

МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ И АЛГОРИТМЫ АНАЛИЗА  
ПРОЦЕССОВ ИОНИЗАЦИИ АТОМА ГЕЛИЯ И МОЛЕКУЛ  
ВОДОРОДА С ВАРИАЦИОННЫМИ ФУНКЦИЯМИ

Чулуунбаатар О.

Объединенный институт ядерных исследований, Дубна

---

*Поступила в редакцию 20.05.2008, после переработки 02.06.2008.*

---

Представлены алгоритмы вычисления вариационных функций основного состояния атома гелия, подчиняющихся условию Като, и волновой функции в виде произведения двух модифицированных по второму аргументу кулоновских функций непрерывного спектра, описывающей движение испущенного электрона в поле двух кулоновских центров. Расчеты дифференциальных сечений ионизации атома гелия и иона водорода быстрым электроном сравниваются с современными экспериментами. Возникающие при расчете многократные интегралы с построенными функциями сводятся с помощью преобразования Фурье к трехкратным интегралам. Ядро интегралов содержит произведения гипергеометрических функций  ${}_2F_1(a, 2; c, x)$ , для вычисления которых предложен эффективный алгоритм.

Algorithms for calculations of the variational functions for ground state of helium atom slaved by Kato conditions, and wave function presented in product of two continuous spectrum Coulomb functions modified by second argument describing motion of ejected electron in the field of two Coulomb centers are presented. Calculations of differential ionization cross sections of helium atom and hydrogen ion by fast electron impact are compared with modern experiments. Originating of calculations multifold integrals with the above functions are reduced to triple integrals by means of Fourier transforms. Integrals kernel contains the hypergeometric functions  ${}_2F_1(a, 2; c, x)$ , effective algorithm for their calculation is proposed.

**Ключевые слова:** математические модели, вариационные методы, алгебраические задачи на собственные значения, численные алгоритмы, краевые задачи, процессы ионизации атомов и молекул электронным ударом.

**Keywords:** mathematical models, variational methods, algebraic eigenvalue problems, numerical algorithms, boundary problems, ionization processes of atoms and molecules by impact electrons.

## 1. Введение

Высокая чувствительность вычисленных дифференциальных сечений к выбору волновых функций начального и конечного состояния мишени была предсказана еще в пионерских расчетах процессов двухкратной ионизации атома гелия

электронным ударом при условии детектирования в эксперименте «на совпадение» рассеянного и двух испускаемых электронов [1]. Первые эксперименты такого типа были выполнены при малых значениях переданного импульса [2]. Условия эксперимента позволяли измерять сечения в абсолютных единицах, что обеспечивает достаточно строгий тест при выборе той или иной математической модели, применяемой для вычисления волновых функций начального и конечного состояния атома гелия. В недавнем эксперименте [3] были выполнены измерения сечений двухкратной ионизации атома гелия при больших значениях переданного импульса вблизи переходной области Бете, где импульс отдачи иона-остатка мал по сравнению с переданным импульсом. В этом эксперименте ( $e, 3-1e$ ) типа детектировались «на совпадение» только быстрый испускаемый и рассеянный электроны, при этом медленный испускаемый не детектировался. Можно ожидать лучшее согласие с этими экспериментальными данными, если в теоретической модели будут учтены специфические особенности электронных корреляций электронов. Одна из таких особенностей известна в литературе как условия Като [4], которым должны подчиняться точная волновая функция атома гелия в точках парных и тройных соударений электронов и ядра гелия в конфигурационном пространстве трех частиц. Представленное в данной работе исследование мотивировалось также недавней дискуссией [5, 6, 7, 8], которая возникла по поводу влияния условий Като на результаты расчетов дифференциальных сечений ( $e, 3e$ ) реакций. В частности, для вычисления дифференциальных сечений в работе [5] предлагалось использовать 3С-вариационные функции модели Плювинажа (P1). В этой модели для построения функции конечного состояния атома гелия используется 3С-функция [9], которая содержит произведение трех двухчастичных кулоновских функций, а функция начального основного состояния выбирается в виде функции типа P1 [10, 11]. Эта функция подчиняется условиям Като, однако, дает очень грубую верхнюю оценку энергии основного состояния, именно,  $E_{P1} = -2.8788$  а.е. по сравнению с удовлетворительной со спектроскопической точки зрения верхней оценки  $-2.903724$  а.е. Тем не менее, предложенная модель очень хорошо описывает большинство экспериментальных данных [2], в противоположность другим моделям [12], в которых хотя и используются более аккуратные методы построения волновых функций, но которые приводят к худшему согласию с данными эксперимента. Отметим, что в работе [7] были предложены две другие функции подчиняющиеся условиям Като. Как и в случае P1, несмотря на то, что эти функции обеспечивают грубые оценки значения энергии, в рамках принятой модели они очень хорошо описывают экспериментальные данные [2]. Таким образом, возникает вопрос: насколько важен учет условий Като при построении математических моделей процессов двухкратной ионизации атома гелия электронным ударом. Для ответа на эти вопросы были разработаны представленные ниже вариационно-итерационный алгоритм и программа вычисления таких вариационных функций, которые не только дают значения энергии с требуемым для спектроскопии числом значащих цифр, но и удовлетворяют с требуемой точностью условиям Като.

Двухцентровая задача встречается при исследовании ионизации и/или рассеяния от двух атомных мишеней быстрыми электронами и является важным случаем кулоновской задачи трех тел. За последние несколько лет был предложен ряд элегантных моделей для описания динамики испущенного электрона в ( $e, 2e$ ) эксперименте, который представляет уникальную физическую ситуацию вместе

с  $(\gamma, e)$  экспериментом, где электрон находится в области двух фиксированных ядер. В работе [13] использовались приближенная однопараметрическая волновая функция типа  $2C$  в виде произведения двух кулоновских волновых функций. Однако, вычисленные сечения расходятся с результатами полученными при использовании аппроксимации эволюции волнового пакета [14] и двухцентральной кулоновской функции, вычисленной в вытянутых сфероидальных координатах [15]. Последний метод вычисления дает правильные результаты, но его применение в случае двух атомных систем приводит к громоздким выкладкам. В данной работе построенные в замкнутом аналитическом виде параметрические асимптотические двухцентровые кулоновские функции непрерывного спектра при заданном направлении импульса рассеянного электрона использовались для анализа математических моделей, описывающих современные  $(e, 2e)$  эксперименты по ионизации молекул водорода электронным ударом. Эффективность применения этих функций по сравнению с усеченным в практических вычислениях на компьютере полным набором численных парциальных двухцентровых кулоновских функций, по которому разлагается плоская волна в направлении рассеянного электрона, была продемонстрирована при вычислении сечения однократной  $(e, 2e)$  ионизации.

Содержание работы следующее. В разделе 2 представлен алгоритм вычисления вариационных функций основного состояния атома гелия, удовлетворяющих условиям Като и их применение к вычислению многократных интегралов для дифференциальных сечений ионизации атома гелия в современных экспериментах. В разделе 3 представлен алгоритм вычисления волновой функции в виде произведения двух модифицированных по второму параметру кулоновских функций непрерывного спектра, описывающей движение уходящего электрона в поле двух кулоновских центров и ее применение к вычислению многократных интегралов для дифференциальных сечений ионизации иона водорода в современных экспериментах. Соответствующие многократные интегралы с построенными функциями сводятся с помощью преобразования Фурье к трехкратным интегралам. Ядра интегралов содержат произведение гипергеометрических функций  ${}_2F_1(a, 2; c, x)$ , для вычисления которых предложен эффективный алгоритм.

