

Антипротон-устөрөгчийн атомын мөргөлдөөний иончлолын бүрэн ОГТЛОЛ

Г.Зоригт*, Л.Хэнмэдэх, Ч.Алдармаа

*Шинжлэх Ухаан Технологийн Их Сургууль, Хэрэглээний Шинжлэх Ухааны Сургууль, Физикийн
тэнхим*

Энэхүү ажилд энергийн (0.1-1000кэВ) өргөн мужид антипротон-устөрөгчийн атомын мөргөлдөөний процессыг хугацаанаас хамаарсан Шредингерийн тэгшитгэлийг тоон аргаар бодож тооцоолсон. Тооцоололд антипротоныг шулуун траектороор шилжих классик загвар авч түүний үүсгэх оронд устөрөгчийн электрон үндсэн төлвөөсөө хэрхэн хувьсалд орж байгааг долгион функцийг огторгуйн дискрет торын зангилаан дээрх утгуудаар нь илэрхийлэв. Кулон баазтай дискрет хувьсагчийн аргаар иончлолын бүрэн огтлолыг антипротоны энергиэс хамааруулан тооцоолж үр дүнгээ псевдоспектриал аргаар тооцоолсон болон туршлагын үр дүнтэй харьцууллаа.

PACs numbers: 36.10.Gv, 25.43.+t, 34.80.Gs

ОРШИЛ

Антипротоныг 1955 онд бүртгэгдсэнээс хойш антиматер бодистой харилцан үйлчлэх туршилтуудыг хийсээр иржээ. Протон болон атомын харилцан үйлчлэлээр өдөөлт, иончлол, харимхай сарнил, цэнэг дамжуулах процессууд явагддаг бол антипротон атомын мөргөлдөөнөөр цэнэг дамжуулах процесс явагддаггүй онцлогтой. Антипротон атомтай харилцан үйлчлэлийг тооцоолох онолын олон ажлууд хийгдсээр ирсэн байна [1-4,7-11]. Эдгээр ажлуудад хүчтэй холбоосын арга [1,7] классик траекторын Монте Карло арга [2], Дискрет хувьсагчаар илэрхийлэх багц долгионы аргаар хугацаанаас хамаарсан Шредингерийн тэгшитгэлийг [8], нягтын функциональ аргаар Кон-Шамын тэгшитгэлийг [11] тус тус бодож өдөөлт иончлолын дифференциал огтлолуудыг тооцоолж туршлагын үр дүнтэй харьцуулжээ. Тооцоолох аргууд нь загварчлах, ойролцоолох зэргээр туршлагын үр дүнг тайлбарлах зорилготой ч нийтлэг бэрхшээл нь компьютерийн санах ойн багтаамж, тооцоолох цаг ихээхэн шаарддаг байна. Иймд зарим ажилд цөөн хэмжээтэй тооцоолох замаар дөхөлтийг хийсэн [9] байна. Бид долгион функцийг радиал функцыг дискрет хувьсагчаар илэрхийлэх аргыг ашиглахдаа Кулоны долгион функцыг бааз болгон авлаа. Энэ баазын ашигласан тооцоог хүчтэй лазер атомын харилцан үйлчлэлд ашиглан тооцоолол хийсэн байна [5,6]. Антипротон устөрөгчийн мөргөлдөөний тооцоололд анх удаа Кулоны долгион функцийг

бааз болгон дискрет хувьсагчаар илэрхийлэх аргаар тооцооллыг хийж бусад аргаар тооцоолсон үр дүнгүүдтэй харьцууллаа. Энэ ажлаар гурван хэмжээт огторгуйд хугацаанаас хамаарсан Шредингерийн тэгшитгэлийг тооцоолсон явдал нь компьютерийн ихээхэн санах ой, тооцооллын цаг орох тооцоог ердийн компьютероор тооцоолж чадсанаараа үр ашигтай ажил болсон гэж үзэж байна. Энэхүү тооцооллыг хийхэд огторгуйг 120000 зангилаа цэг дээр дискретчилэн 1400 гаруй псевдоспектрал бааз ашиглан тооцооллыг хийлээ.

