

МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
им. М.В. Ломоносова

Научно-исследовательский институт ядерной физики
им. Д.В. Скобельцына

На правах рукописи

Савельев Василий Иванович

ИЗУЧЕНИЕ ДВИЖЕНИЯ КВАНТОВЫХ ЧАСТИЦ
В АТОМНЫХ СТРУКТУРАХ ПРИ ПОМОЩИ ЧИСЛЕННОГО
РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЯ ШРЁДИНГЕРА

Специальность: 01.04.04 – физическая электроника

Автореферат диссертации на соискание ученой
степени кандидата физико-математических наук

Москва – 2007

Работа выполнена на кафедре общей и теоретической физики ГОУ ВПО «Чувашский государственный педагогический университет им. И.Я. Яковлева»

Научный руководитель:

доктор физико-математических наук, профессор
Филиппов Геннадий Михайлович

Официальные оппоненты:

доктор физико-математических наук, профессор
Насонов Николай Николаевич

кандидат физико-математических наук,
ведущий научный сотрудник
Похил Григорий Павлович

Ведущая организация:

«МАТИ» – Российский государственный технологический
университет им. К.Э. Циолковского

Защита состоится « 01 » ноября 2007 г. в 14 час. на заседании
диссертационного совета К 501.001.06 в НИИЯФ МГУ.

Адрес: 119991, г. Москва, Ленинские горы, НИИЯФ МГУ, 19-й
корпус, ауд. 2-15.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке НИИЯФ МГУ.

Автореферат разослан « 28 » сентября 2007 г.

Ученый секретарь диссертационного совета
кандидат физико-математических наук

 О.В. Чуманова

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы. Подавляющее большинство проблем квантовой механики, как правило, не имеет точных аналитических решений. Часть таких задач решается или с использованием упрощенных математических моделей, не отражающих всю полноту проблемы, или с использованием медленно сходящихся рядов теории возмущений. С развитием компьютерных методов научных исследований становится очевидным, что, применяя ЭВМ, мы способны решать значительно более широкий класс задач, чем это было возможно до сих пор при помощи аналитических или модельных методов расчета. Неоспоримым преимуществом аналитических методов является то, что они позволяют получить общее решение задачи, но численные методы позволяют исследовать даже те проблемы, которые не могут быть описаны ни точными, ни приближенными аналитическими методами.

В последнее время численные методы часто используются при решении квантовомеханических задач. В большинстве случаев это стационарные задачи. При решении эволюционных задач обычно применяются квазиклассическое приближение или метод молекулярной динамики. Точное решение эволюционных задач обычно сопряжено с большими вычислительными затратами. Тем не менее, бурно развивающиеся возможности вычислительных машин позволяют справляться с теми задачами, которые в недалеком прошлом находились за пределом возможностей ПЭВМ.

Наиболее естественным и точным способом исследования эволюционных задач квантовой механики является решение нестационарного уравнения Шрёдингера, так как вычисление волновой функции дает максимально возможное полное описание квантовой системы.

Целью диссертационной работы является исследование некоторых нерешенных проблем атомной физики на основе численного решения многомерного нестационарного уравнения Шрёдингера и развитие техники проведения расчетов такого типа.

Направление и объект исследований. В данной диссертационной работе исследуются физические системы, состоящие

из частиц двух типов: а) квантовых частиц, движение которых необходимо описывать на основе квантовой механики; б) частиц с относительно слабо выраженными квантовыми свойствами в рассматриваемой задаче.

Так, в работе исследованы столкновения атома водорода и протона в области промежуточных энергий, когда относительная скорость тяжелых частиц соизмерима со скоростями электронов на боровских орбитах. Описано основное состояние однократно ионизированной молекулы водорода, продемонстрирована возможность расчета многомерного туннельного эффекта и представлены различные подходы к изучению систем, состоящих из двух квантовых частиц.

Научная новизна работы состоит в применении численных методов решения многомерного уравнения Шрёдингера в совокупности с другими численными методами к задачам физики атомных столкновений и физической электроники.

Научная и практическая значимость работы. Полученные результаты свидетельствуют о применимости использованных в работе методов для исследования широкого круга задач квантовой физики и, в частности, физической электроники, и позволяют в полной мере использовать возможности современных ЭВМ для решения этих проблем.

Достоверность результатов подтверждается согласием расчетных данных с экспериментальными данными для тех решенных в работе задач, для которых они известны, а также внутренней согласованностью и логической завершенностью применяемых математических моделей.

Личный вклад автора заключается в развитии математических моделей, разработке и тестировании компьютерных программ, выполнении численного моделирования, анализе промежуточных и окончательных результатов.

Основные положения, выносимые на защиту.

- Результаты исследования процессов рассеяния атома водорода на протоне. Произведенная оценка сечения перезарядки при рассеянии хорошо согласуется с экспериментальными данными.
- Получена и исследована осцилляционная зависимость сечения перезарядки при рассеянии протона на атоме водорода на угол 3° , находящаяся в хорошем согласии с экспериментальными данными.
- Путем введения комплексного времени в нестационарное уравнение Шрёдингера рассчитана волновая функция основного состояния электрона в ионе H_2^+ , находящаяся в хорошем согласии с экспериментом.
- Продемонстрирована возможность расчета многомерного туннельного эффекта.
- Проанализированы некоторые подходы к исследованию систем, состоящих из двух квантовых частиц.

Апробация работы. Основные результаты диссертации и работа в целом докладывались на

- XXX Международной конференции по физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами (г. Москва, НИИЯФ МГУ, май 2000 г);
- Международной конференции по ядерной физике «Кластеры в ядерной физике» (г. Санкт-Петербург, 2000 г);
- XXXII Международной конференции по физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами (г. Москва, НИИЯФ МГУ, май 2002 г);
- XVI Международной конференции «Взаимодействие ионов с поверхностью. ВИП-2003» (г. Звенигород, август 2003 г);
- XXXIV Международной конференции по физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами (г. Москва, НИИЯФ МГУ, май 2004 г);
- XXXV Международной конференции по физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами (г. Москва, НИИЯФ МГУ, май 2005 г);
- XVII Международной конференции «Взаимодействие ионов с поверхностью. ВИП-2005» (г. Звенигород, август 2005 г).

