange cross section had been performed.

Preprint. Joint Institute for Nuclear Research.
Dubna, 1974

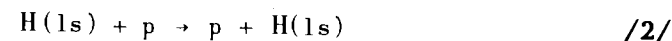
Введение

Подробный расчет реакции перезарядки атомов водорода в основном состоянии на дейтонах



при энергиях столкновения $E \leq 0,5$ эВ позволил обнаружить осцилляции в полном сечении этой реакции.^{/1/}

В данной работе установлено, что в полном сечении симметричной перезарядки



при энергиях столкновения $10^{-2} \leq E \leq 0,7$ эВ имеют место аналогичные осцилляции. Их период оказался примерно постоянным в шкале импульсов, а амплитуда в грубом приближении составляет 10% от величины усредненного сечения. С ростом энергии относительного движения осцилляции затухают /см. рис. 1а/.

Общий ход сечения перезарядки /2/ в интервале энергий столкновения $10^{-4} \leq E \leq 5$ эВ был рассчитан нами ранее^{/2/}. В настоящей работе постановка задачи, методика и точность вычисления фаз рассеяния остались прежними.

Вид эффективных потенциалов, определяющих процесс рассеяния /2/ /см. рис. 2/, во многом типичен для атомных столкновений: отталкивание на малых расстояниях, минимум при конечных R и далекодействующий "хвост"

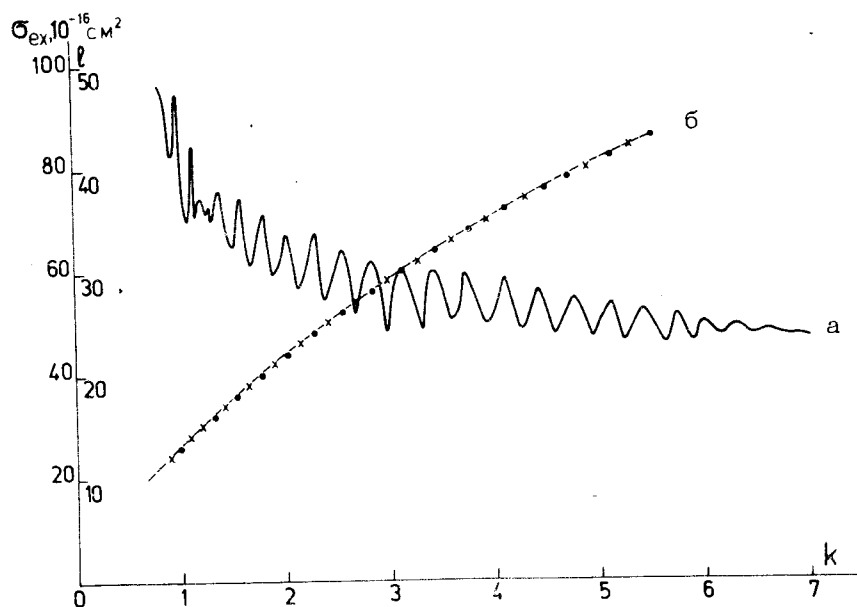


Рис. 1. а/. Полное сечение симметричной перезарядки $H(1s) + p \rightarrow p + H(1s)$ как функция импульса рассеяния. Импульсы даны в единицах задачи, сечения в единицах 10^{-16} см^2 , $E = 1,48 \cdot 10^{-2} k^2 \text{ эВ}$. б/. Орбитальный момент как функция импульса орбитирования $k\ell$, определенного соотношением /10/. Значения $k = k_\ell$ соответствуют максимумам /кружки/ и минимумам /крестики/ сечения $\sigma_{\text{ex}}(k)$. В наиболее интересной области $1,5 \leq k < 4$ точки, соответствующие парам значений (ℓ_0, k_ℓ) , группируются вокруг прямой

притяжения. Сечение рассеяния на таком потенциале имеет сложную колебательную структуру, которая является следствием интерференции колебаний типов ^{/3/}: орбитирования (orbiting), ореола (glory) и радуги (rainbow). Перечисленные осцилляции имеют общую природу: наличие связанных состояний в рассеивающем потенциале.