КУЛОН БААЗТАЙ ДИСКРЕТ ХУВЬСАГЧААР ИЛЭРХИЙЛЭХ АРГА

Бид устөрөгчийн атомыг антипротон мөргөх процессыг тооцоолон электроны төлвийн өөрчлөлтийн динамикийг судлан иончлолын магадлалыг тооцоолсон билээ. Энэхүү тооцооллыг квант механикийн үндсэн тэгшитгэл болох хугацаанаас хамаарсан Шредингерийн тэгшитгэлийг бодох замаар гүйцэтгэв. Тооцоололд устөрөгчийн атомын электроны төлвийн өөрчлөлтийг судалсан. Гадны оронд байгаа устөрөгчийн атомын электроны хувьд Шредингерийн тэгшитгэлийг бичвэл [11]

$$i \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = (\hat{H}_0 + \hat{V}(\vec{r}, t)) \Psi(\vec{r}, t) \quad (1)$$

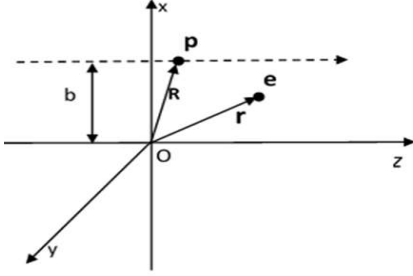
Энд $\Psi(\vec{r}, t)$ - атомын электроны долгион функц, \hat{H}_0 - устөрөгчийн атомын электроны гамилтанионы оператор, $\hat{V}(\vec{r}, t)$ - гадны орны харилцан үйлчлэлийн оператор. Антипротон

* Electronic address: g_zorigt@yahoo.com

буюу ионыг z тэнхлэгийн дагуу шулуунаар хөдлөнө гэж үзвэл үүсгэх цахилгаан орны потенциал дараах байдлаар илэрхийлэгдэнэ [3,4].

$$\hat{V}(\mathbf{r}, t) = -\frac{1}{|\mathbf{R}(b, 0, vt) - \mathbf{r}|} \quad (2)$$

энд \mathbf{R} ионы радиус вектор, b шагайлтын зай v ионы хурд \mathbf{r} электроны радиус вектор, t хугацаа.



Зураг 1. Антипротон устөрөгчийн атомын харилцан үйлчлэлийн схем. Энд \mathbf{r} антипротон, \mathbf{e} электрон, \mathbf{R} антипротоны радиус вектор, b шагайлтын зай, \mathbf{r} электроны радиус вектор.

Антипротоныг ингэж классик траектороор хөдлөнө гэж үзээд мөргөлдөөний иончлол, сарнилын тооцооллод ашигласан [3,4] ажлууд олон байдаг. Жишээ нь [3,4] ажлуудад антипротон-гелийн мөргөлдөөнийг иончлолын дифференциал ба бүрэн огтлолыг шагайлтын зайгаар интегралчлан тооцоолсон бол, [13]-д антипротон-устөрөгчийн хувьд тооцоолсон байна. Шредингерийн тэгшитгэлээс хугацааны t эгшинээс $t + \Delta t$ эгшин дэх долгион функцыг олбол [5]:

$$\psi(\mathbf{r}, t + \Delta t) = e^{-i(\hat{H}_0 + \hat{V}(\vec{r}, t))\Delta t} \psi(\vec{r}, t) \quad (3)$$

Энэхүү итерацийн алхмуудаар долгион функцын хугацааны хамаарал тодорхойлогдоно. Тухайн алхмыг гүйцэтгэхэд Δt хугацааны алхам бага үед хугацааг хуваах Странгийн аргыг хэрэглэх боломжтой юм. Хугацааг хуваах аргыг ашиглан хугацаанаас хамаарсан ба хамаараагүй операторуудыг салган, бөмбөлөг координатын системд долгион функцыг тодорхойлбол [5,12]:

$$\begin{aligned} \psi(r, \theta, \varphi, t + \Delta t) \cong & \exp\left(-i\hat{V}(r, \theta, \varphi, t + \right. \\ & \left. \Delta t)\frac{\Delta t}{2}\right) \times \exp(i\hat{H}_0\Delta t) \times \\ & \exp\left(-i\hat{V}(r, \theta, \varphi, t)\frac{\Delta t}{2}\right) \psi(r, \theta, \varphi, t) \end{aligned} \quad (4)$$

Дээрх хугацааны итерацийн алхамыг хугацааны хагас алхамд атомын гамилтонианаар үйлчлүүлээд гадны орны харицан үйлчлэлийг хугацааны бүтэн алхамд тооцоолж дахин хугацааны хагас алхамд атомын

