



УДК 537.563.5

© М. С. Алешин, С. А. Зайцев, 2011

**ИССЛЕДОВАНИЕ РОЛИ НАЧАЛЬНОГО СОСТОЯНИЯ
В ОПИСАНИИ ПРОЦЕССА ДВОЙНОЙ ФОТОИОНИЗАЦИИ
АТОМА ГЕЛИЯ**

Алешин М. С. – студент спец-ти «Физика», e-mail: aleshin.m.s@mail.ru; Зайцев С. А. – д-р физ.-мат. наук, проф. кафедры «Физика», тел. (4212) 73-40-09, e-mail: zaytsev@fizika.khstu.ru (ТОГУ)

Фундаментальная роль реакции двойной фотоионизации атома гелия заключается в возможности с ее помощью теоретического изучения электронных корреляций. Здесь исследуется влияние вида волновой функции начального состояния на значения модуля матричного элемента. Проведены вычисления для двух различных форм волновых функций: учитывающей корреляцию электронов и без ее учета. Используется $C2$ -приближение, в котором волновая функция конечного состояния представляется в виде произведения двух кулоновых волн. Показано, что влияние корреляции оказывается существенным, что свидетельствует о важности ее учета.

The fundamental role of the double photoionization of the helium atom resides in the possibility to study the electron correlations in such reactions. We investigate the influence of the form of the initial state wave function upon the absolute value of the matrix element. Calculations are performed for two different forms of the ground state wave function: 1) with consideration for the inter-electron correlation, and 2) without the use of the electron-electron correlation. We make use of the $C2$ -model approach in which the final state wave function is presented as a product of two Coulomb waves. We demonstrate the importance of taking into account of the electron-electron correlation in this reaction.

Ключевые слова: двойная фотоионизация атомов, электронная корреляция, дифференциальное сечение реакции, $C2$ -приближение, матричный элемент перехода, интеграл Нордсика.

Введение

Процесс двойной фотоионизации атомов ($(\gamma, 2e)$ -реакции), который представляет собой испускание двух электронов вследствие поглощения атомом единственного фотона, является одной из фундаментальных реакций в атомной физике с участием нескольких частиц. Здесь мы сталкиваемся с кулоновской проблемой трех тел, точное решение которой по прежнему не

получено ни для связанных состояний, ни для состояний непрерывного спектра. До недавнего времени экспериментальные и теоретические исследования процессов двойной фотоионизации проводились главным образом для атома гелия. Атом He является простейшей двухэлектронной мишенью, а у иона остатка He^{2+} отсутствует электронная структура, что существенно упрощает теоретическое описание и интерпретацию экспериментальных данных [1].

Фундаментальная роль рассматриваемого процесса происходит из того факта, что это экстремально «чистая» реакция, при которой континуум кулоновской системы трех тел свободен от резонансной структуры, т. е. непрерывный спектр является гладким. Классически это соответствует тому факту, что в конечном состоянии три частицы равномерно удаляются друг от друга без участия в орбитальном вращении. Такая ситуация контрастирует с энергетической областью ниже трехчастичного развала, где в спектре присутствует множество резонансных состояний, и где соответствующее классическое движение является крайне нерегулярным (хаотическим).

В данной работе выполнен расчет матричного элемента, входящего в выражение для тройного дифференциального сечения (TDCS) процесса двойной фотоионизации атома гелия. Предметом исследований является степень влияния выбора волновой функции основного состояния атома гелия на величину матричного элемента, в частности, насколько существенным оказывается вклад, обусловленный учетом корреляции электронов в волновой функции начального состояния.

