

БОРНОВСКИЙ РЯД В ТЕОРИИ ИОНИЗАЦИИ АТОМА ЭЛЕКТРОННЫМ УДАРОМ

В. Л. Шаблов

Институт атомной энергетики, Обнинск, Россия

П. С. Виницкий, Ю. В. Попов

Научно-исследовательский институт ядерной физики
Московского государственного университета им. М. В. Ломоносова, Москва

О. Чулуунбаатар

Объединенный институт ядерных исследований, Дубна

К. А. Кузаков

Физический факультет Московского государственного университета
им. М. В. Ломоносова, Москва

ВВЕДЕНИЕ	607
ОПРЕДЕЛЕНИЕ ВОЛНОВЫХ ФУНКЦИЙ И АМПЛИТУД ПЕРЕХОДОВ В МНОГЧАСТИЧНЫХ СИСТЕМАХ С КУЛОНОВСКИМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ	611
Общая теория волновых операторов	612
Стационарная теория кулоновского рассеяния	613
Амплитуды переходов	617
Метод искаженных волн	619
Заключение к разд. 1	621
ПРИМЕНЕНИЕ ОБЩЕЙ ТЕОРИИ К ЗАДАЧЕ ИОНИЗАЦИИ АТОМА ВОДОРОДА БЫСТРЫМ ЭЛЕКТРОНОМ	621
Определения	622
Регуляризация сингулярных матричных элементов	625
Первые «борновские» приближения в методе искаженных волн	627
Второе плосковолновое борновское приближение для амплитуды квазиупругой $(e, 2e)$ -реакции на атоме водорода	631
Расчет дифференциальных сечений. Обсуждения	636
Заключение к разд. 2	645

ПРИЛОЖЕНИЕ	646
СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ	648

БОРНОВСКИЙ РЯД В ТЕОРИИ ИОНИЗАЦИИ АТОМА ЭЛЕКТРОННЫМ УДАРОМ

В. Л. Шаблов

Институт атомной энергетики, Обнинск, Россия

П. С. Виноцкий, Ю. В. Попов

Научно-исследовательский институт ядерной физики
Московского государственного университета им. М. В. Ломоносова, Москва

О. Чулуунбаатар

Объединенный институт ядерных исследований, Дубна

К. А. Кузаков

Физический факультет Московского государственного университета
им. М. В. Ломоносова, Москва

Дано обобщение теории рассеяния нескольких квантовых частиц на случай их кулоновского взаимодействия. Поскольку в этом случае амплитуда рассеяния, являющаяся решением уравнения резольвентного типа, имеет сингулярность при выходе комплексного параметра z на поверхность энергии, приведено определение физической амплитуды перехода. Сформулирован рецепт регуляризации (устранения расходимостей) интегралов, описывающих члены ряда теории возмущений при различных возмущающих потенциалах. В качестве примера общая теория применена к расчетам дифференциальных сечений квазиупругой реакции ионизации атома водорода быстрым электроном.

A generalization of few-body quantum scattering theory is given for the case of Coulomb interaction. Since in this specific case the scattering amplitude, which is a solution of the resolvent-type equation, possesses a singularity when the complex parameter z tends to the energy shell, a definition of the physical amplitude is provided. A recipe for regularizing integrals (eliminating divergencies), which describe the terms of a perturbation theory series for different perturbing potentials, is formulated. As an example, the general theory is applied to the calculations of differential cross sections for a quasielastic electron-impact ionization reaction on atomic hydrogen.

PACS: 34.80.Dg; 03.65.Nk; 34.10.+x

ВВЕДЕНИЕ

Как известно, для определения волновых функций и амплитуд переходов в многочастичных системах с короткодействующими парными потенциалами можно использовать различные интегральные уравнения, которым удовлетворяют волновые функции либо T -матрица [1–4]. Поскольку полное решение этих уравнений является весьма сложной задачей, часто используются

приближенные подходы, наиболее распространенным из которых является разложение нескольких волновых функций и амплитуд в борновские ряды (борновские серии). При этом существенно следующее обстоятельство: если начальный канал реакции отвечает столкновению двух фрагментов, то члены борновских серий для амплитуд переходов имеют определенные значения вблизи (на) поверхности энергии. В случае же систем частиц с кулоновским взаимодействием ситуация является гораздо более сложной: борновские серии, построенные по тому же рецепту, что и в случае короткодействующих потенциалов, оказываются расходящимися при выходе параметра z — комплексной энергии системы — на поверхность энергии [5, 6]. Как следствие, на поверхности энергии расходятся и амплитуды переходов (т. е. никакой компенсации сингулярностей в членах различных порядков не происходит).

Причина этого явления хорошо известна: стандартный формализм многоканальной теории рассеяния, основанный на интегральных уравнениях Липпмана–Швингера (ЛШ) либо интегральных уравнениях резольвентного типа (Фаддеева, Вейнберга–ван Винтера и др.), непосредственно неприменим к системам заряженных частиц. Это связано с тем, что в данных уравнениях не выделены так называемые кулоновские сингулярности (исключением являются уравнения Веселовой [1, 7], определяющие трехчастичную амплитуду при энергиях ниже порога развала, в которых явно выделены двухчастичные кулоновские сингулярности). Существование таких сингулярностей предсказывается стандартной теорией кулоновского рассеяния [3, 6, 8, 9] и, на самом деле, следует из общей теории инфракрасных расходимостей в КЭД [10, 11]. Однако выделение кулоновских сингулярностей, отвечающих развалу системы на три и более фрагментов, в уравнениях резольвентного типа осуществить до последнего времени не удалось. Попытка выделить трехчастичную кулоновскую сингулярность в уравнениях Фаддеева, предпринятая в [12, 13], привела к однородному уравнению для коэффициента перед этой сингулярностью. Единственное, что удалось сделать, — установить связь между фаддеевскими компонентами амплитуды развала.

Чтобы избежать вышеупомянутых проблем, для описания динамики систем заряженных частиц были сформулированы системы дифференциальных уравнений для компонент волновой функции в координатном представлении (уравнения Меркурьева), а для вычисления амплитуд рассеяния разработаны приближения, основанные либо на методе искаженных волн в парных подсистемах (например, метод эффективных зарядов Петеркопа [14]), либо на приближенных выражениях для кулоновской волновой функции трехчастичной системы в целом (метод Редмонда–Меркурьева [1, 15], подход Бенкса [16] и др.). Поскольку координатные асимптотики многочастичной кулоновской волновой функции имеют достаточно сложный вид, особенно в так называемых переходных областях [1, 17], уравнения Меркурьева не получили широкого распространения при изучении динамики конкретных квантовых систем.

Что же касается вышеупомянутых приближенных методов, то их основным недостатком является проблема вычисления последующих приближений, поскольку за ней опять стоит вопрос о свойствах решений интегральных уравнений резольвентного типа.

История развития теории многочастичного кулоновского рассеяния насчитывает несколько десятилетий, значительное количество ученых и целые школы принимали участие в ее разработке. Из наиболее известных российских (советских) школ следует упомянуть: санкт-петербургскую (ленинградскую) (Фаддеев Л. Д., Меркурьев С. П., Веселова А. М., Куперин Ю. А., Квицинский А. А., Яковлев С. Л. и др.), ташкентскую (Мухамеджанов А. М., Латыпов Д. М., Кадыров А. С. и др.), рижскую (Петеркоп Р. К., Гаилитис М. К. и др.), киевскую (Харченко В. Ф., Шадчин С. А. и др.). Из зарубежных ученых следует перечислить имена Dollard J., Muhlerin D., Zinnes I. I., Chandler C., Gibson A. G., Prugovečki E., Zorbas J., Alt E. O., Kok L. P., van Haeringen H., Rudje M. R. H., Seaton M. J. и мн. др. Огромное влияние на развитие идей оказали основополагающие работы В. А. Фока и Дж. Швингера. В небольшом обзоре невозможно даже кратко представить все работы, и ниже будут приведены лишь необходимые по контексту ссылки. В изложении же материала мы будем следовать в основном работам авторов обзора.

В предлагаемой работе в рамках последовательной квантовой теории кулоновского рассеяния рассматривается вопрос о построении борновских рядов для амплитуд процессов многократной ионизации. Для чего это нужно? Дело в том, что ряд эффективных и физически прозрачных методов исследования квантовой структуры мишени и механизмов рассеяния нескольких заряженных частиц основан на доминировании первого приближения некоторого ряда теории возмущений. Например, метод электронной импульсной спектроскопии (ЭИС). Теория метода ЭИС была изложена в работах [18–20], а экспериментально он был реализован примерно 40 лет назад [21–24], и суть этого метода заключается в следующем. На мишень падает монохроматичный пучок электронов с достаточно большой энергией E_0 . С помощью схемы совпадений из огромного числа событий, вызванных электронами пучка, выделяются такие, в которых падающий электрон, пролетая мимо одного из электронов мишени на очень малом (в атомных масштабах) расстоянии, посредством кулоновского взаимодействия «мгновенным ударом» выбивает этот электрон из мишени, передавая ему существенную часть своей кинетической энергии. При этом измеряется энергетическое и угловое распределение обоих конечных электронов. Такой процесс часто называют квазиупругой ($e, 2e$) реакцией.

Если взять простейший случай компланарной геометрии (когда векторы импульсов начального и обоих конечных электронов лежат в одной плоскости), то схема совпадений регистрирует конечные электроны с энергиями E_s и E_e , вылетевшие под углами θ_s и θ_e к направлению первичного пучка

(при $\theta_s = \theta_e$ и $E_s = E_e$ кинематика симметричная). Тем самым определяются импульсы конечных электронов \mathbf{p}_s и \mathbf{p}_e . Имеется в виду именно кинематика квазиупругого выбивания, близкая к кинематике свободного рассеяния, когда угол между импульсами \mathbf{p}_s и \mathbf{p}_e равен примерно 90° , а энергии $E_s \sim E_e \sim E_0/2$, т.е. близки к их значениям для свободного рассеяния. Указанное ограничение означает, что виртуальный импульс выбиваемого электрона в мишени $q \ll p_s, p_e$ и его потенциал ионизации $|\varepsilon_i| \ll E_s, E_e$.

В методе ЭИС кинематика описываемого парного столкновения фиксируется таким образом, что влияние многоэлектронной системы, в которой находится выбиваемый электрон, сводится к двум простым, но принципиально важным факторам: выбиваемый электрон имеет определенную энергию связи ε_i и («в момент удара») импульс $-\mathbf{q}$ (обратный по направлению импульс \mathbf{q} является импульсом отдачи, который получает конечная система; такой выбор знаков — дань традиции). Эти величины определяются в эксперименте через законы сохранения для парных столкновений $E_0 + \varepsilon_i = E_s + E_e$ и $\mathbf{p}_0 - \mathbf{q} = \mathbf{p}_s + \mathbf{p}_e$ (масса ядра предполагается бесконечно большой). Измеряя E_0, E_s и E_e , мы узнаем, из какого одночастичного состояния (атомная орбиталь в атоме или молекуле) выбивается электрон. Импульсы \mathbf{p}_s и \mathbf{p}_e определяются энергиями E_s и E_e и измеряемыми телесными углами Ω_s и Ω_e . Повторим, что условия «квазисвободного» столкновения имеют вид $|\varepsilon_i| \ll E_s, E_e$ и $q \ll p_s, p_e$. Итак, величины ε_i и \mathbf{q} восстанавливаются по небольшому, но хорошо измеримому отклонению кинематики квазиупругого процесса ($e, 2e$) от кинематики рассеяния быстрого электрона на покоящемся свободном электроном. Импульс \mathbf{q} можно измерять, либо слегка варьируя углы вылета двух конечных электронов в плоскости их разлета, либо меняя ориентацию начального электронного пучка относительно этой плоскости. В результате измеряется импульсное распределение $|\varphi_i(\mathbf{q})|^2$ одночастичного состояния i с потенциалом ионизации $|\varepsilon_i|$. При этом охватывается весь физически актуальный диапазон значений q от нуля до нескольких атомных единиц.

Теория метода ЭИС базируется на плосковолновом первом борновском (импульсном) приближении. До недавнего времени реальный вклад высших членов соответствующих рядов теории возмущений серьезно не изучался, однако его оценки с точки зрения информативности метода ЭИС крайне важны. Во-первых, дифференциальное сечение квазиупругих процессов пропорционально Q^{-4} , где $\mathbf{Q} = \mathbf{p}_0 - \mathbf{p}_s$ — переданный системе импульс, большой для квазиупругих реакций. Чем больше энергия падающего электрона, тем существенно меньше дифференциальное сечение и труднее его экспериментальное измерение. Поэтому речь может идти о компромиссных энергиях, при которых вклад высших борновских членов может быть не асимптотически мал. Во-вторых, для оценки применимости приближения первого порядка необходимо провести расчет по крайней мере членов второго порядка, а высшие борновские члены описываются формально расходящимися интегралами, про-

цедуру регуляризации которых необходимо построить, определенным образом выделяя и отбрасывая расходящиеся слагаемые. Такая процедура была предложена в работе Попова [5], близкие результаты получены также Зорбасом [6]. Фактически в качестве малых параметров выступают значения кулоновских параметров Зоммерфельда (кулоновские числа) каналов рассеяния. В-третьих, на этом фоне требуется разработать удобную численную схему расчета высших слагаемых борновского ряда.

Таким образом, оценка вклада высших борновских членов в амплитуды и дифференциальные сечения многократных ионизационных процессов представляется чрезвычайно актуальной задачей, поскольку без такой оценки ценность метода, основанного на доминировании первого члена ряда теории возмущений, становится сомнительной. Следует отметить, что последовательного исследования области применения теории ЭИС до сих пор не проводилось. Поэтому в работе рассматриваются простые конкретные примеры применения общего формализма, в частности, квазиупругая реакция ионизации атома водорода.

Далее там, где не оговорено особо, при записи формул используются атомные единицы $e = m_e = \hbar = 1$.

1. ОПРЕДЕЛЕНИЕ ВОЛНОВЫХ ФУНКЦИЙ И АМПЛИТУД ПЕРЕХОДОВ В МНОГОЧАСТИЧНЫХ СИСТЕМАХ С КУЛОНОВСКИМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ

Используются обозначения, традиционные для теории рассеяния и принятия, например, в [3,25]. В частности, H обозначает гамильтониан многочастичной квантовой системы (с уже отделенным движением центра масс), его резольвента, или полная функция Грина системы, обозначается как $G(z) = (z - H)^{-1}$ и удовлетворяет уравнению ЛШ (второму резольвентному тождеству)

$$G(z) = G_\alpha(z) + G_\alpha(z) V^\alpha G(z),$$

где $G_\alpha(z) = (z - H_\alpha)^{-1}$ — функция Грина для канала реакции α ; H_α — соответствующий каналный гамильтониан и $V^\alpha = H - H_\alpha$ — сумма парных потенциалов взаимодействия между частицами, входящих в состав различных фрагментов, которые сталкиваются в канале α .

Набор относительных импульсов $\mathbf{p}_{\beta\gamma}$, задающих движение n_α фрагментов, сталкивающихся в канале α , будем обозначать \mathbf{p}_α , а набор пространственных переменных, сопряженных \mathbf{p}_α , обозначаем $\boldsymbol{\rho}_\alpha$. При этом относительная координата частиц i и j записывается как \mathbf{r}_{ij} , а их относительный импульс как \mathbf{k}_{ij} . Наконец, вектор $|\phi_\alpha\rangle$ обозначает произведение волновых функций связанных состояний фрагментов, задающих канал α , с суммарной энергией связи $-\kappa_\alpha^2$.

В используемых обозначениях ненормированная in- или out-асимптота канала α имеет вид $|\phi_\alpha, \mathbf{p}_\alpha\rangle$, так что $H_\alpha|\phi_\alpha, \mathbf{p}_\alpha\rangle = E_\alpha|\phi_\alpha, \mathbf{p}_\alpha\rangle$, где E_α — соответствующая энергия канала.

1.1. Общая теория волновых операторов. Как известно, в случае многочастичных систем с короткодействующими парными потенциалами взаимодействия асимптотическое условие (см., например, [1,4,25]), обеспечивающее существование волновых операторов

$$\Omega_{\pm\alpha} = s - \lim_{t \rightarrow \mp\infty} e^{iHt} e^{-iH_\alpha t} |\phi_\alpha\rangle, \quad (1.1)$$

где $s - \lim$ обозначает сильный предел (предел по норме), и имеющее вид

$$\int_0^{\mp\infty} dt \|V^\alpha e^{-iH_\alpha t} |\phi_\alpha, f_\alpha\rangle\| < \infty, \quad (1.2)$$

где $|f_\alpha\rangle$ принадлежит канальному гильбертову пространству функций $\mathbb{L}^2(\mathbb{R}^{3n_\alpha-3})$, не выполняется для потенциалов, убывающих на бесконечности как $r^{-\gamma}$, $\gamma \leq 1$. В частности, для кулоновского взаимодействия. Этот факт связан с дальнодействующим характером кулоновских сил, движение в поле которых никогда не становится асимптотически свободным.