Сечение перезарядки /2/ определяется двумя потенциалами /см. рис. 2/. Как увидим в дальнейшем, их

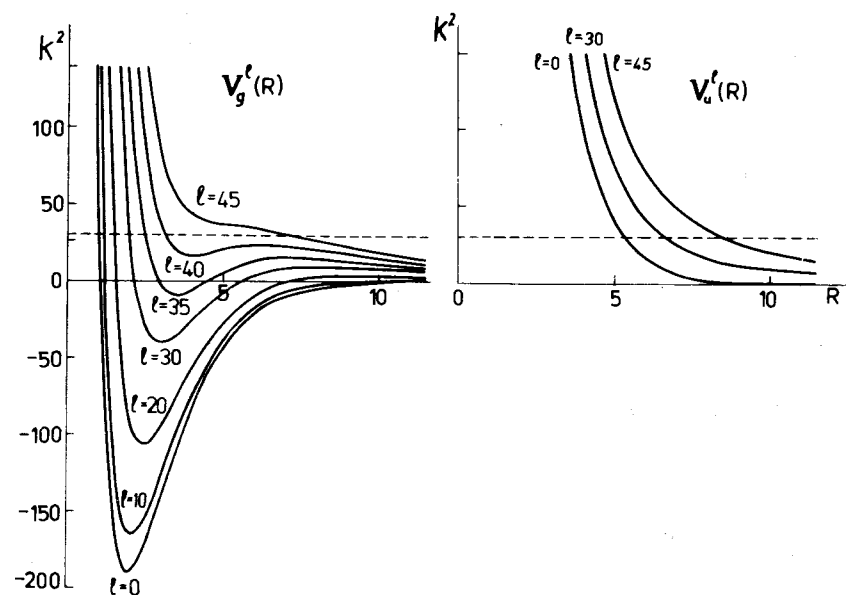


Рис. 2. Эффективные потенциалы $V_{\mu, u}^{\ell}(R) = 2M W_{\mu, u}(R) + \frac{\ell(\ell+1)}{R^2}$, описывающие процесс перезарядки /3/. По оси ординат отложены значения k^2 в единицах задачи. Пунктиром отмечена граница области орбитирования. Слабый минимум потенциала $V_u^0(R)$ расположен при $R = 12,55$ /7/.

взаимное влияние приводит к исчезновению явления ореола в сечении реакции перезарядки, что существенно упрощает анализ результатов расчета.

Осцилляции, обнаруженные в полном сечении перезарядки /2/, обусловлены квантовым аналогом явления орбитирования, хорошо известного из классической теории рассеяния ^{/4/}. При интерпретации результатов вычислений отмеченная классическая аналогия оказывается весьма содержательной и помогает объяснить основные особенности поведения сечения: положение максимумов и минимумов, число и период осцилляций, а также область энергий столкновения, в которой их можно наблюдать.

В двухуровневом приближении метода возмущенных стационарных состояний задача о вычислении сечения перезарядки для процесса /2/ сводится к решению двух одномерных радиальных уравнений Шредингера /в единицах $e = \hbar = m = 1$, $1/m = 1/m_e + 1/2M_p$ /

$$\frac{d^2}{dR^2} \chi_{g,u}^\ell(R) + [k^2 - V_{g,u}^\ell(R)] \chi_{g,u}^\ell(R) = 0, \quad /3/$$

где введены обозначения

$$V_{g,u}^\ell(R) = 2M[W_{g,u}(R) - W_{g,u}(\infty)] + [K_{gg,uu}(R) - K_{gg,uu}(\infty)] + \frac{\ell(\ell+1)}{R^2}$$

$$k^2 = 2ME, \quad M = M_p/2, \quad /4/$$

m_e и M_p - массы электрона и протона соответственно, E - энергия относительного движения в системе центра инерции.

