

АКАДЕМИЯ НАУК СССР

ЖУРНАЛ
ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ
и
ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ
ФИЗИКИ

Том 49

(Отдельный оттиск)

9

МОСКВА · 1965

ОТРЫВ ЭЛЕКТРОНА ПРИ МЕДЛЕННОМ СТОЛКНОВЕНИИ ОТРИЦАТЕЛЬНОГО ИОНА С АТОМОМ

II. УЧЕТ КОНЕЧНЫХ РАЗМЕРОВ СИСТЕМЫ

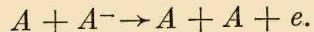
Ю. Н. Демков

Рассмотрена реакция типа $A^- + A \rightarrow A + A + e$. Эффективный потенциал системы A_2 , в поле которой движется слабо связанный электрон, заменяется двумя потенциальными ямами малого радиуса. Предполагается, что при сближении ядер связанное состояние A_2^- исчезает и происходит его распад. Рассчитано угловое и энергетическое распределение вылетающих электронов для симметричного и антисимметричного состояний. Показано, что учет конечных размеров системы неожиданно мало меняет энергетический спектр электронов. Получена общая система уравнений для движения частицы в поле движущихся потенциальных ям малого радиуса переменной глубины.

1. Введение

В предыдущей работе [1] отрыв электрона при столкновении типа $A^- + B$ был рассмотрен в предположении, что при сближении атома и иона Σ -терм AB^- сливаются с термом молекулы AB , слабо связанный электрон становится неустойчивым и происходит распад. Было получено распределение вылетевших электронов по импульсам и вероятность распада, однако область применимости теории была ограничена прежде всего тем, что система AB заменялась эффективной потенциальной ямой, радиус которой считался малым по сравнению с длиной волны вылетающих электронов. Между тем расстояние R_0 между атомом и ионом, при котором энергия связи $E(R)$ обращается в нуль, может быть довольно большим. В то же время, по мере уменьшения скорости сталкивающихся частиц V , средний импульс вылетающих электронов \bar{k} убывает очень медленно (как $V^{1/3}$), так что критерий применимости теории $\bar{k}R_0 \ll 1$ выполняется лишь при очень малых скоростях V .

В данной работе удалось освободиться от этого ограничения, заменяя систему AB эффективным потенциалом в виде двух ям малого радиуса — приближение, которое недавно было использовано Фирсовым и Смирновым [2]. Рассматривается столкновение одинаковых атома и иона, т. е. реакция типа



Оказалось, что при распаде симметричного и антисимметричного состояний приближение нулевого радиуса действия дает для спектра вылетающих электронов разумные результаты далеко за пределами написанного выше критерия.

Антисимметричное состояние, которое при стремлении энергии связи E к нулю приводит к p -состоянию для слабо связанного электрона, дает существенно другой спектр, чем тот, который дает распад симметричного состояния, соответствующего $l = 0$ (s -состояние) и рассмотренного в [1]. Возможно обобщение результатов на состояния, соответствующие в пределе $E \rightarrow 0$ высшим значениям l .

Начальная, степенная, часть спектра электронов малой энергии не зависит от явной формы эффективной потенциальной ямы и целиком определяется первыми членами разложения $E(R)$ в окрестности R_0 . Фактически, спектр определяется лишь такими величинами, как объем фазового пространства и т. п. (подобно тому, например, как характер спектра нейтрин малой энергии при β -распаде).

Следует отметить, что если задачи о возбуждении, перезарядке и т. п. после соответствующей схематизации могут быть приведены к системе нескольких дифференциальных уравнений, то задача о взаимодействии со сплошным спектром даже после упрощений приводит к дифференциальным уравнениям в частных производных, т. е. к решению дифракционных задач, решению уравнений типа уравнения теплопроводности и т. п.