Необходимая модификация определения волновых операторов (1.1) была дана Доллардом [26,27]:

$$\Omega_{\pm\alpha} = s - \lim_{t \rightarrow \mp\infty} e^{iHt} e^{-iH_\alpha t - i\chi_\alpha^\pm(t)} |\phi_\alpha\rangle. \quad (1.3)$$

Операторная функция $\chi_\alpha^\pm(t)$ коммутирует с гамильтонианом H_α и в импульсном представлении есть оператор умножения на функцию

$$\chi_\alpha^\pm(\mathbf{p}_\alpha, t) = \text{sign}(t)(\eta_\alpha \ln |t| + A_\alpha). \quad (1.4)$$

В (1.4)

$$\eta_\alpha = \sum_{\beta,\gamma} \eta_{\beta\gamma} = \sum_{\beta,\gamma} \frac{Z_\beta Z_\gamma \mu_{\beta\gamma}}{p_{\beta\gamma}} \quad (1.5a)$$

обозначает кулоновский параметр (кулоновское число, параметр Зоммерфельда) канала α , равный сумме кулоновских параметров пар фрагментов β и γ , $\mu_{\beta\gamma}$ — приведенная масса этих фрагментов, а

$$A_\alpha = \sum_{\beta,\gamma} \eta_{\beta\gamma} \ln \frac{2p_{\beta\gamma}^2}{\mu_{\beta\gamma}} \quad (1.5b)$$

есть так называемая фаза Долларда, необходимая для согласования в случае двух заряженных частиц фазы волновой функции $\langle \mathbf{r} | \Omega_{\pm} | \mathbf{k} \rangle$, задаваемой с помощью (1.3), с фазой двухчастичной кулоновской волновой функции

$$\psi_c^+(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = e^{-\pi\eta/2} \Gamma(1 + i\eta) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} {}_1F_1(-i\eta, 1; ikr - i\mathbf{k}\mathbf{r}). \quad (1.6)$$

Другое возможное представление волновых операторов Ω_{α} получается из (1.3) заменой асимптотического оператора Долларда $e^{-iH_{\alpha}t - i\chi_{\alpha}^{\pm}(t)}$ оператором Мулерина–Цинна $\mathbb{V}_{\alpha}^{\pm} e^{-iH_{\alpha}t}$ [28–30]

$$\Omega_{\pm\alpha} = s - \lim_{t \rightarrow \mp\infty} e^{iHt} \mathbb{V}_{\alpha}^{\pm} e^{-iH_{\alpha}t} | \phi_{\alpha} \rangle. \quad (1.7)$$

Операторы $\mathbb{V}_{\alpha}^{\pm}$ в (1.7) добавляют к плоской волне относительного движения заряженных фрагментов в паре соответствующую логарифмическую фазу

$$\begin{aligned} \langle \rho_{\alpha} | \mathbb{V}_{\alpha}^{\pm} | f_{\alpha} \rangle &= \\ &= \int \frac{d\mathbf{p}_{\alpha}}{(2\pi)^{3(n_{\alpha}-1)}} \exp \left[i \langle \mathbf{p}_{\alpha}, \rho_{\alpha} \rangle \pm i \sum_{\beta\gamma} \eta_{\beta\gamma} \ln(p_{\beta\gamma} r_{\beta\gamma} \mp \mathbf{p}_{\beta\gamma} \mathbf{r}_{\beta\gamma}) \right] f_{\alpha}(\mathbf{p}_{\alpha}), \end{aligned} \quad (1.8)$$

где символ $\exp [i \langle \mathbf{p}_{\alpha}, \rho_{\alpha} \rangle]$ обозначает плоскую волну относительного движения в выбранном канале.

Отметим, что, помимо оператора Мулерина–Цинна, существуют и другие независимые от времени операторы, обозначаемые далее $\mathcal{F}_{\alpha}^{\pm}$, которые асимптотически эквивалентны оператору Долларда [28, 31]. Это означает, что

$$\lim_{t \rightarrow \mp\infty} \left\| \left(e^{-iH_{\alpha}t - i\chi_{\alpha}^{\pm}(t)} - \mathcal{F}_{\alpha}^{\pm} e^{-iH_{\alpha}t} \right) | \phi_{\alpha}, f_{\alpha} \rangle \right\| = 0, \quad (1.9)$$

а потому

$$\Omega_{\pm\alpha} = s - \lim_{t \rightarrow \mp\infty} e^{iHt} \mathcal{F}_{\alpha}^{\pm} e^{-iH_{\alpha}t} | \phi_{\alpha} \rangle. \quad (1.10)$$

1.2. Стационарная теория кулоновского рассеяния. Соотношения (1.6), (1.7) и (1.10), определяющие волновые операторы многочастичного кулоновского рассеяния в рамках нестационарной теории рассеяния, могут быть использованы для построения стационарной теории кулоновского рассеяния. При этом привлекается один из следующих методов: метод абелевых пределов [1, 26], метод Кука [26], теория рассеяния в паре гильбертовых пространств [32]. Опишем коротко эти подходы.

Метод абелевых пределов основан на следующем утверждении [1, 26]. Пусть $v(t)$ — ограниченная операторная функция при $t \in [0, \infty)$, имеющая

предел $v_+ = \lim_{t \rightarrow \infty} v(t)$. Тогда

$$v_+ = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \varepsilon \int_0^{\infty} dt e^{-\varepsilon t} v(t). \quad (1.11)$$

Применяя данное утверждение к оператору $e^{iHt} e^{-iH_\alpha t - i\chi_\alpha^\pm(t)} |\phi_\alpha\rangle$, получаем

$$\begin{aligned} \Omega_{\pm\alpha} |\mathbf{p}_\alpha\rangle &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \varepsilon \int_0^{\infty} dt e^{-\varepsilon t \mp i(Ht - E_\alpha t - A_\alpha)} t^{\pm i\eta_\alpha} |\phi_\alpha, \mathbf{p}_\alpha\rangle = \\ &= e^{-\pi\eta_\alpha/2} \Gamma(1 \pm i\eta_\alpha) e^{\pm iA_\alpha} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \pm i\varepsilon G^{1 \pm i\eta_\alpha}(E_\alpha \pm i\varepsilon) |\phi_\alpha, \mathbf{p}_\alpha\rangle. \end{aligned} \quad (1.12)$$

Вследствие того, что в соотношении (1.12) фигурирует комплексная степень функции Грина, оно неудобно для практических вычислений. Однако комплексная степень может быть перенесена на параметр ε перед функцией Грина в формуле (1.12), так что волновой оператор будет выражаться непосредственно через первую степень полной функции Грина [1, 6]. Для вывода соответствующего выражения [33] определим операторы $\Omega_{\pm\alpha}^{(0)}(\varepsilon) |\mathbf{p}_\alpha\rangle$ с помощью соотношения

$$\Omega_{\pm\alpha}^{(0)}(\varepsilon) |\mathbf{p}_\alpha\rangle = \pm i\varepsilon G(E_\alpha \pm i\varepsilon) |\phi_\alpha, \mathbf{p}_\alpha\rangle. \quad (1.13)$$

Выражение (1.13) можно переписать в интегральном виде

$$\Omega_{\pm\alpha}^{(0)}(\varepsilon) |\mathbf{p}_\alpha\rangle = \varepsilon \int_0^{\infty} dt e^{-\varepsilon t} e^{\mp iHt} e^{\pm iH_\alpha t} |\phi_\alpha, \mathbf{p}_\alpha\rangle, \quad (1.14a)$$

так что

$$\begin{aligned} \varepsilon^{\mp i\eta_\alpha} \Omega_{\pm\alpha}^{(0)}(\varepsilon) |\mathbf{p}_\alpha\rangle &= \int_0^{\infty} dt e^{-(t \pm i\eta_\alpha \ln t \pm iA_\alpha)} \times \\ &\times \left[e^{\mp iHt/\varepsilon} e^{\pm iH_\alpha t/\varepsilon} e^{-i\chi_\alpha^\pm(\mathbf{p}_\alpha, \mp t/\varepsilon)} |\phi_\alpha\rangle \right] |\mathbf{p}_\alpha\rangle. \end{aligned} \quad (1.14б)$$

Переходя в (1.14б) к пределу $\varepsilon \rightarrow 0$ и учитывая, что выражение в квадратных скобках сходится при этом к $\Omega_{\pm\alpha}$, получим

$$\begin{aligned} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \varepsilon^{\mp i\eta_\alpha} \Omega_{\pm\alpha}^{(0)}(\varepsilon) |\mathbf{p}_\alpha\rangle &= \Omega_{\pm\alpha} |\mathbf{p}_\alpha\rangle \int_0^{\infty} dt e^{-(t \pm i\eta_\alpha \ln t \pm iA_\alpha)} = \\ &= \Gamma(1 \mp i\eta_\alpha) e^{\mp iA_\alpha} \Omega_{\pm\alpha} |\mathbf{p}_\alpha\rangle. \end{aligned} \quad (1.15)$$

В итоге получаем цепочку равенств

$$\begin{aligned}
 \Omega_{\pm\alpha}|\mathbf{p}_\alpha\rangle &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\varepsilon^{\mp i\eta_\alpha}}{\Gamma(1 \mp i\eta_\alpha)} e^{\pm iA_\alpha} \Omega_{\pm\alpha}^{(0)}(\varepsilon)|\mathbf{p}_\alpha\rangle = \\
 &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\varepsilon^{\mp i\eta_\alpha}}{\Gamma(1 \mp i\eta_\alpha)} e^{\pm iA_\alpha} (\pm i\varepsilon) G(E_\alpha \pm i\varepsilon)|\phi_\alpha, \mathbf{p}_\alpha\rangle = \\
 &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{e^{-\pi\eta_\alpha/2 \pm iA_\alpha}}{\Gamma(1 \mp i\eta_\alpha)} (\pm i\varepsilon)^{1 \mp i\eta_\alpha} G(E_\alpha \pm i\varepsilon)|\phi_\alpha, \mathbf{p}_\alpha\rangle. \quad (1.16)
 \end{aligned}$$

Для существования предела в (1.16) необходимо потребовать, чтобы структура главных (полюсных, или кластерных) особенностей полной функции Грина описывалась выражением [1, 8, 9, 28]

$$G(z) = \sum_{\beta} u_{\beta}(z) \langle \phi_{\beta} | (z - H_{\beta})^{-1 \pm i\eta_{\beta}} + g(z), \quad (1.17)$$

причем выбор знака перед $i\eta_{\beta}$ определяется знаком $\text{Im } z$ (минус при $\text{Im } z > 0$ и наоборот). Индексы β в (1.17) суть индексы каналов, причем для канала развала системы на исходные N частиц полагаем $\beta = 0$ ($\kappa_0^2 = 0$) и $\phi_0(\mathbf{k}_0) \equiv 1$. Операторы $u_{\beta}(z)$ носят название in-компонент полной функции Грина, а про функцию $g(z)$ известно, что она не содержит сингулярности $(\pm i\varepsilon)^{-1 \pm i\eta_{\beta}}$ на поверхности энергии (но, возможно, содержит другие особенности). Сравнение (1.16) и (1.17) показывает, что имеет место соотношение

$$\Omega_{\pm\alpha}|\mathbf{p}_\alpha\rangle = \frac{e^{-\pi\eta_\alpha/2 \pm iA_\alpha}}{\Gamma(1 \mp i\eta_\alpha)} u_{\alpha}(E_{\alpha} \pm i0)|\mathbf{p}_\alpha\rangle. \quad (1.18)$$

Результат (1.18) согласуется с определением волновых операторов в виде (1.12). Докажем это утверждение на примере оператора $\Omega_{+\alpha}$, для чего рассмотрим тождество

$$G^{1+i\eta}(E+i\varepsilon) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{(-2\pi i)} \frac{1}{(x-H+i\varepsilon_1)} \frac{1}{(E-x+i\varepsilon_2)^{1+i\eta}}, \quad (1.19)$$

причем $\varepsilon_{1,2} > 0$ и $\varepsilon = \varepsilon_1 + \varepsilon_2$. Из (1.16), (1.17) и (1.19) следует

$$\begin{aligned}
 \Omega_{+\alpha}|\mathbf{p}_\alpha\rangle &= e^{-\pi\eta_\alpha/2 + iA_\alpha} \Gamma(1 + i\eta_\alpha) \times \\
 &\times \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} i\varepsilon \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{(-2\pi i)} \frac{G(x+i\varepsilon_1)}{(E_\alpha - x + i\varepsilon_2)^{1+i\eta_\alpha}} |\phi_\alpha, \mathbf{p}_\alpha\rangle = \\
 &= e^{-\pi\eta_\alpha/2 + iA_\alpha} \Gamma(1 + i\eta_\alpha) I_{\alpha} u_{\alpha}(E_{\alpha} + i0)|\mathbf{p}_\alpha\rangle. \quad (1.20)
 \end{aligned}$$

В (1.20)

$$I_\alpha = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} i\varepsilon \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{(-2\pi i)} \frac{1}{(x - E_\alpha + i\varepsilon_1)^{1-i\eta_\alpha}} \frac{1}{(E_\alpha - x + i\varepsilon_2)^{1+i\eta_\alpha}} =$$

$$= \frac{1}{\Gamma(1+i\eta_\alpha)\Gamma(1-i\eta_\alpha)}, \quad (1.21)$$

откуда легко видно, что формула (1.20) непосредственно превращается в (1.18).

При формулировании теории рассеяния в паре гильбертовых пространств операторы \mathcal{F}_α^\pm предполагаются ограниченными. Тогда для волновых операторов выполняется соотношение [31]

$$\Omega_{\pm\alpha}|\mathbf{p}_\alpha\rangle = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \pm i\varepsilon G(E_\alpha \pm i\varepsilon) \mathcal{F}_\alpha^\pm |\phi_\alpha, \mathbf{p}_\alpha\rangle. \quad (1.22)$$

С помощью второго резольвентного тождества и соотношения

$$\pm i\varepsilon G_\alpha(E_\alpha \pm i\varepsilon) \mathcal{F}_\alpha^\pm |\phi_\alpha, \mathbf{p}_\alpha\rangle = \mathcal{F}_\alpha^\pm |\phi_\alpha, \mathbf{p}_\alpha\rangle + G_\alpha(E_\alpha \pm i\varepsilon) [H_\alpha, \mathcal{F}_\alpha^\pm] |\phi_\alpha, \mathbf{p}_\alpha\rangle \quad (1.23)$$

выражение (1.22) можно переписать в виде модифицированного представления ЛШ

$$\Omega_{\pm\alpha}|\mathbf{p}_\alpha\rangle = \mathcal{F}_\alpha^\pm |\phi_\alpha, \mathbf{p}_\alpha\rangle + G(E_\alpha \pm i0)(V^\alpha \mathcal{F}_\alpha^\pm + [H_\alpha, \mathcal{F}_\alpha^\pm]) |\phi_\alpha, \mathbf{p}_\alpha\rangle. \quad (1.24)$$

Операторы переходов в виде коммутаторов $[H_\alpha, \mathcal{F}_\alpha^\pm]$ были впервые введены в теорию кулоновского рассеяния в работах [34,35]. В частности, если канал α отвечает столкновению двух заряженных фрагментов, операторы $\mathcal{F}_\alpha^\pm |\phi_\alpha\rangle$ могут быть выбраны в виде $\omega_{\pm\alpha}$, и эти новые волновые операторы отвечают чисто кулоновскому рассеянию на потенциале $v_c^\alpha = Z_{1\alpha}Z_{2\alpha}/\rho_\alpha$. В этом случае справедлива запись

$$\Omega_{\pm\alpha}|\mathbf{p}_\alpha\rangle = \omega_{\pm\alpha}|\mathbf{p}_\alpha\rangle + G(E_\alpha \pm i0)(V^\alpha - v_c^\alpha)\omega_{\pm\alpha}|\mathbf{p}_\alpha\rangle, \quad (1.25)$$

что соответствует представлению волновых операторов многоканального рассеяния в методе искаженных волн [3,28,36].

В методе Кука вопрос о существовании предела при $t \rightarrow \infty$ функции, заданной и непрерывно дифференцируемой при $t \geq 0$, сводится к вопросу об интегрируемости производной такой функции, поскольку

$$\lim_{t \rightarrow \infty} f(t) = f(0) + \lim_{t \rightarrow \infty} \int_0^t d\tau f'(\tau).$$

Применительно к волновым операторам интегрируемость на полуоткрытом интервале $[0, \infty)$ нормы соответствующей операторной функции и есть асимптотическое условие их существования [3,25,26,31], причем в случае короткодействующих парных потенциалов это условие имеет вид (1.2). В работе [31] метод Кука был применен к представлению волновых операторов кулоновского рассеяния в формулировке Мулерины–Цинна и было показано, что волновые операторы $\Omega_{\pm\alpha}|\mathbf{p}_\alpha\rangle$ удовлетворяют представлению ЛШ вида (1.24) с заменой операторов \mathcal{F}_α^\pm на асимптотические операторы \mathbb{V}_α^\pm .