## 2. Вариационные функции основного состояния атома гелия, подчиняющиеся условиям Като

Для выяснения сформулированных выше вопросов, были построены два типа относительно простых пробных функций, подчиняющихся условиям Като, адаптированных к вариационным расчетам и дающих верхнюю оценку значения энергии с требуемой точностью. Представленный алгоритм, реализует вариационную процедуру, которая интенсивно эксплуатировалась в работах [16, 17] и продемонстрировала высокую скорость сходимости. Уравнение Шредингера для нормированных волновых функций  $\Psi \equiv \Psi(r_1, r_2, r_{12})$  запишется в виде

$$H\Psi = E\Psi, \quad \langle \Psi | \Psi \rangle = 1, \quad H = -\frac{1}{2}(\Delta_{\mathbf{r}_1} + \Delta_{\mathbf{r}_2}) - \frac{2}{r_1} - \frac{2}{r_2} + \frac{1}{r_{12}}. \quad (1)$$

В этой процедуре  $\Psi$  ищется в виде разложения по набору линейно независимых

пробных функций  $\varphi = \{\varphi_j\}_{j=1}^{j_{\max}}$  с неизвестными коэффициентами  $\mathbf{D} = \{D_j\}_{j=1}^{j_{\max}}$

$$\Psi = \sum_{j=1}^{j_{\max}} D_j \varphi_j, \quad \varphi_j = [\exp(-\alpha_j r_1 - \beta_j r_2) + \exp(-\alpha_j r_2 - \beta_j r_1)] \exp(-\gamma_j r_{12}), \quad (2)$$

где  $r_1$ ,  $r_2$  и  $r_{12} = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$  – периметрические координаты конфигурационного пространства  $\Omega \in \mathbf{R}_+^3 \otimes S^3 \in \mathbf{R}^6 \setminus \{0\}$  двух электронов в приближении бесконечно тяжелой массы ядра атома гелия при значении полного углового момента  $L = 0$ . Чтобы избежать вырождения данной линейной комбинации  $\varphi$ , вещественные параметры  $\alpha_j$ ,  $\beta_j$  и  $\gamma_j$  генерировались стандартным алгоритмом датчика псевдослучайных чисел:

$$\begin{aligned} \alpha_j &= \left\{ \frac{1}{2} j(j+1) \sqrt{p_\alpha} \right\} (A_2 - A_1) + A_1, & 0 \leq A_1 < A_2, \\ \beta_j &= \left\{ \frac{1}{2} j(j+1) \sqrt{p_\beta} \right\} (B_2 - B_1) + B_1, & 0 \leq B_1 < B_2, \\ \gamma_j &= \left\{ \frac{1}{2} j(j+1) \sqrt{p_\gamma} \right\} (C_2 - C_1) + C_1, & 0 \leq C_1 < C_2. \end{aligned} \quad (3)$$

Здесь  $\{x\}$  обозначает дробную часть вещественного значения  $x$ .  $[A_1, A_2]$ ,  $[B_1, B_2]$  и  $[C_1, C_2]$  – интервалы значений вариационных параметров, подлежащих оптимизации.  $p_\alpha$ ,  $p_\beta$  и  $p_\gamma$  – некоторые простые числа. Ниже использовались следующие значения:  $p_\alpha = 2$ ,  $p_\beta = 3$  и  $p_\gamma = 5$ . Заметим, что окончательные результаты оптимизации для  $\alpha_j$ ,  $\beta_j$  и  $\gamma_j$  практически нечувствительны к изменению вышеуказанных исходных чисел. В принципе, можно применять вариационную процедуру решения частичной задачи на собственные значения (1)–(3) с явно заданными условиями Като в виде однородных краевых условий третьего рода для искомой собственной функции [4]:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial r_i} \Big|_{r_i \rightarrow 0} = -2\Psi \Big|_{r_i \rightarrow 0} \quad (i = 1, 2), \quad \frac{\partial \Psi}{\partial r_{12}} \Big|_{r_{12} \rightarrow 0} = \frac{1}{2}\Psi \Big|_{r_{12} \rightarrow 0}. \quad (4)$$

Однако, такую процедуру трудно реализовать в практических расчетах, поскольку в этом случае волновая функция (2) должна удовлетворять двухчастичным условиям локально, т.е. в каждой точке парного удара конфигурационного пространства  $\Omega$ . Поэтому в вариационной процедуре реализуется усредненные двухчастичные условия, которые следуют из соотношений (4) и традиционно применяются в вариационных расчетах, например [16]:

$$\nu_1 = \nu_2 = \frac{\langle \Psi | \delta(\mathbf{r}_1) \frac{\partial}{\partial r_1} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \delta(\mathbf{r}_1) | \Psi \rangle} = -2, \quad \nu_{12} = \frac{\langle \Psi | \delta(\mathbf{r}_{12}) \frac{\partial}{\partial r_{12}} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \delta(\mathbf{r}_{12}) | \Psi \rangle} = \frac{1}{2}. \quad (5)$$

Эти двухчастичные условия можно рассматривать как слабую форму в пространстве  $L_2(\Omega)$  сильных условий, заданных в форме (4). Волновую функцию, удовлетворяющую двухчастичным условиям, заданным (5), будет обозначать аббревиатурой 2PC (2 points of collision). Из парных условий Като (4) можно вывести

следующие условия в точке тройного соударения частиц [18, 19]

$$\mu_1 = \mu_2 = \frac{\frac{\partial \Psi}{\partial r_1} \Big|_{r_1, r_2, r_{12} \rightarrow 0}}{\Psi \Big|_{r_1, r_2, r_{12} \rightarrow 0}} = -2, \quad \mu_{12} = \frac{\frac{\partial \Psi}{\partial r_{12}} \Big|_{r_1, r_2, r_{12} \rightarrow 0}}{\Psi \Big|_{r_1, r_2, r_{12} \rightarrow 0}} = \frac{1}{2}. \quad (6)$$

Волновую функцию, удовлетворяющую этим трехчастичным условиям, аналогично (5) в слабом смысле, будет обозначать аббревиатурой ЗРС (3 points of collision).

*2.1 Алгебраическая формулировка задачи и численный алгоритм*

В представлении (2) задача (1) с помощью принципа минимакса [20, 21] сводится к обобщенной алгебраической задаче на собственные значения при фиксированных значениях нелинейных параметров  $A_1, A_2, B_1, B_2, C_1$  и  $C_2$

$$\mathbf{HD} = \mathbf{EWD}, \quad H_{ij} = \langle \varphi_i | H | \varphi_j \rangle, \quad W_{ij} = \langle \varphi_i | \varphi_j \rangle, \quad (7)$$

где скалярное произведение задано трехкратным интегралом

$$\langle \varphi_i | \varphi_j \rangle = 8\pi^2 \int_0^\infty r_1 dr_1 \int_0^\infty r_2 dr_2 \int_{|r_1 - r_2|}^{r_1 + r_2} r_{12} dr_{12} \varphi_i \varphi_j. \quad (8)$$

Все требуемые матричные элементы в (5), (6) и (7) вычисляются по аналитическим формулам, полученным интегрированием с пробным функциям (2) в скалярном произведении (8). Следовательно, невозможно явно учесть условия Като в вариационном функционале  $F_1(\Psi) = \langle \Psi | H | \Psi \rangle$ , соответствующим задаче (2), как граничные условия. Поэтому условия Като можно использовать только как дополнительные условия, например, в виде квадратичного функционала ошибки [22]. Тогда численный вариационно-итерационный алгоритм формулируется в рамках метода Ньютона следующим образом:

**Блок 1.** Энергии  $E$  – неподвижная точка функционала  $F_1(\Psi)$ :  $E = F_1(\Psi)$ , и соответствующие коэффициенты  $D_j$  при фиксированных значениях параметров  $A_1, A_2, B_1, B_2, C_1$  и  $C_2$ , вычисляются как решения обобщенной алгебраической задачи на собственные значения (7) с помощью метода обратных итераций (частный случай метода Ньютона [23]), используя подпрограммы INVSG [21].

**Блок 2.** Для нахождения оптимальных значений параметров  $A_1, A_2, B_1, B_2, C_1$  и  $C_2$ , используем минимизацию квадратичного функционала  $F_2$ :

$$F_2 = \sum_{i=1}^8 |f_i|^2 \rightarrow \min, \quad (9)$$

где  $f_i, i = 1, \dots, 6$ , определяются как частные производные от функционала  $E = F_1(\Psi)$

$$f_1 = \frac{\partial E}{\partial A_1}, \quad f_2 = \frac{\partial E}{\partial A_2}, \quad f_3 = \frac{\partial E}{\partial B_1}, \quad f_4 = \frac{\partial E}{\partial B_2}, \quad f_5 = \frac{\partial E}{\partial C_1}, \quad f_6 = \frac{\partial E}{\partial C_2}, \quad (10)$$

с дополнительными условиями

$$f_7 = \nu_1 + 2, \quad f_8 = \nu_{12} - 0.5 \quad \text{или} \quad f_7 = \mu_1 + 2, \quad f_8 = \mu_{12} - 0.5. \quad (11)$$

В численных расчетах использовалась центральная аппроксимация второго порядка первой производной функционалов  $f_i$ ,  $i = 1, \dots, 6$ , с шагом  $10^{-6}$ . Расчеты выполнены с точностью  $\varepsilon = 10^{-12}$ , используя подпрограммы MINSQ из библиотеки Дубна ОИЯИ [24] для минимизации суммы квадратичных функционалов методом Ньютона, на каждом шаге которого 14 раз решается обобщенная алгебраическая задача на собственные значения (7) из **Блока 1**. Для достижения указанной точности  $\varepsilon = 10^{-12}$  потребовалось примерно 30 итераций.