2. Уравнение движения частицы в поле движущихся потенциальных ям малого радиуса

Пусть имеется N потенциальных ям малого радиуса, положение которых характеризуется векторами $\mathbf{R}_i(t)$, $i = 1, 2, \dots, N$. Переходя к приближению нулевого радиуса действия сил (см., например, [1, 2]), получаем, что волновая функция частицы $\psi(\mathbf{r}, t)$ должна иметь в окрестности каждой ямы вид

$$\psi(\mathbf{r}, t) = A_i(t) \left[\frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}_i|} + f_i(t) \right] + O(|\mathbf{r} - \mathbf{R}_i|). \quad (1)$$

Функции $f_i(t)$ характеризуют глубину каждой ямы, которая может зависеть от времени. Если $f_i < 0$, то в изолированной яме имеется связанное состояние, если же $f_i > 0$, то яма мелкая и такого связанного состояния нет. Переход $f_i \rightarrow +\infty$ соответствует стремлению глубины ямы к нулю — волновая функция становится при этом регулярной в точке \mathbf{R}_i .

Напишем нестационарное уравнение Шредингера для этой задачи:

$$\left(-\frac{1}{2} \nabla^2 - i \frac{\partial}{\partial t} \right) \psi = 2\pi \sum_{j=1}^N A_j(t) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j(t)). \quad (2)$$

Используя функцию Грина, можно написать формальное решение этого уравнения

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi i}} \sum_{j=1}^N \int_{-\infty}^t A_j(t') \exp \left[i \frac{|\mathbf{r} - \mathbf{R}_j(t')|^2}{2(t-t')} \right] \frac{dt'}{(t-t')^{3/2}}, \quad (3)$$

из которого видно, что волновая функция может быть построена, если известны N функций от времени $A_j(t)$.

Перейдем в формуле (3) к пределу $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{R}_i(t)$, вычтем из правой и левой частей расходящийся член и учтем формулу (1). Получаем систему интегральных уравнений для функций A_i

$$\begin{aligned} f_i(t) A_i(t) = & \frac{1}{\sqrt{2\pi i}} \sum_{j=1}^N \int_{-\infty}^t \left[A_j(t') \exp \left(i \frac{|\mathbf{R}_i(t) - \mathbf{R}_j(t')|^2}{2(t-t')} \right) - \right. \\ & \left. - A_i(t) \delta_{ij} \right] \frac{dt'}{(t-t')^{3/2}}. \end{aligned} \quad (4)$$

Справедливость полученной системы легко может быть проверена для различных частных случаев. Так, если имеется одна неподвижная яма переменной глубины, то система (4) легко преобразуется к интегральному

уравнению, полученному в [1]. Если все ямы неподвижны и постоянной глубины, то, предполагая, что все $A_i(t)$ гармонически зависят от времени, приходим к алгебраической системе линейных уравнений для A_i , позволяющей найти стационарные состояния. Эту систему легко получить и прямо из условия (1). Наконец, если имеется одна равномерно движущаяся яма постоянной глубины, то для нее волновая функция может быть написана сразу, если использовать принцип Галилея. Легко проверить, что эта функция согласуется с (4).

Таким образом, решение дифференциального уравнения в частных производных мы свели к решению системы однородных интегральных уравнений Вольтерра для функций одной переменной t . Тем самым задача существенно упрощена. Уравнения эти можно решать и численно, например по методу шагов. Можно предположить, что рассмотренная здесь модель окажется полезной для самых различных задач.

3. Приближение двух ям малого радиуса

Заменим теперь реальную задачу о столкновении атома с ионом задачей о движении электрона в поле двух ям малого радиуса. Такое приближение было ранее использовано для этой задачи Смирновым и Фирсовым [2], для того чтобы оценить величину R_0 и, тем самым, сечение отрыва электрона. Динамика процесса в [2] не рассматривалась.

Строго говоря, нам нужно было бы рассмотреть две движущиеся ямы постоянной глубины, задавая траекторию их относительного движения. Однако даже в простейшем приближении прямолинейного пролета задача точно не решается. Кроме того, мы предполагаем, что ядра движутся медленно, так что процесс происходит в основном при $R \approx R_0$. Поэтому допустимо рассматривать две неподвижные ямы на расстоянии $R = R_0$ друг от друга, но переменной глубины и подобрать скорость изменения глубины ям так, чтобы энергия связи менялась со временем так же как при реальном сближении. Далее, поскольку существенно поведение термов лишь в той области, где электрон перестает быть связанным, мы можем, так же как в [1], считать f_1 и f_2 линейными функциями времени и не обращать внимания на их поведение при $t \rightarrow \pm\infty$, которое не влияет на спектр вылетевших электронов.