1.3. Амплитуды переходов. Материал, представленный выше, позволяет описать структуру сингулярностей матричных элементов оператора перехода. Последний может быть записан в двух видах: post

$$T_{\beta\alpha}(z) = \langle \phi_\beta | V^\beta + V^\beta G(z) V^\alpha | \phi_\alpha \rangle, \quad (1.26a)$$

и prior

$$\tilde{T}_{\beta\alpha}(z) = \langle \phi_\beta | V^\alpha + V^\beta G(z) V^\alpha | \phi_\alpha \rangle, \quad (1.26b)$$

разница между матричными элементами которых $\langle \mathbf{p}_\beta | T_{\beta\alpha}(z) - \tilde{T}_{\beta\alpha}(z) | \mathbf{p}_\alpha \rangle$ на поверхности энергии $z = E_\alpha + i0 = E_\beta + i0$ равна нулю, что легко проверяется (см., например, [25]). Оператор перехода (далее для удобства рассматриваем post-форму) по определению связан следующим образом с полной функцией Грина задачи:

$$G(z) = (z - H_\beta)^{-1} | \phi_\beta \rangle T_{\beta\alpha}(z) \langle \phi_\alpha | (z - H_\alpha)^{-1} + \tilde{G}(z),$$

где функция $\tilde{G}(z)$ не содержит одновременно кластерных сингулярностей каналов α и β (подробнее см. [3]). Матричные элементы (1.26) в случае короткодействующих парных потенциалов задают на поверхности энергии конечную амплитуду переходов между каналами α и β [3,25]. В случае же частиц с кулоновским взаимодействием, когда полюсные особенности функции Грина имеют вид (1.17), рассматриваемые матричные элементы содержат сингулярности вида $(z - E_\alpha)^{i\eta_\alpha}$ и $(z - E_\beta)^{i\eta_\beta}$ (см. также [37]). Это означает, что при выходе параметра z на поверхность энергии в обоих каналах ($E_\alpha = E_\beta = E$) конечным является выражение типа

$$t_{\beta\alpha}(\mathbf{p}_\beta, \mathbf{p}_\alpha; E + i0) = \frac{e^{-(\pi/2)(\eta_\beta + \eta_\alpha)} e^{i(A_\beta + A_\alpha)}}{\Gamma(1 - i\eta_\alpha) \Gamma(1 - i\eta_\beta)} \times \\ \times \lim_{z \rightarrow E + i0} e^{-i(\eta_\beta + \eta_\alpha) \ln(z - E)} \langle \mathbf{p}_\beta | T_{\beta\alpha}(z) | \mathbf{p}_\alpha \rangle. \quad (1.27)$$

Его можно с помощью формул (1.13) и (1.26) представить следующим образом:

$$t_{\beta\alpha}(\mathbf{p}_\beta, \mathbf{p}_\alpha; E + i0) = \frac{e^{-(\pi/2)(\eta_\beta + \eta_\alpha)} e^{i(A_\beta + A_\alpha)}}{\Gamma(1 - i\eta_\alpha)\Gamma(1 - i\eta_\beta)} \times \\ \times \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} (i\varepsilon)^{i(\eta_\alpha + \eta_\beta)} \begin{cases} \langle \mathbf{p}_\beta, \phi_\beta | V^\beta \Omega_{+\alpha}^{(0)}(\varepsilon) | \mathbf{p}_\alpha \rangle, \\ \langle \mathbf{p}_\beta | \Omega_{-\beta}^{(0)+}(\varepsilon) V^\alpha | \mathbf{p}_\alpha, \phi_\alpha \rangle. \end{cases} \quad (1.28)$$

Действительно, выражение (1.13) с помощью второго резольвентного тождества приводится к виду

$$\Omega_{\pm\alpha}^{(0)}(\varepsilon) | \mathbf{p}_\alpha \rangle = [I + G(E_\alpha \pm i\varepsilon) V^\alpha] | \phi_\alpha, \mathbf{p}_\alpha \rangle,$$

так что

$$\langle \mathbf{p}_\beta, \phi_\beta | V^\beta \Omega_{+\alpha}^{(0)}(\varepsilon) | \mathbf{p}_\alpha \rangle = \langle \mathbf{p}_\beta | T_{\beta\alpha}(E + i\varepsilon) | \mathbf{p}_\alpha \rangle. \quad (1.29a)$$

Аналогично

$$\langle \mathbf{p}_\beta | \Omega_{-\beta}^{(0)+}(\varepsilon) V^\alpha | \mathbf{p}_\alpha, \phi_\alpha \rangle = \langle \mathbf{p}_\beta | \tilde{T}_{\beta\alpha}(E + i\varepsilon) | \mathbf{p}_\alpha \rangle. \quad (1.29б)$$

Если, например, начальный канал реакции содержит не более одного заряженного фрагмента ($\eta_\alpha = 0$), амплитуду такого процесса с учетом (1.16) можно записать в более привычном виде через полную волновую функцию $\Psi_\beta^-(\mathbf{p}_\beta)$ задачи конечного канала:

$$t(\mathbf{p}_\beta, \mathbf{p}_\alpha; E + i0) = \langle \Psi_\beta^-(\mathbf{p}_\beta) | V^\alpha | \phi_\alpha, \mathbf{p}_\alpha \rangle. \quad (1.30)$$

Выразим теперь элементы S -матрицы, которая по определению есть

$$S_{\beta\alpha}(\mathbf{p}_\beta, \mathbf{p}_\alpha) = \langle \mathbf{p}_\beta | \Omega_{-\beta}^+ \Omega_{+\alpha} | \mathbf{p}_\alpha \rangle, \quad (1.31)$$

через величины $t_{\beta\alpha}$

$$\langle \mathbf{p}_\beta | S_{\beta\alpha} | \mathbf{p}_\alpha \rangle = -2\pi i \delta(E_\alpha - E_\beta) t_{\beta\alpha}(\mathbf{p}_\beta, \mathbf{p}_\alpha; E_\alpha + i0). \quad (1.32)$$

Для вывода формулы (1.32) поступим следующим образом. В матричных элементах S -матрицы (1.31) каждый из волновых операторов запишем в виде временного предела (1.3) и произведение пределов заменим пределом произведения. В результате получим

$$\langle \mathbf{p}_\beta | S_{\beta\alpha} | \mathbf{p}_\alpha \rangle = e^{i(A_\alpha + A_\beta)} \lim_{t \rightarrow +\infty} t^{i(\eta_\alpha + \eta_\beta)} e^{i(E_\alpha + E_\beta)t} \langle \phi_\beta, \mathbf{p}_\beta | e^{-2iHt} | \mathbf{p}_\alpha, \phi_\alpha \rangle. \quad (1.33)$$

Далее, матричный элемент в правой части (1.33) запишем в интегральном представлении через функцию Грина

$$\langle \phi_\beta, \mathbf{p}_\beta | e^{-2iHt} | \mathbf{p}_\alpha, \phi_\alpha \rangle = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE}{(-2\pi i)} e^{-2iEt} \langle \phi_\beta, \mathbf{p}_\beta | G(E + i\varepsilon) | \mathbf{p}_\alpha, \phi_\alpha \rangle, \quad (1.34)$$

к которой дважды применим второе резольвентное тождество. В этом случае из (1.34) следует

$$\langle \mathbf{p}_\beta | S_{\beta\alpha} | \mathbf{p}_\alpha \rangle = e^{i(A_\alpha + A_\beta)} (I_1 + I_2), \quad (1.35)$$

где

$$I_1 = \lim_{t \rightarrow +\infty} t^{i(\eta_\alpha + \eta_\beta)} e^{i(E_\alpha - E_\beta)t} \langle \phi_\beta, \mathbf{p}_\beta | \mathbf{p}_\alpha, \phi_\alpha \rangle, \quad (1.36)$$

$$I_2 = \lim_{t \rightarrow +\infty} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE}{(-2\pi i)} \frac{t^{i\eta_\beta} e^{-i(E - E_\beta)t}}{(E - E_\beta + i\varepsilon)^{1 - i\eta_\beta}} \frac{t^{i\eta_\alpha} e^{-i(E - E_\alpha)t}}{(E - E_\alpha + i\varepsilon)^{1 - i\eta_\alpha}} \times \\ \times [(E - E_\beta + i\varepsilon)^{-i\eta_\beta} \langle \mathbf{p}_\beta | T_{\beta\alpha}(E + i\varepsilon) | \mathbf{p}_\alpha \rangle (E - E_\alpha + i\varepsilon)^{-i\eta_\alpha}]. \quad (1.37)$$

Применяя к I_2 предельные соотношения для асимптотики преобразования Фурье обобщенных функций [1, 38]

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} \frac{t^{i\eta} e^{-ixt}}{(x \pm i0)^{1 - i\eta}} = \begin{cases} -2\pi i \delta(x) \frac{e^{-\pi\eta/2}}{\Gamma(1 - i\eta)} & \text{для } +i0, \\ 0 & \text{для } -i0, \end{cases} \quad (1.38)$$

находим

$$I_2 = -2\pi i e^{-i(A_\alpha + A_\beta)} \delta(E_\alpha - E_\beta) t_{\beta\alpha}(\mathbf{p}_\beta, \mathbf{p}_\alpha; E_\alpha + i0). \quad (1.39)$$

Слагаемое I_1 в случае короткодействующих парных потенциалов равно $\delta_{\alpha\beta}$. В рассматриваемой ситуации, когда хотя бы один кулоновский параметр η_α или η_β не равен нулю, это слагаемое равно нулю и при $\alpha = \beta$ вследствие леммы Римана–Лебега (в слабом смысле) [1, 3, 26, 39, 40]. Из последнего факта и (1.35) следует результат (1.32).

1.4. Метод искаженных волн. По аналогии с (1.13) введем в рассмотрение оператор

$$\tilde{\Omega}_{\pm\alpha}(\varepsilon) | \mathbf{p}_\alpha \rangle = \pm i\varepsilon G(E_\alpha \pm i\varepsilon) \omega_{\pm\alpha} | \mathbf{p}_\alpha \rangle. \quad (1.40)$$

В (1.40) волновые операторы $\omega_{\pm\alpha}$ порождают искаженные волны, являющиеся собственными функциями гамильтониана $H^\alpha = H_\alpha + U^\alpha$ (ср. (1.25)). Их можно записать с помощью определения (1.3):

$$\omega_{\pm\alpha} = s - \lim_{t \rightarrow \mp\infty} e^{iH^\alpha t} e^{-iH_\alpha t - i\chi_\alpha^{(0)\pm}(t)} | \phi_\alpha \rangle. \quad (1.41)$$

Операторы $\chi_\alpha^{(0)\pm}(t)$ определяются искажающими потенциалами U^α , причем

$$\chi_\alpha^{(0)\pm}(t)|\mathbf{p}_\alpha\rangle = \text{sign}(t)(\eta_\alpha^{(0)} \ln t + A_\alpha^{(0)})|\phi_\alpha\rangle.$$

Имеет место следующее соотношение:

$$\Omega_{\pm\alpha}|\mathbf{p}_\alpha\rangle = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\varepsilon \mp i(\eta_\alpha - \eta_\alpha^{(0)})}{\Gamma(1 \mp i(\eta_\alpha - \eta_\alpha^{(0)}))} e^{\pm i(A_\alpha - A_\alpha^{(0)})} \tilde{\Omega}_{\pm\alpha}(\varepsilon)|\mathbf{p}_\alpha\rangle, \quad (1.42)$$

которое является обобщением (1.16). Докажем это соотношение для случая оператора $\Omega_{+\alpha}$. Поскольку

$$\tilde{\Omega}_{+\alpha}(\varepsilon)|\mathbf{p}_\alpha\rangle = \varepsilon \int_0^\infty dt e^{-iHt} e^{iH^\alpha t} \omega_{+\alpha}|\mathbf{p}_\alpha\rangle$$

и

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} \left(e^{iH^\alpha t} \omega_{+\alpha} - e^{iH_\alpha t + i\chi_\alpha^{(0)+}(-t)}|\phi_\alpha\rangle \right) \rightarrow 0$$

в смысле сильного предела, то

$$\tilde{\Omega}_{+\alpha}(\varepsilon)|\mathbf{p}_\alpha\rangle = \varepsilon \int_0^\infty dt e^{-iHt} e^{iH_\alpha t + i\chi_\alpha^{(0)+}(\mathbf{p}_\alpha, -t)}|\phi_\alpha, \mathbf{p}_\alpha\rangle + R(\varepsilon)|\mathbf{p}_\alpha\rangle. \quad (1.43)$$

Действуя так же, как и при выводе формул (1.14)–(1.16), получим

$$\begin{aligned} \varepsilon^{-i(\eta_\alpha - \eta_\alpha^{(0)})} \tilde{\Omega}_{+\alpha}(\varepsilon)|\mathbf{p}_\alpha\rangle &= \int_0^\infty dt e^{-t - i(\eta_\alpha - \eta_\alpha^{(0)}) \ln t - i(A_\alpha - A_\alpha^{(0)})} \times \\ &\times \left[e^{-iHt/\varepsilon} e^{iH_\alpha t/\varepsilon + i\eta_\alpha \ln t/\varepsilon + iA_\alpha}|\phi_\alpha\rangle \right] |\mathbf{p}_\alpha\rangle + \varepsilon^{-i(\eta_\alpha - \eta_\alpha^{(0)})} R(\varepsilon)|\mathbf{p}_\alpha\rangle. \end{aligned} \quad (1.44)$$

Переходя в (1.44) к пределу $\varepsilon \rightarrow 0$ и учитывая, что выражение в квадратных скобках сходится к $\Omega_{+\alpha}$, приходим к соотношению

$$\begin{aligned} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \varepsilon^{-i(\eta_\alpha - \eta_\alpha^{(0)})} \tilde{\Omega}_{+\alpha}(\varepsilon)|\mathbf{p}_\alpha\rangle &= \\ &= \Gamma(1 - i(\eta_\alpha - \eta_\alpha^{(0)})) e^{-i(A_\alpha - A_\alpha^{(0)})} \Omega_{+\alpha}|\mathbf{p}_\alpha\rangle + \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \varepsilon^{-i(\eta_\alpha - \eta_\alpha^{(0)})} R(\varepsilon)|\mathbf{p}_\alpha\rangle. \end{aligned} \quad (1.45)$$

Оператор $R(0)|\mathbf{p}_\alpha\rangle$ можно записать в виде абелева предела

$$R(0)|\mathbf{p}_\alpha\rangle = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \varepsilon \int_0^\infty dt e^{-iHt} \left(e^{iH^\alpha t} \omega_{+\alpha} - e^{iH_\alpha t + i\chi_\alpha^{(0)+}(-t)}|\phi_\alpha\rangle \right) |\mathbf{p}_\alpha\rangle. \quad (1.46)$$

Подынтегральный оператор в (1.46) ограничен, и его предел равен нулю при $t \rightarrow \infty$. В силу общих свойств абелевых пределов $R(0)|\mathbf{p}_\alpha\rangle = 0$ и, следовательно, выражение (1.45) эквивалентно (1.42).

Результат (1.42) позволяет переписать амплитуду (1.30) в виде, аналогичном (1.28) и (1.27):

$$\begin{aligned} t_{\beta\alpha}(\mathbf{p}_\beta, \mathbf{p}_\alpha; E + i0) &= \\ &= \frac{e^{-(\pi/2)(\eta_\beta - \eta_\beta^{(0)})}}{\Gamma(1 - i(\eta_\beta - \eta_\beta^{(0)}))} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} (i\varepsilon)^{-i(\eta_\beta - \eta_\beta^{(0)})} \langle \mathbf{p}_\beta | \tilde{\Omega}_{-\beta}^+(\varepsilon) V^\alpha | \mathbf{p}_\alpha, \phi_\alpha \rangle = \\ &= \frac{e^{-(\pi/2)(\eta_\beta - \eta_\beta^{(0)})}}{\Gamma(1 - i(\eta_\beta - \eta_\beta^{(0)}))} \lim_{z \rightarrow E + i0} (z - E)^{-i(\eta_\beta - \eta_\beta^{(0)})} \times \\ &\quad \times \langle \zeta_\beta^-(\mathbf{p}_\beta) | [V^\alpha + (V^\beta - U^\beta)G(z)V^\alpha] | \phi_\alpha, \mathbf{p}_\alpha \rangle, \quad (1.47) \end{aligned}$$

где $|\zeta_\beta^-(\mathbf{p}_\beta)\rangle = \omega_{-\beta}|\mathbf{p}_\beta\rangle$. Результат (1.47) показывает, что если мы имеем волновую функцию некоторой группы заряженных частиц в конечном (начальном) канале с правильной кулоновской асимптотикой, то их (суммарный) параметр Зоммерфельда не учитывается в общем (суммарном) параметре Зоммерфельда канала при регуляризации. Уравнение типа (1.47) в случае ионизации атома водорода быстрым электроном было получено в работе [41].

1.5. Заключение к разд. 1. Подводя итог разд. 1, можно сказать, что специфическая асимптотика кулоновского взаимодействия при больших взаимных расстояниях между заряженными фрагментами порождает дополнительные сингулярности амплитуд рассеяния, являющихся решениями уравнений ЛШ, при переходе этих решений на поверхность энергии. Вне этой области с решениями уравнения ЛШ (нефизическими амплитудами) можно работать, как и в случае короткодействующих парных потенциалов.

Для получения физических наблюдаемых величин требуется по определенным правилам убрать сингулярности амплитуд переходов. Такие правила вытекают из представлений (1.27) и (1.47), и далее мы рассмотрим конкретный пример, как это делать.

2. ПРИМЕНЕНИЕ ОБЩЕЙ ТЕОРИИ К ЗАДАЧЕ ИОНИЗАЦИИ АТОМА ВОДОРОДА БЫСТРЫМ ЭЛЕКТРОНОМ

В дальнейшем будет в основном рассматриваться система трех частиц. Для ее описания используются координаты Якоби \mathbf{r}_γ — относительная координата пары γ и $\boldsymbol{\rho}_\gamma$ — радиус-вектор третьей частицы относительно центра масс этой пары. Соответствующие этим координатам сопряженные импульсы

будут обозначаться \mathbf{k}_γ и \mathbf{p}_γ . Свободный гамильтониан трехчастичной системы можно записать в виде

$$H_0 = -\frac{1}{2\mu_\gamma}\Delta_{r_\gamma} - \frac{1}{2n_\gamma}\Delta_{p_\gamma},$$

где μ_γ — приведенная масса частиц в паре γ ; n_γ — приведенная масса пары γ и третьей частицы.

В такой системе возможны 4 канала рассеяния: связанная пара и свободная третья частица (3 канала) и все три частицы свободны. Типичным примером такой системы является взаимодействие заряженной частицы (электрона, позитрона, протона и т. п.) с атомом водорода. Задача рассеяния атомных частиц, когда мы имеем только кулоновское взаимодействие между частицами, крайне важна с методической точки зрения. Во-первых, любая двухчастичная проблема здесь имеет точное решение, и мы имеем возможность в ряде случаев сравнивать приближенный результат с точным. Во-вторых, согласно общим подходам, ядерную задачу рассеяния заряженных частиц можно решать, если решена атомная задача [42]. В-третьих, в большинстве задач атомной физики (например, рассеяния электрона на атоме или даже рассеяния протона на очень маленькие углы) возможно еще одно упрощение, связанное с большой (бесконечно большой) массой ядра. Обычно импульс ядра K в процессе таких столкновений невелик, и его энергия $K^2/2M \rightarrow 0$. В последнем случае можно рассматривать задачу рассеяния двух частиц в поле третьей (неподвижной) частицы, где имеется выделенная система координат [1, 43, 44]. При этом вместо координат $(\mathbf{r}_\gamma, \mathbf{p}_\gamma)$ удобно ввести координаты $(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$, характеризующие положение легких частиц относительно неподвижной тяжелой частицы, находящейся в центре системы координат.