гамилтонианаар үйлчлүүлээд тооцоолоход бидний тооцооллын хугацаа (4) илэрхийлэлийг ашигласнаас ойролцоогоор хоёр дахин багасч байсан учир (5) илэрхийллээр тооцооллыг хийлээ.

$$\begin{aligned} \psi(r, \theta, \varphi, t + \Delta t) \cong & \exp\left(\frac{i\hat{H}_0\Delta t}{2}\right) \times \\ & \exp\left(-i\hat{V}(r, \theta, \varphi, t + \frac{\Delta t}{2})\Delta t\right) \times \\ & \exp\left(\frac{i\hat{H}_0\Delta t}{2}\right) \psi(r, \theta, \varphi, t) \end{aligned} \quad (5)$$

Долгион функцыг бөмбөлөг координатын системд координатуудыг дискретчилэн сфер гармоник функцийн баазаар задлан бичвэл:

$$\psi(r_i, \theta_j, \varphi_k, t) = \sum_{l=0}^{l_{max}} \sum_{m=-l}^l R_{l,m}(r_i, t) Y_{l,m}(\varphi_k, \theta_j) \quad (6)$$

$Y_{l,m}(\varphi_k, \theta_j)$ сфер гармоник, $R(r_i, t)$ радиал функц. Энэхүү функцээ (1) тэгшитгэлд орлуулбал бөмбөлөг координатын системд өнцгийн ба радиал тэгшитгэлүүд болгон задалж болно. Өнцгийн тэгшитгэлийн хувьд \hat{L}^2 операторын хувийн функцүүд нь $Y_{l,m}(\varphi, \vartheta)$ сфер гармоник ба хувийн утгууд нь $l(l+1)$ болно [6]. Радиал тэгшитгэл нь хугацаанаас хамаарах радиал функцыг тодорхойлно. Долгион функцын сфер функцээр задалсан задаргааны коэффициент (6) болох радиал функцыг өнцгийн интегралаар тооцоолон гаргах ба энд интегралыг квадратур ашиглан бичвэл:

$$\begin{aligned} R_{l,m}(r_i, t) = & \sum_{k=1}^{k_{max}} \sum_{j=1}^{j_{max}} \psi(r_i, \theta_j, \varphi_k, t) Y_{l,m}^*(\varphi_k, \theta_j) w_k w_j \end{aligned} \quad (7)$$

w_k, w_j эдгээр нь Симпсоны ба Гаусс-Лежандрын жингүүд j_{max} θ өнцгийн зангилааны тоо, k_{max} φ өнцгийн зангилааны тоо болно. Кулоны функц сонгон язгууруудаар нь радиал зангилааны цэгүүдийг авч радиал функцыг кардинал функцүүдээр илэрхийлсэн интерполяцын функцыг гарган авъя. Интерполяцын функцыг устөрөгчийн атомын гамилтониантай стационар радиал тэгшитгэлд орлуулан тооцоолно. Кулоны функцыг $F(r)$ түүний уламжлалыг $F'(r)$ гээд $\frac{R_{l,m}(r_i, t)}{F'(r)} = \phi_{k,j}$ гэвэл атомын гамилтониантай стационар тэгшитгэлээс дараах шугаман тэгшитгэлийн системийг гаргаж болно [5].

$$\sum_{j=1}^N \left[-\frac{1}{2} D_{i,j} + V_l(r_j) \delta_{i,j} \right] \phi_{k,j} = \varepsilon_k \phi_{k,i} \quad i = 1 \dots N \quad (8)$$

Энд $\phi_{k,i}$ хувийн функций (k -р спектрийн i -р) утга, ϵ_k хувийн утга (k -р спектрийн энерги) $D_{i,j}$ координатын 2-р эрэмбийн уламжлалыг тодорхойлох матриц

$$D_{i,j} = \frac{1}{3} \left(E + \frac{Z1}{r_i} \right) \delta_{i,j} + (1 - \delta_{i,j}) \frac{1}{(r_i - r_j)^2} \quad (9)$$

E антипротоны энерги, $Z1$ кулоны функций цэнэг, $V_l(r_j)$ координатаас хамаарсан потенциал.

$$V_l(r_j) = \frac{l(l+1)}{2r_j^2} - \frac{1}{r_j}, \quad l - \text{орбитын квант тоо.} \quad (8)$$

нь шугаман тэгшитгэлийн систем үүсгэх учир l -н утга бүрд харгалзах тэгшитгэлийн системийг бодож, радиал зангилааны тоотой тэнцүү тооны хувийн утга ба хувийн векторуудыг олно.