Термы $W_g(R)$ и $W_u(R)$ /собственные значения задачи двух центров/ и адиабатические поправки к термам $K_{gg}(R)$ и $K_{uu}(R)$ /матричные элементы операторов кинетической энергии ядер по волновым функциям задачи двух центров/ вместе с центробежным потенциалом $\ell(\ell+1)/R^2$ формируют два набора эффективных потенциалов $V_g^\ell(R)$ и $V_u^\ell(R)$, представленных на рис. 2а и 2б. Фазы рассеяния $\delta_g^\ell(k)$ и $\delta_u^\ell(k)$, вычисленные из уравнений /3/, позволяют найти сечение перезарядки реакции /2/:

$$\sigma_{ex}(k) = \frac{\pi}{k^2} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) \sin^2 \Delta^\ell(k), \quad /5/$$

где

$$\Delta^\ell(k) = \delta_g^\ell(k) - \delta_u^\ell(k). \quad /6/$$

На рис. 3а-3в приведены фазы $\delta_g^\ell(\ell) \equiv \delta_g^\ell(k)$, $\delta_u^\ell(\ell) \equiv \delta_u^\ell(k)$ и $\Delta^\ell(\ell) \equiv \Delta^\ell(k)$ как функции орбитального момента ℓ при некоторых фиксированных значениях E . Отметим характерные особенности этих функций, определяющих поведение сечения. Прежде всего, наличие максимумов на графиках фаз $\delta_g^\ell(\ell)$ и $\delta_u^\ell(\ell)$ указывает на то, что полное сечение упругого рассеяния для процесса /2/

$$\sigma = \frac{2\pi}{k^2} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) (\sin^2 \delta_g^\ell + \sin^2 \delta_u^\ell) \quad /7/$$

будет содержать осцилляции ореола, которые обеспечиваются фазами, удовлетворяющими квазиклассическому условию

$$\frac{\partial}{\partial \ell} \delta_g^\ell(\ell) = 0^{/4-6/}. \quad \text{Из рис. 3в видно, что функции}$$

$\Delta^\ell(\ell)$ монотонно убывают, и, следовательно, в сечении перезарядки /5/ явление ореола отсутствует.

Для области орбитирования характерна сильная зависимость фазы рассеяния от ℓ /3, 4/. Из рис. 3 следует, что такое поведение $\Delta^\ell(\ell)$ полностью определяется фазами $\delta^\ell(\ell)$, и потому осцилляции орбитирования будут присутствовать как в полном сечении /7/, так и в сечении перезарядки /5/, причем их положение зависит лишь от потенциала $V_g(R)$.

Семейство функций $\Delta^\ell(k)$ приведено на рис. 4. С уменьшением k эти функции стремятся к величинам

$$\Delta^\ell(0) = \pi(n_g^\ell - n_u^\ell) = \pi n_\ell, \quad /8/$$

где n_g^ℓ и n_u^ℓ равны числу связанных состояний в потенциалах $V_g(R)$ и $V_u(R)$ соответственно. Как известно, /7/, $n_g^0 = 20$ и $n_u^0 = 2$ и в соответствии с этим $\Delta^0(0) = 18\pi$. Весьма примечательно, что приближенное равенство $\Delta^0(0) \approx 18\pi$ оказывается верным в очень широком интервале значений k /см. рис. 3в/. При увеличении ℓ значение n_u^ℓ обращается в нуль и величина n_ℓ становится равной $\Delta^0(0)/\pi = n_g^\ell$, т.е. числу уровней в потенциале $V_g(R)$.