2.1. Определения. Здесь мы в основном следуем подходу, изложенному в работе [5]. Приведем основные определения. Волновую функцию атома водорода в начальном состоянии обозначим как φ_0 , его энергия связи равна ε_0 . Гамильтониан системы $(e + H)$ имеет вид

$$H = h_{01} + h_{02} + W = H_0 + W, \quad (2.1)$$

где $W = v_{1N} + v_{2N} + v_{12}$ — полный потенциал системы, а v_{iN} и v_{12} — потенциалы взаимодействия электронов с неподвижным ядром (протоном) и друг с другом соответственно. Полная энергия системы $E = \varepsilon_0 + p_0^2/2 = p_1^2/2 + p_2^2/2$, \mathbf{p}_0 — импульс падающего электрона, \mathbf{p}_s и \mathbf{p}_e — импульсы рассеянного и испущенного электронов (это разделение носит условный характер, и его смысл станет ясен позже).

Применим теперь изложенные выше общие математические положения к конкретному процессу рассеяния. Ключевым здесь будет выражение физической амплитуды для реакции ионизации атома водорода из нейтрального

канала в канал с тремя свободными заряженными частицами, так называемая $(e, 2e)$ -реакция. Эта амплитуда записывается в соответствии с (1.27) в виде

$$t(\mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e, \mathbf{p}_0; E+i0) = \frac{e^{-\frac{\pi}{2}\eta+iA}}{\Gamma(1-i\eta)} \lim_{z \rightarrow E+i0} (z-E)^{-i\eta} \langle \mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e | T(z) | \mathbf{p}_0, \varphi_0 \rangle. \quad (2.2)$$

В (2.2) η — полный кулоновский параметр (1.5а)

$$\eta = \eta_s + \eta_e + \eta_{se}; \quad \eta_s = -p_s^{-1}, \quad \eta_e = -p_e^{-1}, \quad \eta_{se} = |\mathbf{p}_s - \mathbf{p}_e|^{-1}, \quad (2.3)$$

а фаза Долларда A в соответствии с (1.5б) равна

$$A = \eta_s \ln(2p_s^2) + \eta_e \ln(2p_e^2) + \eta_{se} \ln|\mathbf{p}_s - \mathbf{p}_e|^2. \quad (2.4)$$

Трехкратное дифференциальное сечение $(e, 2e)$ -процесса записывается как

$$\frac{d^3\sigma}{dE_s d\Omega_s d\Omega_e} = (2\pi)^{-5} \frac{p_s p_e}{p_0} \left(\frac{1}{4} |t^{\text{dir}} + t^{\text{exch}}|^2 + \frac{3}{4} |t^{\text{dir}} - t^{\text{exch}}|^2 \right).$$

Здесь направления импульсов вылетающих электронов характеризуются телесными углами Ω_s и Ω_e . Амплитуда t^{dir} (t^{exch}) отвечает ситуации, когда рассеянный электрон имеет импульс \mathbf{p}_s (\mathbf{p}_e), т. е. в записи (2.2) для обменного процесса импульсы просто меняются местами.

Амплитуду перехода t возьмем в виде (1.30) (далее мы будем рассматривать только t^{dir} , опуская индекс):

$$t(\mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e, \mathbf{p}_0; E+i0) = \langle \Psi_f^-(\mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e) | V_i | \mathbf{p}_0, \varphi_0 \rangle. \quad (2.5)$$

В (2.5) $V_i = v_{1N} + v_{12}$ — потенциал взаимодействия налетающего электрона с атомом. Начальное состояние системы выбрано в виде $|\mathbf{p}_0, \varphi_0\rangle$ и удовлетворяет уравнению Шредингера

$$(H - V_i - E) |\mathbf{p}_0, \varphi_0\rangle = 0, \quad (2.6)$$

и гамильтониан H определен в (2.1). Атом водорода электрически нейтрален, поэтому матричный элемент регулярен на поверхности энергии начального канала, несмотря на наличие плоской волны падающего электрона. Рассеянная волна в конечном состоянии $\langle \Psi_f^-(\mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e) | = \langle \mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e | \Omega_{-f}^\dagger$ включает все взаимодействия между фрагментами конечного состояния и удовлетворяет уравнению Шредингера

$$(H - E) |\Psi_f^-(\mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e)\rangle = 0. \quad (2.7)$$

Конечная функция обладает правильной кулоновской асимптотикой, вытекающей из дальнегодействующего характера взаимодействия между конечными

продуктами реакции. Именно поэтому представление (2.5) не имеет сингулярностей на поверхности энергии, соответствует физической амплитуде и не нуждается в каких-либо дальнейших манипуляциях типа регуляризации.

Метод последовательных приближений в теории рассеяния базируется на интегральном уравнении ЛШ для оператора $T(z)$ и в случае нескольких заряженных частиц имеет ряд особенностей. Во-первых, это выбор потенциалов в начальном и конечном состояниях, которые мы рассматриваем как возмущение. Этот выбор диктуется, как правило, физическими условиями задачи рассеяния и в некоторой степени «чутьем» исследователя. Например, в нашем случае это V_i , хотя, если бы мы рассматривали задачу ионизации однократно заряженного водородоподобного иона, следовало бы выбрать схему, основанную на выражении (1.25): тем самым мы в начальном состоянии рассматривали бы кулоновскую волну падающей частицы вместо плоской, избежав тем самым регуляризации начального канала. Во-вторых, высшие борновские члены описываются расходящимися интегралами при $z \rightarrow E + i0$ вследствие дальнедействующего характера кулоновских сил. Физически расходимости означают, что плоские волны рассеянных частиц не являются их асимптотическими состояниями. На этом моменте мы остановимся более подробно.

Вне энергетической поверхности конечное трехчастичное состояние ищется как решение уравнения

$$|\Psi_f^-(\mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e; z)\rangle = |\mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e\rangle + G_0^-(z)W|\Psi_f^-(\mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e; z)\rangle, \quad (2.8)$$

или

$$(z - H)|\Psi_f^-(\mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e; z)\rangle = (z - H_0)|\mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e\rangle,$$

что следует из (1.13). Свободный оператор Грина $G_0^\pm(z)$ берется в виде

$$G_0^\pm(z) = (z - H_0)^{-1}, \quad (2.9)$$

причем знак «плюс» или «минус» определяется знаком мнимой части параметра z . Выражение (2.8) может быть представлено в эквивалентной форме

$$|\Psi_f^-(\mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e; z)\rangle = [1 + G^-(z)W]|\mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e\rangle, \quad (2.10)$$

где $G^\pm(z) = (z - H)^{-1}$ — полный оператор Грина.

Из (2.5) и (2.8) вытекает плосковолновой борновский ряд теории возмущений

$$T(\mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e; z) = \sum_{n=0}^{\infty} T_n(\mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e; z), \quad (2.11)$$

$$T_n(\mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e; z) = \langle \mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e | [W G_0^+(z)]^n V_i | \mathbf{p}_0, \varphi_0 \rangle.$$

Слагаемое с индексом $n = 0$ соответствует первому борновскому приближению (FBA)

$$T_0(\mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e) \equiv \text{FBA} = \langle \mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e | V_i | \mathbf{p}_0, \varphi_0 \rangle. \quad (2.12)$$

В формулах (2.11) и (2.12) сознательно используется буква T вместо t , поскольку теперь все члены борновского ряда при $n \geq 1$ содержат сингулярности при $z \rightarrow E + i0$. Возникает интересный вопрос: когда же произошла подмена регулярного выражения (2.5) на сингулярное (2.11)? Ответ: именно когда мы стали заменять точную трехчастичную волновую функцию в (2.8) суммой последовательных плосковолновых членов. Следует напомнить, что теория рассеяния в случае короткодействующих парных потенциалов строится на вполне физическом предположении, что все пространство можно рассматривать как сумму нескольких хорошо разделенных областей: небольших областей собственно взаимодействий частиц и обширной области их свободного движения между столкновениями, включая движение на (бесконечно) больших взаимных расстояниях (см., например, [25]). Падающий на атом волновой пакет всегда много больше атома по размерам, что и позволяет рассматривать в его пределах малую часть этого пакета как плоскую волну. В случае же кулоновских потенциалов все в точности наоборот: размеры любого волнового пакета всегда меньше области взаимодействия, и сам пакет должен входить в граничные условия стационарной задачи, что неудобно. Таким образом, сингулярности амплитуды рассеяния есть неизбежная плата за то, чтобы приспособить хорошо разработанную теорию рассеяния с короткодействующими парными потенциалами для задач рассеяния заряженных частиц. Эта ситуация чем-то напоминает перенормировки в квантовой электродинамике, хотя там сингулярности связаны с гипотезой точечности релятивистских частиц и, видимо, с неправомерностью применения представления взаимодействия для описания процессов их рассеяния. Но и там базис плоских волн не адекватен поставленной задаче.

2.2. Регуляризация сингулярных матричных элементов. Теперь покажем, как схема расчетов, основанная на выражении (2.2), может быть применена для проведения процедуры регуляризации (устранения сингулярностей) членов борновского ряда. Рассмотрим один из возможных путей выделения экспоненты $e^{i\eta \ln(z-E)}$ из ряда (2.11), которая компенсирует такую же экспоненту в (2.2). Рассмотрим слагаемое $T_1(\mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e; z)$. Справедлива запись

$$T_1(\mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e; z) = R_1(\mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e; z)T_0(\mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e) + \tilde{T}_1(\mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e; z), \quad (2.13)$$

где

$$R_1(\mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e; z) = \int \frac{d^3 k_s}{(2\pi)^3} \frac{d^3 k_e}{(2\pi)^3} \frac{\langle \mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e | W | \mathbf{k}_s, \mathbf{k}_e \rangle}{z - k_s^2/2 - k_e^2/2}, \quad (2.14)$$

$$\tilde{T}_1(\mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e; z) = \int \frac{d^3 k_s}{(2\pi)^3} \frac{d^3 k_e}{(2\pi)^3} \frac{\langle \mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e | W | \mathbf{k}_s, \mathbf{k}_e \rangle}{z - k_s^2/2 - k_e^2/2} [T_0(\mathbf{k}_s, \mathbf{k}_e) - T_0(\mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e)]. \quad (2.15)$$

Аналогично

$$\begin{aligned} T_2(\mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e; z) = \\ = R_2(\mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e; z)T_0(\mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e) + R_1(\mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e; z)\tilde{T}_1(\mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e; z) + \tilde{T}_2(\mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e; z), \end{aligned} \quad (2.16)$$

где

$$R_2(\mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e; z) = \int \frac{d^3 k_s}{(2\pi)^3} \frac{d^3 k_e}{(2\pi)^3} \frac{\langle \mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e | W | \mathbf{k}_s, \mathbf{k}_e \rangle}{z - k_s^2/2 - k_e^2/2} R_1(\mathbf{k}_s, \mathbf{k}_e; z), \quad (2.17)$$

$$\begin{aligned} \tilde{T}_2(\mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e; z) = \int \frac{d^3 k_s}{(2\pi)^3} \frac{d^3 k_e}{(2\pi)^3} \frac{\langle \mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e | W | \mathbf{k}_s, \mathbf{k}_e \rangle}{z - k_s^2/2 - k_e^2/2} R_1(\mathbf{k}_s, \mathbf{k}_e; z) \times \\ \times [T_0(\mathbf{k}_s, \mathbf{k}_e) - T_0(\mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e)] + \\ + \int \frac{d^3 k_s}{(2\pi)^3} \frac{d^3 k_e}{(2\pi)^3} \frac{\langle \mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e | W | \mathbf{k}_s, \mathbf{k}_e \rangle}{z - k_s^2/2 - k_e^2/2} [\tilde{T}_1(\mathbf{k}_s, \mathbf{k}_e) - \tilde{T}_1(\mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e)], \end{aligned} \quad (2.18)$$

и т. д. По индукции можно показать, что

$$R_{n+1}(\mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e; z) = \int \frac{d^3 k_s}{(2\pi)^3} \frac{d^3 k_e}{(2\pi)^3} \frac{\langle \mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e | W | \mathbf{k}_s, \mathbf{k}_e \rangle}{z - k_s^2/2 - k_e^2/2} R_n(\mathbf{k}_s, \mathbf{k}_e; z), \quad R_0 \equiv 1; \quad (2.19)$$

$$\begin{aligned} \tilde{T}_{n+1}(\mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e; z) = \sum_{k=0}^n \int \frac{d^3 k_s}{(2\pi)^3} \frac{d^3 k_e}{(2\pi)^3} \frac{\langle \mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e | W | \mathbf{k}_s, \mathbf{k}_e \rangle}{z - k_s^2/2 - k_e^2/2} R_k(\mathbf{k}_s, \mathbf{k}_e; z) \times \\ \times [\tilde{T}_{n-k}(\mathbf{k}_s, \mathbf{k}_e; z) - \tilde{T}_{n-k}(\mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e; z)], \quad \tilde{T}_0(\mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e; z) \equiv T_0(\mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e). \end{aligned} \quad (2.20)$$

Суммируя борновские члены, получим из (2.11)

$$T(\mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e; z) = R(\mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e; z)\tilde{T}(\mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e; z). \quad (2.21)$$

При этом функция $R(\mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e; z)$ удовлетворяет уравнению

$$R(\mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e; z) = 1 + \int \frac{d^3 k_s}{(2\pi)^3} \frac{d^3 k_e}{(2\pi)^3} \frac{\langle \mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e | W | \mathbf{k}_s, \mathbf{k}_e \rangle}{z - k_s^2/2 - k_e^2/2} R(\mathbf{k}_s, \mathbf{k}_e; z) \quad (2.22)$$

и является сингулярной на энергетической поверхности, т. е. при $z \rightarrow E + i0$.

Функция $R(\mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e; z)$ тесно связана с полной функцией Грина задачи рассеяния, а именно

$$R(\mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e; z) = \langle \mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e | G_0^{-1}(z) G(z) | \mathbf{r}_1 = 0, \mathbf{r}_2 = 0 \rangle, \quad (2.23)$$

и имеет структуру при $z \sim E$ типа [5, 45]

$$R(\mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e; z) = (z - E)^{in} r(\mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e; z) + \tilde{R}(\mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e; z), \quad (2.24)$$

причем функция $r(\mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e; z)$ регулярна на поверхности энергии, а функция $\tilde{R}(\mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e; E + i0) = 0$. Доказательство утверждения (2.24) приведено в приложении (см. также [46]).

2.3. Первые «борновские» приближения в методе искаженных волн.

Запись уравнения Липпмана–Швингера имеет много форм, и это связано с введением различных искажающих потенциалов в потенциальные группы начального и конечного состояний (см. общую теорию в п. 1.4). Остановимся на этом подробнее. Матричный элемент оператора $t(E + i0)$ в (2.2) можно записать в двух эквивалентных формах. Первое представление выражается через собственную трехчастичную функцию гамильтониана (1.33) $\Psi^-(\mathbf{p}_s, \mathbf{r}_1; \mathbf{p}_e, \mathbf{r}_2)$, характеризующую асимптотически двумя электронами в континууме с признаками сходящейся сферической волны:

$$t(\mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e; +i0) = \langle \Psi^-(\mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e) | W - V_i | \psi_i^+(\mathbf{p}_0) \rangle, \quad (2.25)$$

второе — через аналогичную функцию $\Psi_0^+(\mathbf{p}_0, \mathbf{r}_1; \mathbf{r}_2)$, описывающую асимптотически электрон 2 в основном состоянии и электрон 1 в непрерывном спектре с признаком расходящейся сферической волны:

$$t(\mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e; E + i0) = \langle \psi_f^-(\mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e) | W - V_f | \Psi_0^+(\mathbf{p}_0) \rangle. \quad (2.26)$$

Волновые функции конечного $\psi_f^\pm(\mathbf{p}_s, \mathbf{r}_1; \mathbf{p}_e, \mathbf{r}_2)$ и начального $\psi_i^\pm(\mathbf{p}_0, \mathbf{r}_1; \mathbf{r}_2)$ состояний удовлетворяют уравнениям Шредингера

$$\left(\frac{p_s^2}{2} + \frac{p_e^2}{2} - H_0 - V_f \right) | \psi_f^\pm \rangle = 0, \quad \left(\varepsilon_0 + \frac{p_0^2}{2} - H_0 - V_i \right) | \psi_i^\pm \rangle = 0. \quad (2.27)$$

Выбор конечного и начального потенциалов V_i и V_f , а также приближение для волновой трехчастичной функции $|\Psi\rangle$ определяют в обоих случаях модель для расчета амплитуды. Разнообразные модели и расчеты можно найти в работах [47–50] и др. В большинстве из них используются формулы (2.25) и (2.26), с помощью которых, как правило, получают различные приближения искаженных волн. В этом приближении прежде всего учитываются вероятные искажения плоских волн быстрых начального и конечных

электронов. Для этого удобно разбить потенциал v_{12} на внутреннюю короткодействующую v_{12}^{in} и периферийную v_{12}^{out} части либо путем введения некоторого обрезающего радиуса R , либо как это предлагается, например, в [1]. Положим $V_i = v_{12}^{\text{out}} + v_{1N} + v_{2N}$. Для упрощения описания взаимодействия налетающего электрона с атомом мы заменим $v_{1N} + v_{12}^{\text{out}} \rightarrow \tilde{v}_0$ и будем рассматривать движение начального электрона в поле с эффективным короткодействующим потенциалом \tilde{v}_0 . С учетом такой замены выражение (2.25) преобразуется к виду

$$t(\mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e; z) \approx \langle \Psi^-(\mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e) | v_{12}^{\text{in}} | \chi_0^+(\mathbf{p}_0), \varphi_0 \rangle, \quad (2.28)$$

где $\varphi_0(\mathbf{r}_2)$ — волновая функция основного состояния атома водорода и $\chi_0^+(\mathbf{p}_0, \mathbf{r}_1)$ — искаженная волна падающего электрона. Заметим, что эффективный короткодействующий потенциал \tilde{v}_0 стремится к нулю на достаточно больших расстояниях электрона от атома, и, таким образом, искаженная волна асимптотически трансформируется в плоскую волну, как и должно быть при рассеянии заряженной частицы на нейтральной системе.

Как следует из (2.28), при замене реального потенциала $v_{1N} + v_{12}^{\text{out}}$ эффективным центральным потенциалом мы пренебрегаем возможными трансформациями волновой функции атома, например, поляризацией. Более тонкие модели можно строить в рамках формулы (2.26).