Теория

Процесс, который мы рассматриваем, представляет собой соударение одного линейно поляризованного фотона с атомами гелия в их основном состоянии. Величина, которая детально характеризует процесс двойной фотоионизации атома – тройное дифференциальное сечение реакции. Оно записывается в виде (см., например, [2]; здесь используются атомные единицы $m_e = e = \hbar = 1$):

$$\frac{d^3\sigma}{dE_1 d\Omega_1 d\Omega_2} = 4\pi^2 \alpha \omega k_1 k_2 \mathbf{T}_{fi}^{(L)}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2), \quad (1)$$

где: \vec{k}_1 и \vec{k}_2 – импульсы выбитых электронов, ω – угловая частота фотона, α – постоянная тонкой структуры. Матричный элемент перехода:

$$\mathbf{T}_{fi}^{(L)}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) = \langle \psi_f | \mathbf{O}^{(L)} | \psi_i \rangle. \quad (2)$$

Мы выбираем оператор $\mathbf{O}^{(L)}$ в форме «длины»:

$$\mathbf{O}^{(L)} = \vec{\varepsilon} \cdot (\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2). \quad (3)$$

Расчеты дифференциальных сечений $(\gamma, 2e)$ -реакции могут быть выполнены по крайней мере для трех различных калибровок оператора $\mathbf{O}^{(L)}$,



и результаты математически эквивалентны, если используемые в расчетах волновые функции начального и конечного состояний являются собственными для одного и того же гамильтониана. Таким образом зависимость результатов расчетов от калибровки может служить мерой отличия начального и конечного гамильтонианов.

Так как рассматриваемый нами процесс выходит за рамки модели независимых частиц (модель Хартри-Фока), то для описания основного состояния атома гелия мы используем волновые функции, предложенные Бонхэмом и Коулом. Они имеют следующий вид:

$$\psi_i(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = N_i(e^{-a r_1} e^{-b r_2} + e^{-b r_1} e^{-a r_2})(1 + C_0 e^{-\lambda_0 r_{12}}). \quad (4)$$

Параметры N_i , a , b , C_0 , λ_0 – подгоночные, определяются так, чтобы функция максимально сходилась с экспериментом. Значения этих параметров приведены в таблице.

Таблица

Параметры волновой функции основного состояния гелия в выражении

Волновая функция	N_i	a	b	C_0	λ_0
GS1	0,70892	2,1832	1,1885	0	
GS2	1,63833	1,4096	2,2058	-0,6054	0,2420

Предметом исследований в данной работе является степень влияния выбора основного состояния атома гелия на величину матричного элемента двойной фотоионизации. При этом мы не учитываем взаимодействие электронов в конечном состоянии, т. е. волновая функция конечного состояния ψ_f задается в виде произведения двух кулоновских волн, а не трех [3]. Другими словами, используется С2-приближение. Поэтому для нашего случая волновая функция конечного состояния будет иметь вид:

$$\psi_f(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 | \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = P_{12} \psi_{\mathbf{k}_1}^-(Z_T; \mathbf{r}_1) \psi_{\mathbf{k}_2}^-(Z_T; \mathbf{r}_2) \quad (5)$$

где:

$$\psi_{\mathbf{k}}^-(Z; \mathbf{r}) = \psi_{\mathbf{k}}^0(\mathbf{r}) D^-(t, \mathbf{k}; \mathbf{r}) \quad (6)$$

– волновая функция кулонового континуума;

$$\psi_{\mathbf{k}}^0(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \text{ – свободная плоская волна;}$$

$$D^-(t, \mathbf{k}; \mathbf{r}) = N(t) F_1(it, 1, -ikr - i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \quad (7)$$

– так называемое кулоново искажение;

$$N(t) = e^{-\pi/2} \Gamma(1 - it) \text{ – кулонов коэффициент;}$$



$t = \frac{-\mu Z}{k}$ – параметр Зоммерфельда, μ – приведенная масса, Z_T – заряд ядра;

$P_{12} = \frac{1}{\sqrt{2}}(1 + P_{12})$, P_{12} – оператор перестановки электронов.

Выражение для $D^-(t, \mathbf{k}; \mathbf{r})$ содержит вырожденную гипергеометрическую функцию ${}_1F_1(a, c; x)$ (функция Куммера). Это приводит в дальнейшем к возникновению интегралов Нордсика.