- XXXVI Международной конференции по физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами (г. Москва, НИИЯФ МГУ, май 2006 г);

Публикации. По теме диссертации опубликовано 7 статей, в том числе 5 статей в академических журналах и 2 статьи в материалах конференций. Полный список публикаций приведен в конце автореферата.

Объем диссертации. Диссертационная работа состоит из введения, трех глав, заключения и списка цитированной литературы. Диссертация содержит 87 страниц, 30 рисунков и список цитируемой литературы из 47 наименований.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во **введении** обоснована актуальность темы, кратко сформулированы цели и существенные результаты, полученные в диссертации.

В **первой** главе приведен краткий обзор аналитических методов изучения атомных столкновений. Приведены критерии применимости широко распространенных методов и подходов. Приведено краткое описание методов изучения квантовых систем, состоящих из небольшого числа частиц, и не поддающихся точному аналитическому описанию, в частности атомных столкновений в области промежуточных энергий. Дан краткий обзор работ, отражающих современное состояние теоретических подходов и расчетных методов для исследования таких систем.

Во **второй** главе рассмотрены использованные в работе методы изучения квантовых систем на основе численного решения нестационарного уравнения Шрёдингера.

В разделе **2.1** рассмотрены непосредственно используемые в данной работе **методы решения нестационарного уравнения Шрёдингера**. Для определенности рассмотрим эволюцию волновой

функции электрона в потенциальном поле $U(x, y, z; t)$. Волновая функция определяется трехмерным нестационарным уравнением Шрёдингера:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x, y, z; t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta \Psi(x, y, z; t) + U(x, y, z; t) \Psi(x, y, z; t), \quad (2.1)$$

где x , y и z – пространственные координаты частицы, t – время, $\Psi(x, y, z; t)$ – волновая функция электрона, $U(x, y, z; t)$ – потенциальная энергия электрона, $\hbar = 1.055 \cdot 10^{-34}$ Дж·с – постоянная Планка, $m_e = 9.11 \cdot 10^{-31}$ кг – масса электрона, Δ – оператор Лапласа.

Существует немало методов решения нестационарного уравнения Шрёдингера. Все методы, так или иначе, используют сеточные значения волновой функции Ψ . Поэтому введем сетку:

$$\begin{aligned} x_i &= x_c + (i - n_x/2)h, \quad i = \overline{0, n_x}, \\ y_j &= y_c + (j - n_y/2)h, \quad j = \overline{0, n_y}, \\ z_k &= z_c + (k - n_z/2)h, \quad k = \overline{0, n_z}, \\ t_\nu &= \nu\tau, \quad \nu = 0, 1, 2, \dots, \end{aligned} \quad (2.2)$$

где h и τ – шаги сетки по пространственным координатам и времени соответственно; x_c , y_c и z_c – центр сетки по пространственным координатам. Значение какой-либо функции в узлах сетки (2.2) обозначается тремя пространственными индексами ijk снизу и индексом времени ν сверху, например:

$$\Psi_{ijk}^\nu(x_i, y_j, z_k; t_\nu). \quad (2.3)$$

В работе в основном использовались следующие две разностные схемы.

Разностная схема 1. Данный метод основан на последовательном приближении решения на следующем временном шаге по каждой координате¹:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\Phi_{ijk} - \Psi_{ijk}^\nu}{\tau} &= -\frac{\hbar^2}{2m_e} (\Lambda_x \Phi_{ijk} + \Lambda_y \Psi_{ijk}^\nu + \Lambda_z \Psi_{ijk}^\nu) + \\ &+ \sigma U_{ijk}^\nu \Psi_{ijk}^\nu + (1 - \sigma) U_{ijk}^{\nu+1} \Phi_{ijk}, \end{aligned} \quad (2.4a)$$

¹ Данная разностная схема разработана Самариним В.В. и впервые была опубликована в работе [1].

$$i\hbar \frac{X_{ijk} - \Psi_{ijk}^v}{\tau} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} (\Lambda_x \Phi_{ijk} + \Lambda_y X_{ijk} + \Lambda_z \Psi_{ijk}^v) + \sigma U_{ijk}^v \Psi_{ijk}^v + (1-\sigma) U_{ijk}^{v+1} X_{ijk}, \quad (2.4б)$$

$$i\hbar \frac{\Psi_{ijk}^{v+1} - \Psi_{ijk}^v}{\tau} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} (\Lambda_x \Phi_{ijk} + \Lambda_y X_{ijk} + \Lambda_z \Psi_{ijk}^{v+1}) + \sigma U_{ijk}^v \Psi_{ijk}^v + (1-\sigma) U_{ijk}^{v+1} \Psi_{ijk}^{v+1}, \quad (2.4в)$$

где Ψ_{ijk}^v – значение сеточной функции, аппроксимирующей значение волновая функция электрона в точке с координатами (x_i, y_j, k_k) момент времени t_v ; Φ_{ijk} и X_{ijk} – временные вспомогательные массивы; Λ_x , Λ_y и Λ_z – разностные операторы, аппроксимирующие вторые производные по декартовым координатам. Например,

$$\Lambda_x \Phi_{ijk} = \frac{\Phi_{i-1,j,k} - 2\Phi_{ijk} + \Phi_{i+1,j,k}}{h^2}. \quad (2.5)$$

Разности вида $\frac{\Psi_{ijk}^{v+1} - \Psi_{ijk}^v}{\tau}$ аппроксимируют частную производную по времени. Данная схема аппроксимирует исходную дифференциальную задачу со вторым порядком по h и первым – по τ .

