

ОБЪЕДИНЕННЫЙ  
ИНСТИТУТ  
ЯДЕРНЫХ  
ИССЛЕДОВАНИЙ  
ДУБНА

A 62

P4-89-384

И. В. Амирханов, О. Лхагва, И. В. Москаленко <sup>1</sup>,  
Л. Хэнмэдэх <sup>2</sup>

ОБОБЩЕННЫЕ СИЛЫ ОСЦИЛЛЯТОРА  
И СЕЧЕНИЯ АСИММЕТРИЧНОЙ  $He(e,2e)He^+$   
РЕАКЦИИ В РАЗЛИЧНЫХ МОДЕЛЯХ  
СТРУКТУРЫ АТОМА ГЕЛИЯ

Направлено в журнал "Вестник МГУ"

<sup>1</sup> Научно-исследовательский институт ядерной физики  
МГУ, Москва

<sup>2</sup> Политехнический институт г. Улан-Батор, МНР

## 1. Введение

Современные совпадательные эксперименты, определяющие тройные дифференциальные сечения (ТДС) ионизации атомов ударом быстрых электронов, дают возможность осуществить детальную проверку теории и исследовать механизм процесса ионизации<sup>[1]</sup>. Вместе с тем  $(e, 2e)$  реакции служат мощным средством для получения информации об электронной структуре атома-мишени<sup>[2]</sup> и, в том числе, для изучения характеристик автоионизационных резонансов<sup>[3,4]</sup>.

ТДС  $(e, 2e)$  реакции характеризуют меру вероятности того, что при столкновении падающего электрона энергии  $E_0$  и импульса  $\vec{k}_0$  с мишенью образуются два электрона с энергиями  $E_a, E_b$  и импульсами  $\vec{k}_a, \vec{k}_b$ , которые испускаются в телесные углы  $d\Omega_a$  и  $d\Omega_b$  [рис.1].

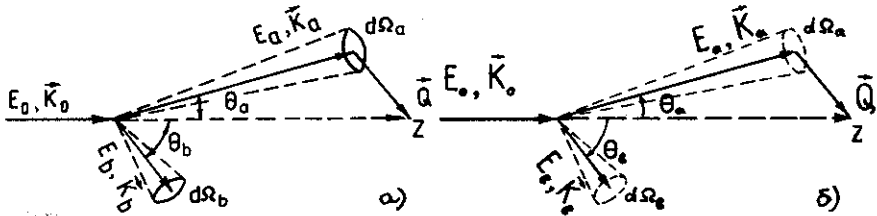


Рис.1.  $\vec{k}_0$  и  $\vec{k}_a$  - начальный и конечный импульсы пролетающего электрона.  $\vec{k}_b$  - импульс эжектируемого электрона.

$\vec{Q} = \vec{k}_0 - \vec{k}_a$  - переданный импульс.  $\theta_a$  и  $\theta_b$  - углы рассеяния и эжекции соответственно.

Обычно рассматривается реакция в компланарной геометрии, когда регистрируемые на совпадение рассеянный и выбитый электроны находятся в одной плоскости рассеяния.

В  $(e, 2e)$  реакции кинематика процесса ионизации полностью определена, так как при заданных энергии  $E_0$  и импульсе  $\vec{k}_0$  падающего электрона энергии рассеянного ( $E_a$ ) и эжектируемого ( $E_b$ ) электронов, а также направления их импульсов строго фиксированы условиями эксперимента. По кинематическим условиям  $(e, 2e)$  реакции делятся на симметричные и асимметричные. Реакции симметричной геометрии соответствуют следующим условиям на энергии и углы:

$E_a = E_b$ ,  $\theta_a = \theta_b$ . В асимметричных  $(e, 2e)$  реакциях быстрые рассеянные электроны попадают преимущественно внутрь узкого конуса вокруг направления падающего пучка, а медленные эжектируемые электроны ( $E_b < E_a$ ) выходят под большими углами к падающему пучку и имеют два пика в угловом распределении. Один из пиков называют квазиупругим, он обусловлен прямым взаимодействием падающего

электрона с атомными и направлен примерно вдоль переданного импульса  $Q$ . Другой пик, направленный противоположно вектору  $Q$ , называют пиком отдачи, он определяется взаимодействием медленного испущенного электрона с остаточным ионом.

Большинство экспериментов по асимметричным  $(e, 2e)$  реакциям проведены на атомах водорода<sup>[5,6]</sup>, атомах гелия<sup>[7-11]</sup> и других благородных газов<sup>[12]</sup>. В них исследованы  $(e, 2e)$  реакции при сравнительно больших энергиях падающего электрона (сотни эВ) и малых значениях переданного импульса<sup>[1]</sup>. Отметим, что при высоких энергиях падающего электрона большая доля ( $\approx 85\%$ ) ионизационных событий происходит<sup>[13]</sup> в случаях столкновений с малым переданным импульсом ( $Q \approx 1$  а. е.).

Теоретическое рассмотрение асимметричных  $(e, 2e)$  реакций проводилось в рамках первого борновского приближения (ПБП) с использованием различных приближений для волновых функций эжектируемого электрона<sup>[1,14,15]</sup>. При этом отмечалось расхождение экспериментальных данных и теоретических оценок ТДС асимметричных реакций<sup>[1,9]</sup>. Цилиндрическая симметрия, предсказываемая ПБП для квазиупругого пика и пика отдачи ТДС относительно оси-вектора переданного импульса  $Q$ , в экспериментальных данных<sup>[10,11]</sup> не наблюдается, эти пики, как правило, смещены от оси  $Q$  в сторону больших углов эжекции. При этом измеренный квазиупругий пик имеет заниженные, а пик отдачи — значительно завышенные значения по отношению к предсказаниям в ПБП. В ряде работ<sup>[5,14,16,17]</sup> предложены модификации ПБП и продемонстрирована важность учета эффектов многократного рассеяния<sup>[5,14,16]</sup> и взаимодействия в конечных состояниях<sup>[17]</sup>. Вместе с тем было показано<sup>[18,19]</sup>, что при высоких энергиях падающего электрона (8 кэВ) эффекты обмена и вклад высших порядков пренебрежимо малы.