Расчеты

Хорошо известно, что решения задач для систем из двух заряженных частиц описывается аналитически с использованием функции Куммера ${}_1F_1(a, c, x)$. В частности в работе мы пользуемся выражением, которое является следствием интеграла Нордсика [4]. Вид этого интеграла:

$$I = \int d\mathbf{r} \frac{1}{r} e^{-\lambda r} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} F(-it, 1; ik\xi) = \frac{2\pi}{\alpha} \left(1 + \frac{\beta}{\alpha}\right)^{it}, \quad (8)$$

где введены обозначения:

$$x = r + \mathbf{k}\mathbf{r} \quad K \equiv \frac{\mathbf{k}}{k} \bullet x, \quad \alpha = \frac{1}{2}(q^2 + \lambda^2), \quad \beta = \mathbf{k} \cdot \mathbf{q} - i\lambda k.$$

Здесь экспоненциально убывающий множитель описывает 1s-состояние водородоподобного атома, функция $1/r$ представляет кулонов потенциал, а гипергеометрическая функция описывает состояние конечного континуума ионизированного электрона. Экспоненциальные колебания возникают из плоских волн начального и конечного состояний снаряда [5]. С помощью действительного положительного параметра λ можно получить другие интегралы, содержащие функцию Куммера дифференцированием исходного.

Нами использовались выражения для интегралов следующих видов:

$$I_1(\lambda, \mathbf{q}, \mathbf{k}) = \int d\mathbf{r} e^{-\lambda r} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} F(-it, 1; ik\xi) = \langle e^{-\lambda r} | e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} F(-it, 1, ik\xi) \rangle \quad (9)$$

$$I_2(\lambda, \mathbf{q}, \mathbf{k}) = \int \mathbf{r} d\mathbf{r} e^{-\lambda r} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} F(-it, 1; ik\xi) = \langle e^{-\lambda r} | \mathbf{r} | e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} F(-it, 1, ik\xi) \rangle \quad (10)$$

Ввиду громоздкости их вид здесь не приводим.

Волновую функцию начального состояния можно разбить на две части, такие, что одна из них будет зависеть от межэлектронного взаимодействия, а другая – нет. Это можно сделать, если раскрыть скобку $(1 + C_0 e^{-\lambda_0 r_{12}})$ в выражении (4). Таким образом мы можем разбить и матричный элемент на два слагаемых:

$$\mathbf{T}_{fi}^{(L)} = \mathbf{T}_0 + \mathbf{T}_1, \quad (11)$$



$$\text{где: } T_0 = 2N_i \langle \psi_f(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 | \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) | \mathbf{r}_1 \cdot \boldsymbol{\epsilon} | e^{-ar_1} e^{-br_2} + e^{-br_1} e^{-ar_2} \rangle, \quad (12)$$

$$T_1 = 2N_i \langle \psi_f(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 | \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) | \mathbf{r}_1 \cdot \boldsymbol{\epsilon} | C_0 e^{-\lambda_0 r_{12}} (e^{-ar_1} e^{-br_2} + e^{-br_1} e^{-ar_2}) \rangle \quad (13)$$

Видно, что в последних выражениях содержатся конструкции вида (9) и (10). Таким образом, основные формулы для расчета приведены.

Чтобы упростить расчеты и обойти неизбежные громоздкие вычисления тройных интегралов, которые возникают при учете корреляции, а в частности направлений электронов, мы положили здесь, что импульсы \mathbf{k}_1 и \mathbf{k}_2 вылетающих электронов параллельны. Направление их выбрано вдоль оси z . Тогда можно писать $\mathbf{k}_1 = \mathbf{k}$, $\mathbf{k}_2 = s\mathbf{k}$, где s – коэффициент пропорциональности.

Результаты

Результаты, полученные для матричного элемента волновой функции основного состояния атома гелия, представлены на рис. 1.