В ходе расчета норма волновой функции

$$\rho = \sum_{i,j,k} \Psi_{ijk}^{*v} \Psi_{ijk}^v h^3 \approx \iiint \Psi^*(x, y, z; t_v) \Psi(x, y, z; t_v) dx dy dz \quad (2.6)$$

может незначительно изменяться. Для «коррекции» нормы достаточно разделить Ψ_{ijk}^v на $\sqrt{\rho}$, то есть произвести замену

$$\Psi_{ijk}^v \longrightarrow \Psi_{ijk}^v = \frac{1}{\sqrt{\rho}} \Psi_{ijk}^v. \quad (2.7)$$

Исследование устойчивости разностной схемы (2.4) методом гармонического анализа [2, 3], показывает, что схема устойчива при

$$\mu \leq \sqrt{3/8} \quad (2.8)$$

для постоянного нулевого потенциала $U \equiv 0$, где $\mu = \tau \hbar / (h^2 m_e)$.

Исследование разностной схемы (2.4) при различных σ и U показывает, что более предпочтительным является значение $\sigma = 0$.

При этом для отрицательного потенциала U устойчивость разностной схемы улучшается, а для положительного существенно ухудшается.

Разностная схема 2. Следующая разностная схема решения r -мерного нестационарного уравнения Шрёдингера предложена Александровым В.А.¹ и модифицирована автором данной диссертационной работы

$$i\hbar \frac{\Psi_{\mathbf{p}}^{v+1/2,0} - \Psi_{\mathbf{p}}^v}{\tau/2} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Lambda \Psi_{\mathbf{p}}^v + \sigma U_{\mathbf{p}}^v \Psi_{\mathbf{p}}^v + (1 - \sigma) U_{\mathbf{p}}^{v+1/2} \Psi_{\mathbf{p}}^{v+1/2}, \quad (2.9a)$$

$$\left\{ \begin{aligned} i\hbar \frac{\Psi_{\mathbf{p}}^{v+1,q} - \Psi_{\mathbf{p}}^v}{\tau} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{2} (\Lambda_q \Psi_{\mathbf{p}}^{v+1,q} + \Lambda_q \Psi_{\mathbf{p}}^v) + \Lambda_{\bar{q}} \Psi_{\mathbf{p}}^{v+1/2,q-1} \right] + \\ &+ \sigma U_{\mathbf{p}}^v \Psi_{\mathbf{p}}^v + (1 - \sigma) U_{\mathbf{p}}^{v+1} \Psi_{\mathbf{p}}^{v+1,q} \\ \Psi_{\mathbf{p}}^{v+1/2,q} &= \frac{1}{2} (\Psi_{\mathbf{p}}^{v+1,q} + \Psi_{\mathbf{p}}^v) \end{aligned} \right., \quad (2.9б)$$

где \mathbf{p} – r -мерный индекс массива значений волновой функции; Λ – разностный оператор r -мерного Лапласиана; Λ_q – разностный оператор Лапласа по q -й координате; $\Lambda_{\bar{q}}$ – разностный оператор Лапласа по всем координатам, кроме q -й. Уравнение (2.9б) последовательно решается для всех $q = \overline{1, r}$. При этом, при $q = r$ величины $\Psi_{\mathbf{p}}^{v+1/2,r}$ не вычисляются, так как величины $\Psi_{\mathbf{p}}^{v+1,r}$ принимаются за конечный результат и берутся в качестве значений волновой функции на $v + 1$ временном слое.

Исследования устойчивости разностной схемы (2.9) показывают, что она менее устойчива для трехмерных задач и задач большей размерности, чем разностная схема (2.4).

В разделе 2.2 представлен подход к описанию систем с одной легкой частицей в поле тяжелых частиц. Решение многомерного нестационарного уравнения Шрёдингера является ресурсоемкой задачей. Современный уровень развития широко распространенных вычислительных машин позволяет решать уравнения Шрёдингера с

¹ Александров В.А. – к. ф.-м. н., Чувашский государственный университет им. И.Н. Ульянова.

приемлемой точностью и скоростью счета для размерности не более трех. Данное обстоятельство не позволяет проводить чисто кватомеханические исследования различных процессов в квантовых системах, состоящих из более чем одной частицы.

Тем не менее, существует немало интересных задач, в которых одна из частиц имеет существенно меньшую массу по сравнению с другими частицами в изучаемой системе. Довольно часто в таких системах представляется возможным описывать движение тяжелых частиц уравнениями классической физики, и лишь движение одной легкой частицы описывать с позиции квантовой механики. Согласно [4] условием применимости классической физики является соотношение

$$\left| \frac{d\tilde{\lambda}}{dx} \right| \ll 1, \tag{2.10}$$

где $\tilde{\lambda} = \lambda/2\pi$ ($\lambda = 2\pi\hbar/p$ – дебройлевская длина волны частицы), а координата x направлена вдоль импульса частицы. То есть дебройлевская длина волны должна слабо меняться на протяжении расстояний порядка ее самой. Условия применимости данного подхода к конкретным системам должны специально оговариваться при их исследовании.

Исходя из вышеизложенного, в данной работе для описания систем с одной «квантовой» частицей используется следующая система уравнений

$$\begin{cases} i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m_q} \Delta \Psi + U_q \Psi, \\ m_i \mathbf{r}_i = -\nabla U_i, \end{cases} \tag{2.11}$$

где m_q – масса «квантовой» частицы,

$$U_q = \sum_i U_{qi} \tag{2.12}$$

– потенциальная энергия «квантовой» частицы в поле других частиц, m_i – масса i -й тяжелой частицы,

$$U_i = \sum_{j \neq i} U_{ij} + \int \Psi^* U_{qi} \Psi d^3 r_q \tag{2.13}$$

– потенциальная энергия i -й частицы в поле других частиц.