Расчеты, проведенные для рассеяния электронов на атоме гелия при энергии 600 эВ<sup>[16]</sup>, указывают на то, что обобщенная сила осциллятора асимметричной  $(e, 2e)$  реакции очень чувствительна к выбору волновых функций мишени, особенно к учету корреляции электронов мишени как в начальном, так и в конечном состояниях.

Критический анализ<sup>[20]</sup> результатов экспериментальных и теоретических исследований<sup>[10,21]</sup>, проведенных при высоких (8 кэВ) энергиях на атоме гелия и вызвавших сомнение в применимости в этом случае ПБП, привел к выводу о необходимости дальнейшего форсирования точных экспериментов, с тем, чтобы детально проверить существующие теоретические модели. В этом отношении большой интерес представляют проведенные недавно Ломаном-Беннани и др.<sup>[22,23]</sup> прецизионные эксперименты по асимметричной  $(e, 2e)$  реакции

на атоме гелия для больших энергий падающего электрона при весьма узких условиях кинематики реакции. Благодаря повышению точности эксперимента (до 6-7%), этим авторам удалось получить в пике отдачи значительно заниженные (примерно на 30%), по сравнению с ранними измерениями<sup>[10]</sup>, данные, и выявить симметрию ТДС по отношению к вектору переданного импульса  $Q$ . Наряду с этим было показано, что при энергиях 4 и 8 кэВ ТДОСО и ТДС становятся независимыми от энергии падающего электрона, и их экспериментальные значения совпадают между собой. Более того, экспериментальные значения этих величин хорошо описываются<sup>[22]</sup> расчетами в ПЭП. Это означает, что ПЭП можно применять для расчетов ( $e, 2e$ ) реакций при высоких энергиях, где эффекты высших порядков пренебрежимо малы. При этом считается, что имеющиеся расхождения между теорией и экспериментом в эти условия обусловлены скорее неадекватностью представления волновых функций атома-мишени. В этой связи отметим, что описание прецизионных данных, полученных Ломаном-Беннани и др.<sup>[22]</sup>, возможно с использованием достаточно точных волновых функций атома-мишени в начальном и конечном состояниях, учитывающих более широкий спектр корреляций, нежели функции, используемые для описания полных сечений ионизации. Такие точные функции необходимы и для описания процессов ионизации атома гелия в случаях, отличных от условий применимости ПЭП, в частности, для проведения исследования по прямым и резонансным ( $e, 2e$ ) реакциям на атоме гелия при малых энергиях.

В данной работе обсуждается вопрос о чувствительности ТДОСО и ТДС асимметричной ( $e, 2e$ ) реакции к различным моделям структуры атома-мишени. Проведены расчеты ТДОСО и ТДС для всех рассмотренных в эксперименте<sup>[22]</sup> наборов кинематических характеристик с использованием различных моделей структуры атома гелия. Дан комплексный анализ всех имеющихся теоретических и экспериментальных данных по асимметричной ( $e, 2e$ ) реакции на гелии в области высоких энергий падающих электронов и малых ( $Q \leq 1a.e.$ ) значений переданного импульса.

В наших расчетах ТДС и ТДОСО для выбитого электрона использовались решения уравнения Шредингера в кулоновском, статическом и статическом с учетом обмена\* потенциалах. В качестве функции начального состояния взяты четыре различных приближенных варианта<sup>[9, 27-29]</sup>, в том числе функция Хиллерааса<sup>[29]</sup>, где учитываются корреляции, зависящие от взаимного

\* В этом случае мы использовали программу из работы<sup>[24]</sup>

расположения электронов. Поляризацонное взаимодействие эжектируемого электрона с остаточным ионом, которое может оказаться заметным при низких энергиях эжекции, при этом не учитывалось.

Работа построена следующим образом. Во втором разделе изложен формализм, используемый для описания ионизации атома быстрыми электронами в ПБП, приводятся выражения для ТДОС и ТДС. В третьем разделе описывается процедура вычислений, проводится также сравнение наших результатов с данными из работы [18] и их обсуждение.

В работе везде используются атомные единицы.

## 2. Сечения и обобщенные силы осциллятора

а. Тройное дифференциальное сечение для  $(e, 2e)$  реакции в ПБП можно представить в виде:

$$d^3\sigma/dE d\Omega_a d\Omega_b = k_a/k_0 |T_{fi}|^2 \quad (1)$$

Здесь амплитуда перехода

$$T_{fi} = -2/Q^2 \langle \Phi_{k_b}^{(-)} | \sum_{\alpha=1,2} e^{iQr_\alpha} | \Phi_0 \rangle \quad (2)$$