Данная итерационная схема, включающая **Блок 1** и **Блок 2**, представляет собой дискретное представление обобщенного непрерывного аналога метода Ньютона (НАМН) [23] для функционала  $\varphi(E, \mathbf{D}, \mathbf{a})=0$ , где искомое собственное значение  $E^*$  и собственный вектор  $\mathbf{D}^*$  вычисляются минимизацией функционала  $F_1(\Psi)$ , а искомые значения компонент дополнительного вектора параметров  $\mathbf{a}^*$  вычисляются минимизацией функционала ошибок  $F_2$ .

В обоих случаях вычисленные отношения (5) и (6) при  $j_{\max} = 60$  находятся в хорошем согласии с точными значениями,  $\nu_1 = \nu_2 = \mu_1 = \mu_2 = -2$  и  $\nu_{12} = \mu_{12} = 0.5$ , в пределах 4 значащих цифр и дают соответственно верхние оценки энергии  $E = -2.903724$  а.е. и  $E = -2.903721$  а.е. с требуемой точностью в пределах 7 значащих цифр. Эти функции были затабулированы и использовались для расчетов сечений ионизации основного состояния атома гелия в работе [25] при  $j_{\max} = 10 - 60$ , позволяющих оценить области применимости модели и возможные кинематические условия проведения экспериментов.

## 2.2 Расчеты сечений ионизации атома гелия

Расчеты сечений ( $e, 3e$ ) для сравнения с данными экспериментов [2] были выполнены в первом борновском приближении по взаимодействию быстрого налетающего электрона на атом гелия. Законы сохранения импульса и энергии записываются в виде

$$\mathbf{p}_{rec} + \mathbf{p}_s = \mathbf{p}_0 - \mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2, \quad E_s = E_0 - E_1 - E_2 - V_{IP}^{2+}. \quad (12)$$

Здесь  $(E_0, \mathbf{p}_0)$ ,  $(E_1, \mathbf{p}_1)$ ,  $(E_2, \mathbf{p}_2)$  и  $(E_s, \mathbf{p}_s)$  – соответственно кинетические энергии и импульсы падающего, испускаемых и рассеянного электронов,  $V_{IP}^{2+}$  – энергия ионизации и энергия порога двукратной ионизации He (79 эВ) и  $\mathbf{p}_{rec}$  – представляет собой импульс отдачи.

Волновая функция конечного состояния непрерывного спектра атома гелия выбиралось, используя волновую функцию 3С модели [9]

$$\Psi_{3C}^-(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \exp(-i\mathbf{p}_{12}\mathbf{r}_{12})\psi^-(\mathbf{p}_1, \mathbf{r}_1)\psi^-(\mathbf{p}_2, \mathbf{r}_2)\psi^-(\mathbf{p}_{12}, \mathbf{r}_{12}), \quad (13)$$

где уходящая кулоновская волновая функция  $\psi^-(\mathbf{p}_j, \mathbf{r}_j)$  определяется в виде

$$\psi^-(\mathbf{p}_j, \mathbf{r}_j) = N(\xi_j) \exp(i\mathbf{p}_j\mathbf{r}_j) {}_1F_1(i\xi_j, 1, -i(p_j r_j + \mathbf{p}_j\mathbf{r}_j)), \quad j = 1, 2, 12. \quad (14)$$

Здесь  ${}_1F_1$  – вырожденная гипергеометрическая функция,  $N(\xi_j) = \exp(-\pi\xi_j/2) \Gamma(1 - i\xi_j)$  – нормировочная константа,  $\xi_1 = -2/p_1$ ,  $\xi_2 = -2/p_2$ ,  $\xi_{12} = 1/(2p_{12})$ , и  $\mathbf{p}_{12} = (\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2)/2$ . Восьмикратное дифференциальное сечение задавалось стандартным

выражением

$$\sigma^{(8)} = \frac{d^8 \sigma}{dE_1 dE_2 d\Omega_1 d\Omega_2 d\Omega_s} = \frac{2p_s p_1 p_2}{(2\pi)^8 p_0} |T_{fi}|^2, \quad (15)$$

$$T_{fi} = \frac{4\pi}{K^2} \int \mathbf{dr}_1 \mathbf{dr}_2 \Psi_{3C}^{-*}(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) (\exp(i\mathbf{K}\mathbf{r}_1) + \exp(i\mathbf{K}\mathbf{r}_2) - 2) \Psi(r_1, r_2, r_{12}),$$

где  $\Omega_1 = \{\theta_1, \varphi_1\}$ ,  $\Omega_2 = \{\theta_2, \varphi_2\}$  и  $\Omega_s = \{\theta_s, \varphi_s\}$  – соответственно сферические углы импульсов испущенных и рассеянного электронов, и  $\mathbf{K} = \mathbf{p}_0 - \mathbf{p}_s$  – переданный импульс. При вычислении амплитуды рассеяния,  $T_{fi}$ , используется метод, изложенный в [26] для расчета двойной ионизации атома гелия с применением функций Бонама и Коля (БК) [27] и 3С-функций для основного и конечного состояний, соответственно.

Используя преобразования Фурье, и аналитическую формулу для интегрирования

$$I(\lambda; \mathbf{p}_\tau, \mathbf{k}) = \int \frac{d\mathbf{r}}{r} \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r} - \lambda r) \psi^{-*}(\mathbf{p}_\tau, \mathbf{r}) = 4\pi N(\xi_\tau) \frac{[(\lambda - ip_\tau)^2 + k^2]^{i\xi_\tau}}{[(\mathbf{k} - \mathbf{p}_\tau)^2 + \lambda^2]^{1+i\xi_\tau}}, \quad (16)$$

находим, что в данном случае формула (15) сводится к следующему трехкратному интегралу

$$T = -\frac{4\pi}{K^2} \sum_{j=1}^{j_{\max}} D_j \frac{\partial^3}{\partial \alpha_j \partial \beta_j \partial \gamma_j} \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3} I(\gamma_j; \mathbf{p}_{12}, \mathbf{p} + \mathbf{p}_{12})$$

$$\times [I(\alpha_j; \mathbf{p}_1, \mathbf{K} - \mathbf{p})I(\beta_j; \mathbf{p}_2, \mathbf{p}) + I(\alpha_j; \mathbf{p}_1, -\mathbf{p})I(\beta_j; \mathbf{p}_2, \mathbf{K} + \mathbf{p})$$

$$+ I(\beta_j; \mathbf{p}_1, \mathbf{K} - \mathbf{p})I(\alpha_j; \mathbf{p}_2, \mathbf{p}) + I(\beta_j; \mathbf{p}_1, -\mathbf{p})I(\alpha_j; \mathbf{p}_2, \mathbf{K} + \mathbf{p})$$

$$- 2I(\alpha_j; \mathbf{p}_1, -\mathbf{p})I(\beta_j; \mathbf{p}_2, \mathbf{p}) - 2I(\beta_j; \mathbf{p}_1, -\mathbf{p})I(\alpha_j; \mathbf{p}_2, \mathbf{p})]. \quad (17)$$

Трехкратные интегралы вычислялись, используя метод адаптивного многомерного интегрирования с помощью подпрограммы D01FCF из библиотеки NAG [28], реализованной нами в комплексной арифметике.

На рис. 1 (а) показаны графики численных результатов для ( $e, 3e$ ) эксперимента, выполненных в [2], в котором все три уходящих электрона детектировались в той же плоскости. Были выбраны энергия падающего электрона  $E_0 = 5599$  эВ, энергия рассеянного электрона  $E_s = 5500$  эВ и угол рассеяния  $\theta_s = 0.45^\circ$ , при энергиях испускаемых электронов  $E_1 = E_2 = 10$  эВ, соответственно. Как видно из рисунка 2PC и 3PC функции дают почти одинаковые результаты, визуально неразличимые и очень близкие к результатам, полученным при вычислениях с ВК функцией [7]. Также показаны результаты, использующие Ле Сеч (LS) функцию [18]. Такой выбор мотивировался тем обстоятельством, что ВК функция дает лучшую точность приближения к собственному значению энергии ( $E_{BK} = -2.9035$  а.е.), но хуже удовлетворяет краевым условиям даже в точке тройного соударения частиц, хотя LS функция точно удовлетворяет краевым условиям в точке тройного соударения, но дает менее точное приближение к собственному значению энергии ( $E_{LS} = -2.9020$  а.е.). Заметим, что в случаях значений угла рассеяния,  $\theta_1 = 83^\circ$  и  $\theta_1 = 207^\circ$ , результаты вычислений, использующие P1 функцию, представленную в [5, 7], демонстрируют схожее расхождение с экспериментальными данными.