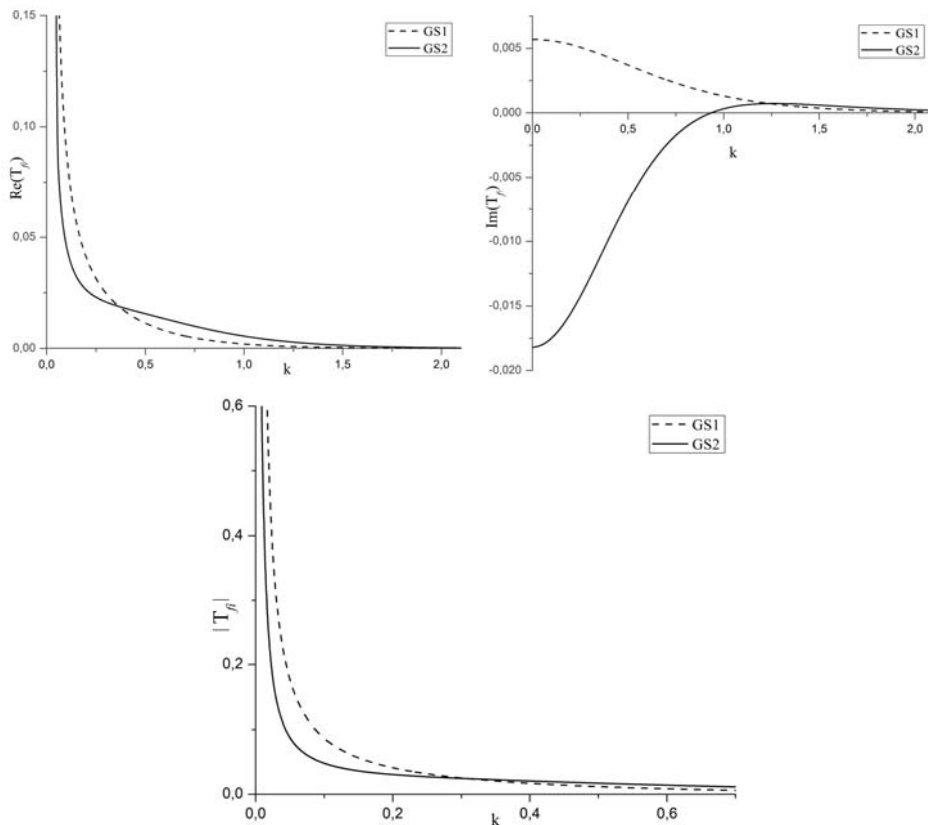


Рис. 1. Действительная и мнимая части матричного элемента и его модуль для волновых функций GS1 и GS2 при $k_1 = k$ и $k_2 = 1.6 k$



На нем для сравнения выводятся одновременно графики матричного элемента, соответствующего волновой функции, не учитывающей корреляцию электронов (функция GS1), и матричного элемента, в котором учтено межэлектронное взаимодействие (функция GS2) (см. таблицу).

Из данных зависимостей видно, что различие формы волновых функций GS1 и GS2 количественно выражается в отличии значений матричного элемента. Расхождение абсолютных значений матричного элемента достигает 50 %, что согласуется с результатами авторов работ (см., напр., [6]), где исследуется роль волновой функции основного состояния атома гелия в расчетах процессов $(\gamma, 2e)$ и $(e, 2e)$.

Таким образом, показано, что учет корреляции в описании такого процесса крайне важен. Кроме того, как свидетельствуют расчеты, этот учет должен вестись как в конечном, так и в начальном состоянии системы.

Библиографические ссылки

1. Реакция двойной фотоионизации атомов в J-матричном подходе / Зайцев С. А., Кныр В. А. // Вестник Тихоокеанского государственного университета. – № 1 (16). – 2010.
2. *Interplay of initial and final states for $(e, 3e)$ and $(\gamma, 2e)$ processes of helium* / Ancarani L. U., Gasaneo G., Colavecchia F. D., Dal Cappello. C. // Phys. Rev. A. – 2008. – V. 77.
3. *Double photoionization of helium: Use of a correlated two-electron continuum wave function* / Kornberg M. A. and Miraglia J. E. // Phys. Rev. A. – 1993. – V. 48.
4. *Reduction of an Integral in the Theory of Bremsstrahlung* / Nordsieck. A. // Phys. Rev. A. – 1953. – V. 93, 4.
5. *Hypergeometric integrals arising in atomic collisions physics* / Colavecchia F. D., Gasaneo G., Garibotti. C. R. // J. Math. Phys. – 1997. – V. 38, 12.
6. *Role of the ground state in electron-atom double ionization* / S. Jones, D. H. Madison // Phys. Rev. Lett. – 2003. – V. 91.