где величины  $k_0, k_a, k_b$  и  $Q$  определены во введении (рис.1). В последнем выражении  $\Phi_0$  и  $\Phi_{k_b}$  являются волновыми функциями атома в начальном и конечном состояниях. Эти функции должны быть ортогональными, так как, вообще говоря, они являются решениями одного и того же уравнения Шредингера:

$$\langle \Phi_{k_b}^{(-)} | \Phi_0 \rangle = 0. \quad (3)$$

Учитывая тождественность электронов мишени, представим волновую функцию атома в конечном состоянии в виде:

$$\Phi_{k_b}^{(-)}(r_1, r_2) = 1/\sqrt{2} \{ \Phi_{1s}(r_1) \Psi_{k_b}^{(-)}(r_2) + (1 \leftrightarrow 2) \}. \quad (4)$$

Подставляя (4) в (2) и считая ортогональной волновую функцию электрона в основном состоянии остаточного иона к функции выбитого электрона, можно привести выражения (2) к виду

$$T_{fi} = -2\sqrt{2}/Q^2 \langle \psi_{k_b}^{(-)}(r) | e^{iQr} | \langle \Phi_{1s}(r') | \Phi_0(r, r') \rangle \rangle. \quad (5)$$

Если  $\Phi_0(r, r') = \varphi_0(r) \varphi_0(r')$ , то перекрытие функций в (5) равно

$$\langle \Phi_{1s} | \Phi_0 \rangle = \langle \Phi_{1s} | \varphi_0 \rangle \varphi_0(r).$$

Разложим функции  $e^{iQr}$  и  $\psi_{k_b}^{(-)}$  по сферическим гармоникам :

$$e^{iQr} = 4\pi \sum_{LM} i^L j_L(Qr) Y_{LM}^*(\hat{Q}) Y_{LM}(\hat{r}), \quad (6)$$

$$\psi_{k_b}^{(-)}(r) = \sum_{lm} i^l e^{-i\delta_l} U_{e1}(r) Y_{lm}^*(\hat{k}) Y_{lm}(\hat{r}), \quad (7)$$

где  $j_L$  - функция Бесселя и  $\delta_l$  - фаза рассеяния.

В качестве  $U_{e1}$  в настоящей работе используются решения радиального уравнения Шредингера следующего вида:

$$(d^2/dr^2 + k^2 - 1(1+1)/r^2 - V(r)) U_{e1} - \int_0^\infty dr' W(r, r') U_{e1}(r') = 0, \quad (8)$$

где  $V(r)$  и  $W(r, r')$  - локальный и нелокальный потенциалы взаимодействия выбитого электрона с ионом. При больших  $r$  функция  $U_{e1}$

удовлетворяет асимптотическому условию

$$U_{e1} \rightarrow 4\pi/kr \sin(k_B r - 1\pi/2 + \delta_1).$$

Подставляя (6) и (7) в формулу (5) с учетом условия (3), получаем

$$T_{fi} = -2 \sqrt{2}/Q^2 \sum_L t_L(k_B, Q) P_L(\cos\theta_b), \quad (9)$$

где ось  $Z$  выбрана вдоль вектора переданного импульса  $Q$ ,  $P_L(\cos\theta_b)$  - полином Лежандра,  $\theta_b$  - угол между направлением вектора  $k_B$  и осью  $Z$ .

$$t_L(k_B, Q) = (2L+1) e^{i\delta_L} I_{eL}(Q), \quad (10)$$

где

$$I_{eL}(Q) = 1/4\pi \int_0^\infty dr U_{eL}(r) j_L(Qr) \langle \Phi_{1s}(r) | \Phi_0(r, r') \rangle. \quad (11)$$

Отметим, что функция  $\psi_{k_b}^{(-)}$  в выражении (5), а следовательно, и  $U_{eL}$  в (11), должны быть выбраны так, чтобы выполнялось условие ортогональности (3).

б. Двойная дифференциальная ОСО (ДДОСО) связана с двойным дифференциальным сечением ионизации следующим соотношением:

$$f^{(2)}(Q, E) = K_O/2K_a E \sigma^{(2)}, \quad (12)$$

где  $\sigma^{(2)} = d^2\sigma/d\Omega dE$  - двойное дифференциальное сечение. В пределе  $Q \rightarrow 0$  ДДОСО в (12) стремится к оптической (дипольной) силе осциллятора  $f_0$  [25, 26]:

$$f_0(E) = \lim_{Q \rightarrow 0} f^{(2)}(Q, E) = f^{(2)}(E).$$

Аналогично соотношению (12) можно определить тройную дифференциальную обобщенную силу осциллятора (ТДОСО) :

$$f^{(3)}(Q, E_B, \theta_B) = K / 2K_a E^2 Q^2 \sigma^{(3)}(\theta_a, E_B, \theta_B), \quad (13)$$

где  $\sigma^{(3)}(\theta_a, E, \theta_B) = d^3\sigma/dE d\Omega_a d\Omega_B$  - тройное дифференциальное сечение ионизации,  $E = E_0 - E_a = E_B + I$  - потери энергии пролетающим электроном,  $I$  - потенциал ионизации атома гелия. В первом борновском приближении величина  $f^{(3)}(Q, E_B, \theta_B)$  не зависит от энергии падающего электрона  $E_0$  для фиксированных значений  $Q, E_B$  и  $\theta_B$ . Кроме того, в пределе малых переданных импульсов ( $Q \rightarrow 0$ ) ТДОСО как в квазиупругом ( $\theta_B = 0$ ) пике, так и в пике отдачи ( $\theta_B = \Pi$ ), стремится к одному и тому же пределу, пропорциональному оптической силе осциллятора  $f_0^{[20]}$ , т.е:

$$\lim_{Q \rightarrow 0} f^{(3)}(Q, E_B, 0) = \lim_{Q \rightarrow 0} f^{(3)}(Q, E_B, \Pi) = 3/4\pi f_0(E). \quad (14).$$