Для частиц, взаимодействующих по закону Кулона, выражения

для потенциалов (2.12) и (2.13) примут вид

$$U_q = \sum_i \frac{\alpha_{qi}}{r_{qi}} \quad (2.14)$$

и

$$\nabla U_i = -\sum_{j \neq i} \frac{\alpha_{ij}}{r_{ij}^3} \mathbf{r}_{ij} - \int \Psi^* \frac{\alpha_{qi}}{r_{qi}^3} \mathbf{r}_{qi} \Psi d^3 r_q, \quad (2.15)$$

где α_{qi} и α_{ij} – постоянные взаимодействия «квантовой» частицы с i -й частицей и i -й частицы с j -й частицей соответственно.

В **третьей** главе представлены основные результаты, полученные диссертантом.

В разделе **3.1** проведен **расчет столкновения атома водорода в основном состоянии с протоном**. Задача решена для начальной относительной скорости движения атома водорода и протона в интервале от ~ 0.5 до ~ 1.5 атомных единиц (а.е.) скорости. Для данной системы применим подход, в котором эволюция состояния электрона описывается квантовомеханическими законами в поле двух «классических» частиц – протонов.

Если рассматривать взаимное движение протона и электрона, то поперечный размер области локализации электрона составляет порядка 1 а.е. длины. Как известно из задачи двух тел, область локализации протона при этом составляет величину порядка m_e/m_p , то есть порядка 10^{-3} а.е. длины. Соответственно, протон вполне можно считать классической частицей при изучении эволюции волновой функции электрона.

Рассмотрим взаимное движение протонов. Согласно [4], условие квазиклассичности движения протонов нарушается, если

$$v \ll 1 \text{ а.е.}, \text{ при } |U| \sim |E|. \quad (3.1)$$

Условие $|U| \sim |E|$ в данной задаче выполняется только для около лобовых столкновений, когда расстояния между протонами порядка 10^{-3} а.е. На таких близких расстояниях протоны находятся сравнительно короткое время. Учитывая также то, что для кулоновского рассеяния квантовая и классическая теории дают одинаковый результат для дифференциального сечения рассеяния, будем считать описание движения протонов законами классической физики в данной задаче допустимым.

Для описания системы используется подход, представленный в разделе 2.2 (см. формулы (2.11) – (2.15)).

Вероятность нахождения электрона в связанном с k -м протоном состоянии с квантовыми числами n, l, m равна

$$P_{nlm}^{(k)} = |a_{nlm}^{(k)}|^2, \quad k = 1, 2. \quad (3.2)$$

Как показали расчеты, вероятность нахождения электрона на третьем и более высоких уровнях достаточно низка. В работе вычисляются нижние оценки вероятности нахождения электрона в связанном состоянии с 1-м и 2-м протонами по отдельности

$$p_k = \sum_{n=1}^2 \sum_{l=0}^{n-1} \sum_{m=-l}^l P_{nlm}^{(k)}, \quad k = 1, 2. \quad (3.3)$$

Большинство имеющихся в литературе экспериментальных результатов по исследуемым столкновениям содержат данные о вероятности или сечении перезарядки. Очевидно, нижняя оценка вероятности перезарядки равна

$$p_{ce, \min} = p_2. \quad (3.4)$$

Верхнюю оценку вероятности перезарядки можно получить, полагая, что при исследуемых столкновениях вероятность ионизации равна нулю. Тогда максимальная вероятность перезарядки равна

$$p_{ce, \max} = 1 - p_1. \quad (3.5)$$

Рассеяние атома водорода на протоне. Схема постановки задачи расчета рассеяния атома водорода в основном состоянии неподвижным (зафиксированным) протоном представлена на рис. 1.

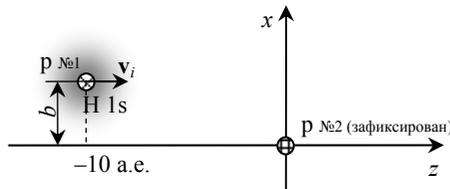


Рис. 1. Схема постановки задачи при расчете движения атома водорода в основном состоянии H 1s в поле неподвижного протона

На рис. 2 представлены зависимости «вероятностей» нахождения электрона в основном состоянии в поле 1-го и 2-го

протонов от времени после начала счета (на рис. 1 представлено состояние системы в нулевой момент времени) при различных прицельных параметрах b .

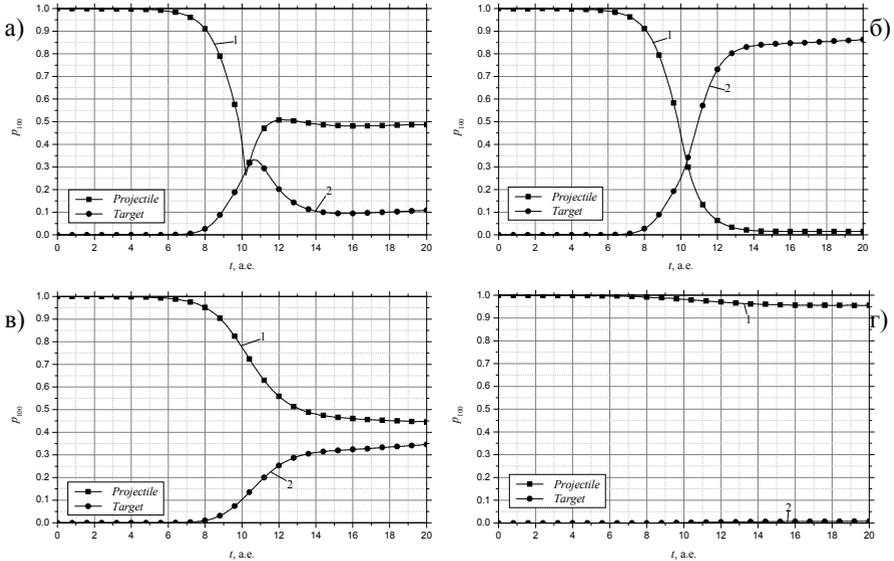


Рис. 2. Зависимости «вероятностей» нахождения электрона в основном состоянии $p_{100}^{(1)}$ (кривая 1) и $p_{100}^{(2)}$ (кривая 2) в поле 1-го и 2-го протонов соответственно от времени при начальной скорости атома водорода $v_i = 1$ а.е. и различных прицельных параметрах а) $b = 0$, б) $b = 0.1$, в) $b = 2$, г) $b = 5$ а.е.