Наконец, мы ограничимся случаем двух одинаковых ям, т. е. будем считать $f_1 = f_2$ (реакция $A + A^- \rightarrow A + A + e$). Этот случай представляет принципиальный интерес и допускает точное решение. Полагая

$$f_1 = f_2 = \beta t, \quad A^\pm = A_1 \pm A_2, \quad \mathbf{R}_2 - \mathbf{R}_1 = \mathbf{R} = \text{const},$$

получаем из системы (4) уравнение для A^\pm :

$$\begin{aligned} \beta t A^\pm(t) = & \frac{1}{\sqrt{2\pi i}} \int_{-\infty}^t \left[A^\pm(t') - A^\pm(t) \pm \right. \\ & \left. \pm A^\pm(t') \exp\left(i \frac{R^2}{2(t-t')} \right) \right] \frac{dt'}{(t-t')^{3/2}}. \end{aligned} \quad (5)$$

Благодаря тому, что ядро интегрального уравнения зависит только от разности $t - t'$, а в левой части коэффициент при A^\pm линеен, уравнение решается по методу Лапласа. Получаем

$$A^\pm(t) = B \int_C \exp\left\{ \frac{i}{\beta} \left[\frac{v^2}{2} \beta t + \frac{v^3}{3} \pm e^{-vR} \left(\frac{1}{R^3} + \frac{v}{R^2} \right) \right] \right\} v dv. \quad (6)$$

Исследование предельного перехода $t \rightarrow -\infty$, такое же как в [1], позволяет определить контур, ветви которого уходят на бесконечность в направлениях $\arg v = -\pi/2$ и $\arg v = \pi/4$.

Подставляя полученное выражение для A в (3), получаем волновую функцию

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}, t) = & B \int_C \exp \left[\frac{i}{\beta} \left(\frac{v^3}{3} \pm \frac{e^{-vR}}{R^3} (1 + vR) \right) + \frac{iv^2}{2} t \right] \times \\ & \times \left[\frac{\exp(-v|\mathbf{r} - \mathbf{R}_1|)}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}_1|} \pm \frac{\exp(-v|\mathbf{r} - \mathbf{R}_2|)}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}_2|} \right] v dv. \end{aligned} \quad (7)$$

Из этой формулы непосредственно следует, что ψ является решением уравнения Шредингера для свободной частицы повсюду, за исключением точек $\mathbf{r} = \mathbf{R}_1$ и $\mathbf{r} = \mathbf{R}_2$.

Перейдем к импульсному представлению. Тогда

$$\begin{aligned} \varphi(\mathbf{k}, t) = & \frac{2B}{\sqrt{2\pi}} [\exp(-ik\mathbf{R}_1) \pm \exp(-ik\mathbf{R}_2)] \times \\ & \times \int_C \exp \left[\frac{i}{\beta} \left(\frac{v^3}{3} \pm \frac{e^{-vR}}{R^3} (1 + vR) \right) + \frac{iv^2}{2} t \right] \frac{v dv}{v^2 + k^2}. \end{aligned} \quad (8)$$

Наконец, буквально повторяя рассуждения, проведенные в [1], получаем, что при $t \rightarrow +\infty$ распределение импульсов для вылетевших электронов определяется вычетом подынтегрального выражения при $v = -ik$. Получаем распределение

$$\begin{aligned} w(k) = & \frac{k^2}{2\pi\beta} [1 \pm \cos(kR \cos \theta)] \times \\ & \times \exp \left[-\frac{2}{\beta} \int_0^k \left(1 \pm \frac{\sin k'R}{k'R} \right) k'^2 dk' \right], \end{aligned} \quad (9)$$

или же, после усреднения по углам,

$$\begin{aligned} w(k) = & \frac{2k^2}{\beta} \left(1 \pm \frac{\sin kR}{kR} \right) \times \\ & \times \exp \left[-\frac{2}{\beta} \int_0^k \left(1 \pm \frac{\sin k'R}{k'R} \right) k'^2 dk' \right]. \end{aligned} \quad (10)$$

Неопределенный множитель B в формуле (8) заменен в (9), (10) тем, который следует из условия нормировки.