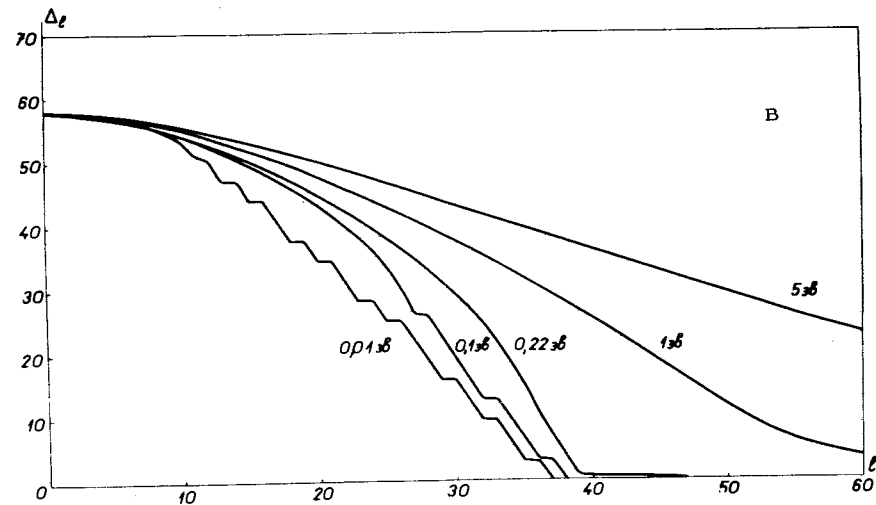
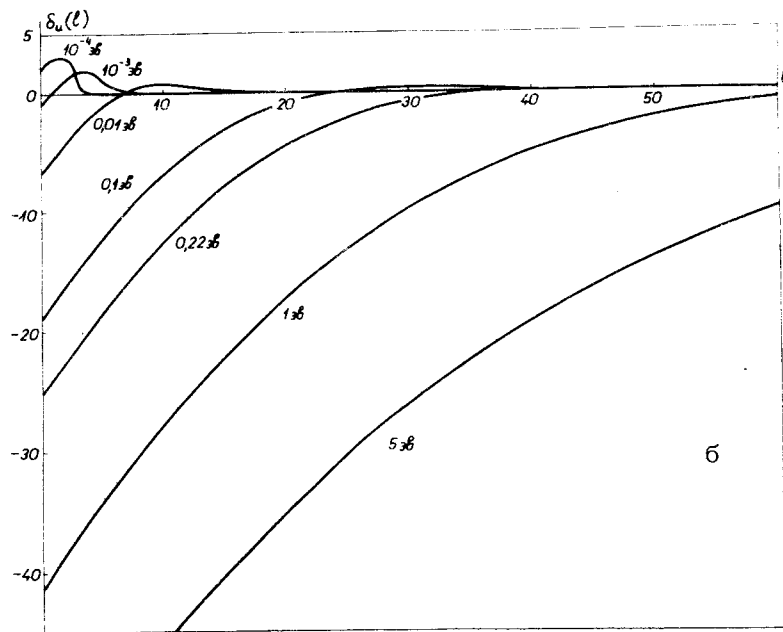
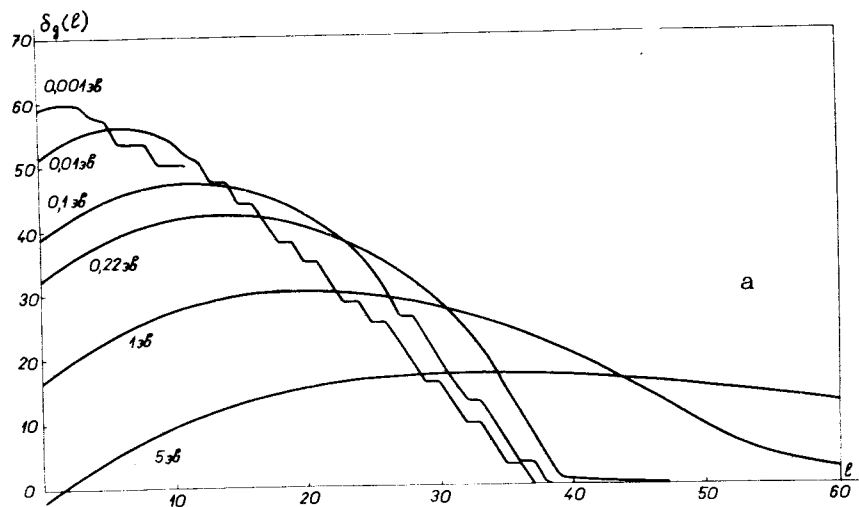