Вероятности нахождения электрона в других состояниях во всех случаях редко превышает 0.05. По приведенным зависимостям можно проследить распределение электронного облака между протонами. Так, например, в случае лобового столкновения (рис. 2 а)) наблюдается переход большей части электронного облака от 1-го протона ко 2-му протону, а затем обратный переход, тем самым электрон как бы совершает колебательные движения в протяженной потенциальной яме, образованной сближившимися протонами. Такие «колебательные» движения электронного облака особенно хорошо проявляются при малых прицельных параметрах, когда протяженная потенциальная яма между протонами достаточно глубока и область повышенной плотности электронного облака может быстро

перемещаться между протонами. При дальнейшем увеличении прицельного параметра электронное облако за время взаимодействия успевает только перейти к протону-мишени, после чего бомбардирующий протон удаляется на значительное расстояние (см. рис. 2 б)). При движении с прицельным параметром 2 а.е. потенциальная энергия в области между протонами возрастает в достаточной степени для того, чтобы электронное облако только частично успело перейти к протону мишени (см. рис. 2 в)). При прицельном параметре 5 а.е. электронное облако претерпевает некоторое небольшое возмущение, а вероятность перезарядки при этом ничтожно мала (см. рис. 2 г)).

На рис. 3 представлены графики зависимостей вероятностей нахождения электрона в различных состояниях после столкновения в зависимости от прицельного параметра b . Видно, что зависимости вероятностей p_k от прицельного параметра b имеют некий немонотонный, с чередующимися областями роста и спада при увеличении b , характер, который проявляется еще сильнее при малых относительных скоростях сталкивающихся частиц.

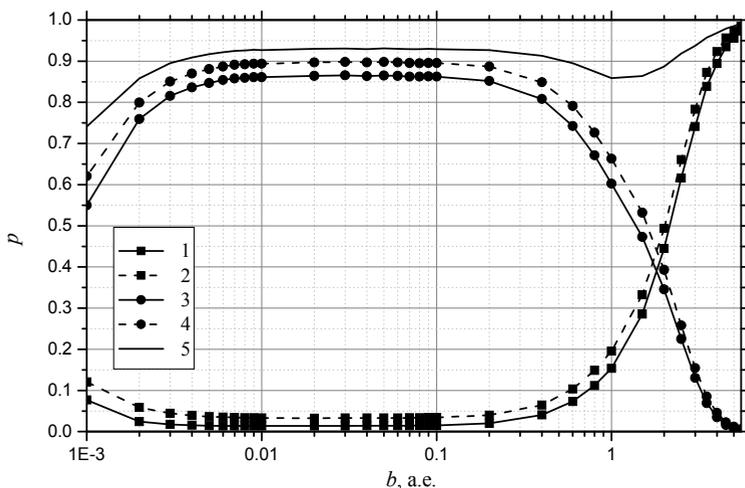


Рис. 3. Зависимости вероятностей $p_{100}^{(1)}$ (кривая 1), p_1 (кривая 2), $p_{100}^{(2)}$ (кривая 3), p_2 (кривая 4) и $p_1 + p_2$ (кривая 5), от прицельного параметра b при начальной скорости атома водорода $v_i = 1$ а.е. (≈ 25 кэВ) после столкновения

По данным, представленным на рис. 3, можно оценить минимальное и максимальное сечения перезарядки σ_{ce} , путем вычисления интегралов:

$$\sigma_{ce,\min} = 2\pi \int_0^{\infty} p_{ce,\min}(b) b db, \quad (3.6)$$

$$\sigma_{ce,\max} = 2\pi \int_0^{\infty} p_{ce,\max}(b) b db, \quad (3.7)$$

где $p_{ce,\min} = p_2$, $p_{ce,\max} = 1 - p_1$. Непосредственные вычисления дают следующие оценки величин (3.6) и (3.7) для сечения перезарядки $\sigma_{ce,\min} = 4.44\pi a_0^2 = 3.91 \cdot 10^{-20} \text{ м}^2$ и $\sigma_{ce,\max} = 5.92\pi a_0^2 = 5.20 \cdot 10^{-20} \text{ м}^2$.

Результаты расчетов сечения перезарядки в диапазоне средних энергий от 10 до 50 кэВ представлены в таблице 1 и на рис. 4¹. Из рисунка видно, что полученные результаты достаточно хорошо согласуются с экспериментальными данными. Большой разброс в результатах для 50 кэВ энергии, скорее всего, обусловлен возрастающим сечением ионизации.

Таблица 1. Сечение перезарядки атомарного водорода H1s на неподвижном протоне

E , кэВ	10	15	20	25	50
$\sigma_{ce,\min}$, 10^{-20} м^2	8.97	6.90	5.38	3.91	1.13
$\sigma_{ce,\max}$, 10^{-20} м^2	9.22	7.49	6.30	5.21	3.55

Наиболее успешные аналитические расчеты в указанном диапазоне энергий проведены Далгарно и Ядавом в приближении возмущенных стационарных состояний (ВСС) (см., например, в [5, с. 587]). Результаты этих расчетов также приведены на рис. 4.

¹ По поводу сравнения расчетных и экспериментальных данных, следует заметить, что в экспериментах протон-мишень находится в свободном состоянии. Но если дело касается сечения перезарядки, то вследствие того, что основной вклад в сечение вносят прицельные расстояния, превышающие 0.1 а.е., когда падающая тяжелая частица проходит область взаимодействия практически по прямой линии, а протон-мишень приобретает незначительный импульс, то ошибки в сравнении не могут превышать 1%.