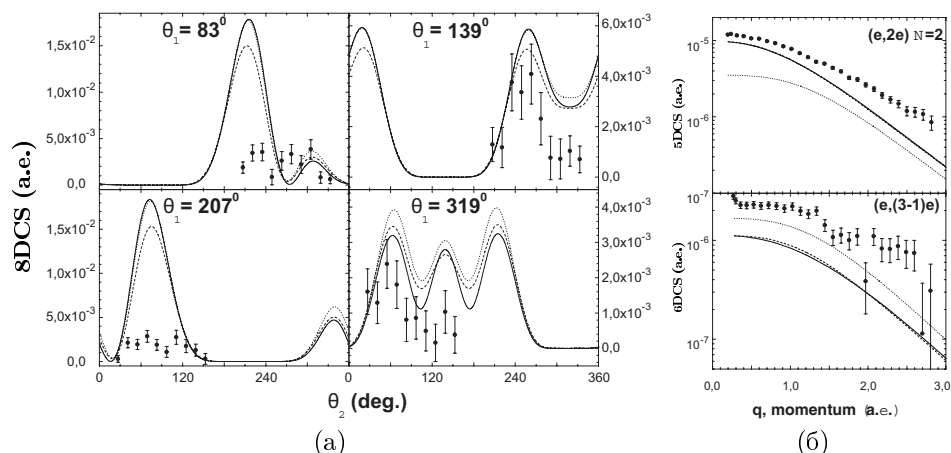


Рис. 1: (а) Сечения ионизации 8DCS для  $(e, 3e)$  эксперимента [2]. Теоретические кривые – результаты ЗС использующие следующие волновые функции основного состояния атома гелия: 2PC (сплошная линия), ВК (пунктирная линия) и LS (точечная линия). (б) Сечения ионизации 5DCS (верхний фрагмент) и 6DCS (нижний фрагмент) для  $(e, 2e)$  и  $(e, (3-1)e)$  экспериментов [3], соответственно. Теоретические кривые – результаты вычисления PWIA модели свернутые с функцией разрешения эксперимента, использующие следующие волновые функции основного состояния атома гелия: 2PC (сплошная линия), ВК (пунктирная линия) и P1 (точечная линия).

На рис. 1 (б) показаны графики результатов расчета для недавних  $(e, 3-1e)$  и  $(e, 2e)$  экспериментов, выполненных в симметричной некопланарной кинематике [3]. В этих экспериментах детектируются два быстрых уходящих электрона, а именно, рассеянный и испускаемый, имеющие равные энергии ( $E_s = E_1 = 1000$  эВ) и полярные углы ( $\theta_s = \theta_1 = 45^\circ$ ). В  $(e, 3-1e)$  случае медленный испускаемый электрон, который не детектируется, имеет энергию  $E_2 = 10$  эВ.  $(e, 2e)$  и  $(e, 3-1e)$  сечения рассеяния изучались как функции импульса  $q = |\mathbf{p}_s + \mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_0|$ . Вычисления были выполнены в плоско-волновом импульсном приближении (PWIA) и эти результаты были обрезаны с экспериментальным разрешением по импульсу (см. детали [3]). В  $(e, 3-1e)$  случае результаты вычислений, использующие 2PC и ЗС функции очень близки друг к другу, а также к результатам расчетов, использующих ВК функцию. Интересно, что вычисления с P1 функцией лучше воспроизводит данные  $(e, 3-1e)$  эксперимента в масштабе абсолютных значений, но совсем не подходит для описания в случае  $(e, 2e)$  перехода в  $N = 2$  возбужденное состояние  $\text{He}^+$ . Отмеченные расхождения между расчетами и экспериментом на рис. 1 (б), показывают, что использование PWIA модели не достаточно для описания ионизации с возбуждением и двухкратной ионизацией в рассматриваемом кинематическом режиме выполнения эксперимента. Подобная ситуация встречается в случае ионизации с возбуждением для молекулы водорода [29]. Эти наблюдения подтверждают необходимость проведения новых экспериментов при более высоких энергиях, достаточных для того, чтобы протестировать границы применимости PWIA модели.



### 3. Волновая функция типа 2С непрерывного состояния электрона в поле двух центров

Рассмотрим уравнение Шредингера для электрона, движущегося в поле двух фиксированных ядер с зарядами  $Z_1$  и  $Z_2$ :

$$\left(H - \frac{k^2}{2}\right) \Psi(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = 0, \quad H = -\frac{1}{2} \Delta_{\mathbf{r}} - \frac{Z_1}{r_1} - \frac{Z_2}{r_2}. \quad (18)$$

Его решение будем искать в виде произведения двух функций:

$$\Psi(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = \Psi_1(\mathbf{k}, \mathbf{r}_1) \Psi_2(\mathbf{k}, \mathbf{r}_2), \quad \Psi_l(\mathbf{k}, \mathbf{r}_l) = \exp\left(\frac{i\mathbf{k}\mathbf{r}_l}{2}\right) \psi(\mathbf{k}, \mathbf{r}_l), \quad l = 1, 2. \quad (19)$$

Подставляя функции (19) в уравнение (18), получаем следующее уравнение

$$\sum_{l=1}^2 \left[ \frac{1}{2} \Delta_{\mathbf{r}_l} \psi(\mathbf{k}, \mathbf{r}_l) + \left( i\mathbf{k} + \beta_l \frac{\nabla_{\mathbf{r}_n} \psi(\mathbf{k}, \mathbf{r}_n)}{2\psi(\mathbf{k}, \mathbf{r}_n)} \right) \nabla_{\mathbf{r}_l} \psi(\mathbf{k}, \mathbf{r}_l) + \frac{Z_l}{r_l} \psi(\mathbf{k}, \mathbf{r}_l) \right] = 0, \quad (20)$$

где  $\beta_l$  – коэффициенты разделения,  $\beta_1 + \beta_2 = 2$ ,  $n = 3 - l$ . Теперь предполагаем, что каждое слагаемое в квадратных скобках равно нулю, т.е.,

$$\frac{1}{2} \Delta_{\mathbf{r}_l} \psi(\mathbf{k}, \mathbf{r}_l) + \left( i\mathbf{k} + \beta_l \frac{\nabla_{\mathbf{r}_n} \psi(\mathbf{k}, \mathbf{r}_n)}{2\psi(\mathbf{k}, \mathbf{r}_n)} \right) \nabla_{\mathbf{r}_l} \psi(\mathbf{k}, \mathbf{r}_l) + \frac{Z_l}{r_l} \psi(\mathbf{k}, \mathbf{r}_l) = 0. \quad (21)$$

Заметим, что уравнение (21) при  $\beta_l = 0$  имеет аналитическое решение

$$\psi(\mathbf{k}, \mathbf{r}_l) = Q(\alpha_l, \mathbf{k}, \mathbf{r}_l) \equiv {}_1F_1(i\alpha_l, 1, -i(kr_l + \mathbf{k}\mathbf{r}_l)), \quad (22)$$

где  $\alpha_l = -Z_l/k$  – параметр Зоммерфельда. Тогда, решение  $\Psi(\mathbf{k}, \mathbf{r})$  имеет вид

$$\Psi(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = \frac{\exp(i\mathbf{k}\mathbf{r})}{(2\pi)^{3/2}} \prod_{l=1}^2 N(\alpha_l) Q(\alpha_l, \mathbf{k}, \mathbf{r}_l), \quad N(\alpha_l) = \exp\left(-\frac{\pi\alpha_l}{2}\right) \Gamma(1 - i\alpha_l), \quad (23)$$

и удовлетворяет условию ортонормировки

$$\langle \Psi(\mathbf{k}, \mathbf{r}) | \Psi(\mathbf{k}', \mathbf{r}) \rangle = \int d\mathbf{r} \Psi^*(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \Psi(\mathbf{k}', \mathbf{r}) = \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}'). \quad (24)$$

Волновая функция (23) называется волновой функцией типа 2С и является частным случаем (13). При больших значениях  $kr$  волновая функция (23) удовлетворяет уравнению (21) с точностью  $O((kr)^{-2})$ , поскольку

$$\begin{aligned} Q(\alpha_l, \mathbf{k}, \mathbf{r}_l) &= \exp(\pi\alpha_l/2) f(\mathbf{k}, \mathbf{r}_l) + O((kr_l)^{-1}), \\ \nabla_l Q(\alpha_l, \mathbf{k}, \mathbf{r}_l) &= \frac{\alpha_l(k\hat{\mathbf{r}}_l + \mathbf{k}) \exp(\pi\alpha_l/2)}{i(kr_l + \mathbf{k}\mathbf{r}_l)} f(\mathbf{k}, \mathbf{r}_l) q(\mathbf{k}, \mathbf{r}_l) + O((kr_l)^{-2}), \\ q(\mathbf{k}, \mathbf{r}_l) &= 1 - \exp(-i(kr_l + \mathbf{k}\mathbf{r}_l)) \frac{\bar{f}(\mathbf{k}, \mathbf{r}_l)}{f(\mathbf{k}, \mathbf{r}_l)}, \quad f(\mathbf{k}, \mathbf{r}_l) = \frac{\exp(-i\alpha_l \ln(kr_l + \mathbf{k}\mathbf{r}_l))}{\Gamma(1 - i\alpha_l)}. \end{aligned} \quad (25)$$