### 3. Процедура вычисления и результаты

В работе вычислены ТДОСО в квазиупругом пике и пике отдачи, а также ТДС с использованием различных приближений для волновых функций начального и конечного состояний  $\varphi_0$  и  $\Psi_{K_B}$ . Радиальные функции  $U_{\epsilon 1}$  для эжектируемого электрона получены путем численного интегрирования дифференциального уравнения в случае статического потенциала, и интегродифференциального уравнения, когда движение электрона рассматривается в нелокальном потенциале с учетом обмена. Наряду с этим использована и кулоновская функция. В конечном состоянии взята невозмущенная функция основного состояния остаточного иона гелия. Для этих функций введем обозначения  $S, SE, C$  и  $U$  соответственно. Расчеты проведены с 4 различными начальными волновыми функциями : простой вариационной функцией<sup>[27]</sup>, одноконфигурационной двойной зета - функцией<sup>[9]</sup>, одноконфигурационной рутан-хартри-фоковской функцией Клементи и Ретти<sup>[28]</sup> и шестипараметрической функцией Хиллерааса<sup>[29]</sup>. Обозначим эти функции  $SV, DZ, CR$  и  $6H$  соответственно.

Комбинации упомянутых волновых функций начального и конечного состояний атома мишени приводят к различным моделям для описания рассматриваемой нами асимметричной ( $e, 2e$ ) реакции. В дальнейшем, следуя Твиду и Ланглоусу<sup>[18]</sup>, введем для этих моделей компактные обозначения. В частности, когда в качестве основного состояния атома берется функция  $6H$ , для остаточного иона функция  $U$  и для выбитого электрона  $SE$ , мы получаем модель  $6H|U|SE$ . Таким же

образом, комбинируя  $CR, U$  и  $S$  функции, получим  $CR|U|S$  модель; у нас таких комбинаций 12.

Волновые функции атома в конечном состоянии ортогонализированы к функции основного состояния атома гелия по методу Шмидта.

В расчетах в зависимости от величины энергии эжектируемого электрона и переданного импульса учитывались от 6 до 12 парциальных волн. Точность расчетов контролировалась поэтапно разными способами. Численные значения ТДОСО в модели  $SV|U|C$  проверялись на совпадение с результатами расчета по аналитическим выражениям<sup>[30]</sup>. При этом было достигнуто совпадение 4-5 значащих цифр, что достаточно для описания данных эксперимента. В случае  $DZ|U|S$  модели проведено также сравнение с данными расчетов Твида и Ланглоиса<sup>[18]</sup>.

Основные результаты работы приведены в таблице и на рисунках 2-7. Зависимость ТДОСО от переданного импульса при малых значениях энергии эжекции сравнивается с соответствующими данными предыдущих авторов<sup>[18,22,32]</sup> (см. табл.). Значения ТДОСО в модели  $DZ|U|S$  из работы<sup>[18]</sup> и в нашей  $DZ|U|S$  отличаются весьма незначительно. Приведенная в таблице комбинация  $V1|U|SEP$  описывает эксперимент<sup>[22]</sup> лучше моделей, использованных в работах<sup>[18,22]</sup>. В последней модели в качестве  $V1$  и  $SEP$  использованы: многоконфигурационная вариационная функция<sup>[18]</sup>, в которой корреляция электронов учитывалась путем включения  $s^2, p^2, d^2$  и  $f^2$  термов, и решение уравнения Шредингера с потенциалом, содержащим статическую, обменную и поляризационную компоненты. В таблице также приведены данные из работы Джакобса<sup>[32]</sup>. Сравнимые здесь модели дают похожие зависимости ТДОСО от переданного импульса. Видно, что значения ТДОСО в моделях  $6H|U|S$  и  $V1|U|SEP$  близки, особенно это относится к квазиупругому пику. При энергии эжекции 19,4 эВ и переданном импульсе 0,8 а.е. данные в моделях  $6H|U|S$  и  $V1|U|SEP$  слегка отличаются в пике отдачи.

Зависимость величины максимумов ТДОСО от переданного импульса в обоих ее пиках, а также их отношения, полученные в рассматриваемых нами моделях, изображены на рис. 2 и 3 вместе с соответствующими экспериментальными данными<sup>[22]</sup> в интервале переданного импульса  $0,1 < Q < 0,9$ . Модели  $CR, DZ, 6H|U|S$  лучше описывают экспериментальные данные<sup>[22]</sup> при энергии эжекции 20 эВ (рис. 2а, S и 3а, S), а при 4,3 эВ лучшее согласие достигается в случае использования моделей  $CR, DZ, 6H|U|SE$  (рис. 2б, SE и 3б, SE).

Комбинации  $CR, DZ|U|C$  удовлетворительно описывают экспериментальные данные (рис. 2б, C и 3б, C). При энергии эжекции 4,3 эВ зависимость отношения R ТДОСО от переданного импульса Q весьма чувствительна к различным моделям структуры атома-мишени (рис. 3б).