Рассмотрим теперь полную волновую функцию системы $|\Psi^-(\mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e)\rangle$, являющуюся собственной функцией гамильтониана (2.7). Разобьем все потенциалы на «внутреннюю» и «периферийную» части и введем асимптотическую функцию Грина

$$G_{\text{as}}^{\pm}(z) = [z - H_0 - v_{12}^{\text{out}} - v_{1N}^{\text{out}} - v_{2N}^{\text{out}}]^{-1}.$$

Это делается для того, чтобы корректно применить фаддеевскую редукцию полной волновой функции

$$|\Psi^-\rangle = |\Psi_{1,2}^-\rangle + |\Psi_{12}^-\rangle, \quad (2.29)$$

что невозможно сделать в полной мере для чисто кулоновских потенциалов из-за некомпактности ядер получающихся интегральных уравнений [1]. Теперь же для ее компонент можно формально записать систему уравнений:

$$\begin{cases} (z - H_0 - v_{1N} - v_{2N} - v_{12}^{\text{out}}) |\Psi_{1,2}^-\rangle = (v_{1N}^{\text{in}} + v_{2N}^{\text{in}}) |\Psi_{12}^-\rangle, \\ (z - H_0 - v_{1N}^{\text{out}} - v_{2N}^{\text{out}} - v_{12}) |\Psi_{12}^-\rangle = v_{12}^{\text{in}} |\Psi_{1,2}^-\rangle. \end{cases} \quad (2.30)$$

Используя операторное уравнение $t_{12}^{\text{in}}(z) = v_{12}^{\text{in}} + v_{12}^{\text{in}} G_{\text{as}}^+(z) t_{12}^{\text{in}}$ и учитывая только одно полное парное столкновение налетающего электрона с электроном мишени, получаем из (2.28)–(2.30) для прямой амплитуды $(e, 2e)$ -реакции приближенное выражение

$$t(\mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e; z) \approx \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \langle \psi^-(\mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e) | t_{12}^{\text{in}}(z) | \chi_0^+(\mathbf{p}_0), \mathbf{p} \rangle \varphi_0(\mathbf{p}). \quad (2.31)$$

Функция $|\psi^-(\mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e)\rangle$ в (2.31) удовлетворяет волновому уравнению

$$\left(\frac{p_s^2}{2} + \frac{p_e^2}{2} - H_0 - v_{1N} - v_{2N} - v_{12}^{\text{out}}\right) |\psi^-(\mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e)\rangle = 0 \quad (2.32)$$

и превращается в произведение двух кулоновских волн, только если пренебречь периферийным взаимодействием v_{12}^{out} . В этом случае получаем так называемое внеэнергетическое импульсное приближение искаженных волн («off-shell» DWIA [24])

$$T(\mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e; z) \approx \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \langle \varphi^-(\mathbf{p}_s), \varphi^-(\mathbf{p}_e) | t_{12}^{\text{in}}(z) | \chi_0^+(\mathbf{p}_0), \mathbf{p} \rangle \varphi_0(\mathbf{p}), \quad (2.33)$$

где $|\varphi^-(\mathbf{p}_i)\rangle$ — кулоновская функция непрерывного спектра.

Обращаем снова внимание на замену в (2.33) буквы t на T . Они совпадают при $z \rightarrow E + i0$ только в рамках нулевого приближения по потенциалу v_{12}^{out} . Их полную связь следует искать в рамках общей формулы (1.47).

Из формулы (2.31) следует большинство используемых приближений. Это и полувнеэнергетическое факторизованное импульсное приближение искаженных волн (half-off-shell factorized DWIA [51]), и его разновидность — эйкональное импульсное приближение (EWIA [22,52]). Если же в (2.32) оставить только периферические части всех потенциалов v_s^{out} , получаем так называемое квазиклассическое эйкональное импульсное приближение (EWIASC [53,54]). Эта модель достаточно проста для оценок эффекта искажений, если полная энергия не асимптотически высока.

Наконец, пренебрегая в (2.32) всеми потенциалами, а также полагая $\tilde{v}_0 = 0$, получаем плосковолновое импульсное приближение (PWIA). Дифференциальное сечение при этом пропорционально квадрату модуля волновой функции водорода в импульсном приближении (эта величина также называется импульсным распределением):

$$\frac{d^3\sigma}{dE_s d\Omega_e d\Omega_s} \propto |\varphi_0(\mathbf{q})|^2, \quad \mathbf{q} = \mathbf{p}_s + \mathbf{p}_e - \mathbf{p}_0. \quad (2.34)$$

Несмотря на внешнюю простоту представления (2.31), проводить с его помощью какие-либо непосредственные вычисления весьма проблематично. Во-первых, практически невозможно рассчитать «внутреннюю» парную амплитуду t_{12}^{in} , так как в уравнение ЛШ входит функция Грина $G_{\text{as}}^+(E)$, которую невозможно как-либо разумно записать без дальнейших упрощений. Во-вторых, имеется значительная неопределенность в определении потенциала \tilde{v}_0 . В-третьих, даже если эти трудности как-то преодолены, матричный элемент (2.31) представляет собой 9-мерный интеграл.

В пп. 2.1 и 2.2 обсуждались в основном борновские серии, однако в теории рассеяния с короткодействующими потенциалами можно рассматривать

так называемые итерации уравнений Фаддеева (известные также как серии Ватсона, или ряды Борна–Фаддеева), где каждый член включает в себя последовательные взаимодействия разных частиц посредством парных амплитуд [1, 2]. К этой форме представления амплитуды рассеяния мы уже обращались в этом пункте. В частности, традиционно используемое в расчетах плосковолновое импульсное приближение

$$\text{PWIA} = \frac{e^{-\frac{\pi}{2}\eta_{se} + iA_{se}}}{\Gamma(1 - i\eta_{se})} \lim_{z \rightarrow E + i0} (z - E)^{-i\eta_{se}} \langle \mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e | t_{12}(z) | \mathbf{p}_0, \varphi_0 \rangle \quad (2.35)$$

как раз является первым членом такой серии. Другим примером является выражение (2.31), которое также можно рассматривать как первый член некоей серии подобного типа. Фактически это метод искаженных волн, и, по видимому, он более информативен в отношении механизмов рассеяния.

Почему же мы в основном уделяем внимание именно борновским сериям, где в узлах диаграммного представления стоят потенциалы (рис. 1), а не парные амплитуды? Диаграмма члена ряда Борна–Фаддеева содержит последовательные блоки, в которых две частицы взаимодействуют через парную амплитуду, а третья свободна. В теории рассеяния частиц с кулоновским взаимодействием такая ситуация никогда не реализуется из-за отсутствия асимптотической свободы. Формально, конечно, можно записать последовательные итерации системы уравнений Фаддеева вне энергетической поверхности, потом выделить в каждой парной амплитуде сингулярную и регулярную части, благо парные кулоновские амплитуды имеют аналитическое выражение вне поверхности энергии (см., например, [55–57]), и далее работать с этим разложением. Однако даже во втором порядке численная реализация такой программы представляется крайне проблематичной.

Действительно, свойства решений уравнений резольвентного типа, к которым относятся и уравнения Фаддеева, позволяют сформулировать процедуру вычисления квадрата модуля физической амплитуды перехода (1.27)

$$|t_{\beta\alpha}(\mathbf{p}_\beta, \mathbf{p}_\alpha; E + i0)|^2 = \left| \frac{e^{-(\pi/2)(\eta_\beta + \eta_\alpha)}}{\Gamma(1 - i\eta_\alpha)\Gamma(1 - i\eta_\beta)} \right|^2 \lim_{z \rightarrow E + i0} |\langle \mathbf{p}_\beta | T_{\beta\alpha}(z) | \mathbf{p}_\alpha \rangle|^2.$$

Поскольку при $\text{Im } z > 0$ уравнения Фаддеева имеют единственное решение, то предельная процедура, по крайней мере, формально позволяет рассчитать физически наблюдаемое сечение процесса, пропорциональное квадрату модуля амплитуды. Однако эта процедура не пригодна в случае приближения амплитуды T его итерациями в рамках серии Ватсона. Покажем это на примере итерации второго порядка. Матричные элементы типа $I_{\beta\alpha} = \langle \mathbf{p}_\beta | t_\beta(z) G_0(z) t_\alpha(z) | \mathbf{p}_\alpha \rangle$ при выходе переменной z на поверхность энергии представляются в виде

$$I_{\beta\alpha} \approx (z - E)^{i\eta_\alpha} A_{\beta\alpha} + (z - E)^{i\eta_\beta} B_{\beta\alpha}$$

(см., например, [12, 13]). Суммируя первую и вторую итерации, мы легко можем убедиться, что компенсация этих сингулярностей с помощью формулы (1.27) невозможна, и, вычисляя таким образом сечение, обнаруживаем, что оно расходится на поверхности энергии.

С этой точки зрения приближение PWIA также не выглядит адекватным теоретическим инструментом. Действительно, как показано в работе [58], если даже в (2.2) нам удастся выделить из $T(z)$ парную амплитуду $t_{12}(z)$ в отдельное слагаемое и регуляризовать ее, т.е. выделить сингулярность $(z - E)^{i\eta_{se}}$, мы не получим стандартного PWIA из-за наличия трехчастичных, в том числе сингулярных, сомножителей перед матричным элементом (ср. (2.2) и (2.35)). Таким образом, чтобы формально получить PWIA, мы должны после выделения $t_{12}(z)$ из $T(z)$ пренебречь в сомножителях перед матричным элементом электрон-ионными параметрами Зоммерфельда, т.е. положить $\eta_s = \eta_e = 0$ в (2.2). Оставляя в стороне вопрос о математической корректности подобной процедуры, отметим, что в случае квазиупругой ($e, 2e$)-реакции реализуется кинематка, в которой парные параметры Зоммерфельда η_{se} , η_e и η_s — величины одного порядка. Последнее обстоятельство очевидно не позволяет обосновать приближение $\eta_s = \eta_e = 0$ в рамках тех или иных физических соображений.

Проведенное обсуждение показывает, что если изначально в амплитуде, задаваемой уравнением ЛШ, не выделены необходимые кулоновские сингулярности, все попытки построить приближенные выражения для амплитуд рассеяния заряженных частиц обречены на неудачу. Один из способов сделать это обсуждается в п. 2.4, другой, основанный на методе эффективных зарядов, изложен в работах [46, 59, 60].

2.4. Второе плосковолновое борновское приближение для амплитуды квазиупругой ($e, 2e$)-реакции на атоме водорода. Результаты п. 2.2 показывают, что роль малого параметра в разложении амплитуды в борновский ряд практически выполняют параметры Зоммерфельда каналов, однозначно связанные с кулоновскими потенциалами. Оставляя в разложении выражения (2.2) в ряд по параметрам η_i слагаемые не выше первого порядка, получим выражение для физической амплитуды во втором плосковолновом борновском приближении (SBA) (поскольку потенциалы уже содержатся в слагаемом T_0):

$$t_1(\mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e, \mathbf{p}_0; E + i0) \equiv t_{\text{SBA}} = \left(1 - \frac{\pi\eta}{2} + iA - iC\eta\right) T_0(\mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e) + \\ + \lim_{z \rightarrow E + i0} [T_1(\mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e; z) - i\eta T_0(\mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e) \ln(z - E)], \quad (2.36)$$

где $C = 0,577215\dots$ — постоянная Эйлера. Для оператора $T(z)$ выберем его prior-форму (1.266) (опускаем для удобства тильду здесь и далее), где

выбираем $V^\alpha = v_{1N} + v_{12}$. Тогда справедлива следующая цепочка выкладок:

$$T(z) = (v_{1N} + v_{12}) + WG_0^+(z)T(z) = (v_{1N} + v_{12}) + WG^+(z)(v_{1N} + v_{12}).$$

Из первого равенства следует

$$(1 - v_{2N}G_0^+(z))T(z) = (v_{1N} + v_{12}) + (v_{1N} + v_{12})G_0^+(z)T(z),$$

или

$$\begin{aligned} T(z) &= [1 - v_{2N}G_0^+(z)]^{-1}[(v_{1N} + v_{12}) + (v_{1N} + v_{12})G_0^+(z)T(z)] = \\ &= [1 - v_{2N}G_0^+(z)]^{-1}[(v_{1N} + v_{12}) + (v_{1N} + v_{12})G^+(z)(v_{1N} + v_{12})]. \end{aligned} \quad (2.37)$$

Используя известное представление полной функции Грина в виде разложения по спектру собственных функций полного гамильтониана H , запишем матричный элемент $\langle \mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e | T(z) | \mathbf{p}_0, \varphi_0 \rangle \equiv T(\mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e; z)$ оператора $T(z)$ в (2.37) в виде

$$\begin{aligned} T(\mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e; z) &= \langle \mathbf{p}_s, \varphi^-(\mathbf{p}_e; z') | v_{1N} + v_{12} | \mathbf{p}_0, \varphi_0 \rangle + \\ &+ \sum_{\alpha} \frac{\langle \mathbf{p}_s, \varphi^-(\mathbf{p}_e; z') | v_{1N} + v_{12} | \Psi_{\alpha}^- \rangle \langle \Psi_{\alpha}^- | v_{1N} + v_{12} | \mathbf{p}_0, \varphi_0 \rangle}{z - E_{\alpha}}, \quad z' = z - \frac{p_s^2}{2}. \end{aligned} \quad (2.38)$$

В (2.38) $|\Psi_{\alpha}^- \rangle$ — трехчастичная волновая функция задачи (с признаками сходящейся сферической волны в случае, если хотя бы один электрон находится в непрерывном спектре), а $\langle \varphi^-(\mathbf{p}_e; z') | = \langle \mathbf{p}_e | [1 - v_{2N}g_0^+(z')]^{-1}$.

Здесь следует обсудить, какой смысл мы вкладываем в термин «первое плосковолновое борновское приближение», «второе плосковолновое борновское приближение» и т. д. при рассмотрении задачи трех тел, где имеются как связанные комплексы, так и свободные электроны. Принимаются в расчет только процессы, включающие одно или два последовательных потенциальных взаимодействия свободных электронов. Поскольку далее рассматривается случай, где все импульсы $\mathbf{p}_0, \mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e$ достаточно велики, так же как и переданный импульс $\mathbf{Q} = \mathbf{p}_0 - \mathbf{p}_s$ (так называемые квазиупругие $(e, 2e)$ -процессы, или метод электронной импульсной спектроскопии, который упоминался во введении и с деталями которого можно также познакомиться в обзорах [61, 62]), в дальнейшем делаются следующие приближения и допущения:

— мы пренебрегаем слагаемыми, в которых координаты, соответствующие быстрым частицам, входят в связанные промежуточные состояния, поскольку вероятность быстрой частице «посидеть» некоторое время в связанном состоянии достаточно мала;

— мы оставляем только те элементарные процессы второго порядка, которые убывают с ростом энергии не быстрее чем $Q^{-2}p_i^{-1}$ ($i = 0, s, e$).

Рассмотрим теперь функцию $|\varphi^-(\mathbf{p}_e; z')\rangle = [1 - g_0^-(z')v_{2N}]^{-1}|\mathbf{p}_e\rangle$. Она удовлетворяет уравнению $(z' - h_{02} - v_{2N})|\varphi^-(\mathbf{p}_e; z')\rangle = (z' - p_e^2/2)|\mathbf{p}_e\rangle$ (ср. с (2.8)) и при $z' = p_e^2/2$, или $z = E$, переходит в уравнение для кулоновской функции с признаками сходящейся сферической волны. Легко показать, что $\langle\varphi_0|\varphi^-(\mathbf{p}_e; z')\rangle \rightarrow 0$ при $z \rightarrow E$, как и требуется для собственных функций, принадлежащих различным частям спектра двухчастичного гамильтониана. Таким образом, в первом слагаемом в сумме (2.38) мы можем опустить член, соответствующий взаимодействию v_{1N} , даже несмотря на регуляризацию в виде (2.2). Теперь виден физический смысл выбора входного потенциала V^α . Данный матричный элемент должен быть равен нулю, поскольку нет передачи энергии через бесконечно массивное тело.

Далее, представим формально кулоновскую функцию непрерывной части спектра $\langle\varphi^-(\mathbf{p}_e; z')|$ в виде разложения в ряд по потенциалу v_{2N} и оставим только два слагаемых. Тогда можно записать

$$\langle\mathbf{p}_s, \varphi^-(\mathbf{p}_e; z')| \approx \langle\mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e| (1 + v_{2N}g_0^+(z')). \quad (2.39)$$

Подставляя в оставшуюся часть первого слагаемого в (2.38) только вектор $\langle\mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e|$ из (2.39), получим ФВА

$$\text{ФВА} \equiv T_0(\mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e) = \langle\mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e|v_{12}|\mathbf{p}_0, \varphi_0\rangle = \frac{4\pi}{(\mathbf{p}_0 - \mathbf{p}_s)^2} \varphi_0(\mathbf{q}). \quad (2.40)$$

Графически, в виде диаграммы, ФВА представлено на рис. 1, *a*. Напоминаем, что нормированная волновая функция основного состояния атома водорода $\varphi_0(\mathbf{q}) = 8\sqrt{\pi}/(q^2 + 1)^2$.

Второе слагаемое в (2.39) после подстановки в (2.38) описывает так называемый TS1 (two step) механизм, когда атомный электрон 2 после столкновения с налетающим электроном 1 «возвращается» к иону и взаимодействует с ним вторично (рис. 1, *б*). Это — часть второго борновского приближения и соответствует искажению волны атомного электрона до второго порядка включительно:

$$\begin{aligned} \text{TS1} &= \langle\mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e|v_{2N}g_0^+\left(z - \frac{p_s^2}{2}\right)v_{12}|\mathbf{p}_0, \varphi_0\rangle = \\ &= -\frac{4\pi}{(\mathbf{p}_0 - \mathbf{p}_s)^2} \int \frac{d^3\mathbf{x}}{(2\pi)^3} \frac{\varphi_0(\mathbf{q} + \mathbf{x})}{z - \frac{p_s^2}{2} - \frac{(\mathbf{p}_e + \mathbf{x})^2}{2}} \frac{4\pi}{x^2}. \quad (2.41) \end{aligned}$$

Интеграл (2.41) имеет логарифмическую сингулярность при $x \sim 0$, если $z \rightarrow E + i0$.