4. Обсуждение

Прежде всего выразим входящий в окончательный результат параметр β через исходные параметры задачи: скорость сближения ядер V_R и поведение термов в окрестности точки слияния. Уравнение для определения энергии стационарного состояния частицы в поле двух одинаковых ям малого радиуса с эффективной глубиной f имеет вид (см. [2])

$$f + \gamma = \pm e^{-vR}/R, \quad E = -\gamma^2/2. \quad (11)$$

В точке, где γ, E обращаются в нуль, имеем для симметричного случая

$$f_0 = \frac{1}{R_0}, \quad \left(\frac{\partial \gamma}{\partial f} \right)_0 = -\frac{1}{2}, \quad \left(\frac{\partial \gamma}{\partial R} \right)_0 = -\left| \frac{d^2 E}{d R^2} \right|_0^{1/2} = -(E_0'')^{1/2}. \quad (12)$$

Приравнивая друг другу изменения γ , происходящие вследствие движения ядер и вследствие изменения глубины ям, получаем

$$\left(\frac{\partial \gamma}{\partial f} \right)_0 \left(\frac{df}{dt} \right)_0 = \left(\frac{\partial \gamma}{\partial R} \right)_0 \left| \frac{dR}{dt} \right|_0, \quad \beta = 2(E_0'')^{1/2}(V_R)_0. \quad (13)$$

Это определение β не содержит R_0 и отличается только множителем 2 от аналогичного параметра в [1].

Если считать kR малым и разложить в формуле (9) показатель и предэкспоненциальный множитель в ряд, оставляя по одному члену, то приходим к формуле

$$w(k) = \frac{4k^2}{\beta} \exp\left(-\frac{4k^3}{3\beta}\right), \quad (14)$$

которая, с учетом (13) в точности совпадает с формулой (13) из [1]. Тем самым подтверждается предположение, сделанное в [1], что формула (14) справедлива при достаточно малых k даже и тогда, когда величина kR_0 (k — средний импульс) не мала, а сравнима или даже больше единицы. Если же $\beta R_0^3 \ll 1$, то формула (14) применима практически при всех k , и это условие совпадает с условием (20) в [1].

Следует отметить, что симметричное связанные состояние исчезает не при сближении, а при удалении обеих потенциальных ям друг от друга $(\partial \gamma / \partial R) < 0$, и это исчезновение имеет место лишь в том случае, когда $f > 0$, т. е. для изолированной ямы не существует связанных состояний. Поэтому в этом случае неприменимо приближение двух движущихся ям постоянной глубины, и рассмотренное здесь приближение неподвижных ям переменной глубины более приспособлено для описания явления.

Для антисимметричного случая из уравнения (11) получаем

$$\left(\frac{\partial E}{\partial f} \right)_0 = -\frac{1}{R_0}, \quad f_0 = -\frac{1}{R_0}, \quad \left(\frac{\partial E}{\partial f} \right)_0 \left(\frac{df}{dt} \right)_0 = \left(\frac{\partial E}{\partial R} \right)_0 \left| \frac{dR}{dt} \right|_0. \quad (15)$$

Таким образом, параметр β имеет в этом случае вид

$$\beta = R_0 \left| \frac{\partial E}{\partial R} \right|_0 \left| \frac{dR}{dt} \right|_0 = (V_R)_0 E_0' R_0. \quad (16)$$

В случае $kR \ll 1$ мы получаем распределение

$$w(k) = \frac{k^4 R^2}{3\beta} \exp\left(-\frac{k^5 R^2}{15\beta}\right). \quad (17)$$