Таблица. Тройные дифференциальные обобщенные силы осциллятора, в непрерывном спектре атома гелия

$E_D$ (эВ)	2,7		5,4		10		19,4	
Q (a. e.)	0,2	0,8	0,2	0,8	0,2	0,8	0,2	0,8
квазиупругий пик								
CR U S <sup>+</sup>	0,439	0,373	0,400	0,472	0,313	0,554	0,211	0,516
DZ U S <sup>+</sup>	0,441	0,376	0,400	0,476	0,311	0,558	0,209	0,517
6H U S <sup>+</sup>	0,456	0,386	0,415	0,487	0,321	0,572	0,212	0,530
DZ U S <sup>*</sup>	0,441	0,379	0,400	0,478	0,311	0,558	0,209	0,514
V1 U SEP <sup>*</sup>	0,451	0,396	0,418	0,542	0,323	0,540	0,217	0,537
ДЖАКОБС <sup>*</sup>	0,438	0,383	0,404	0,493	0,322	0,580	0,224	0,539
пик отдачи								
CR U S	0,322	0,149	0,258	0,116	0,178	0,079	0,112	0,051
DZ U S <sup>+</sup>	0,322	0,149	0,256	0,115	0,176	0,079	0,111	0,050
6H U S <sup>+</sup>	0,335	0,153	0,265	0,117	0,179	0,079	0,110	0,050
DZ U S <sup>*</sup>	0,322	0,150	0,256	0,115	0,165	0,078	0,111	0,051
V1 U SEP <sup>*</sup>	0,309	0,120	0,251	0,113	0,172	0,085	0,108	0,034
ДЖАКОБС <sup>*</sup>	0,296	0,111	0,240	0,087	0,172	0,059	0,115	0,038

+ настоящие расчеты, \* взяты из работы<sup>[18]</sup>.

Заметим, что расчеты в моделях 6H|U|C и SV|U|SE,S сильно отличаются от данных эксперимента. По-видимому, это указывает на необходимость более точного учета корреляции электронов одновременно в начальном и конечном состояниях.

Рассмотрим поведение ТДОСО вблизи оптического ( $Q \rightarrow 0$ ) предела. Численные значения ТДОСО во всех моделях, за исключением 6H|U|SE,S,C комбинаций, при  $Q \rightarrow 0$  весьма близки к оптическому пределу<sup>[20,32]</sup>, с правильным восстановлением отношения ( $R \rightarrow 1$ ). Однако можно увидеть и их различия в зависимости от энергий эжекции. При  $Q = 0,002$  a. e. и энергии эжекции 4,3 эВ численные значения ТДОСО в CR,DZ|U|SE моделях отличаются от экспериментальных данных<sup>[31]</sup> примерно на 0,2%, а при энергии эжекции 20 эВ на 10-12%. При том же значении переданного импульса и энергии эжекции 4,3 и 20 эВ CR,DZ|U|S модели отличаются от эксперимента примерно на 1,1 и 1,5 процентов соответственно. Следовательно, комбинации CR,DZ функций с искаженными волнами SE,S и C в общем правильно воспроизводят поведение ТДОСО вблизи оптического предела. При энергии эжекции 4,3 эВ модели

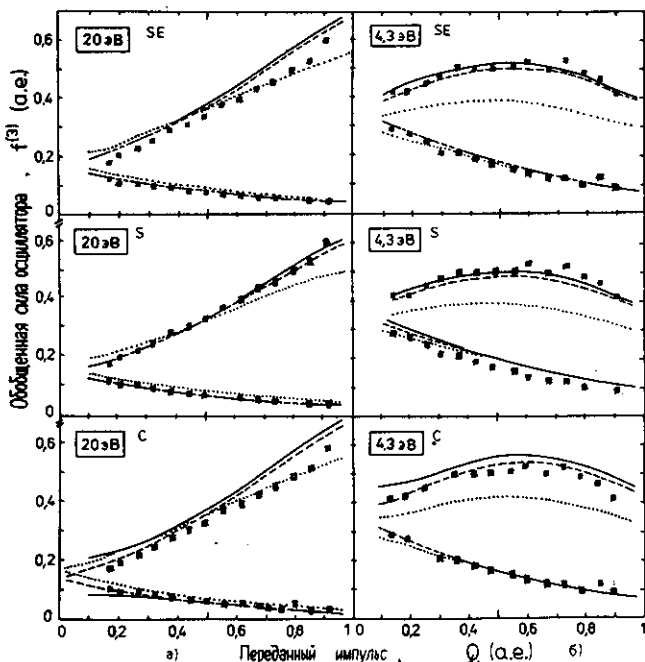


Рис.2. Зависимость ТДОСО от переданного импульса  $Q$ . Верхние ветви соответствуют максимуму квазиупруго пика ( $\theta_B = 0$ ), нижние — максимуму пика отдачи ( $\theta_B = \Pi$ ). Энергии (эВ): а)  $E_0 = 4106$ ,  $E_a = 4061$ ,  $E_b = 20$  б)  $E_0 = 4090$ ,  $E_a = 4061$ ,  $E_b = 4,3$ ; ■ — эксперимент Ломана-Беннани и др.(1987). Связь между символами и моделями: ..... — SV|U|SE,S,C; — — — — — 6N|U|SE,S,C. а — — — — — совпадающие результаты CR,DZ|U|SE,S,C моделей.

CR,DZ|U|SE,S, а при 20 эВ модели CR,DZ|U|S дают хорошее приближение оптического предела.

На рисунках 4 — 7 показаны полярные графики теоретических и экспериментальных [22] значений ТДС для некоторых углов рассеяния при энергиях эжекции 4,3 и 20 эВ.

Прежде всего заметим, что рутан-хартри-фоковская функция Клементи и Ротти и двойная зета-функция в комбинации с каждой из функций непрерывного спектра для эжектируемого электрона SE,S и C дают почти совпадающие между собой значения в каждом рассмотренном нами варианте реакции. Как уже отмечалось, простая вариационная функция SV с любой из функций SE,S и C, в целом, приводит к оценкам, значительно отличающимся от эксперимента.