Энэхүү хувийн утгууд нь псевдоспектрууд болох ба хувийн векторууд нь бүрэн бааз үүсгэнэ. Хугацаанаас хамаарсан долгион функций радиал функций координатын төлөөллөөс энэхүү псевдоспектрал бааз дээр задлах буюу энергийн төлөөлөлд шилжүүлээд \hat{H}_0 оператороор үйлчлэхэд задаргааны гишүүн бүрийн хувьд харгалзах хувийн утга үржигдэн гарах ба буцааж координатын төлөөлөлд шилжинэ. Эдгээр үйлдэл нь тогтмол утгатай хувьслын матрицаар үйлчилсэнтэй адил болно. Иймд (5) тэгшитгэлийн \hat{H}_0 операторын үйлчлэлийг тооцоолохдоо долгион функцээс (7) илэрхийллээр радиал функций утгуудыг тодорхойлон (10) илэрхийлэлээр гүйцэтгэх ба энд $S_{ij}(l)$ хувийн утгуудаар тодорхойлогдох хувьсалын матриц болно.

$$\left[\exp(-iH_l^0 \Delta t) R_{l,m}(r_j, t) \right]_i = \sum_{j=1}^N S_{ij}(l) R_{l,m}(r_j, t), \quad (10)$$

Хувьсалын матриц нь:

$$S_{ij}(l) = \sum_k \phi_{k,j}(l) \phi_{k,i}(l) \exp(-i\epsilon_k(l) \Delta t) \quad (11)$$

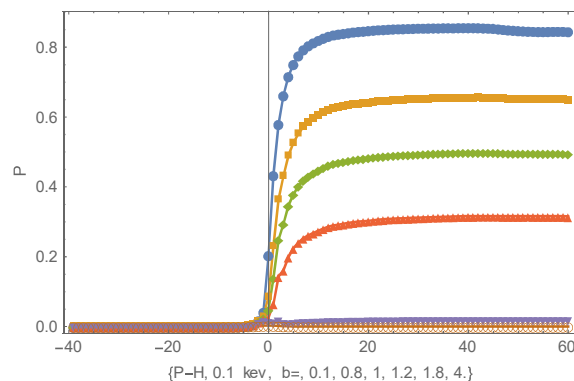
χ_{ki} хувийн функций (k -р спектрийн j -р) утга, ϵ_k хувийн утга (k -р спектрийн энерги). Хугацааны хувьд нэг итераци хийхэд антипротоны байрлал z тэнхлэгийн дагуу $v\Delta t$ хэмжээгээр шилжиж орны потенциал өөрчлөгдөнө.

Антипротоны z координат нь -40 а.н – ээс 60 а.н зайд шилжих хугацаанд тооцооллыг хийлээ.

ҮР ДҮН

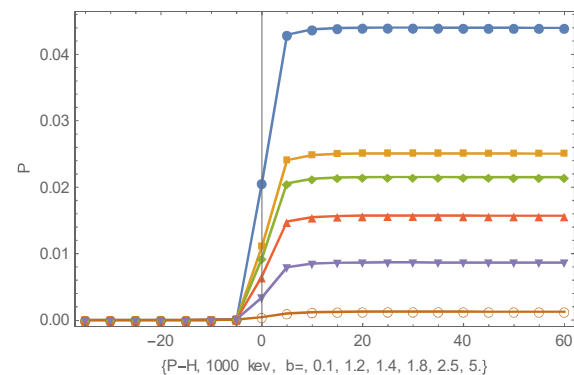
Тооцооллод Кулоны долгион функций цэнэгийг 120, долгион тоог 3 а.н утгатай авч, радиал зангилааны тоог 200 -гаар сонгон авахад радиусын максимум $r_{max} = 153.95$ а.н зайд тооцоололыг хийлээ. Орбитын квант тоог 7

байхад антипротон буюу ионы харилцан үйлчлэлийг түүний координат -40 а.н – ээс 60 а.н байх мужид тооцоолон 0.1 - 1000 кэВ энергийн мужид энергийн 19 утганд тооцооллыг хийж иончлолын бүрэн огтлолыг тооцооллоо. Антипротоны энерги бага буюу 0.1 кэВ үед ионы байрлалтай харгалзуулан иончлолын магадлалын хамаарлыг янз бүрийн шагайлтын зайн хувьд зураг 2-д үзүүлэв. Иончлолын магадлал нь ион атомд дөхөж ирэх үед огцом өсч ионы координат $z=50$ а.н орчимоос тогтворжиж байна. Харин Антипротоны энерги ихсэхэд иончлолын магадлал буурахын зэрэгцээ тогтворжих зай багасч байлаа.