Рис. 3. Фазы рассеяния как функции орбитального момента при фиксированной энергии столкновения. а/. Фазы $\delta_g(\ell) \equiv \delta_u^{\ell}(k)$. По смещению максимумов кривых можно определить период осцилляций ореола в упругом сечении /7/, который ($\Delta k \approx 1$) оказывается примерно в три раза больше периода осцилляций орбитирования ($\Delta k \approx 0,3$). б/. Фазы $\delta_u(\ell) \equiv \delta_u^{\ell}(k)$. В области импульсов орбитирования ($1 \leq k \leq 5$) и при значениях орбитальных моментов, им соответствующих /см. рис. 16/, фазы $\delta_u^{\ell}(k)$ малы и практически постоянны, и поэтому не влияют на структуру осцилляций орбитирования. в/. Функции $\Delta(\ell) \equiv \Delta^{\ell}(k)$ монотонно уменьшаются с ростом ℓ , что объясняет отсутствие осцилляций ореола в сечении перезарядки /2/.

Число связанных состояний n_{ℓ} с ростом ℓ уменьшается, и последний дискретный уровень исчезает при $\ell = 36$.

Резкие скачки фаз $\Delta^{\ell}(k)$ при некоторых значениях k свидетельствуют о наличии квазистационарных состояний в потенциалах $V_g^{\ell}(R)$ /очевидно, их энергия не может превышать высоты центробежного барьера/. Число квазистационарных состояний n_{ℓ}^* не превышает трех и последнее из них исчезает при $\ell = 42$ вместе с исчезновением минимума в потенциале $V_g^{\ell}(R)$.

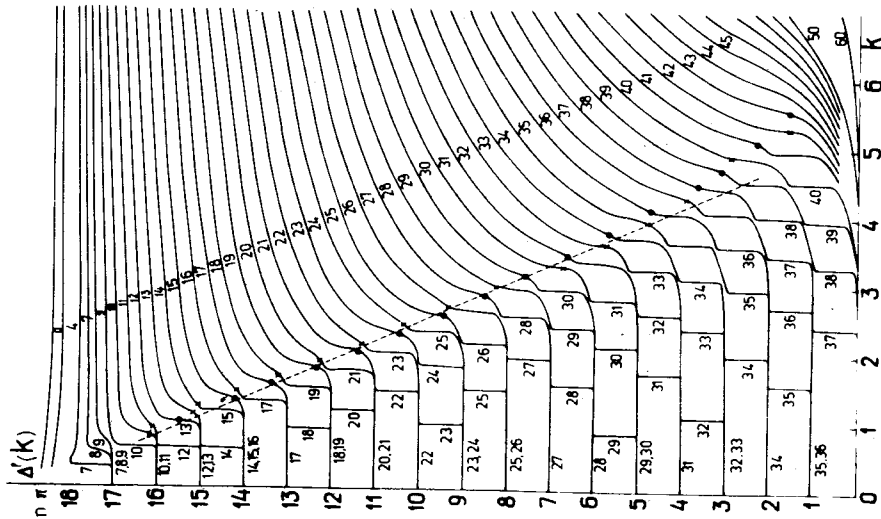


Рис. 4. Функции $\Delta^l(k)$. При $k \rightarrow 0$ значения $\Delta^l(0) = \pi n \ell$, где $n \ell$ равно числу связанных состояний в эффективном потенциале $V_g^l(R)$. Цикло резких скачков при малых k равно числу $n \ell$ квазистационарных состояний ($n \ell \leq 3$). Когда самый высокий квазистационарный уровень попадает в область орбитирования ($k \approx k \ell$), фазы $\Delta^l(k)$ принимают значения $\Delta_{\max}^l(k \ell) \approx \pi(n \ell + n \ell + 1/2)$ / эти точки помечены крестиками/. Крестиками помечены величины $\Delta_{\min}^l(k \ell) \approx \pi(n \ell + n \ell)$ при энергиях столкновения /10/, но не совпадающих с энергией квазистационарного состояния. Значения фаз $\Delta^l(k \ell)$ для $1 \leq k \leq 4$, $10 \leq \ell \leq 36$ группируются вблизи прямой $\Delta^l(k) = 59,7 - 11k$, или с учетом зависимости между ℓ_0 и $k \ell$ /рис. 1б/, $\Delta^l(k \ell) \approx 23\pi - \pi \ell / 2$. Из наклона прямой $\Delta^l(k \ell)$ можно оценить период осцилляции орбитирования: $\Delta k \approx \pi / 11 \approx 0,28$.