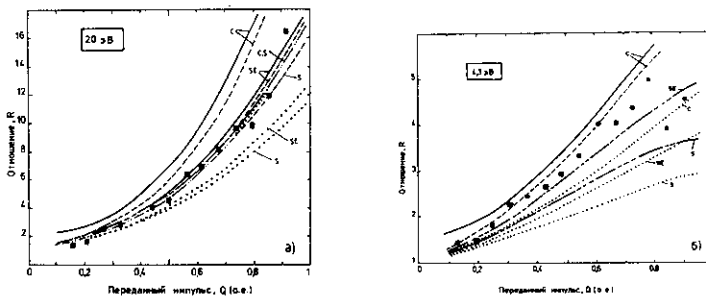


Рис.3. Отношение  $R$  интенсивностей ТДОС в максимумах квазиупругого пика ( $\theta_p=0$ ) и пика отдачи ( $\theta_p=\pi$ ) в зависимости от переданного импульса  $Q$ . Энергии эжекции: а) 20 эВ, б) 4,3 эВ. Модели и символы такие же, как на рис.2. Здесь совпадающие результаты CR, DZ, 6H|U|SE, S, C моделей обозначены — — — — —, а SV, CR, DZ|U|SE, S, C моделей - - - - -.

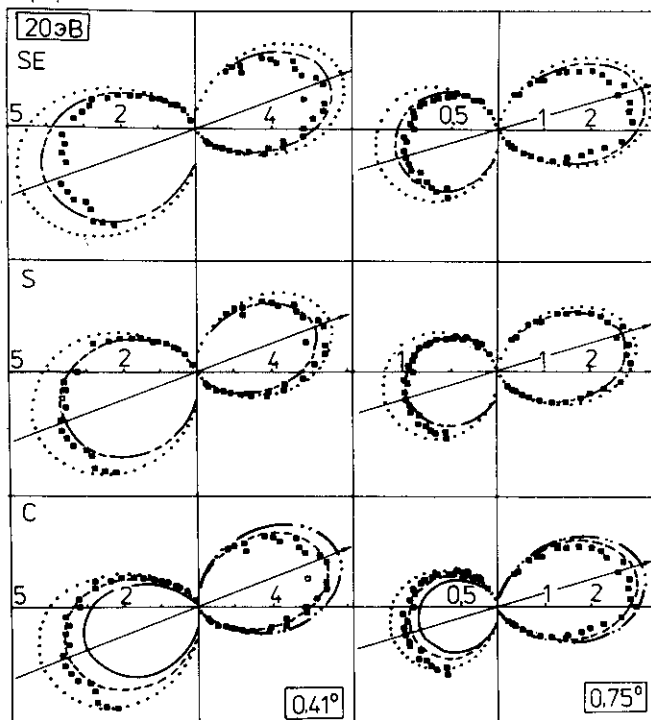


Рис.4. ТДС (в а.е.) как функция угла эжекции при  $E_a=8000$  эВ и  $E_B=20$  эВ. Углы рассеяния  $\theta_a=0,41$  и  $0,75^\circ$ . Стрелки указывают направление  $Q$ . Символы и модели такие же, как на рис. 2 и 3.

Рассмотрим случай реакции при энергии эжекции 20 эВ (рис.4 и 5). Видно, что при малых углах рассеяния ( до  $1,48^\circ$  включительно) теоретические значения ТДС в моделях CR,DZ,6H|U|S проходят через экспериментальные точки (рис.4,S и 5,S, $1,48^\circ$ ), а CR,DZ|U|C комбинации описывают экспериментальные данные с небольшими отклонениями (рис.4,C и 5). Комбинации CR,DZ,6H|U|SE приводят к несколько заниженным оценкам в обоих пиках. (рис.4,SE и 5,SE, $1,48^\circ$ ). Следовательно, при энергии эжекции 20 эВ и малых углах рассеяния ( $\theta_a \leq 1,48^\circ$ ) волновая функция выбитого электрона в статическом потенциале в сочетании с функциями CR, DZ и 6H для основного состояния атома гелия весьма хорошо описывает процесс ионизации атома гелия ударом быстрых электронов.

При угле рассеяния  $2^\circ$  модели CR,DZ,6H|U|SE,с дают значения, достаточно хорошо описывающие экспериментальные данные в квази-упругом пике, в то же время модели CR,DZ,6H|U|S приводят к результатам, отличающимся от эксперимента в обоих пиках (рис.5, $2^\circ$ ). Значит, при больших углах рассеяния ( $\theta_a = 2^\circ$ ) на значения ТДОС и ТДС заметно влияют волновые функций атома -мишени ( рис. 5.  $2^\circ$ ). По-видимому, это особенно важно при описании

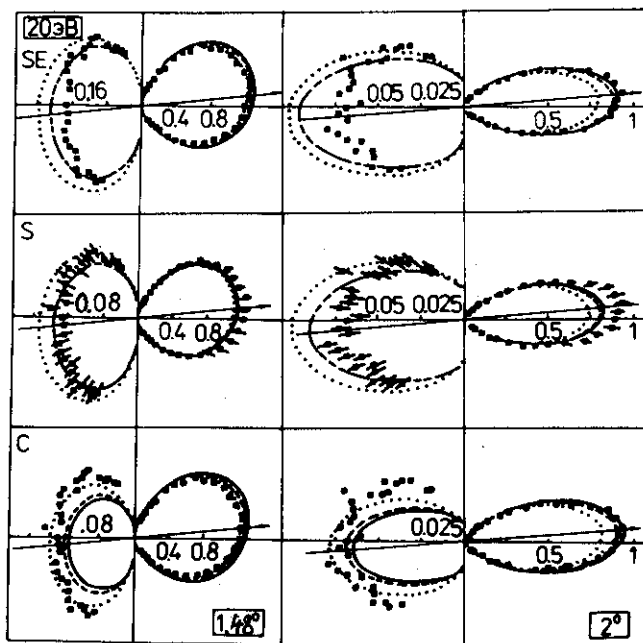


Рис.5. То же, что и на рис.4. Углы рассеяния  $\theta_a = 1,48$  и  $2^\circ$ .