Зураг 2. Антипротоны энерги 0.1кэВ үед иончлолын магадлал түүний координатаас хамаарах хамаарал.. z координат атомын нэгжээр илэрхийлэгдсэн ба магадлалын муруй дээрээсээ эхлэн шагайлтын зайн $0.1, 0.8, 1.0, 1.2, 1.8, 4.0$ а.н утгуудад харгалзана.

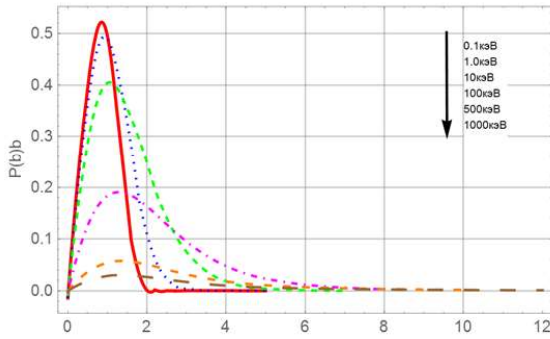
Ионы энерги 1000 кэВ үед ионы координатаас иончлолын магадлал хамаарах хамаарлыг янз бүрийн шагайлтын зайн хувьд зураг 3-д үзүүлэв. Иончлолын магадлал шагайлтын зай 0.1 а.н үед хамгийн их байгаа ч антипротоны энерги 0.1 кэВ үеийнхтэй харьцуулахад олон дахин бага байна. Ионы координат $z=20$ а.н орчимоос тогтворжиж байна.



Зураг 3. Антипротоны энерги 1000кэВ үед иончлолын магадлал түүний координатаас хамаарах хамаарал. z координат атомын нэгжээр илэрхийлэгдсэн ба

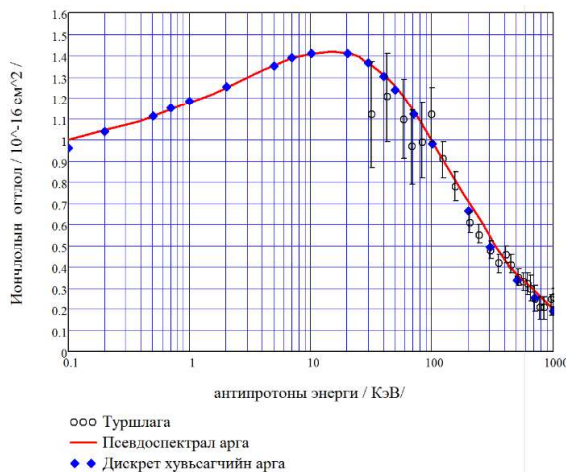
магадлалын муруй дээрээсээ эхлэн шагайлтын зайн 0.1,1.2,1.4,1.8,2.5,5.0 а.н утгуудад харгалзана.

0.1-1000кэВ энергитэй антипротон тусахад иончлогдох магадлалын шагайлтын зайн хамааралыг өргөтгөсөн псевдоспектрал аргаар тооцоолсон [13] ажлын үр дүнтэй харьцуулахад антипротоны энерги 0.1кэВ утганд бидний тооцоолсон утга хамгийн их утгын орчим арай бага байв. Харин бусад утганд сайн таарч байна. Антипротоны энергийн зарим утганд харгалзах иончлолын магадлал шагайлтын зайн үржвэр шагайлтын зайнаас хамаарах хамааралыг тооцоолсоноо зураг 4-д үзүүлэв.



Зураг 4. Антипротоны энерги 0.1,1.0, 10,100,500,1000кэВ-д харгалзах иончлолын магадлал шагайлтын зайн үржвэр шагайлтын зайнаас хамаарах хамаарал.(шагайлтын зай атомын нэгжээр)

Шагайлтын зайгаар интегралчлан иончлолын бүрэн огтлолыг тооцооллоо. (Зураг 5). Антипротоны энергийн 0.1-1000кэВ мужид иончлолын бүрэн огтлолыг кулон баазтай дискрет хувьсагчийн аргаар тооцоолсон үр дүнг өргөтгөсөн псевдоспектрал аргаар тооцоолсон [13] ажил болон туршлагын [14] утгатай харьцуулахад сайн тохирч байна.