### 3.1 Модифицированная волновая функция типа 2C

Рассмотрим уравнение (21) в котором вместо  $\nabla_{\mathbf{r}_n} \psi(\mathbf{k}, \mathbf{r}_n) / \psi(\mathbf{k}, \mathbf{r}_n)$  дано его асимптотическое выражение, определяемое следующей из (25) приближенной формулой

$$\begin{aligned} \nabla_{\mathbf{r}_n} \psi(\mathbf{k}, \mathbf{r}_n) &= \frac{\alpha_n (k\hat{\mathbf{r}}_n + \mathbf{k}) \exp(\pi\alpha_n/2)}{i(kr_n + \mathbf{k}\mathbf{r}_n)} f(\mathbf{k}, \mathbf{r}_n) q(\mathbf{k}, \mathbf{r}_n) + O((kr_n)^{-2}) \\ &= \frac{k\hat{\mathbf{r}}_n + \mathbf{k}}{i(kr_n + \mathbf{k}\mathbf{r}_n)} \psi(\mathbf{k}, \mathbf{r}_n) \alpha_n q(\mathbf{k}, \mathbf{r}_n) + O((kr_n)^{-2}). \end{aligned} \quad (26)$$

Заменим величину  $\alpha_n \beta_n q(\mathbf{k}, \mathbf{r}_n)$  некоторой константой  $\varepsilon_l$  и, считая ее как малый свободный параметр, перепишем уравнение (21) в виде

$$\frac{1}{2} \Delta_{\mathbf{r}_l} \psi(\mathbf{k}, \mathbf{r}_l) + \left( i\mathbf{k} - \frac{i\varepsilon_l}{2} \frac{k\hat{\mathbf{r}}_l + \mathbf{k}}{kr_l + \mathbf{k}\mathbf{r}_l} \right) \nabla_{\mathbf{r}_l} \psi(\mathbf{k}, \mathbf{r}_l) + \frac{Z_l}{r_l} \psi(\mathbf{k}, \mathbf{r}_l) = 0, \quad (27)$$

где  $\mathbf{r}_n$  заменена на  $\mathbf{r}_l$ , поскольку  $r_n^{-1} = r_l^{-1} + O(r_l^{-2})$ . Тогда полученное уравнение имеет решение зависящее от малого параметра  $\varepsilon_l$

$$\psi(\mathbf{k}, \mathbf{r}_l) = Q(\alpha_l, \varepsilon_l, \mathbf{k}, \mathbf{r}_l) \equiv {}_1F_1(\alpha_l, 1 - i\varepsilon_l, -i(kr_l + \mathbf{k}\mathbf{r}_l)), \quad (28)$$

и совпадает с (22) при  $\varepsilon_l = 0$ . С помощью (28) получаем новое выражение волновой функции (МТСС)

$$\Psi(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = \frac{\exp(i\mathbf{k}\mathbf{r})}{(2\pi)^{3/2}} \prod_{l=1}^2 N(\alpha_l, \varepsilon_l) Q(\alpha_l, \varepsilon_l, \mathbf{k}, \mathbf{r}_l), \quad (29)$$

которое удовлетворяет условию ортонормировки (24) с нормировочным множителем

$$N(\alpha_l, \varepsilon_l) = \exp\left(-\frac{\pi\alpha_l}{2}\right) \frac{\Gamma(1 - i\alpha_l - i\varepsilon_l)}{\Gamma(1 - i\varepsilon_l)}. \quad (30)$$

Основное отличие между функциями (23) и (29) заключается в том, что в последней учитывается то, что относительное движение электрона в поле одного из кулоновских центров зависит от параметра Зоммерфельда другого центра. Наконец, выражаем волновую функцию медленного испущенного электрона в симметричной форме:

$$\chi(\mathbf{k}; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{\exp(i\mathbf{k}\mathbf{r})}{2(2\pi)^{3/2}} N(\alpha_1, \varepsilon_1) N(\alpha_2, \varepsilon_2) \sum_{l=1}^2 Q(\alpha_l, \varepsilon_l, \mathbf{k}, \mathbf{r}_l) Q(\alpha_2, \varepsilon_2, \mathbf{k}, \mathbf{r}_{3-l}). \quad (31)$$

### 3.2 Расчеты сечения ионизации иона водорода

Расчеты сечений ( $e, 2e$ ) для сравнения с теоретическими результатами работы [15] были выполнены в первом борновском приближении по взаимодействию

неполяризованного быстрого налетающего электрона на молекулу водорода. Законы сохранения импульса и энергии при фиксированном межъядерном расстоянии записываются в виде

$$\mathbf{k}_{rec} + \mathbf{k}_s = \mathbf{k}_i - \mathbf{k}_e, \quad E_i = E_s + E_e + I, \quad (32)$$

где  $(E_i, \mathbf{k}_i)$ ,  $(E_s, \mathbf{k}_s)$  и  $(E_e, \mathbf{k}_e)$  – соответственно кинетические энергии и импульсы падающего, рассеянного и испущенного электронов,  $I = 30$  эВ – пороговая энергия для испускания электрона из мишени при равновесии межъядерном расстоянии  $\rho = 2$  а.е. и  $\mathbf{k}_{rec}$  – представляет собой импульс отдачи.

В общем случае, когда два электрона и ядро  $\text{H}_2^+$  не находятся в одной плоскости, семикратное дифференциальное сечение задано выражением

$$\sigma^{(7)} = \frac{d^7\sigma}{d\Omega_\rho d\Omega_e d\Omega_s dE_s} = \frac{k_e k_s}{k_i} |T_{fi}|^2, \quad (33)$$

где  $\Omega_s = \{\theta_s, \varphi_s\}$ ,  $\Omega_e = \{\theta_e, \varphi_e\}$  – соответственно сферические углы рассеянного и испущенного электронов,  $\Omega_\rho = \{\theta_\rho, \varphi_\rho\}$  – сферический угол межъядерной оси  $\rho$ . Пренебрегая обменом между падающим и испущенным электронами, матричный элемент перехода  $T_{fi}$  имеет вид:

$$T_{fi} = -\frac{2}{K^2} \int d\mathbf{r} \exp(i\mathbf{K}\mathbf{r}) \chi^*(\mathbf{k}_e; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \varphi_{1\sigma_g}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2), \quad (34)$$

где  $\mathbf{K} = \mathbf{k}_i - \mathbf{k}_s$  – переданный импульс мишени. Радиус-векторы  $\mathbf{r}_1$  и  $\mathbf{r}_2$  испущенного электрона относительно центров  $Z_1$  и  $Z_2$  определяются по формулам  $\mathbf{r}_1 = \mathbf{r} + \rho/2$  и  $\mathbf{r}_2 = \mathbf{r} - \rho/2$ . Волновая функция  $\varphi_{1\sigma_g}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  описывающая начальное электронное основное состояние  $1\sigma_g$  мишени  $\text{H}_2^+$  была получена вариацией по двум параметрам [13]:

$$\varphi_{1\sigma_g}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = N(\rho)(\exp(-ar_1 - br_2) + \exp(-br_1 - ar_2)), \quad (35)$$

где  $a = 0.224086$  и  $b = 1.13603$  – вариационные параметры, которые определяются из условия равновесия межъядерной расстояния  $\rho = 2$  а.е.,  $N(\rho) = 0.6217$  – соответствующий нормировочный параметр. Волновая функция  $\chi(\mathbf{k}_e; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  определяется по формуле (31) и описывает состояние непрерывного спектра медленного испущенного электрона.