Таким образом, для этого случая использованное в [1] приближение неприменимо. Волновая функция слабо связанных электронов при стремлении $R \rightarrow R_0$ сохраняет антисимметрию и на больших расстояниях от ядер имеет угловую зависимость $\cos \theta$, т. е. является p -функцией. В этом случае терм, соответствующий связанным состояниям, не касается границы сплошного спектра, а, как это видно из формул (15), (16), пересекается с границей под некоторым углом. Далее этот терм продолжается в сплошном спектре и соответствует квазистационарному состоянию, которое возникает благодаря наличию центробежного потенциального барьера при $l \neq 0$ (см., например, [3]). Это приводит к некоторой стабилизации состояния электрона и к увеличению среднего импульса вылетевших электронов, как это видно из формулы (17). Для состояний с $l \neq 0$ приближение нулевого радиуса

действия непосредственно неприменимо, однако из формулы (17) видно, что если одновременно с R_0 стремить к нулю и β , так чтобы отношение R^2/β оставалось конечным, такой переход все же можно совершить.

Зависимость от угла θ в полученном распределении имеется только в предэкспоненциальном множителе. Он имеет типичный интерференционный характер и получается в результате суперпозиции двух сферических расходящихся волн e^{ikr}/r , смешенных одна относительно другой на расстояние R . Для симметричного состояния волны находятся в фазе, для антисимметричного — в противофазе. Зависимость от угла симметрична относительно $\theta = \pi/2$. Симметричное состояние дает максимум распределения импульсов при $\theta = \pi/2$, а антисимметричное — нуль. Если $kR < \pi/2$, то в интервалах $0 < \theta < \pi/2$ и $\pi/2 < \theta < \pi$ распределение меняется монотонно, если же $kR > \pi$, то появляются интерференционные максимумы и минимумы, доходящие до нуля. На самом деле эта картина будет смазываться за счет движения атома и иона и их конечных размеров, которыми мы здесь пренебрегли. Кроме того, угол θ отсчитывается от оси, соединяющей ядра при $R = R_0$, которая не совпадает с направлением движения налетающей частицы, так что при усреднении по параметрам удара произойдет дополнительное сглаживание углового распределения. Это последнее усреднение можно устраниТЬ, если регистрировать одновременно угол отклонения тяжелой частицы и направление вылетевшего электрона, т. е. использовать методику совпадений, но в данном случае это сделать очень трудно. Поэтому далее мы будем рассматривать только усредненные сечения.

5. Усреднение по параметрам удара. Эффективное сечение

Введем вместо параметра β и импульса k безразмерные величины $s = \beta R_0^3$ и $q = kR_0$. Тогда, для нормированного распределения $w(s, q)$ получаем формулу

$$w(s, q) = f'(q) s^{-1} \exp(-f(q)/s); \quad (18)$$

$$f(q) = 2/3q^3 \pm (\sin q - q \cos q). \quad (19)$$

Если учесть теперь геометрию столкновения и считать, что ион пролетает мимо атома по прямой с постоянной скоростью V , то величина $(V_R)_0$, входящая в β и s , равна $V \cos \alpha$, где α — угол между вектором \mathbf{R}_0 и направлением движения ионов.

Вводя параметр s_0 по формуле $s_0 = s / \cos \alpha$, который характеризует столкновение в целом, и предполагая, что формула (18) справедлива при всех параметрах удара ρ , получаем, после усреднения по ρ , эффективное сечение

$$\sigma(s_0, q) = 2\pi \int_0^{\pi/2} w(s_0 \cos \alpha, q) R_0 \sin \alpha R_0 \cos \alpha d\alpha; \quad (20)$$

$$\frac{\sigma(s_0, q)}{\pi R_0^2} = 2 \frac{f'(q)}{s_0} \int_0^{\pi/2} \exp\left(-\frac{f(q)}{s_0 x}\right) dx = 2 \frac{f'(q)}{s_0} F\left(\frac{f(q)}{s_0}\right); \quad (21)$$

$$F(y) = e^{-y} + y \operatorname{Ei}(-y), \quad (22)$$

причем функция $\sigma(s_0, q) / (\pi R_0^2)$ нормирована на единицу по q .