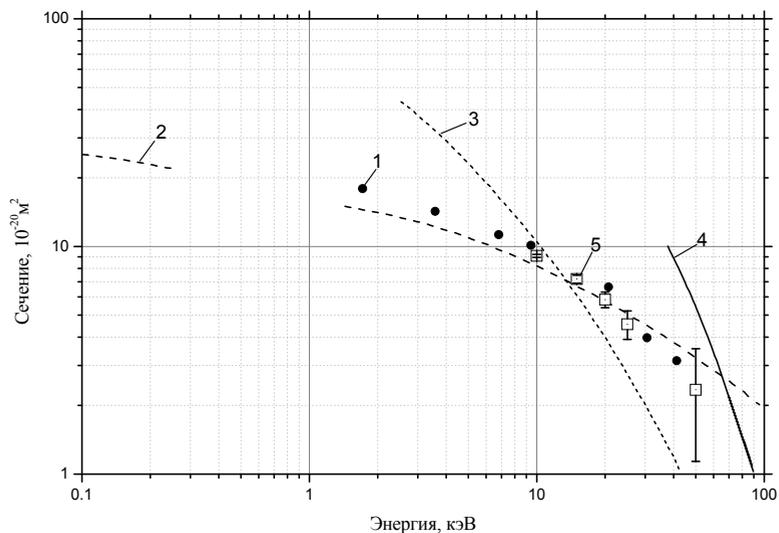


Рис. 4. Сечение перезарядки в столкновении $H^+ + H \rightarrow H + H^+$. 1 – экспериментальные результаты; 2 – расчет Далгарно и Ядава (метод ВСС); 3 – расчет Бейтса и Далгарно (приближение $Q^{(B)}$ высокой энергии); 4 – расчет (приближение $Q^{(a)}$ высокой энергии); 5 – расчет по формулам (3.6) и (3.7). Зависимости 1-4 приведены в монографии [5]

Рассеяние протона на атоме водорода. Имеющиеся в литературе [5] данные указывают на наличие немонотонной колебательной зависимости сечения от энергии столкновения в диапазоне от 0.75 до 50 кэВ при фиксированном угле рассеяния. Там же приведены экспериментальные данные по вероятности захвата $p_{се}$ электрона протоном при рассеянии атомарным водородом $H\ 1s$ на угол 3° в лабораторной системе отсчета (рис. 5).

Аналитические расчеты в данной области энергий провести затруднительно, поэтому численному анализу практически нет альтернативы.

Схема, поясняющая постановку задачи при расчете рассеяния протона на свободном атоме водорода в основном состоянии $H\ 1s$, представлена на рис. 6. Результаты расчетов приведены в таблице 2 и на рис. 5. Они показывают хорошее согласие с экспериментальными данными. Большой разброс в результатах для 50 кэВ, скорее всего,

обусловлен возрастающей вероятностью ионизации.

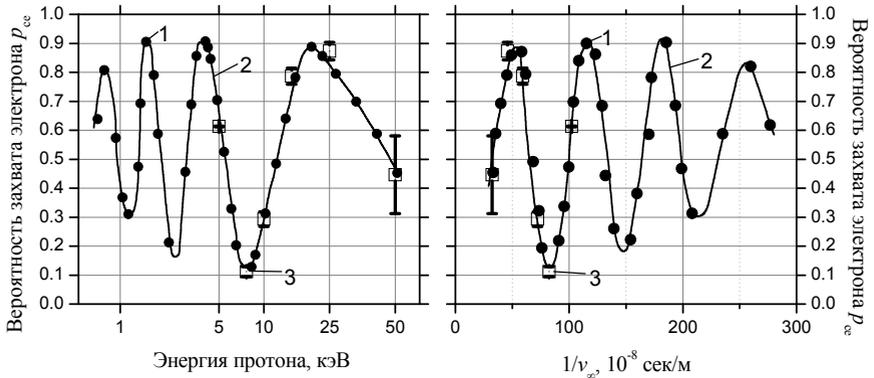


Рис. 5. Вероятность захвата p_{ce} электрона протоном при рассеянии атомарным водородом в основном состоянии на угол 3° в лабораторной системе отсчета. 1 – экспериментальные данные; 2 – интерполяция экспериментальных данных; 3 – расчетные данные. Зависимости 1 и 2 приведены в монографии [5].

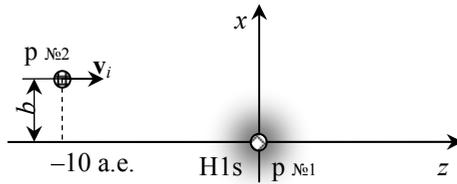


Рис 6. Схема постановки задачи при расчете рассеяния протона на атоме водорода в основном состоянии

Таблица 2. Вероятность захвата p_{ce} электрона протоном при рассеянии на атоме водородам в основном состоянии на 3° в лабораторной системе отсчета.

E , кэВ	5.00	7.69	10.0	15.0	25.0	50.0
$1/v_\infty$, 10^{-8} с/м	102.1	82.4	72.2	59.0	45.7	32.3
$p_{ce \text{ min}}$	0.612	0.095	0.268	0.759	0.861	0.312
$p_{ce \text{ max}}$	0.614	0.129	0.318	0.814	0.931	0.580

В разделе 3.2 проведен **расчет туннелирования**. Для этого были взяты протон и атом водорода в основном состоянии. Разместим протон и атом водорода таким образом, чтобы для перехода электрона

от исходного протона к другому необходимо было преодолеть потенциальный барьер. В качестве начального состояния электрона возьмем основное состояние в атоме водорода. Расположим протон и атом водорода на расстоянии 9 а.е. Тогда величина потенциального барьера составляет 1/18 а.е. (начальная энергия электрона равна $-1/2$ а.е.). Полный переход осуществляется за время порядка $2.5 \cdot 10^3$ а.е. (около $6.05 \cdot 10^{-14}$ с) (рис. 7).