Подставляя функции (35) и (31) в формулу (34), получаем

$$\begin{aligned} T_{fi} &= \frac{-N(\rho)}{(2\pi)^{3/2} K^2} N(\alpha_1, \varepsilon_1) N(\alpha_2, \varepsilon_2) (I(a, b) + I(b, a)), \\ I(a, b) &= J(a, b, \alpha_1, \varepsilon_1, \alpha_2, \varepsilon_2) + J(a, b, \alpha_2, \varepsilon_2, \alpha_1, \varepsilon_1), \\ J(a, b, \alpha_1, \varepsilon_1, \alpha_2, \varepsilon_2) &= \int d\mathbf{r} \exp(i(\mathbf{K} - \mathbf{k}_e)\mathbf{r} - ar_1 - br_2) \\ &\quad \times {}_1F_1(-i\alpha_1, 1 + i\varepsilon_1, i(k_e r_1 + \mathbf{k}_e \mathbf{r}_1)) {}_1F_1(-i\alpha_2, 1 + i\varepsilon_2, i(k_e r_2 + \mathbf{k}_e \mathbf{r}_2)). \end{aligned} \quad (36)$$

Используя преобразования Фурье получаем выражение

$$\begin{aligned} J(a, b, \alpha_1, \varepsilon_1, \alpha_2, \varepsilon_2) &= \frac{\exp(i(\mathbf{K} - \mathbf{k}_e)\rho/2)}{(2\pi)^3} \int d\boldsymbol{\tau} \exp(i\boldsymbol{\tau}\rho) W_{(\alpha_1, \varepsilon_1)}(\mathbf{k}_e, \boldsymbol{\tau}, a) \\ &\quad \times W_{(\alpha_2, \varepsilon_2)}(\mathbf{k}_e, -\mathbf{K} - \boldsymbol{\tau} + \mathbf{k}_e, b). \end{aligned} \quad (37)$$

Таблица 1: Сечения ионизации 7DCS для различных значений  $Z_3 = Z_4$  при  $\mathbf{k}_e \uparrow\uparrow \mathbf{K}$ ,  $\theta_s = 9^\circ$  и  $\varphi_\rho = 0^\circ$ ,  $\theta_\rho = 0^\circ$ . В последней колонке показано разница между 7DCS вычисленным в [15] и 7DCS из предшествующей колонки.

$Z_1 = Z_2$	$Z_3 = Z_4$	$\sigma^{(7)}$ by МТСС	$\Delta\sigma^{(7)}$
1.00	0.00	0.13741	0.00813
	0.10	0.14252	0.00303
	0.16	0.14546	0.00009
	0.17	0.14594	-0.00039
	0.20	0.14737	-0.00182
	0.50	0.16043	-0.01488
	1.00	0.17777	-0.03222
$\sigma^{(7)}$ [15]		0.14555	

Подынтегральная функция  $W_{(\alpha,\beta)}(\mathbf{k}, \mathbf{q}, \lambda)$  вычисляется по аналитической формуле

$$W_{(\alpha,\beta)}(\mathbf{k}, \mathbf{q}, \lambda) = \int d\mathbf{r} \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r} - \lambda r) {}_1F_1(-i\alpha, 1 + i\beta, i(kr + \mathbf{k}\mathbf{r})) = \frac{8\pi}{(q^2 + \lambda^2)^2} \times \left( \frac{\lambda\beta}{\beta + \alpha x} - \left( \frac{\lambda\alpha x(i\beta + x + i\alpha x - 1)}{(\beta + \alpha x)(1 + i\beta)} + \frac{\alpha k}{1 + i\beta} \right) {}_2F_1(1 - i\alpha, 2; 2 + i\beta, x) \right), \quad (38)$$

где  $x = 2(\mathbf{q}\mathbf{k} + i\lambda k)/(q^2 + \lambda^2)$  и  ${}_2F_1$  – гипергеометрическая функция. Гипергеометрическая функция в (38) при  $\beta = 0$  выражается аналитически. Предложенная редукция показывает двухатомную структуру задачи появлением интерференционных эффектов, описываемых множителем  $\exp(i(\mathbf{K} - \mathbf{k}_e)\boldsymbol{\rho}/2)$ . Трехкратные интегралы вычислялись используя метод адаптивного многомерного интегрирования, с помощью подпрограмма D01FCF из библиотеки NAG [28], реализованной нами в комплексной арифметике.

Рассмотрим только случай гомоядерных двухатомных молекул, имеющих одинаковые заряды  $Z_1 = Z_2 = 1$ , которые исследовались в недавних работах [13, 14, 15] при энергиях  $E_i = 2$  кэВ и  $E_e = 50$  эВ. Это дает оптимальную величину многократного дифференциального сечения этого процесса, оправдывает пренебрежение обменными термами [13] между рассеянного и испущенного электронами в матричном элементе перехода при  $k_s \gg k_e$ , и позволяет понять, что процесс ионизации намного быстрее, чем движение ядра. Теперь рассмотрим детектирование «на совпадение» рассеянного и испущенного электронов с одним из протонов, импульс которым дает ориентация молекулярной мишени. Здесь рассматривается семикратное дифференциальное сечение для направлении межъядерной оси  $\varphi_\rho = 0^\circ$  и  $\theta_\rho = 0^\circ$ . В этом случае положим равные параметры,  $\varepsilon_1 = -Z_3/k_e = \varepsilon_2 = -Z_4/k_e$ , которые должны быть малыми из (27). Чтобы определить подходящее значение  $Z_3 = Z_4$ , в Таблице 1 сравнивали наши результаты с результатами [15] в оптимальной ситуации при разных значениях  $Z_3 = Z_4$ , когда импульс испущенного электрона равен и параллелен переданному импульсу в мишени падающим электроном, т.е.,  $K = k_e$  и  $\mathbf{k}_e \uparrow\uparrow \mathbf{K}$ . Результаты показывают, что  $Z_3 = Z_4$  не превышает 0.2. Требуемое значение  $Z_3 = Z_4$  определяется изменением знака, который соответствует окрестностей максимума 7DCS. Это обстоятельство может исполь-

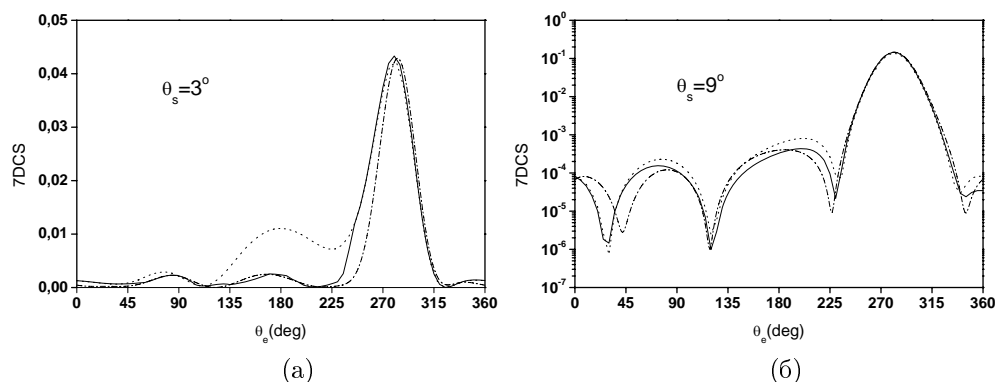


Рис. 2: Поведение сечения  $7DCS$  ионизации иона водорода в зависимости от угла  $\theta_e$  испущенного электрона с оптимальными значениями  $Z_3 = Z_4 = f_e(\theta_e)$  (сплошная линия),  $Z_3 = Z_4 = 0$  (точечная линия) и [15] (пунктирная линия). Здесь  $\varphi_p = 0^\circ$ ,  $\theta_p = 0^\circ$  и  $\theta_s = 3^\circ$  (а) и  $\theta_s = 9^\circ$  (б).

зваться как ключевой пункт для рассматриваемой проблемы и ее дальнейшему применению для более сложных диатомных системам, чтобы реализовывать эффективный алгоритм подгонки для теоретических и экспериментальных данных любых многократных дифференциальных сечений.

Чтобы, видеть эффект введения параметров  $Z_3$  и  $Z_4$  более подробно, рассматриваем вариационные семикратные дифференциальные сечения в зависимости от угла испущенного электрона для двух направлений рассеянного электрона  $\theta_s = 3^\circ$  (рис. 2 (а)) и  $\theta_s = 9^\circ$  (рис. 2 (б)) при ориентация межъядерной оси  $\varphi_p = 0^\circ$ ,  $\theta_p = 0^\circ$ . В обоих случаях видны интерференционные эффекты, возникающие из-за диатомной структуры мишени описываемые множителем  $\exp(-i(\mathbf{K} - \mathbf{k}_e)\rho/2)$ , как получены с помощью двухцентровой кулоновской функции, вычисленной в вытянутых сфероидальных координатах [15]. Улучшение волновой функции введением дополнительных параметров  $\varepsilon_l$ , очевидны из рис. 2 (а), (в), в области  $100^\circ < \theta_e < 240^\circ$  (особенно из рис. 2 (а)). Некоторые несогласия сохраняются в области  $0 < \theta_e < 100^\circ$  (особенно в рис. 2 (б)), в которые очень трудны для интерпретации, поскольку многократное дифференциальное сечение является относительно маленьким в этой области и можно объяснить по аппроксимации волновой функции (29) (см. формулу (25)).

### 3.3 Вычисление гипергеометрических функций ${}_2F_1(a, 2; c, z)$

При вычислении интегралов (37) требуется многократное вычисление гипергеометрических функций  ${}_2F_1(a, 2; c, z)$  при  $c \neq 2$  и  $c \neq 1$ . Обычно для этой цели используется интегральное представление в комплексной плоскости  $z$ . В этом случае требуются значительные вычислительные и временные ресурсы. Поэтому предложен более эффективный алгоритм, использующий формулы линейных преобразований в комплексной плоскости  $z$ , позволяющие использовать быстро сходящиеся ряды в различных областях, тем самым снижая временные затраты.