Второе слагаемое в (2.38) — очевидный кандидат на второе борновское приближение. В литературе этот член традиционно называется TS2-механизмом, он описывает два последовательных взаимодействия налетающего электрона 1 с системой. Займемся анализом суммы в (2.38). Прежде

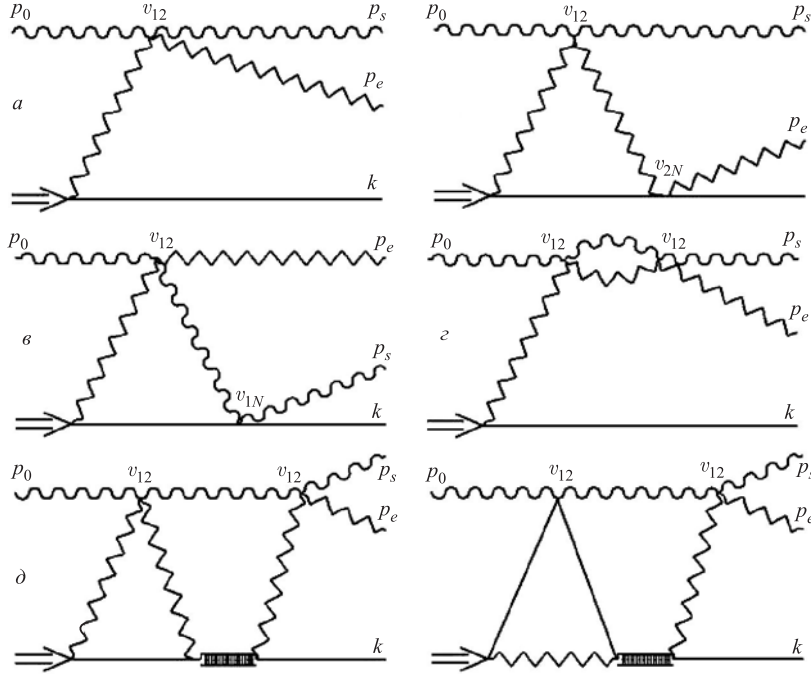


Рис. 1. Нерелятивистские диаграммы, изображающие процессы первого и второго порядка для реакции $H(e, 2e)H^+$: а) FBA; б) TS1; в) TS2₂₁; г) TS2₂₂; д) TS2₁

всего исключим из рассмотрения связанные промежуточные состояния иона H^- , поскольку такие матричные элементы будут пренебрежимо малы в случае квазиупругих $(e, 2e)$ -процессов. Далее, выделим в сумме группу функций $|\Psi_\alpha^- \rangle$ с одним свободным электроном в асимптотике и другим связанным. Поскольку в рассматриваемом SBA-члене мы уже имеем два последовательных взаимодействия, мы полагаем свободный электрон плоской волной. Иными словами, $|\Psi_\alpha^- \rangle = |\mathbf{p}, \varphi_g \rangle$, $g \rightarrow (n, l, m)$. Обозначим эту сумму как TS2₁ (рис. 1, д). Тогда

$$TS2_1 = \sum_g \int \frac{d^3 \mathbf{x}}{(2\pi)^3} \frac{4\pi}{(\mathbf{p}_0 - \mathbf{p}_s - \mathbf{x})^2} \frac{[F_g(\mathbf{x}) - \delta_{n1}] \varphi_g(\mathbf{q} + \mathbf{x})}{z - \varepsilon_g - \frac{(\mathbf{p}_0 - \mathbf{x})^2}{2} + i0} \frac{4\pi}{x^2}. \quad (2.42)$$

В (2.42)

$$F_g(\mathbf{x}) = \int \frac{d^3 \mathbf{y}}{(2\pi)^3} \varphi_0(\mathbf{y}) \varphi_g^*(\mathbf{y} + \mathbf{x}). \quad (2.43)$$

Заметим, что этот интеграл не расходится при любом номере g при $z \rightarrow E + i0$, так как ноль знаменателя при $x = 0$ компенсируется нулем числителя.

Далее в сумме (2.38) следует выделить промежуточные состояния с двумя асимптотически свободными электронами (континуум). Также вначале положим $|\Psi_{\alpha}^{-}\rangle = |\mathbf{p}, \varphi^{-}(\mathbf{p}')\rangle$ с последующей заменой кулоновской волны на плоскую. В результате получим

$$TS2_2 = TS2_{21} + TS2_{22},$$

где

$$TS2_{21} = - \int \frac{d^3 \mathbf{x}}{(2\pi)^3} \frac{4\pi}{(\mathbf{p}_0 - \mathbf{p}_s - \mathbf{x})^2} \frac{\varphi_0(\mathbf{q} + \mathbf{x})}{z - \frac{p_e^2}{2} - \frac{(\mathbf{p}_s + \mathbf{x})^2}{2} + i0} \frac{4\pi}{x^2} \quad (2.44)$$

и

$$TS2_{22} = \varphi_0(\mathbf{q}) \int \frac{d^3 \mathbf{x}}{(2\pi)^3} \frac{4\pi}{(\mathbf{p}_0 - \mathbf{p}_s - \mathbf{x})^2} \frac{1}{z - \frac{(\mathbf{p}_s + \mathbf{x})^2}{2} - \frac{(\mathbf{p}_e - \mathbf{x})^2}{2} + i0} \frac{4\pi}{x^2}. \quad (2.45)$$

Члены $TS2_{21}$ и $TS2_{22}$ в виде диаграмм представлены на рис. 1, в, г. Оба интеграла (2.44) и (2.45) расходятся на энергетической поверхности.

Таким образом, мы построили амплитуду $T_1(\mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e; z)$ в формуле (2.36), и она равна

$$T_1(\mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e; z) \equiv SBA = FBA + TS1 + TS2_1 + TS2_{21} + TS2_{22}. \quad (2.46)$$

Заметим, что слагаемые $TS1$, $TS2_{21}$ и $TS2_{22}$ отвечают за искажение плоских волн конечных электронов вплоть до второго порядка и входят симметричным образом во все три канала. Слагаемое $TS2_1$ несет определенную информацию о процессах, связанных с непрямыми кулоновскими искажениями в самом атоме под действием налетающего электрона (то, что связано с $\chi^+(\mathbf{p}_0)$). Как и следовало ожидать, SBA дает информацию, эквивалентную формуле (2.31). Возможно, эта информация меньше той, которая содержится в (2.31), но она более конкретна и не оставляет произвола в трактовке искаженных волн.

Близкие по духу преобразования были проведены в работе [49], однако там авторы не столкнулись с проблемой расходимостей, используя так называемое контактное приближение (closure approximation — CA), которое существенно меняет асимптотическое условие. Это приближение позволяет оценить средний вклад промежуточных возбуждений в сечение рассматриваемого процесса. Для этого в сумме (2.38) произведем замену $E_{\alpha} \rightarrow \bar{\varepsilon} > -0,5$ и учтем условие полноты собственных функций $|\Psi_{\alpha}^{-}\rangle$

$$\sum_{\alpha} |\Psi_{\alpha}^{-}\rangle \langle \Psi_{\alpha}^{-}| = I.$$

В результате этих манипуляций сумма в (2.38) сведется к выражению

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha} \dots = & \int \frac{d^3 \mathbf{x}}{(2\pi)^3} \frac{4\pi}{(\mathbf{p}_0 - \mathbf{x})^2} \frac{4\pi}{(\mathbf{p}_s - \mathbf{x})^2} \frac{1}{E - \bar{\varepsilon} - x^2/2 + i0} \times \\ & \times \left[\int d^3 \mathbf{r}_1 \tilde{\varphi}^{-*}(\mathbf{p}_e, \mathbf{r}_1) e^{i(\mathbf{p}_0 - \mathbf{p}_s)\mathbf{r}_1} \tilde{\varphi}_0(\mathbf{r}_1) - \right. \\ & - \int d^3 \mathbf{r}_1 \tilde{\varphi}^{-*}(\mathbf{p}_e, \mathbf{r}_1) e^{i(\mathbf{x} - \mathbf{p}_s)\mathbf{r}_1} \tilde{\varphi}_0(\mathbf{r}_1) - \\ & \left. - \int d^3 \mathbf{r}_1 \tilde{\varphi}^{-*}(\mathbf{p}_e, \mathbf{r}_1) e^{-i(\mathbf{x} - \mathbf{p}_0)\mathbf{r}_1} \tilde{\varphi}_0(\mathbf{r}_1) \right] \quad (2.47) \end{aligned}$$

(тильда здесь означает координатное представление кулоновской функции). Учитывая, что импульс \mathbf{p}_e большой, положим приближенно в (2.47) кулоновскую волну плоской с одновременной заменой $\mathbf{x} \rightarrow (\mathbf{p}_s - \mathbf{x})$. В результате получаем

$$\begin{aligned} \text{CA} = & \int \frac{d^3 \mathbf{x}}{(2\pi)^3} \frac{4\pi}{(\mathbf{p}_0 - \mathbf{p}_s - \mathbf{x})^2} \frac{1}{E - \bar{\varepsilon} - \frac{(\mathbf{p}_s + \mathbf{x})^2}{2} + i0} \frac{4\pi}{x^2} \times \\ & \times [\varphi_0(\mathbf{q}) - \varphi_0(\mathbf{p}_e - \mathbf{x}) - \varphi_0(\mathbf{q} + \mathbf{x})]. \quad (2.48) \end{aligned}$$

В интеграле (2.48) уже не возникает проблема расходимости, если, например, $\bar{\varepsilon}$ находится где-то внутри дискретной части кулоновского спектра или даже является небольшой положительной величиной. Первые два члена в квадратных скобках в (2.48) соответствуют сумме механизмов TS2₁+TS2₂₂, тогда как третье слагаемое соответствует механизму TS2₂₁.

В контактном приближении необходимо регуляризовать только слагаемое TS1(z):

$$t_{\text{clos}} \approx [1 - R_e(z)] \text{FBA} + \text{TS1}(z) + \text{CA}, \quad (2.49)$$

где

$$R_e(z) = i\eta_e \ln(z - E) + \eta_e \left(\frac{\pi}{2} + iC \right) - i\eta_e \ln(2p_e^2).$$

2.5. Расчет дифференциальных сечений. Обсуждения. Для расчетов и оценок выбрана кинематика ионизационных экспериментов на гелиевой мишени, проведенных недавно группой японских ученых [63]. В этих экспериментах угол каждого электрона фиксировался равным 45° по отношению к налетающему электрону. При этом один из детекторов конечных электронов двигался по кругу перпендикулярно к плоскости, образованной векторами скоростей начального и другого конечного электронов. В этой кинематике $p_s^2 = p_e^2 = 2E_s$, $p_0^2 = 2(2E_s + \varepsilon_0)$ и Φ — угол между векторами \mathbf{p}_s и \mathbf{p}_e . При

этом

$$q^2 = |\mathbf{p}_0 - \mathbf{p}_s - \mathbf{p}_e|^2 = 4E_s \left(\cos \Phi + 2 - 2\sqrt{1 + \frac{\varepsilon_0}{2E_s} + \frac{\varepsilon_0}{2E_s}} \right). \quad (2.50)$$

Угол Φ связан с полярным углом α выхода вектора электрона из плоскости соотношением $\cos \Phi = 0,5(1 - \cos \alpha)$, причем фаза выбрана так, чтобы минимальное значение q достигалось при условии, когда все электроны расположены в одной плоскости. Это значение стремится к нулю при $E_s \rightarrow \infty$, но при конечных E_s оно конечно. Например, если $E_s \gg \varepsilon_0$, то $q_{\min} \approx \varepsilon_0/(2\sqrt{E_s})$. Равенство (2.50) дает связь между углами и импульсом q , что используется в расчетах различных матричных элементов при получении импульсных профилей в переменной q .

На рис. 2–5, 9–12 [64] приведены результаты расчетов вкладов как отдельных механизмов реакции ионизации водорода во втором борновском приближении, так и SBA в целом. Расчеты проводились при энергии $E = 2013,6$ эВ (по 1 кэВ на каждый конечный электрон). Такой выбор энергий конечных электронов также обусловлен экспериментами [63].

На рис. 2, 3 представлены основные приближения первого порядка: FBA и PWIA. Поскольку основное состояние атома водорода — это $1s$ -состояние, то сечение является конечной величиной при $q \rightarrow 0$. В случае высших угловых состояний — p, d, f — сечение стремилось бы к нулю при малых q . В визуальном различии угловых профилей импульсных распределений электронов в мишени и заключается методическая сила метода электронной импульсной спектроскопии.

На рис. 4, 5 представлены расчеты дифференциального сечения, куда наряду с FBA включены вклады некоторых механизмов второго порядка: TS1, TS2₂₁ и TS2₂₂ (их сумма вместе с FBA обозначена как SBA^{simple}). Они достаточно заметно завышают FBA-расчеты как при малых, так и при больших значениях q , хотя имеется область $1,5 \leq q \leq 2,5$, где кривые практически совпадают. Напомним, что эти механизмы приводят к искажению плоских волн быстрых электронов в конечном состоянии. Механизмы TS2₂₁ и TS1 отвечают за искажение плоской волны одного из конечных электронов полем ядра, тогда как TS2₂₂ отвечает за искажение волн за счет их кулоновского отталкивания. Если вклад этого механизма уменьшает сечение по сравнению с FBA-расчетами, то кулоновское взаимодействие протона и электронов существенно его завышает. Это удивительно, поскольку энергии электронов достаточно велики ($p_s = p_e \sim 10$), чтобы считать кулоновские параметры (или параметры Зоммерфельда) η_i достаточно малыми.

Следует отметить, что в случае атома водорода имеется ряд аналитических тестов, позволяющих не только проверить качество численных расчетов, но и сделать определенные выводы о качестве второго борновского приближения в случае кулоновского взаимодействия частиц. Вернемся к первому

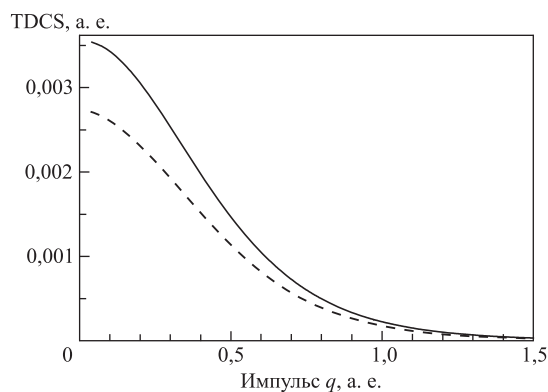


Рис. 2. Трехкратное дифференциальное сечение (TDCS) квазиупругой реакции $H(e, 2e)H^+$ как функция импульса отдачи q в приближениях FBA (сплошная кривая) и PWIA (штриховая) в линейной шкале. $E_0 = 2013,6$ эВ

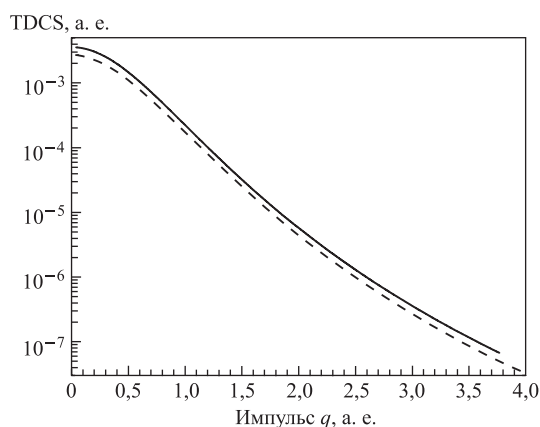


Рис. 3. То же, что на рис. 2, но в логарифмической шкале

слагаемому в (2.38). Этот матричный элемент может быть вычислен аналитически (обозначим его как CWBA — Coulomb wave Born approximation):

$$\begin{aligned}
 \text{CWBA} &= \langle \mathbf{p}_s, \varphi^-(\mathbf{p}_e) | v_{12} | \mathbf{p}_0, \varphi_0 \rangle = \\
 &= \text{FBA} e^{-\pi\eta_e/2} \Gamma(1 + i\eta_e) \left[\frac{Q^2 + (1 - ip_e)^2}{1 + q^2} \right]^{i\eta_e} \times \\
 &\quad \times \left[1 + i\eta_e \left(1 - \frac{(1 - ip_e)(1 + q^2)}{(1 - ip_e)^2 + Q^2} \right) \right]. \quad (2.51)
 \end{aligned}$$

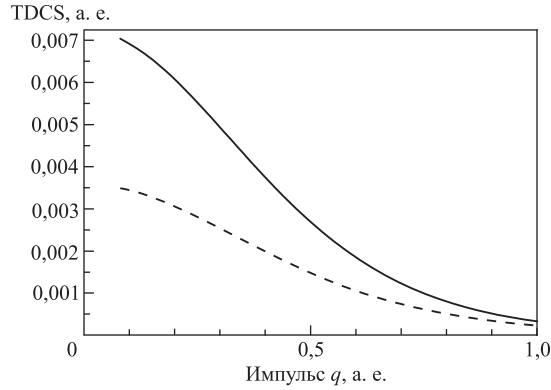


Рис. 4. Трехкратное дифференциальное сечение квазиупругой реакции $H(e, 2e)H^+$ как функция импульса отдачи q в приближениях FBA (штриховая кривая) и $SBA^{\text{simple}} = FBA + TS1 + TS2_{21} + TS2_{22}$ (сплошная) в линейной шкале. $E_0 = 2013,6$ эВ

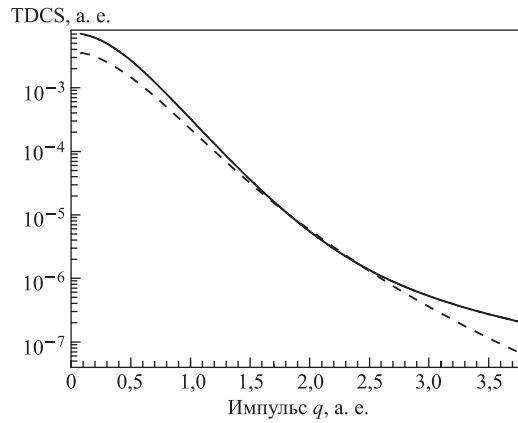


Рис. 5. То же, что на рис. 4, но в логарифмической шкале

В формуле (2.40) $\eta_e = -1/p_e$. Матричный элемент PWIA также вычисляется аналитически:

$$\begin{aligned} \text{PWIA} &= \langle e^{i\mathbf{P}_{se}\mathbf{R}_{12}} \tilde{\varphi}^-(\mathbf{p}_{se}, \mathbf{r}_{12}) | v_{12} | \mathbf{p}_0, \varphi_0 \rangle = \\ &= \text{FBA} e^{-\pi\eta_{se}/2} \Gamma(1 + i\eta_{se}) \left[\frac{(1/4)(\mathbf{p}_0 - \mathbf{q})^2 - p_{se}^2}{Q^2} \right]^{i\eta_{se}}, \end{aligned} \quad (2.52)$$

где $\mathbf{P}_{se} = \mathbf{p}_s + \mathbf{p}_e$, $\mathbf{p}_{se} = (\mathbf{p}_s - \mathbf{p}_e)/2$, $\eta_{se} = 1/2p_{se}$.