Кривые, рассчитанные по формулам (20) — (22) для симметричного и антисимметричного случаев (для $s_0 = 1$ и $s_0 = 10$), изображены соответственно на рис. 1 и 2. Для $s_0 = 10$ пунктиром проведены кривые, соответствующие приближенным формулам (14), (17), если приближенно положить

$f^+(q) = 4q^3/3$, $f^-(q) = q^5/15$. Хотя это предположение строго справедливо лишь при $s \ll 1$, из графиков видно, что даже при $s_0 = 10$ оно дает хороший результат всюду, за исключением больших q , при которых сечение уже мало. Для $s_0 = 1$ в масштабе чертежа приближенные кривые почти совпадают с точными. Отсюда видно, что приближение нулевого радиуса действия сил оказывается неожиданно хорошим даже при довольно

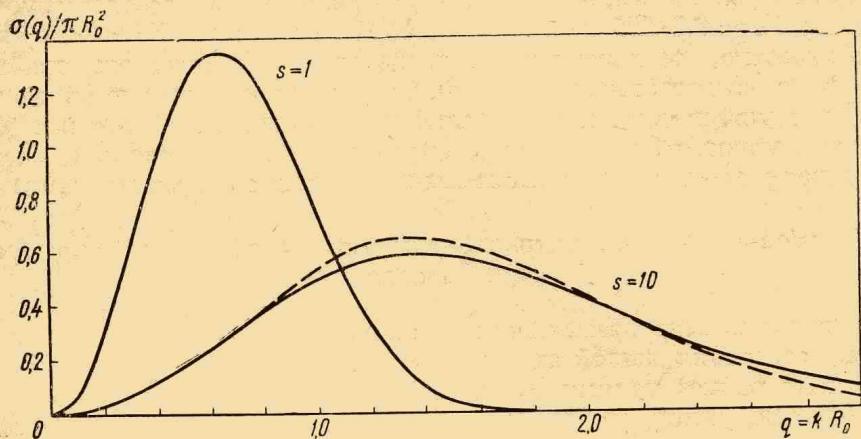


Рис. 1

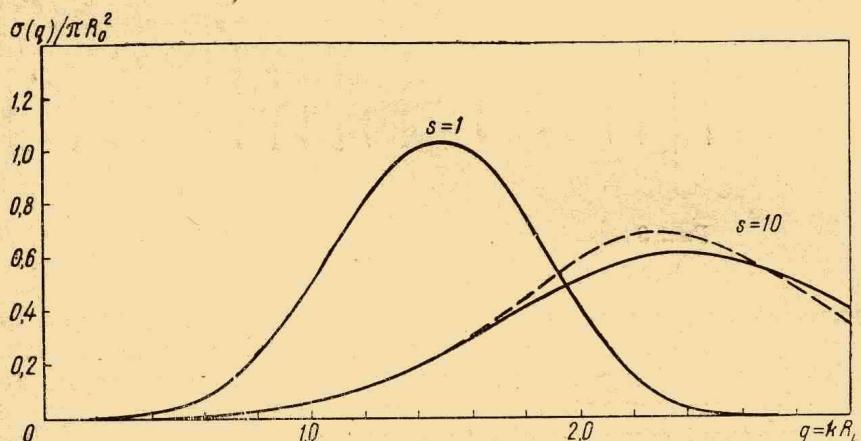


Рис. 2

больших значениях средней скорости вылетающих электронов, когда длина волн сравнима с размерами системы ($q \sim 1$). Можно думать, что и более точный учет конечного размера атомов существенно изменит полученные результаты лишь при больших q .

В реальном столкновении симметричное и антисимметричное состояния входят с одинаковым весом, так что спектр вылетающих электронов получится в результате наложения двух кривых. В частности, при определенном соотношении между параметрами E'_0 , E''_0 , R_0^+ , R_0^- можно ожидать, что в результате наложения получится кривая с двумя максимумами. К сожалению, незнание параметров E'_0 , E''_0 не дает возможности применить полученные формулы к задаче о столкновении конкретных пар атом — ион.