В сечении $\sigma_{ex}(k)$ эти квазистационарные состояния проявляются как узкие резонансы /на рис. 1 они не показаны ввиду своей многочисленности/. Положение этих резонансов легко определяется из рис. 4, а их относительная высота может быть вычислена по формуле для парциальных сечений

$$\sigma_{ex}^{\ell} = \frac{\pi}{k^2} (2\ell + 1), \quad /9/$$

Ширина резонансов экспоненциально увеличивается по мере приближения к вершине центробежного барьера потенциалов $V_g^l(R)$ и в окрестности его вершины становится сравнимой с расстоянием между уровнями. Как следует из рис. 4, в этой области фазы $\Delta^l(k)$ меняются еще достаточно быстро, чтобы обеспечить резонансное поведение сечений, но уже достаточно медленно, чтобы ширина резонанса оказалась значительной.

Основное утверждение работы состоит в том, что осцилляции в сечении $\sigma_{ex}(k)$, представленные на рис. 1, объясняются особенностями процесса рассеяния вблизи вершины центробежных барьеров потенциалов $V_g^l(R)$ и, следовательно, особенностями поведения фаз рассеяния в соответствующей области энергий столкновения /рис. 4/.

Осцилляции в полном сечении перезарядки и явление орбитирования

Явление орбитирования при классическом рассеянии на потенциалах $V_g^l(R)$ возникает при импульсах столкновения, удовлетворяющих условию:

$$k_{\ell}^2 = 2M V_g^l(R_{\ell}), \quad /10/$$

где значения R_{ℓ} соответствуют вершине центробежного барьера и определяются равенством

$$\frac{\partial}{\partial R} V_g^l(R_{\ell}) = 0. \quad /11/$$

Полученное таким образом множество точек в плоскости (ℓ, k) ложится на плавную кривую /рис. 1/. Нетрудно убедиться, что значения k_ℓ практически совпадают с положениями максимумов и минимумов в сечении перезарядки.

Каждой паре значений (ℓ, k_ℓ) на графиках $\Delta^\ell(k)$ соответствует точка $\Delta^\ell(k_\ell)$, совокупность которых группируется вблизи прямой /рис. 4/. При значениях k_ℓ , соответствующих условию орбитирования /10/, величины $\Delta^\ell(k_\ell)$ при последовательном увеличении ℓ принимают поочередно значения $\Delta_{\max}^\ell(k_\ell) \approx \pi(n_\ell + n_\ell^* + 1/2)$ и $\Delta_{\min}^\ell(k_\ell) \approx \pi(n_\ell + n_\ell^*)$. Это означает, что при k_ℓ , соответствующих Δ_{\max}^ℓ , квазистационарный уровень действительно находится в окрестности вершины центростремительного барьера. Приблизительно такие условия резонанса повторяются с интервалом $\Delta\ell = 2$ /см. рис. 4/. С ростом ℓ дискретные уровни исходной потенциальной ямы $V_g^0(R)$ становятся квазистационарными уровнями потенциала $V_g^\ell(R)$ и при дальнейшем увеличении ℓ вытесняются в непрерывный спектр, минуя окрестность вершины центростремительного барьера. Отсюда, в частности, следует, что число осцилляций орбитирования приблизительно совпадает с числом дискретных уровней в потенциале $V_g^0(R)$.

С уменьшением энергии столкновения ($k \leq 1$) периодичность осцилляций нарушается и они постепенно вырождаются в узкие резонансы. При $k \geq 5$, когда возможно лишь надбарьерное рассеяние, осцилляции орбитирования переходят в осцилляции радужного рассеяния^{/3/}, амплитуда которых быстро убывает.

