



УДК 541.1.001.5

© С. А. Зайцев, В. А. Кныр, 2010

РЕАКЦИЯ ДВОЙНОЙ ФОТОИОНИЗАЦИИ АТОМОВ В J -МАТРИЧНОМ ПОДХОДЕ

Зайцев С. А. – канд. физ.-мат. наук, доц. кафедры «Физика», тел.: (4212) 73-40-09, e-mail: Zaytsev@fizika.khstu.ru; Кныр В. А. – д-р физ.-мат. наук, проф. завкафедрой «Физика», тел.: (4212) 73-40-09, e-mail: Knyr@fizika.khstu.ru (ТОГУ)

Обсуждается применение J -матричной версии описания кулоновской системы трех тел к процессам двойной фотоионизации атомов. Проведено вычисление тройного дифференциального сечения реакции $(\gamma, 2e)$ на атомах гелия и бериллия. В последнем случае используется приближения замороженного двухэлектронного остова. Результаты вычислений согласуются с экспериментальными данными.

The application of the J -matrix version formulated for the description of the three-body Coulomb system to two-electron single-photon ionization processes is discussed. Triple-differential cross sections of $(\gamma, 2e)$ reactions have been calculated. Results are rather close to the experiment.

Ключевые слова: атом гелия, атом бериллия, фотоионизация, система трех тел, сечение реакции, метод J -матрицы.

Введение

Процесс двойной фотоионизации атомов, который представляет собой испускание двух электронов вследствие поглощения атомом фотона, является одной из фундаментальных реакций в атомной физике с участием нескольких частиц. Фундаментальная роль данной реакции заключается в возможности с её помощью теоретического изучения электронных корреляций. Здесь мы сталкиваемся с кулоновской проблемой трёх 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 [1]. Атом He является простейшей двухэлектронной мишенью, а у иона остатка He^{2+} отсутствует электронная структура, что существенно упрощает теоретическое описание и интерпретацию экспериментальных данных.

Существует класс атомных мишеней, а именно, щелочноземельные атомы, которые можно приближенно рассматривать как двухэлектронные системы. Действительно, компактный электронный кор достаточно сильно отделен и пространственно, и по энергии от валентной ns^2 оболочки. При относительно малых энергиях фотона электроны, принадлежащие коре, не принимают участия в фотоионизации внешних валентных электронов. Таким образом, влияние кора на валентные электроны проявляется в виде потенциала самосогласованного поля и поляризованного потенциала [2].

В данной работе выполнен расчёт тройного дифференциального сечения (TDCS) процесса двойной фотоионизации атома гелия. Волновая функция конечного состояния системы, которое принадлежит непрерывному спектру, получена в рамках варианта [3, 4] J -матричного подхода [5], разработанного нами для описания кулоновской системы трёх тел. Результаты расчёта согласуются по форме с экспериментальными данными. Мы также рассчитали сечение реакции $(\gamma, 2e)$ на атоме бериллия. При этом эффект замороженного двухэлектронного остова был учтён путем включения локального потенциала самосогласованного поля. Поскольку соответствующее TDCS не фиксировалось в экспериментах, мы сравнили теоретические результаты со значениями, полученными для атома гелия, чтобы оценить влияние кора на валентные электроны.

1. Теория

Тройное дифференциальное сечение реакции двойной фотоионизации атома записывается в виде [6] (здесь используются атомные единицы $m_e = e = \hbar = 1$)

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_1 d\Omega_2 dE_2} = \frac{4\pi^2 \alpha k_1 k_2}{\omega} \left| T(\vec{k}_1, \vec{k}_2) \right|^2, \quad (1)$$

где \vec{k}_1 и \vec{k}_2 — импульсы выбитых электронов, ω — угловая частота фотона, α — постоянная тонкой структуры. В выражении

$$T(\vec{k}_1, \vec{k}_2) = \langle \Psi_f^{(-)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) | W(\vec{r}_1, \vec{r}_2) | \Psi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \rangle \quad (2)$$

для матричного элемента перехода оператор $W(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ представляется в форме «длины»:

$$W(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \vec{\varepsilon} \cdot (\vec{r}_1 + \vec{r}_2), \quad (3)$$



где $\vec{\varepsilon}$ — вектор поляризации фотона, \vec{r}_1 и \vec{r}_2 — координаты электронов. Волновые функции начального $\Psi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ и конечного $\Psi_f^{(-)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ состояний системы ищутся в виде разложений по базисам квадратично-интегрируемых функций.