Для оценки E'_0 (но не E''_0) можно использовать то же приближение двух ям малого радиуса, считая, что эффективная глубина их не меняется

при сближении. Тогда [2]

$$f_0 = -R_2^{-1} = -\sqrt{2I}, \quad E_0' = R_0^{-3} = (2I)^{3/2}, \quad (23)$$

$$q = k/k_0 = k/\sqrt{2I}, \quad s_0 = VR_0 = V/\sqrt{2I},$$

где I — энергия электронного средства, а k_0 — средний импульс слабо связанных электронов. Если, например, $I = 1 \text{ эв}$, то $s_0 = 1$ соответствует скорости ядер $V_0 = 0,6 \cdot 10^8 \text{ см/сек}$, а $s_0 = 10$ — скорости $V = 6 \cdot 10^8 \text{ см/сек}$. Однако известно, что даже для ионов щелочных металлов это приближение не является достаточно хорошим. Сколько-нибудь точное определение E_0' , E_0'' требует, по-видимому, довольно громоздких вариационных расчетов. Скорее можно рассчитывать на определение этих величин из эксперимента при сравнении экспериментальных кривых с теоретическими.

6. Движение полюсов матрицы рассеяния и квазиадиабатическое приближение

В каждый момент времени стационарные, квазистационарные и виртуальные состояния нашей системы характеризуются полюсами S -матрицы или (что то же) нулями функции Йоста на комплексной плоскости E или k (см., например, [3, 4]). Приближение, которое мы рассматриваем

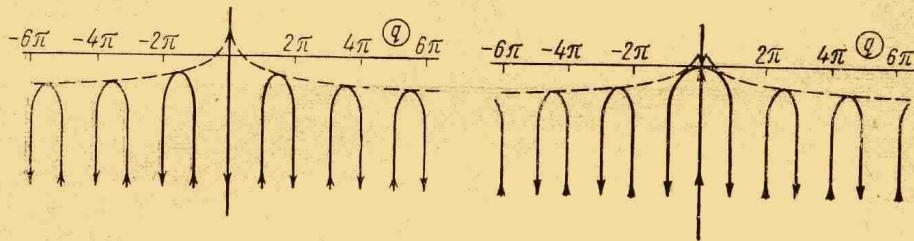


Рис. 3

Рис. 4

здесь и которое можно назвать квазиадиабатическим, состоит в том, что мы описываем процесс распада связанного состояния с точки зрения движения этих нулей (полюсов) и определенным образом схематизируем это движение. Ранее [1] была решена задача о распаде, когда учитывается только один нуль, который равномерно движется по мнимой оси в комплексной плоскости k , переходя из верхней полуплоскости (связанное состояние) в нижнюю (виртуальное состояние). Рассматриваемый здесь случай соответствует учету бесконечного числа нулей на комплексной плоскости переменной $q = kR_0$. Траектории этих нулей легко получить, если решить уравнение (11) при разных значениях параметра f , пропорционального времени t , и положить $q = iyR_0$. Для симметричного и антисимметричного случаев эти траектории изображены соответственно на рис. 3 и 4¹⁾. Для антисимметричного случая при исчезновении связанного состояния два нуля сливаются в начале координат и затем расходятся вправо и влево, образуя, как уже отмечалось, квазистационарные состояния. Приближение нулевого радиуса действия соответствует для симметричного случая учету одного, а для антисимметричного — двух из всего бесконечного числа нулей.

¹⁾ Все ветви касаются кривой $\text{Im } q = -\ln |\text{Re } q|$, которая проведена на рисунках пунктиром.

Для того чтобы то или иное приближение было применимо, нужно, чтобы принятая схема движения нулей соответствовала реальной картине в окрестности начала координат и в течение определенного промежутка времени, по прошествии которого распад в основном уже произошел. Согласно [1], это условие аналогично адабатическому критерию Месси и имеет для симметричного и, аналогично, для антисимметричного случаев соответственно вид

$$E_0''(\delta R)^3 / V \gg 1, \quad E_0'(\delta R)^2 / V \gg 1, \quad (24)$$

где δR — область, отвечающая линейному изменению f , очевидно, должна быть в свою очередь много меньше R_0 , т. е. $\delta R \ll R_0$. Возможно, однако, что формулы применимы в несколько более широком интервале, так что оба условия можно объединить и вместо (24) написать

$$V \leq E_0''R_0^3, \quad V \leq E_0'R_0^2. \quad (25)$$

Изложенный здесь метод позволяет произвести расчет также и для двух ям неодинаковой глубины, что позволило бы моделировать процесс столкновения разных атомов и ионов, однако в этом случае задача не решается в аналитическом виде и требует довольно громоздких численных расчетов.