Парциальный анализ осцилляций /см. рис. 5/ показывает, что в действительности и при $k < 5$ колебательная структура сечений обеспечивается суперпозицией осцилляций орбитирования и осцилляций радуги, так как в формировании максимума /минимума/ в сечении участвует группа из нескольких волн.

Как видно из рис. 5, значение $\ell_0 = \ell(k_\ell)$ служит границей, по обе стороны которой структура парциальных сечений $\sigma_{ex}^\ell(k)$ весьма различна. При $\ell < \ell_0$ набор величин σ_{ex}^ℓ образует ступенчатую и довольно нерегулярную функцию орбитального момента ℓ , при $\ell > \ell_0$ фор-

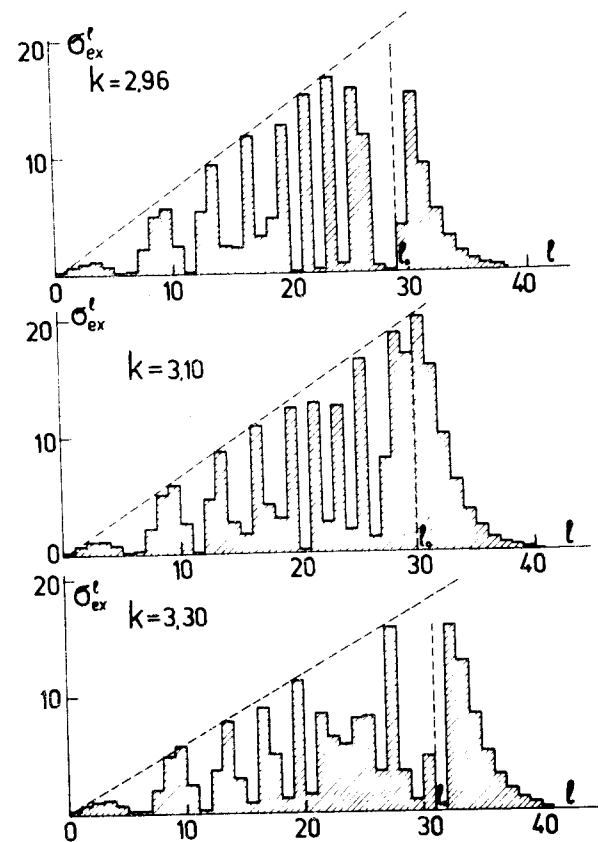


Рис. 5. Парциальный анализ полного сечения перезарядки $\sigma_{ex}^\ell(k)$ при значениях $k = 3, 10$ /максимум в сечении/, $k = 2, 96$ и $k = 3, 30$ /два соседних минимума/. Значения ℓ_0 , определенные из условия орбитирования /10/ при этих значениях энергии, соответственно равны $\ell_0 = 30$ и $\ell_0 = 29$ и $\ell_0 = 31$ /см. также рис. 16/. Характер гистограмм по обе стороны от этих значений ℓ_0 существенно различен. Парциальные сечения σ_{ex}^ℓ в малой окрестности значений $\ell \leq \ell_0$ соответствуют радужному рассеянию.

мируется устойчивая картина, которая с ростом k становится все более определенной^{/2/}. Парциальные сечения σ_{ex}^ℓ в малой окрестности $\ell \leq \ell_0$ соответствуют радужному рассеянию.

Заключение

Реакция /2/ является довольно редким примером реальной квантовой задачи рассеяния, которая может быть сформулирована и решена с необходимой точностью. Область энергий столкновения $10^{-2} \leq E \leq 0,7 \text{ эВ}$, в которой она изучена в настоящей работе, весьма интересна для многочисленных приложений, однако приближенные методы расчета следует применять здесь с большой осторожностью. Результаты представленных в работе вычислений иллюстрируют это утверждение, впрочем, достаточно хорошо известное ^{/3,6/}.