Гамильтониан системы трёх тел имеет вид

$$H = -\Delta_1/2 - \Delta_2/2 + V(r_1) + V(r_2) + 1/r_{12}, \quad (4)$$

где $r_{12} = |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$ — расстояние между электронами, Δ_1 (Δ_2) — оператор Лапласа первого (второго) электрона, $V(r_1)$ и $V(r_2)$ — энергии взаимодействия соответственно первого и второго электрона с ядром в случае атома гелия ($V(r) = -2/r$) и с остовом в случае атома бериллия. Таким образом, в случае атома бериллия к кулоновскому взаимодействию электрона с остовом Be^{2+} следует добавить локальный потенциал самосогласованного поля, в результате потенциальная энергия валентного электрона описывается функцией

$$V(r) = -\frac{2}{r} - \frac{2e^{-5.4r}}{r} - 5.4e^{-4.36r}. \quad (5)$$

Потенциал (5) позволяет описать энергетическое положение ($E_{2s} = 0,6609$) одноэлектронного состояния $2s$ иона бериллия Be^+ , гамильтониан которого задается выражением

$$H_{Be^+} = -\Delta/2 + V(r). \quad (6)$$

В нашем подходе волновая функция $\Psi_f^{(-)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ представляется в виде парциального разложения

$$\begin{aligned} \Psi_f^{(-)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = & \frac{2}{\pi} \frac{\sqrt{2}}{k_1 k_2} \sum_{L, \ell_0, \lambda_0, m_0, \mu_0} (\ell_0 m_0 \lambda_0 \mu_0 | LM) \times \\ & \times i^{\ell_0 + \lambda_0} e^{-i(\sigma_{\ell_0} + \sigma_{\lambda_0})} Y_{\ell_0 m_0}^*(\hat{k}_1) Y_{\lambda_0 \mu_0}^*(\hat{k}_2) \psi_{\ell_0 \lambda_0}^{LM}, \end{aligned} \quad (7)$$

пространственная часть $\psi_{\ell_0 \lambda_0}^{LM}$ которого в свою очередь раскладывается по бисферическому базису и квадратично-интегрируемым функциям:

$$\psi_{\ell_0 \lambda_0}^{LM} = \sum_{\ell, \lambda, n, \nu} C_{n\nu}^{L(\ell\lambda)}(E) |n\ell\nu\lambda; LM\rangle, \quad (8)$$

$$|n\ell\nu\lambda; LM\rangle = \frac{\varphi_n^\ell(r_1) \varphi_\nu^\lambda(r_2)}{r_1 r_2} Y_{\ell\lambda}^{LM}(\hat{r}_1, \hat{r}_2), \quad (9)$$

$$Y_{\ell\lambda}^{LM}(\hat{r}_1, \hat{r}_2) = (\ell m \lambda \mu | LM) Y_{\ell m}(\hat{r}_1) Y_{\lambda \mu}(\hat{r}_2). \quad (10)$$

Лагерровские базисные функции φ_n^ℓ в (9) имеют вид

$$\varphi_n^\ell(x) = [(n+1)_{(2\ell+1)}]^{-1/2} (2bx)^{\ell+1} e^{-bx} L_n^{2\ell+1}(2bx), \quad (11)$$

где b — масштабный параметр, удачный выбор которого влияет на скорость сходимости численных результатов. Искомые коэффициенты $C_{nv}^{L(\ell\lambda)}$ являются решением системы алгебраических уравнений, которая представляет собой дискретный аналог уравнения Липпмана-Швингера.