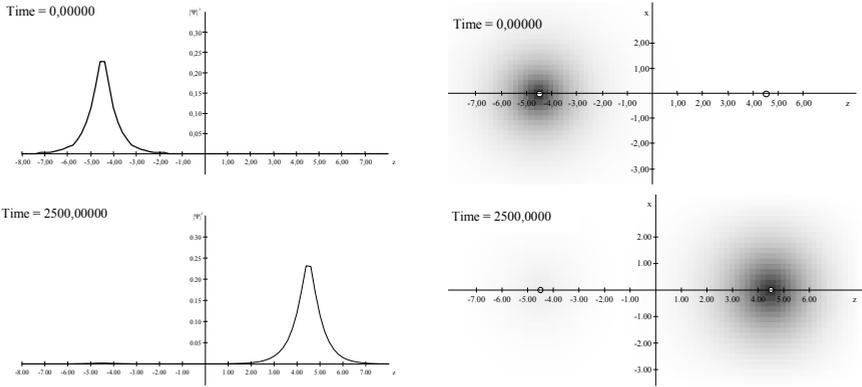


Рис. 7. Туннелирование электрона от одного протона к другому (расстояние между протонами 9 а.е.)

В разделе 3.3 произведен расчет по **определению основного состояния иона H_2^+** путем введения комплексного времени. Пусть электрон находится в стационарном потенциальном поле $U(\mathbf{r})$ и в начальный момент времени $t = 0$ описывается волновой функцией $\psi_i(\mathbf{r})$. Как известно, в этом случае нестационарная волновая функция системы определяется соотношением

$$\Psi_i(\mathbf{r}, t) = \sum_k a_k \psi_k(\mathbf{r}) \exp(-iE_k t), \tag{3.8}$$

где $a_k = \int \psi_k^*(\mathbf{r}) \psi_i(\mathbf{r}) d^3r$. Заменим действительное время t на комплексное $t' = (1 - i\alpha)t$, где $\alpha > 0$. В результате получим

$$\Psi_i(\mathbf{r}, t) = \sum_k a_k \psi_k(\mathbf{r}) \cdot \exp(-iE_k t) \cdot \exp(-\alpha E_k t), \tag{3.9}$$

откуда следует, что при введении комплексного времени вес волновой

функции, соответствующей основному состоянию, экспоненциально возрастает.

Данное обстоятельство позволяет выделить волновую функцию основного состояния из начальной смеси состояний, если производить вычисление волновой функции в течение достаточно длительного времени. Ввиду того, что при введении комплексного времени происходит постоянное уменьшение суммарной вероятности, необходимо постоянно корректировать норму волновой функции. Расчеты производились при фиксированном расстоянии между протонами согласно экспериментальному значению 2.003 а.е. [6, с. 175]. Вычисление волновой функции позволяет установить все свойства основного состояния молекулярного иона водорода. В частности, если добавить энергию взаимного отталкивания протонов $1/R$ к вычисленному значению энергии электрона -1.0937 а.е., то получим значение -0.5937 а.е., что в пределах точности расчета хорошо согласуется с экспериментальным значением энергии молекулярного иона водорода -0.5974 а.е. (энергия H_2^+ получается вычитанием из энергии атома водорода энергии ионизации молекулярного иона водорода [6, с. 210]). Распределение квадрата модуля волновой функции основного состояния представлено на рис. 8.

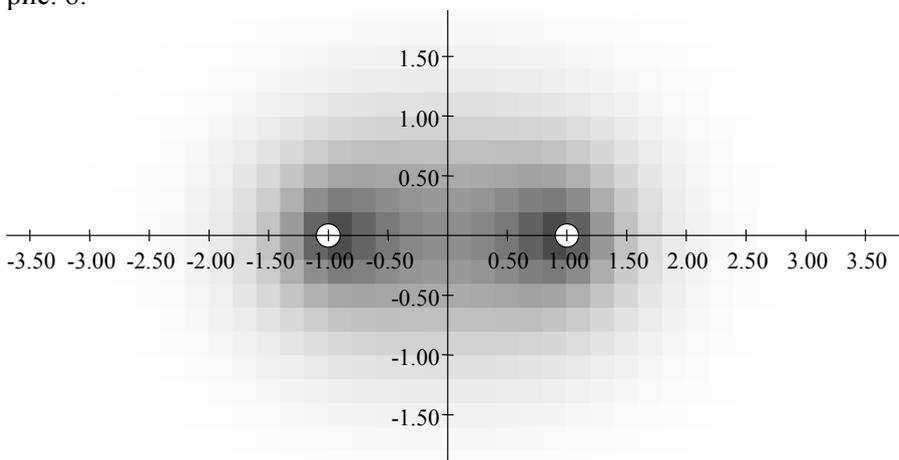


Рис. 8. Основное состояние H_2^+ (расстояние между протонами 2 а.е.)

В разделе 3.4 представлены некоторые подходы к изучению двухэлектронных систем, обладающих определёнными симметриями. Рассмотрим достаточно простой пример системы из двух частиц, не поддающейся точному аналитическому описанию. Пусть две одинаковые бесспиновые частицы с массой m находятся в поле гармонического осциллятора $U(x) = m\omega^2 x^2 / 2$. Потенциал взаимодействия частиц равен $U_{12} = \alpha\delta(x_2 - x_1)$. Гамильтониан системы имеет вид

$$\hat{H} = -\frac{\hbar}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} \right) + \frac{m\omega^2}{2} (x_1^2 + x_2^2) + \alpha\delta(x_2 - x_1), \quad (3.10)$$

где x_1 и x_2 – координаты 1-ой 2-ой частицы.

В работе [7] показано, что система с гамильтонианом (3.10) имеет точное аналитическое решение лишь для нечетных относительно разности координат $x_2 - x_1$ состояний. Как видно, даже в весьма простых случаях, для решения двухчастичной задачи предпочтительно применение численных методов.

В работе [8] показано, что учет симметрии относительно перестановки частиц и симметрии относительно инверсии координат для системы с гамильтонианом (3.10) позволяет уменьшить объем требуемой памяти почти в 4 раза. В задачах большей размерности учет различных типов симметрии позволяет достичь еще большей экономии оперативной памяти ЭВМ [8].