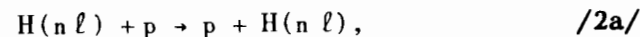
Особенно интересным представляется нам то обстоятельство, что уже простой анализ формы потенциалов, входящих в уравнение Шредингера, позволяет объяснить довольно тонкие особенности структуры квантово-механического сечения рассеяния.

Характерной особенностью реакции симметричной перезарядки /2/ является возможность записать ее сечение в виде /5/. Это означает, что $\sigma_{ex}^{\ell}(k)$ можно представить как результат рассеяния на некотором "обменном" потенциале $V_{ex}(R)$, порождающем набор фаз рассеяния $\Delta^{\ell}(k)$. Некоторые свойства $V_{ex}(R)$ следуют уже из рис. 3в. Так, монотонность функций $\Delta^{\ell}(k)$ означает конечность потенциала $V_{ex}(R)$ при $R \rightarrow 0$, а слабая зависимость $\Delta^{\ell}(k)$ от k при $\ell \rightarrow 0$ свидетельствует о том, что $V_{ex}(R)$ зависит от энергии столкновения некоторым специальным образом. Последнее обстоятельство накладывает вполне определенное ограничение на вид обменного потенциала $V_{ex} = V_g(R) - V_u(R)$, который обычно принимается в расчетах по методу прицельного параметра ^{/6,8,9/}.

Эффект, изученный на частном примере симметричной перезарядки /2/, является достаточно общим и проявляется в более сложных реакциях перезарядки, например, в реакции /1/. Однако в этих случаях его интерпретация не столь наглядна, поскольку для описания процесса /1/ необходимы уже три набора фазовых параметров вместо единственного $\Delta^{\ell}(k)$ в случае реакции /2/.

Осцилляции орбитирования должны возникать всегда при низкоэнергетическом рассеянии /для энергий, мень-

ших глубины ямы, и порядка высоты центробежного барьера/ на достаточно мощных потенциалах, в которых помещается некоторое число связанных состояний. При увеличении энергии столкновения осцилляции исчезают, однако при открытии нового канала реакции перезарядки, например,



они должны появиться вновь при энергиях столкновения, несколько превышающих пороговую. В этом смысле осцилляции орбитирования можно рассматривать как пороговый эффект.

Колебательная структура сечения и ее связь с классической задачей рассеяния, по-видимому, впервые исследовалась в работе ^{/10/} для потенциала $V(R) = -a/R^4$. Сходные вопросы рассматривались также авторами работы ^{/3/}, где достаточно подробно обсуждаются точность и границы применимости квазиклассического приближения в задачах подобного типа.

В заключение нам приятно выразить свою признательность С.С.Герштейну, Ю.Н.Демкову, Г.Ф.Друкареву и Я.А.Смородинскому за интерес к работе и плодотворные обсуждения.

Литература

1. А.В.Матвеев. ЖЭТФ, 65, 2167 /1973/.
2. А.В.Матвеев, Л.И.Пономарев. ЖЭТФ, 57, 2085 /1969/.
3. R.J.Munn, E.A.Mason, F.J.Smith. J.Chem.Phys., 41, 3978 (1964).
4. Р.Ньютон. Теория рассеяния волн и частиц. Москва, Изд. "Мир", 1969.
5. R.B.Bernstein. J.Chem.Phys., 38, 2599 (1962).
6. M.C.R.McDowell, J.P.Coleman. Introduction to the theory of ion-atom collisions. Amsterdam-London, 1970.
7. J.M.Peek. J.Chem.Phys., 50, 4595 (1969).
8. A.V.Matveenko, L.I.Ponomarev. J.Phys.B.Atom. Molec. Phys., 5, 27 (1972).
9. D.R.Bates, A.H.Boyd. Proc. Phys. Soc., A80, 1301 (1962).

9. Б.М.Смирнов. Асимптотические методы в теории атомных столкновений. Москва, Атомиздат, 1973.
10. E. Vogt, G.H. Wannier. *Phys.Rev.*, 95, 1190 (1954).

Рукопись поступила в издательский отдел
28 августа 1974 года.