Помимо условия (24) — (25), ограничивающего применимость теории со стороны больших скоростей, остается в силе ограничение со стороны малых скоростей [1], которое связано с тем, что мы рассматриваем ядра классически, задавая перед их движением, т. е. рассматриваем их как неограниченный источник энергии. Именно поэтому мы получили для вылетевших электронов неограниченный сверху энергетический спектр, тогда как на самом деле он ограничен законом сохранения. Однако в том случае, когда энергия сталкивающихся частиц много больше энергии электронного сродства (т. е. когда классическое рассмотрение ядер допустимо), вероятность большой передачи энергии электрону в нашем приближении настолько мала (далекая экспоненциальная область спектра), что практически неотличима от нуля. В том же случае, когда энергия сталкивающихся частиц сравнима с энергией электронного сродства (припороговая область), или же если мы специально интересуемся большой передачей энергии, необходимо явно рассматривать обмен энергией между движущимися ядрами и электроном, т. е. необходимо квантовое описание движения ядер, а рассмотренная здесь теория неприменима.

Если при дальнейшем сближении ядер в области $R < R_0$ образуется квазистационарное состояние со сравнительно большим временем жизни, то для антисимметричного случая расходящиеся из начала координат вправо и влево нули будут двигаться существенно ближе к вещественной оси, чем на рис. 4. Для симметричного случая (рис. 3) движущийся вниз нуль может также встретиться с другим нулем на мнимой полуоси в нижней полуплоскости вблизи начала координат, после чего также образуются квазистационарные состояния. В этих случаях область δR будет малой и полученные нами формулы будут справедливы лишь при достаточно малых V и s_0 .

Вместо аналитических свойств функции Иоста эту же задачу можно рассматривать с точки зрения аналитических свойств энергетических термов $U(\bar{R})$, которые являются различными значениями одной многозначной аналитической функции комплексной переменной R . Исследование спектра вылетевших при распаде электронов позволяет исследовать аналитические свойства энергии связи $E(R)$ вблизи от вещественного корня R_0 .

который является краем разреза функции $E(R)$, так что при $R < R_0$ функция $E(R)$ принимает уже, вообще говоря, комплексные значения на вещественной оси.

В заключение я благодарю Г. Ф. Друкарева и Л. Д. Фаддеева за обсуждение вопросов, рассмотренных в статье.

Ленинградский государственный
университет

Поступила в редакцию
28 апреля 1965 г.

Литература

- [1] Ю. Н. Демков. ЖЭТФ, 46, 1126, 1964.
- [2] О. Б. Фирсов, Б. М. Смирнов. ЖЭТФ, 47, 232, 1964.
- [3] Ю. Н. Демков, Г. Ф. Друкарев. ЖЭТФ, 49, 8, 1965.
- [4] Л. Д. Фаддеев. УМН, 14, 57, 1959.

ELECTRON DETACHMENT IN SLOW COLLISIONS BETWEEN NEGATIVE IONS AND ATOMS

II. ACCOUNT OF THE FINITE SIZE OF THE SYSTEM

Yu. N. Demkov

A reaction of the $A + A^- \rightarrow A + A + e$ type is considered. The effective potential of system A_2 , in the field of which a weakly bound electron moves, is represented by two short range potential wells. It is assumed that when the nuclei approach each other the bound state of A_2^- vanishes and it disintegrates. The angular and energy distributions of the emitted particles are calculated for symmetric and antisymmetric states. It is shown that account of the finite size of the system unexpectedly weakly changes the energy spectrum of the electrons. A general equation set is deduced for the motion of a particle in the field of moving short range potential wells of variable depth.