Плосковолновые приближения второго порядка выражений (2.51) и (2.52) получаются их разложением в ряд Тейлора по параметрам Зоммерфельда η_e

и η_{se} соответственно:

$$\text{CWBA} \approx \text{FBA} \left[1 - \frac{\pi\eta_e}{2} - iC\eta_e + i\eta_e \left(1 - \frac{(1-ip_e)(1+q^2)}{(1-ip_e)^2 + Q^2} \right) + i\eta_e \ln \frac{Q^2 + (1-ip_e)^2}{1+q^2} \right], \quad (2.53)$$

$$\text{PWIA} \approx \text{FBA} \left[1 - \frac{\pi\eta_{se}}{2} - iC\eta_{se} + i\eta_{se} \ln \frac{(1/4)(\mathbf{p}_0 - \mathbf{q})^2 - p_{se}^2}{Q^2} \right]. \quad (2.54)$$

Заметим, что *абсолютно те же результаты* получаются в случае применения процедуры регуляризации при $z \rightarrow E + i0$:

$$\text{CWBA} \approx \left(1 - \frac{\pi\eta_e}{2} + iA_e - iC\eta_e \right) \text{FBA} + \lim_{z \rightarrow E+i0} [\text{TS1}(z) - i\eta_e \text{FBA} \ln(z-E)], \quad (2.55)$$

$$\text{PWIA} \approx \left(1 - \frac{\pi\eta_{se}}{2} + iA_{se} - iC\eta_{se} \right) \text{FBA} + \lim_{z \rightarrow E+i0} [\text{TS2}_{22}(z) - i\eta_{se} \text{FBA} \ln(z-E)]. \quad (2.56)$$

Напомним, что фазы Долларда $A_e = \eta_e \ln(2p_e^2)$ и $A_{se} = \eta_{se} \ln(4p_{se}^2)$. Интегралы $\text{TS1}(z)$ и $\text{TS2}_{22}(z)$ относятся к так называемым интегралам типа Льюиса [65] и вычисляются аналитически:

$$\begin{aligned} \text{TS1}(z \rightarrow E + i0) &= -\frac{4\pi}{Q^2} \int \frac{d^3x}{(2\pi)^3} \frac{\varphi_0(\mathbf{q} + \mathbf{x})}{z - \frac{p_s^2}{2} - \frac{(\mathbf{p}_e + \mathbf{x})^2}{2}} \frac{4\pi}{x^2} = \\ &= \text{FBA} i\eta_e \left[1 - \frac{(1-ip_e)(1+q^2)}{(1-ip_e)^2 + Q^2} + \ln \frac{Q^2 + (1-ip_e)^2}{1+q^2} + \ln \frac{(z-E)}{2p_e^2} \right], \end{aligned} \quad (2.57)$$

$$\begin{aligned} \text{TS2}_{22}(z \rightarrow E + i0) &= \\ &= \varphi_0(\mathbf{q}) \int \frac{d^3x}{(2\pi)^3} \frac{4\pi}{(\mathbf{Q} + \mathbf{x})^2} \frac{1}{z - E + 2\mathbf{p}_{se}\mathbf{x} - x^2 + i0} \frac{4\pi}{x^2} = \\ &= \text{FBA} i\eta_{se} \left[\ln \frac{(1/4)(\mathbf{p}_0 - \mathbf{q})^2 - p_{se}^2}{Q^2} + \ln \frac{(z-E)}{4p_{se}^2} \right]. \end{aligned} \quad (2.58)$$

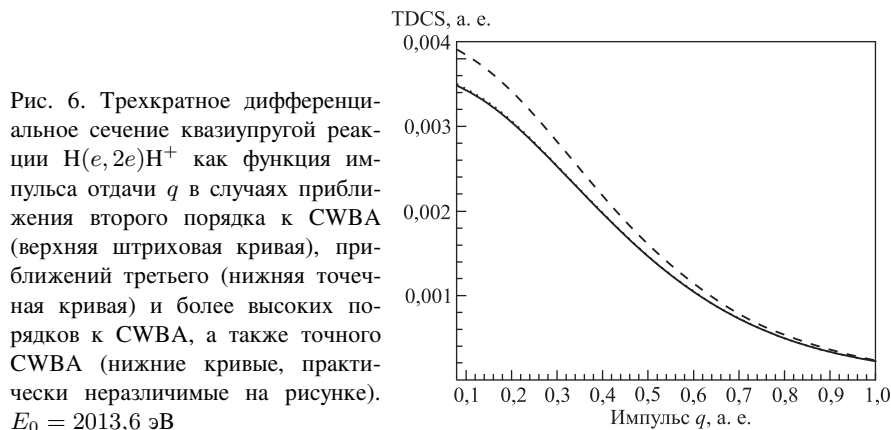


Рис. 6. Трехкратное дифференциальное сечение квазиупругой реакции $H(e, 2e)H^+$ как функция импульса отдачи q в случаях приближения второго порядка к CWBA (верхняя штриховая кривая), приближений третьего (нижняя точечная кривая) и более высоких порядков к CWBA, а также точного CWBA (нижние кривые, практически неразличимые на рисунке). $E_0 = 2013,6$ эВ

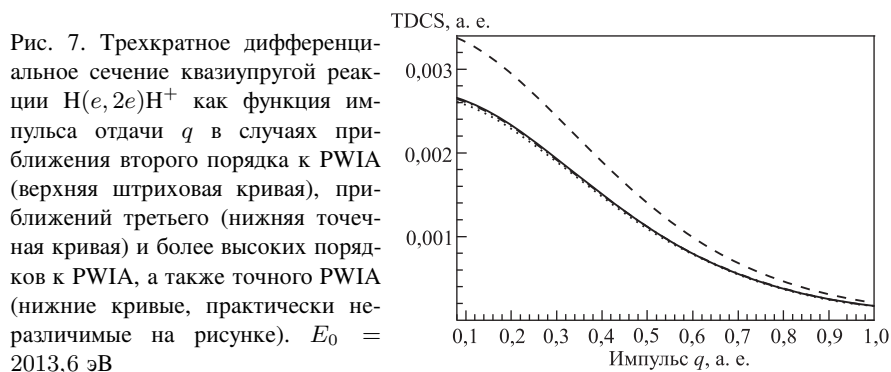


Рис. 7. Трехкратное дифференциальное сечение квазиупругой реакции $H(e, 2e)H^+$ как функция импульса отдачи q в случаях приближения второго порядка к PWIA (верхняя штриховая кривая), приближений третьего (нижняя точечная кривая) и более высоких порядков к PWIA, а также точного PWIA (нижние кривые, практически неразличимые на рисунке). $E_0 = 2013,6$ эВ

Раскладывая выражения (2.51) и (2.52) далее по параметрам Зоммерфельда, можно получить высшие борновские приближения. Результаты расчетов этих приближений приведены на рис. 6, 7 [66]. Кривые дифференциального сечения в приближениях FBA и CWBA практически совпадают в достаточно широком диапазоне импульсов отдачи q . То же можно сказать и о приближениях, начиная с третьего. Заметно отличается только второе борновское приближение (!). Такая же картина наблюдается и в случае импульсного приближения. Из этого следует парадоксальный вывод, что учет механизмов искажения волн только в рамках SBA не улучшает, а ухудшает результаты. Этот негативный эффект всецело следует отнести к качеству приближения кулоновской функции непрерывного спектра плоской волной: для этого двух членов ряда Тейлора явно недостаточно.

Любопытно, что похожий результат дает использование в формуле (2.25) так называемой функции ВВК (или 3С) [15] в качестве конечного

состояния:

$$\Psi_{3C}^-(\mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = e^{-i\mathbf{p}_{se}\mathbf{r}_{12}} \tilde{\varphi}^-(\mathbf{p}_s, \mathbf{r}_1) \tilde{\varphi}^-(\mathbf{p}_e, \mathbf{r}_2) \tilde{\varphi}^-(\mathbf{p}_{se}, \mathbf{r}_{12}). \quad (2.59)$$

Будучи разложена в ряд по кулоновским числам до первого порядка включительно, функция (2.59) дает в точности FBA + SBA^{simple}. Соответствующие расчеты представлены на рис. 8 (выполнены К. Даль Капелло). Как видно, применение функции ВВК практически совпадает с FBA-расчетами.

Вклады промежуточных возбуждений $n = 1, 2$ (рис. 9, 10) практически не меняют сечение при небольших q . В то же время учет $2s$ - и $2p$ -волн существенно проявляет себя при средних импульсах q . Напомним, что вклады промежуточных возбуждений обычно связывают с реакцией нейтрального атома

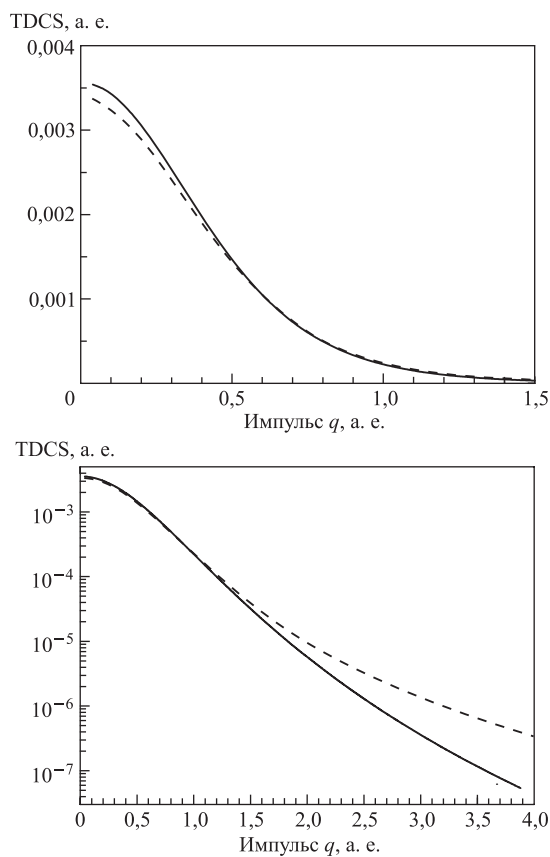


Рис. 8. Трехкратное дифференциальное сечение квазиупругой реакции $\text{H}(e, 2e)\text{H}^+$ как функция импульса отдачи q в приближениях FBA (сплошная кривая) и ВВК (штриховая). $E_0 = 2013,6$ эВ

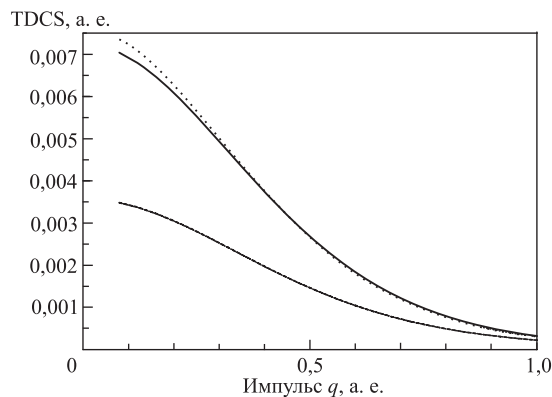


Рис. 9. Трехкратное дифференциальное сечение квазиупругой реакции $\text{H}(e, 2e)\text{H}^+$ как функция импульса отдачи q в приближениях FBA, FBA+1s (нижние кривые, практически неразличимые на рисунке), SBA^{simple} (верхняя сплошная кривая) и SBA^{simple}+1s+2s+2p (верхняя точечная кривая) в линейной шкале. $E_0 = 2013,6$ эВ

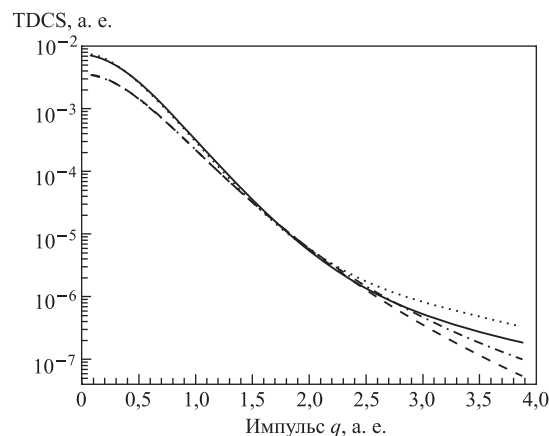


Рис. 10. То же, что на рис. 9, но в логарифмической шкале

на подлетающий электрон, и прежде всего с поляризацией атома, которая как раз и описывается $2p$ -возбуждением. Именно промежуточный переход $1s \rightarrow 2p$ является доминирующим при фотоионизации. В случае $(e, 2e)$ -реакции при больших начальных энергиях промежуточные переходы $1s \rightarrow ns$ ($n \geq 2$) не запрещены. Однако, как показывают расчеты, в случае выбранной квазисимметричной геометрии они не дают заметного вклада в SBA практически во всем диапазоне изменения импульса q , как, впрочем, и переход $1s \rightarrow 2p$. Лишь упругий канал в промежуточном состоянии дает заметный вклад при

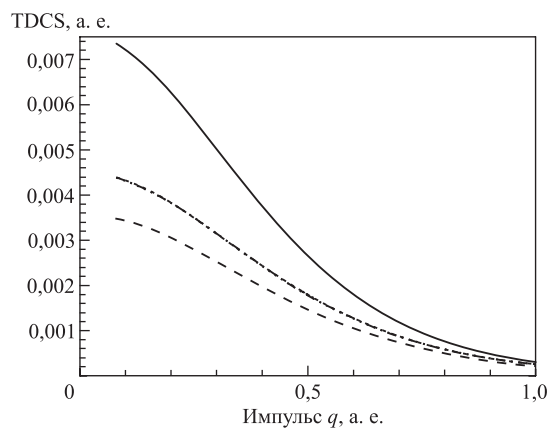


Рис. 11. Трехкратное дифференциальное сечение квазиупругой реакции $\text{H}(e, 2e)\text{H}^+$ как функция импульса отдачи q в приближениях FBA (нижняя штриховая кривая), в контактном приближении при значениях $\bar{\varepsilon} = -0,2$, $\bar{\varepsilon} = 3$, $\bar{\varepsilon} = 10$ (средние кривые, практически неразличимые на рисунке) и в приближении $\text{SBA}^{\text{simple}} + 1s + 2s + 2p$ (верхняя сплошная кривая) в линейной шкале. $E_0 = 2013,6$ эВ

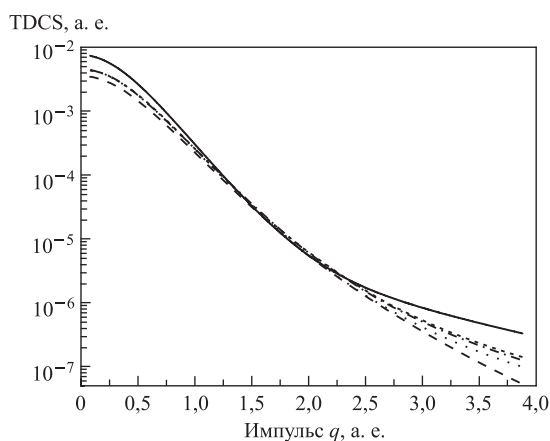


Рис. 12. То же, что на рис. 11, но в логарифмической шкале

$q > 3$, что обычно связывают с искажением плоской волны падающего электрона в начальном состоянии за счет многочастичных эффектов [48].

На рис. 11, 12 представлены расчеты SBA в контактном приближении. В данной версии контактного приближения рассматривается искажение плоской волны падающего электрона полем протона в конечном состоянии, к которому добавляется усредненный эффект промежуточных возбуждений со-

гласно формуле (2.36). В атомных единицах величина $\bar{\epsilon}$ может изменяться в пределах от $-0,5$ до $+\infty$. Как следует из расчетов, кривые сечения практически совпадают при небольших q в широком диапазоне изменения параметра $\bar{\epsilon}$ и расположены ближе к FBA, чем к SBA. В то же время различия при больших значениях q становятся все более заметны. При движении «средней точки» $\bar{\epsilon}$ по спектру промежуточных возбуждений сечение все более смещается в сторону FBA, что, на наш взгляд, является позитивным для данного достаточно грубого приближения. При этом не следует забывать, что само сечение почти на 4 порядка меньше в конце диапазона импульсов q , чем в начале. В целом контактное приближение все же ближе расположено к FBA, чем к $FBA + SBA^{\text{simple}}$ при небольших q , что говорит о полезности его использования в практических расчетах. Более того, если учесть негативное влияние вклада TS1 (см. рис. 6) в полное искажение плоской волны падающего электрона, то, по всей видимости, следует ожидать достаточно малого вклада члена SA в сечение при малых q , что согласуется с расчетами, представленными на рис. 9.