**Шаг 1.** При  $|z| \leq 1/2$  для  ${}_2F_1(a, 2; c, z)$ , используем усеченный ряд Гаусса

$${}_2F_1(a, 2; c, z) = \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(a)} \sum_{n=0}^{n_{\max}} \frac{\Gamma(a+n)}{\Gamma(c+n)} (n+1)z^n, \quad (39)$$

который достаточно быстро сходится<sup>1</sup>.

**Шаг 2.** Для вычисления  ${}_2F_1(a, 2; c, z)$  при  $|z| > 1/2$  используем формулы линейного преобразования [30]

$${}_2F_1(a, 2; c, z) = \begin{cases} \frac{\Gamma(c)\Gamma(2-a)}{\Gamma(c-a)} (-z)^{-a} \left(1 - \frac{1}{z}\right)^{c-a-1} \left(1 - \frac{1+a-c}{a-1} \frac{1}{1-z}\right) + \frac{(c-1)(c-2)}{(a-1)(a-2)} (-z)^{-2} {}_2F_1\left(3-c, 2; 3-a, \frac{1}{z}\right), & \left|\frac{1}{z}\right| \leq \frac{1}{2}, \\ \frac{\Gamma(c)\Gamma(2+a-c)}{\Gamma(a)} (1-z)^{c-a-2} z^{2-c} \left(1 - \frac{c-2}{c-a-1} \frac{z-1}{z}\right) + \frac{(c-1)(c-2)}{(c-a-1)(c-a-2)} {}_2F_1\left(a, 2; 3+a-c, 1-z\right), & |1-z| \leq \frac{1}{2}, \\ \frac{\Gamma(c)\Gamma(2-a)}{\Gamma(c-a)} (1-z)^{-a} \left(\frac{z}{z-1}\right)^{2-c} \left(1 - \frac{c-2}{a-1} \frac{1}{z}\right) + \frac{(c-1)(c-2)}{(a-1)(a-2)} (1-z)^{-2} {}_2F_1\left(c-a, 2; 3-a, \frac{1}{1-z}\right), & \left|\frac{1}{1-z}\right| \leq \frac{1}{2}, \\ \frac{\Gamma(c)\Gamma(2+a-c)}{\Gamma(a)} (1-z)^{c-a-2} z^{a-c} \left(\frac{1}{z}\right)^{a-1} \left(1 - \frac{1-a}{c-a-1} (1-z)\right) + \frac{(c-1)(c-2)}{(c-a-1)(c-a-2)} z^{-a} {}_2F_1\left(a, 1+a-c; 3+a-c, 1-\frac{1}{z}\right), & \left|1-\frac{1}{z}\right| \leq \frac{1}{2}, \\ (1-z)^{-2} {}_2F_1\left(c-a, 2; c, \frac{z}{z-1}\right), & \left|\frac{z}{z-1}\right| \leq \frac{1}{2}. \end{cases} \quad (40)$$

Гипергеометрические функции в (40) вычисляются по формуле (39). Эти преобразования дают возможность вычислять гипергеометрическую функцию  ${}_2F_1(a, 2; c, z)$  вне областей I и II, а также при всех вещественных значениях  $z$ , показанных на рис. 3 (а).

**Шаг 3.** Рассмотрим круги радиуса  $1/2$  с центрами в точках  $(\operatorname{Re}z_j, \operatorname{Im}z_j)$ ,  $j = 1, \dots, 21$  при  $\operatorname{Im}z \neq 0$  и  $z \in \text{I} \cup \text{II}$ :

$$\begin{aligned} z_1 &= 1/2 + 2i, z_2 = 3/2i, z_3 = 1 + 3/2i, z_4 = -1/2 + i, z_5 = 1/2 + i, \\ z_6 &= 3/2 + i, z_7 = -1 + 1/2i, z_8 = 1/2i, z_9 = 1 + 1/2i, z_{10} = 2 + 1/2i, \\ z_{21-i} &= z_i^*, i = 1, \dots, 10, z_{21} = 1/2. \end{aligned} \quad (41)$$

Можно показать, что эти круги полностью покрывают области I и II (см. 3 рис. (б)). Кроме того, выполняется условие  $\max_{1 \leq i \leq 20} (|1 - z_j|, |z_j|) > 1$ . Тогда для каждого значения  $z \in \text{I} \cup \text{II}$  находим оптимальную точку  $z_o$ :  $z_o \in \{z_1, \dots, z_{21}\}$ , определяемую из условия  $\min_{1 \leq i \leq 21} |z - z_i| \leq 1/2$ . Если  $z_o = z_{21}$ , то эту точку заменим на одну из точек набора  $\{z_8, z_9, z_{12}, z_{13}, z_{22}, z_{23}\}$ , определяемую из условия  $1/2 < \min(|z - z_8|, |z - z_9|, |z - z_{12}|, |z - z_{13}|, |z - z_{22}|, |z - z_{23}|) \leq \sqrt{5}/4 \approx 0.56$ , где  $z_{22} = 0$  и  $z_{23} = 1$ . Затем используем разложение в усеченный ряд Тейлора в

<sup>1</sup>Машинная точность в наших расчетах,  $\varepsilon = 2 \cdot 10^{-16}$ , обычно достигается при  $n_{\max} < 40$ .

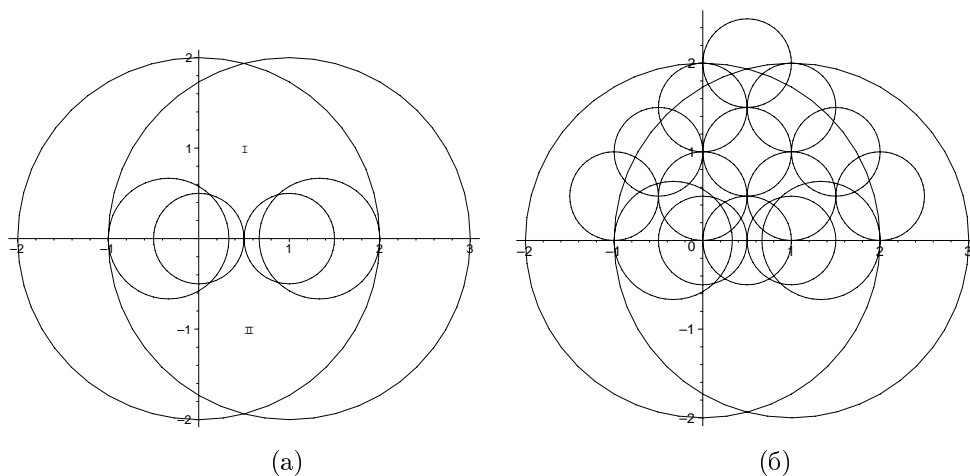


Рис. 3: Границы областей сходимости рядов (39), (40) и (42).

окрестности найденной точки  $z_o$

$$\begin{aligned}
 & {}_2F_1(a, 2; c; z) \\
 = & \begin{cases} \sum_{n=0}^{n_{\max}} \frac{d^n {}_2F_1(a, 2; c; z)}{dz^n} \Big|_{z=z_o} \frac{(z-z_o)^n}{n!}, & |1-z_o| \geq 1, \\ \frac{\Gamma(c)\Gamma(2+a-c)}{\Gamma(a)} (1-z_o)^{c-a-2} z_o^{2-c} \left(1 - \frac{c-2}{c-a-1} \frac{z_o-1}{z_o}\right) \\ + \frac{(c-1)(c-2)}{(c-a-1)(c-a-2)} \sum_{n=0}^{n_{\max}} \frac{d^n {}_2F_1(a, 2; 3+a-c, 1-z)}{dz^n} \Big|_{z=z_o} \frac{(z-z_o)^n}{n!}, & |z_o| \geq 1. \end{cases} \quad (42)
 \end{aligned}$$

Производные от гипергеометрических функций вычисляются по формулам

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{n!} \frac{d^n {}_2F_1(a, 2; c; z)}{dz^n} &= \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(a)} \frac{\Gamma(a+n)(1+n)}{\Gamma(c+n)} (1-z)^{c-a-2-n} \\
 &\quad \times {}_2F_1(c-a, c-2; c+n, z), \quad (43) \\
 \frac{1}{n!} \frac{d^n {}_2F_1(a, 2; c; 1-z)}{dz^n} &= (-1)^n \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(a)} \frac{\Gamma(a+n)(1+n)}{\Gamma(c+n)} z^{c-a-2-n} \\
 &\quad \times {}_2F_1(c-a, c-2; c+n, 1-z).
 \end{aligned}$$

Из формулы (43) видно, что абсолютные значения коэффициентов в разложениях (42) монотонно убывают с возрастанием  $n$ , начиная с некоторого номера  $n_0$ . Поэтому, для вычисления гипергеометрической функции  ${}_2F_1(a, 2; c; z)$ , используются заранее вычисленные с помощью подпрограммы HYPGEO [31] значения гипергеометрических функций и их производных из формулы (42) в указанных выше точках  $z_j, j = 1, \dots, 20, 22, 23$ .