конечного состояния. Можно полагать, что для малых значений переданного импульса в ТДОС и ТДС доминируют дипольные переходы, которые оказываются менее чувствительными к выбору волновых функций атома-мишени. С увеличением переданного импульса  $Q$ , становятся существеннее эффекты корреляций, взаимодействия в конечном состоянии и эффекты кратного столкновения.

Переходя к случаю малой энергии эжекции (4,3 эВ), можно увидеть заметное отличие ТДС от случая, когда энергия выбитого электрона составляет 20 эВ (рис. 6 и 7). В пределах экспериментальных ошибок модели  $CR, DZ, 6N|U|SE$  при углах рассеяния  $0,75^\circ, 1,51^\circ$ ,  $CR, DZ, 6N|U|S$  при  $1,51^\circ, 2^\circ$ , а  $CR, DZ, 6N|U|C$  при угле  $0,75^\circ$  неплохо описывают экспериментальные данные в обоих пиках ТДС. При малых углах рассеяния ( $\theta_a = 0,41^\circ$ ) и небольших энергиях эжекции все используемые нами модели в пике отдачи дают заниженные по сравнению с экспериментальными данными значения (рис. 6,  $SE, S, C, 0,41^\circ$ ). При угле рассеяния  $2^\circ$  значения ТДС, особенно в пике отдачи, оказываются чувствительными к выбору волновой функции конечного состояния мишени (рис. 7,  $SE, S, C, 2^\circ$ ).

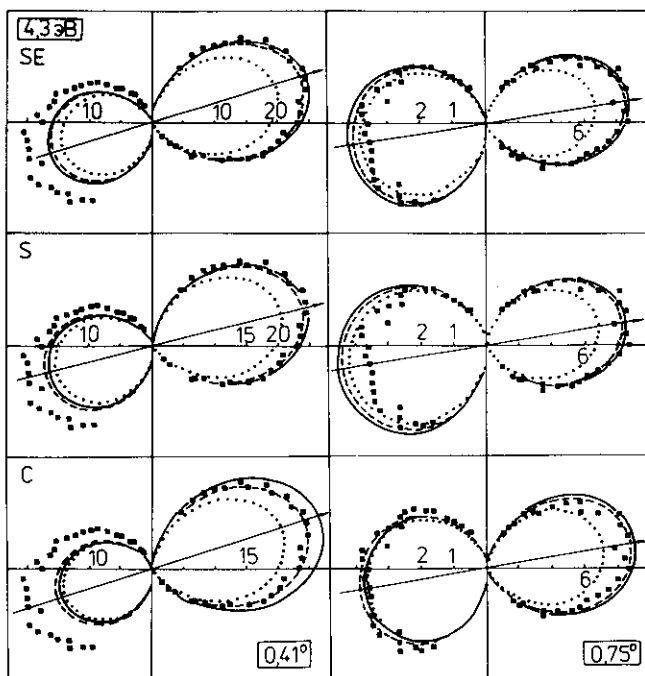


Рис. 6. То же, что и на рис. 4. При  $E_B = 4,3$  эВ.

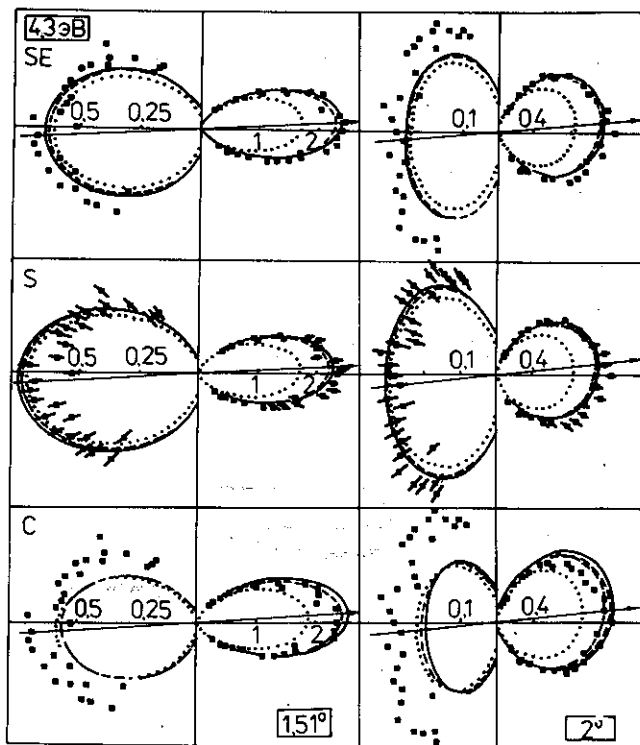


Рис. 7. То же, что и на рис. 6. Углы рассеяния  $\theta_a = 1, 51, 2^\circ$

Расчеты ТДОСО и отношения  $R$  в моделях  $CR, DZ, 6H|U|S$  лучше описывают экспериментальные данные [22], чем в модели  $V1|U|SEP$  при энергии эжекции 20 эВ, а при 4,3 эВ модель  $V1|U|SEP$  дает более близкие к экспериментальным данным значения, чем модели  $CR, DZ, 6H|U|SE$ . Полярные графики ТДС, полученные в моделях  $CR, DZ, 6H|U|S$  при энергии 20 эВ, также описывают экспериментальные данные лучше, нежели расчеты в модели  $V1|U|SEP$ . Это значит, что с увеличением энергии эжекции электрона уменьшается роль обменной и поляризационной компонент потенциала взаимодействия электрона с ионом гелия. С другой стороны, учет поляризационной добавки в ион-электронном взаимодействии может оказаться важным при малых энергиях эжекции.