2.6. Заключение к разд. 2. Сформулируем кратко результаты, полученные в разд. 2.

1. На конкретном примере квазиупругой реакции $H + e \rightarrow H^+ + 2e$ показана возможность регуляризации сингулярных интегралов, описывающих высшие борновские члены, что обеспечивается общей теорией рассеяния нескольких заряженных частиц. Произведен численный расчет дифференциального сечения этой реакции во втором порядке теории возмущений.

2. Теория регуляризации расходящихся интегралов ряда возмущений дает результат, совпадающий с разложением в ряд Тейлора по параметрам Зоммерфельда в тех случаях, где возможны аналитические решения.

3. Учет промежуточного континуума при расчетах эффектов второго порядка ухудшает качество приближения в случае процессов квазиупругого выбивания при не асимптотически больших энергиях столкновения, что продемонстрировано на тестовых примерах. Требуется принимать во внимание как минимум эффекты третьего порядка, либо проводить расчеты с искаженными волнами, либо... вовсе не учитывать механизмы TS1, TS2₂₁ и TS2₂₂ при небольших импульсах q . Последняя гипотеза легла в основу выбора расчетной схемы в работе [67].

4. При начальной энергии ~ 2 кэВ учет промежуточных возбуждений дискретных состояний атома незначительно влияет на ход кривой дифференциального сечения при небольших импульсах отдачи q , однако становится заметен при росте q в основном за счет упругого перерассеяния на фоне существенного убывания самого сечения, рассчитанного в FBA. Это подтверждает справедливость модели «замороженного кора» при больших энергиях столкновения и небольших импульсах отдачи.

5. Контактное приближение лучше приближает к FBA, чем просто SBA в широком диапазоне импульсов q и параметров $\bar{\varepsilon}$.

Можно сформулировать и еще один важный вывод о том, что энергия 1 кэВ на улетающий электрон достаточна, по крайней мере для водорода, чтобы говорить о подавляющем доминировании первого борновского приближения FBA, которое несет основную информацию о волновой функции мишени, вплоть до $q \approx 2$. При больших импульсах q следует учитывать искажение волн, включая упругое перерассеяние падающего электрона на мишени (кривая FBA +1s на рис. 10), что, впрочем, и делается в большинстве расчетов по методу искаженных волн.

Авторы выражают глубокую благодарность С.И.Виницкому и К.Даль Каппелло за помощь и постоянное внимание к работе. Один из авторов (П.В.) выражает признательность фонду некоммерческих программ «Династия» за многолетнее спонсорство исследований по программам поддержки студентов, аспирантов и молодых ученых. Работа выполнена в рамках темы ОИЯИ 09-6-1060-2005/2010 «Математическая поддержка экспериментальных и теоретических исследований, проводимых ОИЯИ», а также гранта РФФИ 08-01-00604-а «Математическое моделирование динамики легких атомов и молекул под действием быстрых частиц, лазерных импульсов и магнитных полей».

ПРИЛОЖЕНИЕ

Подставим представление (2.24) в (2.22) и перепишем уравнение в виде

$$\begin{aligned}
 & (z - p_s^2/2 - p_e^2/2)^{i\eta(\mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e)} r(\mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e; z) + \tilde{R}(\mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e; z) = 1 + \\
 & + r(\mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e; z) \int \frac{d^3 k_s}{(2\pi)^3} \frac{d^3 k_e}{(2\pi)^3} \langle \mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e | W | \mathbf{k}_s, \mathbf{k}_e \rangle (z - k_s^2/2 - k_e^2/2)^{-1 + i\eta(\mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e)} + \\
 & + \int \frac{d^3 k_s}{(2\pi)^3} \frac{d^3 k_e}{(2\pi)^3} \frac{\langle \mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e | W | \mathbf{k}_s, \mathbf{k}_e \rangle}{(z - k_s^2/2 - k_e^2/2)} \left[r(\mathbf{k}_s, \mathbf{k}_e; z) (z - k_s^2/2 - k_e^2/2)^{i\eta(\mathbf{k}_s, \mathbf{k}_e)} - \right. \\
 & \quad \left. - r(\mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e; z) (z - k_s^2/2 - k_e^2/2)^{i\eta(\mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e)} \right] + \\
 & \quad + \int \frac{d^3 k_s}{(2\pi)^3} \frac{d^3 k_e}{(2\pi)^3} \frac{\langle \mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e | W | \mathbf{k}_s, \mathbf{k}_e \rangle}{(z - k_s^2/2 - k_e^2/2)} \tilde{R}(\mathbf{k}_s, \mathbf{k}_e; z). \quad (\text{П.1})
 \end{aligned}$$

Матричный элемент $\langle \mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e | W | \mathbf{k}_s, \mathbf{k}_e \rangle$ включает сумму трех однотипных членов. Рассмотрим один из них:

$$\langle \mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e | v_{1N} | \mathbf{k}_s, \mathbf{k}_e \rangle = (2\pi)^3 \delta(\mathbf{p}_e - \mathbf{k}_e) \frac{-4\pi}{|\mathbf{p}_s - \mathbf{k}_s|^2} \quad (\text{П.2})$$

и вычислим базовый интеграл

$$I_e = \int \frac{d^3 k_s}{(2\pi)^3} \frac{-4\pi}{|\mathbf{p}_s - \mathbf{k}_s|^2} (z - p_s^2/2 - k_e^2/2)^{-1+i\eta}. \quad (\text{П.3})$$

Делаем замену переменных $\mathbf{k}_s = \mathbf{p}_s - \mathbf{x}$ и, вычисляя тривиальный интеграл по угловым переменным, получим

$$\begin{aligned} I_e &= \frac{-1}{i\pi p_e \eta} \int_0^\infty \frac{dx}{x} \left[\left(z - E + p_e x - \frac{x^2}{2} \right)^{i\eta} - \left(z - E - p_e x - \frac{x^2}{2} \right)^{i\eta} \right] = \\ &= -\frac{(p_e^2/2)^{i\eta}}{i\pi p_e \eta} \int_{-\infty}^\infty \frac{dx}{x} (\gamma + 2x - x^2)^{i\eta}; \quad \gamma = \frac{z - E}{p_e^2/2}; \quad \text{Im } \gamma > 0. \end{aligned} \quad (\text{П.4})$$

Воспользуемся известным преобразованием

$$\frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_0^\infty t^{-1+\alpha} e^{-tx} dt = x^{-\alpha}; \quad \text{Re } x > 0; \quad \text{Re } \alpha > 0.$$

Тогда

$$I_e = -2 \frac{(p_e^2/2)^{i\eta}}{\pi p_e \eta} \frac{e^{-\pi\eta/2}}{\Gamma(-i\eta)} \int_0^\infty t^{-1-i\eta} e^{i\gamma t} dt \int_0^\infty \frac{dx}{x} e^{-ix^2 t} \sin(2xt). \quad (\text{П.5})$$

Интеграл по x равен $\sqrt{t} e^{-\pi/4} {}_1F_1(1/2, 3/2; it)$, и (П.5) превращается в

$$I_e = -2 \frac{(p_e^2/2)^{i\eta}}{\sqrt{i\pi} p_e \eta} \frac{e^{-\pi\eta/2}}{\Gamma(-i\eta)} \int_0^\infty t^{-1/2-i\eta} e^{i\gamma t} {}_1F_1\left(\frac{1}{2}, \frac{3}{2}; it\right) dt. \quad (\text{П.6})$$

Интеграл по t относится к табличным

$$\int_0^\infty d\rho e^{-\beta\rho} \rho^\nu {}_1F_1(\alpha, \gamma; \lambda\rho) = \frac{\Gamma(\nu+1)}{\beta^{\nu+1}} {}_2F_1\left(\nu+1, \alpha; \gamma; \frac{\lambda}{\beta}\right); \quad \text{Re } \beta > \text{Re } \lambda,$$

и в результате вычислений

$$I_e = -2 \frac{(p_e^2/2)^{i\eta}}{\sqrt{\pi} p_e \eta} \frac{\Gamma(1/2 - i\eta)}{\Gamma(-i\eta)} \gamma^{-1/2+i\eta} {}_2F_1\left(\frac{1}{2} - i\eta, \frac{1}{2}; \frac{3}{2}; -\frac{1}{\gamma}\right). \quad (\text{П.7})$$

Используя формулу преобразования гипергеометрической функции при обращении аргумента, получим окончательно

$$I_e = \frac{\eta_e}{\eta} \left[(z - E)^{i\eta} - \frac{(p_e^2/2)^{i\eta} \Gamma(1/2 - i\eta)}{\sqrt{\pi} \Gamma(1 - i\eta)} {}_2F_1 \left(\frac{1}{2} - i\eta, -i\eta; 1 - i\eta; \gamma \right) \right]. \quad (\text{П.8})$$

Производя аналогичные расчеты для других потенциалов в сумме W , получим при $z \rightarrow E + i0$

$$I_e + I_s + I_{se} \approx (z - E)^{i\eta} - \frac{B \Gamma(1/2 - i\eta)}{\sqrt{\pi} \Gamma(1 - i\eta)} + O(\gamma), \quad (\text{П.9})$$

где

$$B = \frac{\eta_e E_e^{i\eta} + \eta_s E_s^{i\eta} + \eta_{se} E_{se}^{i\eta}}{\eta},$$

что и требовалось доказать.

Заметим, что необходимо обеспечить сходимость всех интегралов в (П.1) при бесконечно больших переменных интегрирования. Это достигается формальной заменой $\eta \rightarrow \eta + i\lambda$, $\lambda \rightarrow +0$ и требованием достаточного убывания функций r и \tilde{R} . В окончательных выражениях можно положить $\lambda = 0$, как это сделано при вычислении интеграла (П.5). Кроме того, из выражения (П.1) следует, что $\tilde{R}(\mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e; E + i0) = 0$, поскольку последний интеграл в сумме в правой части равенства регулярен по определению.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Меркурьев С.П., Фаддеев Л.Д. Квантовая теория рассеяния для систем нескольких частиц. М.: Наука, 1985.
2. Шмид Э., Цигельман Х. Проблема трех тел в квантовой механике. М.: Наука, 1979.
3. Комаров В.В., Попова А.М., Шаблов В.Л. Динамика систем нескольких квантовых частиц. М.: Изд-во Моск. гос. ун-та, 1996.
4. Рид М., Саймон Б. Методы современной математической физики. Т. 4. Анализ операторов. М.: Мир, 1982.
5. Popov Yu. // J. Phys. B: At. Mol. Phys. 1981. V. 14. P. 2449.
6. Zorbas J. // Intern. J. Theor. Phys. 1981. V. 20. P. 921.
7. Веселова А.М. // ТМФ. 1970. Т. 3. С. 326; 1978. Т. 35. С. 180.
8. Веселова А.М. // ТМФ. 1972. Т. 13. С. 368.
9. Baizer Z. // Few Body Nuclear Physics / Eds. Pisent A., Vanzani V., Fonda L. IAEA. Vienna, 1978. P. 365.

10. *Weinberg S.* // *Phys. Rev.* 1965. V. 140. P. B516.
11. *Кулиш П. П., Фаддеев Л. Д.* // *ТМФ.* 1970. Т. 4. С. 153.
12. *Латыпов Д. М., Мухамеджанов А. М.* // *ЯФ.* 1992. Т. 55. С. 318.
13. *Latypov D. M., Mukhamedzhanov A. M.* // *J. Math. Phys.* 1992. V. 33. P. 3105; 1993. V. 34. P. 4554.
14. *Петеркоп Р. К.* Теория ионизации атомов электронным ударом. Рига: Зинатне, 1975.
15. *Brauner M., Briggs J. S., Klar H.* // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 1989. V. 22. P. 2265.
16. *Bencze G.* // *Nucl. Phys. A.* 1972. V. 196. P. 135.
17. *Alt E. O., Mukhamedzhanov A. M.* // *Phys. Rev. A.* 1993. V. 47. P. 2004.
18. *Смирнов Ю. Ф., Неудачин В. Г.* // *Письма в ЖЭТФ.* 1966. Т. 3. С. 298.
19. *Неудачин В. Г., Новоскольцева Г. А., Смирнов Ю. Ф.* // *ЖЭТФ.* 1968. Т. 55. С. 1039.
20. *Glassgold A. E., Ialongo G.* // *Phys. Rev.* 1968. V. 175. P. 151.
21. *Amaldi U., Jr. et al.* // *Rev. Sci. Instr.* 1969. V. 40. P. 1001.
22. *Camilloni R. et al.* // *Phys. Rev. Lett.* 1972. V. 29. P. 618.
23. *Weigold E., Hood S. T., Teubner P. J. O.* // *Phys. Rev. Lett.* 1973. V. 30. P. 475.
24. *Hood S.T. et al.* // *Phys. Rev. A.* 1973. V. 8. P. 2494.
25. *Тейлор Дж.* Теория рассеяния. М.: Мир, 1975.
26. *Рид М., Саймон Б.* Методы современной математической физики. Т. 3. Теория рассеяния. М.: Мир, 1982.
27. *Dollard J.* // *J. Math. Phys.* 1964. V. 5. P. 729.
28. *Chandler C.* // *Nucl. Phys. A.* 1981. V. 353. P. 129.
29. *Muhlerin D., Zinnes I. I.* // *J. Math. Phys.* 1970. V. 11. P. 1402.
30. *Chandler C., Gibson A. G.* // *J. Math. Phys.* 1974. V. 15. P. 291.
31. *Шаблов В. Л., Билык В. А., Попов Ю. В.* // *Фундаментальная и прикладная математика.* 2002. Т. 8. С. 559.
32. *Chandler C., Gibson A. G.* // *J. Math. Phys.* 1973. V. 14. P. 1328.
33. *Zorbas J.* // *J. Math. Phys.* 1976. V. 17. P. 498.
34. *Prugovečki E., Zorbas J.* // *J. Math. Phys.* 1973. V. 14. P. 1358.
35. *Prugovečki E., Zorbas J.* // *Nucl. Phys. A.* 1973. V. 213. P. 541.
36. *Joachain C. J.* *Quantum Collision Theory.* N. Y.: North-Holland, 1975.
37. *Веселова А. М., Меркурьев С. П., Фаддеев Л. Д.* // *Дифракционное взаимодействие адронов с ядрами: Сб. тр. Киев, 1987. С. 107.*
38. *Федорюк М. В.* Асимптотика: интегралы и ряды. М.: Наука, 1987.
39. *Herbst I.* // *Commun. Math. Phys.* 1974. V. 35. P. 181.

40. *Mercuriev S. P.* // Ann. Phys. (N. Y.). 1980. V. 130. P. 385.
41. *Shablov V. L., Bilyk V. A., Popov Yu. V.* // Phys. Rev. A. 2002. V. 65. P. 042719.
42. *Noble J. V.* // Phys. Rev. 1967. V. 161. P. 945.
43. *Popova A. M., Popov Yu. V.* // J. Phys. A: Math. Phys. 1983. V. 16. P. 2743; Вестн. МГУ. Сер. «Физика, астрономия». 1983. Т. 24. С. 56.
44. *Комаров В. В., Попова А. М., Шаблов В. Л.* // ЭЧАЯ. 1983. Т. 14. С. 329.
45. *Popov Yu. V., Bang I., Benayoun J. J.* // J. Phys. B: At. Mol. Phys. 1981. V. 14. P. 4637.
46. *Шаблов В. Л., Билык В. А., Попов Ю. В.* // Фундаментальная и прикладная математика. 1998. Т. 4. С. 1207.
47. *Smith J. J., Winters K. H., Bransden B. H.* // J. Phys. B: At. Mol. Phys. 1979. V. 12. P. 1723.
48. *Pathak A., Srivastava M. K.* // J. Phys. B: At. Mol. Phys. 1980. V. 13. P. 3257.
49. *Byron F. W., Jr., Joachain C. J., Piraux B.* // J. Phys. B: At. Mol. Phys. 1985. V. 18. P. 3203.
50. *Whelan C. T. et al.* // Phys. Rev. A. 1994. V. 50. P. 4394.
51. *Weigold E.* // Nucl. Phys. A. 1981. V. 353. P. 327c.
52. *McCarthy I. E., Weigold E.* // Phys. Rep. C. 1976. V. 27. P. 275.
53. *Popov Yu. V., Benayoun J. J.* // J. Phys. B: At. Mol. Phys. 1981. V. 14. P. 3513.
54. *Avaldi L. et al.* // Phys. Rev. A. 1986. V. 33. P. 851.
55. *Schwinger J.* // J. Math. Phys. 1964. V. 5. P. 1606.
56. *Shastri C. S., Kumar L., Callaway J.* // Phys. Rev. A. 1970. V. 1. P. 1137.
57. *Shastri C. S., Rajagopal A. K.* // Ibid. 1970. V. 2. P. 781.
58. *Kouzakov K. A. et al.* // J. Electron Spectros. Relat. Phenom. 2007. V. 161. P. 35.
59. *Shablov V. L., Bilyk V. A., Popov Yu. V.* // J. Phys. IV. France. 1999. V. 9. P. Pr6-59.
60. *Shablov V. L., Bilyk V. A., Popov Yu. V.* // Many-Particle Spectroscopy of Atoms, Molecules, Clusters and Surfaces / Eds. Beracdar J., Kirschner J. N. Y., 2001. P. 71.
61. *Weigold E., McCarthy I. E.* Electron Momentum Spectroscopy. N. Y., Kluwer, 1999.
62. *Неудачин В. Г., Попов Ю. В., Смирнов Ю. Ф.* // УФН. 1999. Т. 169. С. 1111.
63. *Watanabe N. et al.* // Phys. Rev. A. 2005. V. 72. P. 032705.
64. *Виницкий П. С.* Дис. . . . канд. физ.-мат. наук. М.: Изд-во Моск. ун-та, 2008.
65. *Lewis R.* // Phys. Rev. 1956. V. 102. P. 537.
66. *Виницкий П. С. и др.* // Вестн. МГУ. Сер. 3 «Физика, астрономия». 2008. № 1. С. 28.
67. *Watanabe N. et al.* // Phys. Rev. A. 2007. V. 75. P. 052701.