На рис. 9 представлены результаты численного решения выше

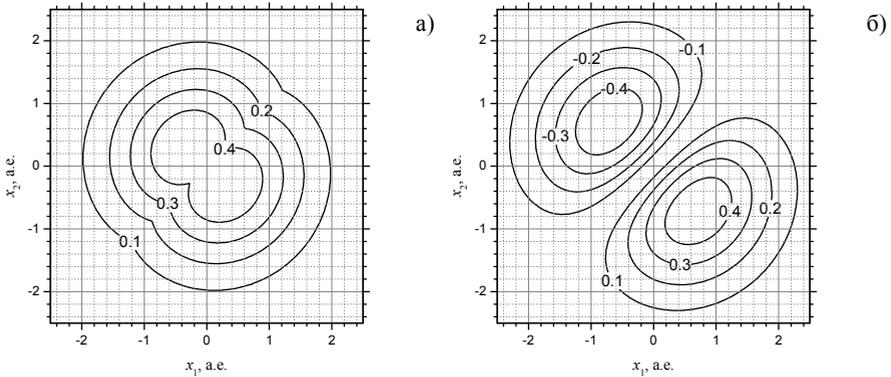


Рис 9. Волновые функции основного – а) и 1-го возбужденного – б) состояний системы

сформулированной задачи с δ -образным отталкиванием с учетом симметрий системы. Расчеты проводились при следующих значениях параметров: $m = 1$, $\alpha = 1$, $\omega = 1$. Постоянная Планка \hbar полагалась равной единице, как это принято в атомной системе единиц.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

В работе рассматривались физические системы, состоящие из частиц двух типов: малого числа квантовых частиц, движение которых необходимо описывать на основе квантовой механики и частиц с относительно слабо выраженными квантовыми свойствами в рассматриваемой задаче. Основными направлениями исследований в работе были некоторые задачи физики атомных столкновений и физической электроники.

Исследованы процессы рассеяния атома водорода на протоне. На основе визуализации плотности электронного облака качественно объяснены осцилляционные зависимости вероятности перезарядки от прицельного параметра и относительной скорости сталкивающихся частиц. Качественно можно сказать, что от прицельного параметра зависит частота переходов области повышенной плотности электронного облака от одного протона к другому. С другой стороны, конечное значение фазы колебаний зависит и от относительной скорости протонов, то есть от времени пролета через область колебательного движения электронного пакета. Произведенная оценка сечения перезарядки при рассеянии атома водорода на протоне хорошо согласуется с экспериментальными данными.

Получена и исследована осцилляционная зависимость сечения перезарядки при рассеянии протона на атоме водорода на угол 3° , находящаяся в хорошем согласии с экспериментальными данными.

Путем введения комплексного времени в нестационарное уравнение Шрёдингера рассчитана волновая функция основного состояния электрона в ионе H_2^+ . Энергия полученного состояния находится в хорошем согласии с экспериментальным значением. Введение комплексного времени в уравнение Шрёдингера позволяет получать волновые функции и возбужденных стационарных состояний.

Продемонстрирована возможность расчета многомерного

туннельного эффекта.

Приведены подходы к исследованию систем, состоящих из двух квантовых частиц. Исследование двухчастичных систем на основе численного решения многомерного уравнения Шрёдингера является ресурсоемкой задачей. В работе разработаны подходы, учитывающие различные типа симметрии задачи с целью уменьшения требований к объему оперативной памяти ЭВМ.

СПИСОК ЦИТИРОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. *В.В. Самарин, В.И. Савельев* // Поверхность, 2001, № 5, с. 6.
2. *Поттер Д.* Вычислительные методы в физике. М.: Мир, 1975.
3. *Формалев В.Ф., Ревизников Д.Л.* Численные методы. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2004.
4. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Теоретическая физика: Учеб. пособ.: для вузов. В 10 т. Т.III. Квантовая механика (нерелятивистская теория). – 5-е изд., стереот. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2002.
5. *Мотт Н., Месси Г.* Теория атомных столкновений. – М.: Мир, 1969.
6. *Радциг А.А., Смирнов Б.М.* Справочник по атомной и молекулярной физике. М.: Атомиздат, 1980.
7. *Г.М. Филиппов, В.И. Савельев* // Материалы XVII Международной конференции по взаимодействию ионов с поверхностью, Т. 1.: М., 2005, с. 154.
8. *В.И. Савельев* // Поверхность, 2007, № 4, с. 103.

СПИСОК ПУБЛИКАЦИЙ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

1. *В.В. Самарин, В.И. Савельев.* Зарядовая асимметрия неупругих столкновений ионов с атомами в нестационарной квантовой модели // Поверхность, 2001, № 5, с. 6-11.
2. *Г.М. Филиппов, В.И. Савельев.* Численное исследование рассеяния атома в поле иона // Материалы XVI Международной конференции

по взаимодействию ионов с поверхностью, Т.1.: М., 2003, с. 295-298.

3. *В.И. Савельев, Г.М. Филиппов.* Численное исследование рассеяния атома в поле иона // *Поверхность*, 2004, № 5, с. 101-105.
4. *В.И. Савельев, Г.М. Филиппов.* Расчеты процессов атомных столкновений при помощи численного решения нестационарного уравнения Шрёдингера // *Поверхность*, 2005, № 3, с. 32-35.
5. *Г.М. Филиппов, В.И. Савельев.* Исследование двухэлектронных атомных систем при помощи численного решения нестационарного уравнения Шрёдингера. // *Материалы XVII Международной конференции по взаимодействию ионов с поверхностью*, Т. 1.: М., 2005, с. 154-156.
6. *В.И. Савельев, Г.М. Филиппов.* Оценки сечений перезарядки при помощи численного решения нестационарного уравнения Шрёдингера // *Поверхность*, 2006, № 4, с. 47–50.
7. *В.И. Савельев.* Исследования двухэлектронных корреляций численным методом // *Поверхность*, 2007, № 4, с. 103-106.