Затем, что при энергии эжекции 4,3 эВ значения ТДС в модели  $6H|U|SE$  оказываются несколько ближе к экспериментальным данным, чем в  $V1|U|SEP$  модели, особенно это относится к малым углам

рассеяния. На наш взгляд, это скорее всего связано с различием учета корреляции электронов в  $6N$  и  $V1$  функциях основного состояния атома гелия.

#### Заключение

Наши расчеты подтверждают вывод предыдущих авторов<sup>[22]</sup> о применимости ПБП для описания  $He(e,2e)He^+$  реакции при энергии падающего электрона  $E_0 \geq 4\text{кэВ}$  для малых и средних значений переданного импульса.

В интервале переданного импульса  $0,1 < Q < 0,9$  модели  $6N|U|SE,S$  хорошо описывают процесс ионизации атома гелия быстрыми электронами. При больших энергиях эжекции асимметричную  $He(e,2e)He^+$  реакцию с хорошей точностью могут описать модели  $6N|U|S$  и  $CR,DZ|U|S$ .

Для описания реакции при энергиях эжекции ( $E \approx 4,3$  эВ), по-видимому, необходимо улучшить функции начального и конечного состояний, что требует более точного описания межэлектронных корреляций в атоме-мишени, а также учета поляризационного взаимодействия эжектируемого электрона с остаточным ионом.

Для больших углов рассеяния ( $\theta = 2^0$ ) значения ГДС и ТДОС при разных энергиях эжекции чувствительны к выбору волновых функций конечного состояния атома гелия (рис.5,  $2^0$  и  $7,2^0$ ), что подчеркивает важность проблемы описания структуры непрерывного спектра гелия в реакциях  $(e, 2e)$ .

Авторы благодарят проф. В.В.Балашова, а также С.И.Страхову и А.Н.Грум-Гржимайло за постоянный интерес и стимулирующие обсуждения. Один из авторов (О.Л.) признателен Т.Эрдэнэдэлгэру и А.Рийжээ за техническую помощь.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Joachain C.J Few - Body Systems, Suppl.2, (1987), 294
2. McCarthy I.E., Weigold E. : Rep.Prog.in Phys.51, (1988), 299
3. Балашов В.В., et al. : Phys. Lett. 39A, (1972), 103
4. Weigold E. et al. : Phys. Rev. Lett. 35, (1975), 209
5. Ehrhardt H., et al. : Phys. Lett. A110, (1985), 92
6. Lohmam-Bennani A., et al. : Phys.Rev A30, (1984), 758
7. Ehrhardt H., et al. : Phys.Rev.Lett.22, (1969), 89
8. Ehrhardt H., et al. : Phys. Rev. Lett. 48, (1982), 1807
9. Jung K., et al. : J.Phys B 18, (1985), 2955
10. Lahmam-Bennani A., Wellenstein H.F., Dal Cappello C., Duguet A. : J.Phys. B17, (1984), 3159
11. Muller-Fielder R., Schlemmer P., Jung K., Ehrhardt H. : Z.Phys. A320, (1985), 89

12. Lahmam-Bennani A., et al. : J.Phys. B16,(1983),121
13. Ehrhardt H., Fisher M., Jung K.: Z. Phys. A304, (1982), 119
14. Byron F.W., Joachain C.J., Piraux B.: J.Phys. B19,(1986),1201
15. Balashov V.V., et al. J. Phys. B12, (1979), L27.
16. Franz A.,Klar H.: Z. Phys.D1,(1986),33
17. Klar H., Franz A., Tenhagen H. : Z.Phys.D1,(1986),373
18. Tweed R.J., Langlois J. : J.Phys. B20,(1987),5213
19. Tweed R.J., Langlois J. : J.Phys. B20,(1987),L259
20. Lahmam-Bennani A., Cherid M., Duguet A.  
J. Phys. B20,(1987),2531
21. Lahmam-Bennani A., et al. : J.Phys. B16.(1983),2219
22. Duguet Alain et al.: J.Phys. B20,(1987),6145
23. Cherid M., Duguet A., Lahmam-Bennani A.,  
J. Phys.B20,(1987),L187
24. Долинов В.К., Коренман Г.Я., Москаленко И.В., Попов В.П.  
Труды международного симпозиума по проблемам взаимодействия  
мюонов и пионов с веществом. Дубна, ОИЯИ, 1987, с.413.  
Д14-87-799, с.413.
25. Ionokuti M.: Rev. Mod. Phys. 43,(1971),297
26. Lassetre E. N.et al.: J.Chem..Phys. 50,(1969),1829
27. Балашов В.В, Долинов В.К. Квантовая механика (1982)  
Москва, издательство МГУ, с. 181.
28. Clementi E., and Roetti C.: At. Data Nucl.  
Data tables 14,(1974),177
29. Stewart A.L., Webb T.G,: Proc. Phys. Soc. 82,(1963),532
30. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика,(1974)  
Москва,Наука,с.713
31. Samson J.A. R.: Phys. Rep. 28,(1976),303
32. Jacobs V.L. Phys. Rev. A10,(1974),499

Рукопись поступила в издательский отдел  
30 мая 1989 года.