Описанный выше алгоритм реализующие Шаги 1, 2 и 3 позволяет экономить время вычисления примерно в 3 раза, чем прямое использование подпрограммы HYPGEO при каждом значении  $z$  из круга  $|z| \leq 1$ , и, используя линейное преобразование [30], при  $|z| > 1$ .

## Заклучение

Построен вариационно-итерационный алгоритм, реализованный в виде программы на языке Фортран, для вычисления в экспоненциальном базисе функций основного состояния атома гелия, удовлетворяющих условиям Като (как в слабом, так и в сильном смысле), которые использовались для расчетов  $(e, 3 - 1e)$  и  $(e, 2e)$  сечений ионизации атома гелия [2, 3]. Преимущество построенных функций состоит в существенном понижении кратности интегралов, возникающих при вычислении сечений ионизации, используя аналитически метод интегрирования, а именно, с шести до трех. Из анализа результатов следует, что в моделях рассмотренных экспериментов условия типа Като не играют значительной роли, а наблюдаемое рассогласование между данными расчетов и экспериментов связано с выбором приближенной модели для волновой функции конечного состояния [3, 6].

Построены в замкнутом аналитическом виде параметрические асимптотические двухцентровые кулоновские функции непрерывного спектра при заданном направлении импульса рассеянного электрона. Они использовались для анализа математических моделей, описывающих современные  $(e, 2e)$  эксперименты по ионизации молекул водорода электронным ударом. Эффективность применения этих функций по сравнению с усеченным в практических вычислениях на компьютере полным набором численных парциальных двухцентровых кулоновских функций, по которому разлагается плоская волна в направлении рассеянного электрона, была продемонстрирована при вычислении сечения однократной  $(e, 2e)$  ионизации. Проведено сравнение с результатами недавних  $(e, 2e)$  экспериментов, позволившее выявить двухцентровые интерференционные эффекты. Построенные функции использовались для расчетов сечений  $(e, 2e)$  и  $(e, 3 - 1e)$  ионизации молекулы водорода, азота и атома гелия при больших значениях переданного импульса. С помощью созданного пакета программ вычисления многократных интегралов до десятого порядка в виде произведения последовательных четырех- и трехкратных интегралов, позволяющих применять MPI технологии, апробированы в расчетах 2007г., выполненных в Centre Informatique National de l'enseignement supérieur, Франция.

Работа выполнена в рамках темы ОИЯИ «Математическая поддержка экспериментальных и теоретических исследований, проводимых ОИЯИ 09-6-1060-2005/2010» и при поддержке гранта РФФИ «Математическое моделирование динамики легких атомов и молекул под действием быстрых частиц, лазерных импульсов и магнитных полей, 08-01-00604-а».

## Список литературы

- [1] Joulakian B. and Dal Cappello C. Theoretical study of the optimal conditions for the measurement of the differential cross section of the double ionization of the helium by fast electrons. *Phys. Rev. A*, v. 47, 1993, pp. 3788–3795.
- [2] Lahmam-Bennani A. et al. Origin of dips and peaks in the absolute fully resolved cross sections for the electron-impact double ionization of He. *Phys. Rev. A*, v. 59, 1999, pp. 3548–3555.



- [3] Watanabe N. et al. ( $e, 2e$ ) and ( $e, 3 - 1e$ ) studies on double processes of He at large momentum transfer. *Phys. Rev. A*, v. 72, 2005, pp. 032705–1–11.
- [4] Kato T. On the eigenfunctions of many-particle systems in quantum mechanics. *Commun. Pure Appl. Math.*, v. 10, 1957, pp. 151–177.
- [5] Jones S. and Madison D.H. Role of the ground state in electron-atom double ionization. *Phys. Rev. Lett.*, v. 91, 2003, pp. 073201–1–4.
- [6] Berakdar J. Comment on «Role of the ground state in electron-atom double ionization». *Phys. Rev. Lett.*, v. 92, 2004, pp. 149301–1–1.
- [7] Ancarani L.U. et al. Role of the helium ground state in ( $e, 3e$ ) processes. *Phys. Rev. A*, v. 70, 2004, pp. 012711–1–10.
- [8] Jones S. et al. Three-Coulomb-wave Pluvinage model for Compton double ionization of helium in the region of the cross-section maximum. *Phys. Rev. A*, v. 72, 2005, pp. 012718–1–3.
- [9] Brauner M. et al. Triply-differential cross sections for ionisation of hydrogen atoms by electron and positrons. *J. Phys. B*, v. 22, 1989, pp. 2265–2287.
- [10] Pluvinage P. Fonction d'onde approchée a un parametre pour l'état fondamental des atomes a deux electrons. *Ann. Phys. (Paris)*, v. 5, 1950, pp. 145–152.
- [11] Pluvinage P. Nouvelle famille de solutions approchées pour certaines equations de Schrödinger non separables. Application a l'état fondamental de l'hélium *J. Phys. Radium*, v. 12, 1951, pp. 789–792.
- [12] Kheifets A. et al. A comparative experimental and theoretical investigation of the electron-impact double ionization of He in the keV regime. *J. Phys. B*, v. 32, 1999, pp. 5047–5065.
- [13] Joulakian B. et al. Dissociative ionization of  $H_2^+$  by fast-electron impact: Use of a two-center continuum wave function. *Phys. Rev. A*, v. 54, 1996, pp. 1473–1479.
- [14] Serov V.V. et al. Wave-packet evolution approach to ionization of the hydrogen molecular ion by fast electrons. *Phys. Rev. A*, v. 63, 2001, pp. 062711–1–8.
- [15] Serov V.V. et al. ( $e, 2e$ ) ionization of  $H_2^+$  by fast electron impact: Application of the exact nonrelativistic two-center continuum wave. *Phys. Rev. A*, v. 65, 2002, pp. 062708–1–7.
- [16] Frolov A.M. Two-stage strategy for high-precision variational calculations. *Phys. Rev. A*, v. 57, 1998, pp. 2436–2439.
- [17] Korobov V.I. Coulomb three-body bound-state problem: Variational calculations of nonrelativistic energies. *Phys. Rev. A*, v. 61, 2000, pp. 064503–1–3.
- [18] Le Sech C. Accurate analytic wavefunctions for two-electron atoms. *J. Phys. B*, v. 30, 1997, pp. L47–L50.
- [19] Popov Yu.V. and Ancarani L.U. Rigorous mathematical study of the He bound states. *Phys. Rev. A*, v. 62, 2000, pp. 042702–1–9.
- [20] Рид М. и Саймон Б. Методы современной математической физики. Анализ операторов. Т.4. Москва, Мир, 1982.
- [21] Коробов В.И. Вариационный метод решения квантовой задачи трех тел и его применение в теории  $\mu$ -катализа. Дисс. канд.физ.-мат. наук, Дубна, 1988.

- 
- [22] Васильев Ф.П. Методы оптимизации. Москва, Факториал Пресс, 2002.
- [23] Пузынин И.В. и др. О методах вычислительной физики для исследования моделей сложных физических процессов. ЭЧАЯ, т. 38, 2007, сс. 144–232.
- [24] <http://www.jinr.ru/programs/dubna.htm>
- [25] Chuluunbaatar O. et al. Role of the cusp conditions in electron-atom double ionization. *Phys. Rev. A*, v. 74, 2006, pp. 014703–1–4.
- [26] Kornberg M.A. and Miraglia J.E. Double photoionization of helium: Use of a correlated two-electron continuum wave function. *Phys. Rev. A*, v. 48, 1993, pp. 3714–3719.
- [27] Bonham R.A. and Kohl D.A. Simple correlated wavefunctions for ground state of heliumlike atoms. *J. Chem. Phys.*, v. 45, 1966, pp. 2471–2473.
- [28] <http://www.nag.co.uk/>
- [29] Takahashi M. et al. ( $e, 2e$ ) ionization-excitation of  $H_2$ . *Phys. Rev. A*, v. 68, 2003, pp. 042710–1–7.
- [30] Абрамовиц М. и Стиган И. Справочник по специальным функциям. Москва, Наука 1979.
- [31] Press W.H. et al. *Numerical Recipes: The Art of Scientific Computing*. Cambridge University Press, Cambridge, 1986.