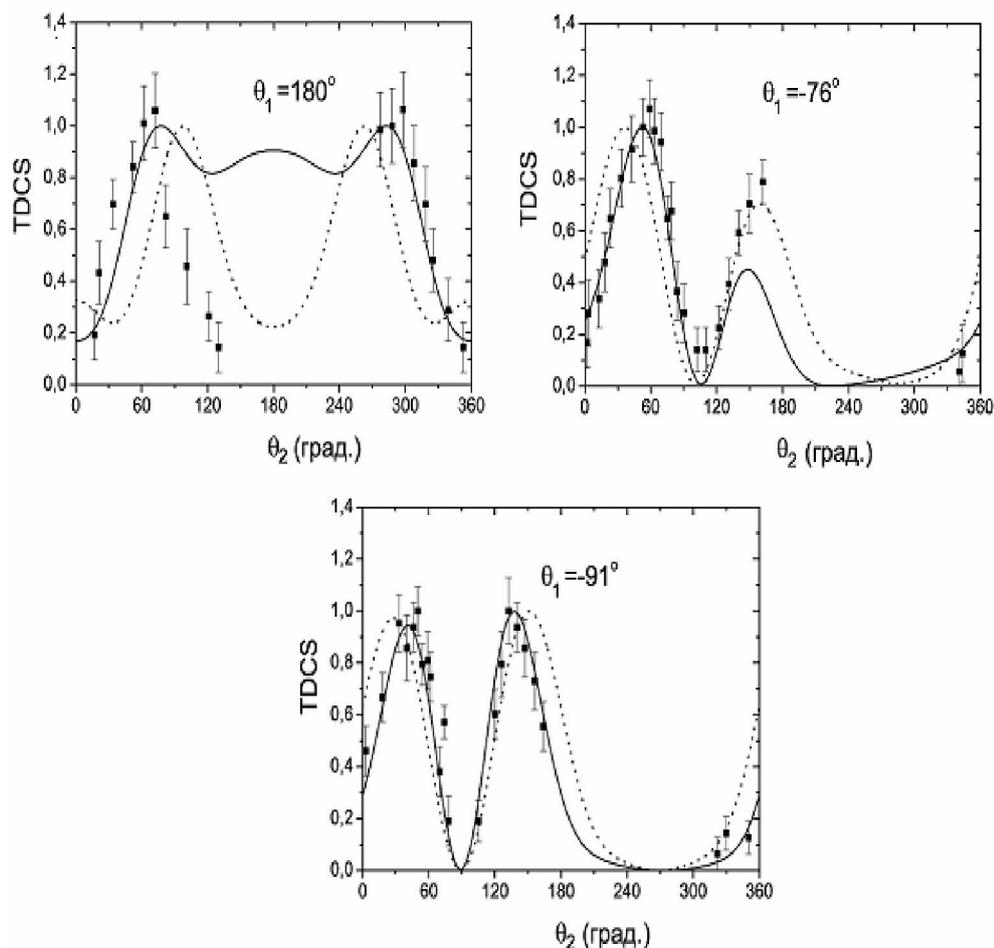
2. Результаты

Волновая функция $\Psi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ мишени получена в результате диагонализации матрицы гамильтониана (4), рассчитанной в базисе (8). Здесь мы ограничились значением $\ell_{max} = 5$ и $n_{max} = v_{max} = 20$ базисных функций по каждой координате r_1 и r_2 (всего 2646 состояний). Выбор базисного параметра $b_0 = 2$ даёт значение $E_0 = -2,03603$ для энергии основного состояния атома гелия и $E_0 = -6,7375$ для энергии основного состояния мишени.

Вычисляя волновую функцию $\Psi_f^{(-)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ (7) конечного состояния, мы ограничились значением полного орбитального момента $L_{max} = 2$ и $\ell, \lambda \leq 5$. В вычислениях использовалось количество $N = 21$ радиальных базисных функций по каждой координате. Значение базисного параметра (11) было выбрано равным $b = 0,3$.

Значения TDCS (3) рассчитаны для компланарного случая, когда испущенные из атома электроны движутся в плоскости xz ($\varphi_1 = \varphi_2 = 0$), причём ось z направлена вдоль вектора поляризации фотона. Энергии вылетевших электронов равны: $E_1 = E_2 = 10$ эВ. Угол вылета θ_1 одного из электронов фиксирован, тогда как угол θ_2 вылета второго электрона пробегает интервал от 0° до 360° . Результаты расчёта TDCS (в относительных единицах), полученные для различных θ_1 , представлены на рисунке: для атома гелия — сплошная линия; для атома бериллия — пунктирная линия. Экспериментальные данные взяты из работы [7]. Сравнение результатов расчёта с экспериментальными данными показывает, что имеет место согласие формы теоретических сечений с экспериментальными (в разной степени для различных кинематик).

Вместе с тем по результатам расчёта невозможно сделать оценку влияния взаимодействия валентных электронов с замороженным остовом, поскольку отличия в значениях теоретических сечений для атомов гелия и бериллия не превышают расхождений теоретических результатов и экспериментальных данных, которые имеют место в случае атома гелия.



TDCS реакции двойной фотоионизации атомов: гелия – сплошная линия; бериллия – пунктирная линия. Энергии испущенных электронов равны $E_1 = E_2 = 10$ эВ. Экспериментальные данные для гелия взяты из [7]

Работа поддержана региональным грантом РФФИ «Дальний Восток» (проект 08-02-98501).

Библиографические ссылки

1. *Differential* cross sections for photo-double-ionization of the helium atom / J. S. Briggs and V. Schmidt // J. Phys. B 2000. Vol. 33.
2. *Frozen-core* model of the double photoionization of beryllium / A. S. Kheifets, I. Bray // Phys. Rev. A 2000. Vol. 65.



3. *Application* of the J-matrix method to Faddeev-Merkuriev equations for $(e,2e)$ reactions: Beyond pseudostates / S. A. Zaytsev, V. A. Knyr, Yu. V. Popov, A. Lahmam-Bennani // Phys. Rev. A 2007. Vol. 76.
4. *Описание* реакции $(e,3e)$ на атоме гелия на основе решения уравнения Фаддеева-Меркурьева в J-матричном подходе / С. А. Зайцев, В. А. Кныр, Ю. В. Попов // Вестник ТОГУ. 2005. № 1(1); Проблема трёх заряженных тел в J-матричном подходе / С. А. Зайцев, В. А. Кныр, Ю. В. Попов, А. Ламам-Беннани // Вестник ТОГУ. 2005. № 4(7).
5. *New L^2* approach to quantum scattering: Theory / E. J. Heller, H. A. Yamani // Phys. Rev. A 2007. Vol. 9.
6. *Interplay* of initial and final states for $(e, 3e)$ and $(\gamma, 2e)$ processes on helium / L. U. Ancarani, G. Gasaneo, F. D. Colavecchia, C. Dal Capello // Phys. Rev. A 2008. Vol. 77.
7. *Application* of the CCC method to the calculation of helium double-photoionization triply differential cross sections / A. S. Kheifets, I. Bray // J. Phys. B 1998. Vol. 31.