Зураг 5. Иончлолын бүрэн огтлол антипротоны энергиэс хамаарах хамаарал.

ДҮГНЭЛТ

Тооцоолол бага энергийн мужид хугацааны олон алхамтай тооцоолол хийж байж иончлолын бүрэн огтлолын утга тогтворжиж байсан бол энерги ихсэхэд хугацааны алхамын тооны цөөн утганд тооцооллын үр дүнг тогтворжин нэг утга руу нийлж байв. Бидний тооцоололд хугацааны алхамын тоог ионы энерги бага үед 10000-аас эхэлж энерги ихсэхэд алхамын тоог цөөрүүлж 1000 хүртэл авлаа. Хугацааны алхамын интервалыг сонгохдоо 0.1а.н ээс бага ба ионы шилжилтийн алхам 0.1а.н –ээс бага байхаар авахад тооцоололын нийлэлт сайн байлаа.

Антипротоны энергийн 0.1-1000кэВ мужид иончлолын бүрэн огтлолыг кулон баазтай дискрет хувьсагчийн аргаар тооцоолсон үр дүнг өргөтгөсөн псевдоспектрал аргаар тооцоолсон [13] ажил болон туршлагын утгатай харьцуулахад сайн тохирч байна. Харин антипротоны энергийн бага утганд орбитын квант тоог 7 гоос их үед иончлолын утга псевдоспектрал аргаар бодсон үр дүнд дөхөж байна.

АШИГЛАСАН МАТЕРИАЛ

- [1] S.Sahoo, S.C. Mukherjee and H.R.J Walters, Ionization of atomic hydrogen and He+ by slow antiprotons, Published 23 July 2004 • 2004 IOP Publishing Ltd
- [2] S.Borbely, J.Feist, K. Tokesi, S.Nagele, L. Nagy and J. Burgdorfer, Ionization of helium slow antiproton impact: total and differential cross section, 2014. arXiv: 1409.1379v1
- [3] M. Foster, J. Colgan, and M. S. Pindzola Fully Correlated Electronic Dynamics for Antiproton Impact Ionization of Helium Phys. Rev. Lett. 100, 033201 – Published 24 January 2008
- [4] Knudsen H, Mikkelsen U, Paludan K, Kirsebom K, Moller S P, Uggerhoj E, Slevin J, Charlton M and Morenzoni E 1995 Phys. Rev. Lett. 74 4627
- [5] Peng, Liang-You and Starace, Anthony F., Application of Coulomb wave function discrete variable representation to atomic systems in strong laser fields, 2006. The journal of chemical physics 125,154311.
- [6] Peng, Liang-You and Starace, Anthony F., " Application of Coulomb wave function DVR: to atomic systems in strong laser fields, 2008. arXiv:physics/0604181v1/

- [7] A. Igarashi, S. Nakazaki, and A. Ohsaki. Ionization of atomic hydrogen by antiproton impact, Phys review A, Vol 61, 062712 published 17 May 2000
- [8] Kazuhiro Sakimoto A theoretical study of ionization processes in low-energy collisions between antiprotons and atomic hydrogen using discrete-variable-representation methods J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 33, 2000 3149–3164. Printed in the UK
- [9] Kazuhiro Sakimoto Full quantum-mechanical study of protonium formation in slow collisions of antiprotons with hydrogen atoms, Phys. rev A, Vol 65, 012706 published 12 December 2001
- [10] Nobuhiro Yamanaka, Masashi Kino, Antihydrogen formation in antiproton–positronium collisions. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B 214 (2004) 4043
- [11] Nils Henkel, Matthias Keim and Hans Jürgen L'udde, Tom Kirchner. Density functional theory investigation of antiproton-helium collisions arXiv:1103.3785v1 [physics.atom-ph] 19 Mar 2011
- [12] Xiao Min Tong, Shih I Chu Theoretical study of multiple high-order harmonic generation by intense ultrashort pulsed laser field: A new generalized pseudospectral time dependent method. Chemical Physics 217 (1997) 119-130
- [13] Xiao-Min Tong, Tsutomu Watanabe, Daiji Kato, and Shunsuke Ohtani. Ionization of atomic hydrogen by antiproton impact: A direct solution of the time-dependent Schrödinger equation .PHYSICAL REVIEW A, VOLUME 64, 022711. 2001
- [14] H.Kundsen et. al, Phys.Rev.Lett 74, 4627 (1995)