

ВКЛАД ЦЕНТРАЛЬНОЙ ЧАСТИ ЭЛЕКТРОННОГО ЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО СПЕКТРА В ПОЛНОЕ СЕЧЕНИЕ ДВОЙНОЙ ФОТОИОНИЗАЦИИ ГЕЛИЯ В АСИМПТОТИЧЕСКОЙ НЕРЕЛЯТИВИСТСКОЙ ОБЛАСТИ ЭНЕРГИЙ

А. И. Михайлов, И. А. Михайлов*

*Петербургский институт ядерной физики Российской академии наук
188300, Гатчина, Ленинградская обл., Россия*

Поступила в редакцию 21 июля 2003 г.

Рассматривается двойная фотоионизация гелия при высоких энергиях фотона в нерелятивистском подходе. Изучаются центральная область электронного спектра и ее вклад в полное сечение процесса и в отношение сечений двойной и однократной ионизаций. Межэлектронное взаимодействие в начальном состоянии учитывается точно, тогда как взаимодействие между быстрыми вылетающими электронами рассчитывается по теории возмущений. Дается детальный вывод выражения для отношения сечений двойной и однократной ионизаций. Проанализированы и исправлены соответствующие результаты других авторов.

PACS: 32.80.Fb, 32.80.Cy

1. ВВЕДЕНИЕ

Двукратная ионизация атома одним фотоном привлекает внимание многих исследователей возможностью эффективно изучать электронные корреляции в атоме. В силу одночастичного характера электрон-фотонного взаимодействия одновременное выбивание двух электронов одним фотоном целиком обусловлено межэлектронным взаимодействием. В асимптотической нерелятивистской области энергий ($I \ll \omega \ll m$, I — энергия ионизации атома, ω — энергия фотона, m — масса электрона; используется релятивистская система единиц $\hbar = c = 1$) получен ряд простых формул для отношения сечений двукратной и однократной ионизаций, а также для энергетического распределения фотоэлектронов [1, 2]. В отличие от однократного фотоэффекта, где электроны вылетают с определенной энергией, в двойном фотоэффекте электрон может иметь любую энергию, так как избыточная энергия фотона делится между двумя электронами. Энергетический спектр электронов простирается от нуля до $E_{max} = \omega - I^{++}$, где I^{++} — энергия двукратной ионизации атома.

Спектр симметричен относительно середины энергетического интервала, $E_0 = E_{max}/2$. Наибольший вклад в полное сечение набирается от краевых областей спектра, где один электрон медленный, а другой быстрый ($E_1 \sim E_{max}$, $E_2 \sim I$ либо $E_1 \sim I$, $E_2 \sim E_{max}$). Вклад, обусловленный краевой частью спектра, ведет себя как $\omega^{-7/2}$ при высоких энергиях фотона. Так же ведет себя сечение однократного фотоэффекта. Поэтому отношение R полных сечений двукратной и однократной ионизаций не зависит от ω в асимптотической области фотонных энергий. Центральная часть фотоэлектронного спектра ($E_1 \sim E_2$), где оба электрона являются быстрыми, тоже дает заметный вклад в полное сечение (на уровне 5–10% [2]), убывая, однако, медленнее с ростом энергии фотона (как $\omega^{-5/2}$), что приводит к появлению растущего с ω вклада R' в отношение R полных сечений ($R' \sim \omega$), который в нерелятивистской области все же меньше краевого вклада. Остальные части спектра дают значительно меньший вклад и обычно не рассматриваются.

В краевой области спектра ядру передается большой импульс, поэтому один электрон должен оказаться вблизи ядра, в то время как второй электрон может находиться где-то внутри атома. В цен-

*E-mail: A.Mikhailov@thd.pnpi.spb.ru

тральной части спектра два электрона могут поглотить один фотон, деля его энергию и импульс между собой. Процесс протекает на больших расстояниях от ядра (порядка размера атома) с передачей ядру малого импульса $q \sim \eta$ (η — средний импульс связанного электрона). При этом межэлектронные расстояния должны быть малыми, чтобы обеспечить достаточно сильное электрон-электронное взаимодействие, в результате которого оба электрона приобретают большие противоположно направленные импульсы ($p_{1,2} \approx \sqrt{m\omega} \gg \omega$, $\mathbf{p}_1 \approx -\mathbf{p}_2$). Такой квазисвободный механизм двойной фотоионизации впервые был рассмотрен в [1] и более детально в [2]. Центральная часть спектра двойной фотоионизации изучалась также в релятивистской области энергий [3, 4]. В работе [4] было показано, что в нерелятивистском пределе вклад от центральной области в два раза меньше вклада, полученного в [2] для той же волновой функции начального состояния¹⁾, которая использовалась в [4]. Недавно появились еще две работы [5, 6], в которых изучался квазисвободный механизм. Результаты, полученные в [5], тоже были примерно в два раза меньше, чем в [2]. Однако авторы более поздней работы [6], используя очень точную двухэлектронную волновую функцию начального состояния [7, 8], вычислили вклад центральной части спектра в сечение ионизации по формуле, полученной в [2]. Соответственно, их результаты почти вдвое превосходят результаты Корнберга и Мираглиа [5].

Цель настоящей работы — дать детальный вывод формулы, описывающей центральную часть электронного энергетического спектра. Мы рассмотрим только асимптотическую нерелятивистскую область энергий фотона, $I \ll \omega \ll m$, где вклад центральной части спектра наиболее заметен.

2. АМПЛИТУДА ДВОЙНОГО ФОТОЭФЕКТА В ЦЕНТРАЛЬНОЙ ОБЛАСТИ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО СПЕКТРА

Будем рассматривать двукратную фотоионизацию гелия и гелиеподобных ионов при условии, что для импульсов обоих фотоэлектронов выполняется условие $p_1, p_2 \gg \eta$. Такие электроны принадлежат центральной области энергетического спектра. В нерелятивистском приближении полная волновая функция двухэлектронной системы берется

в виде произведения спиновой и координатной волновых функций. Поскольку главная часть электронно-фотонного взаимодействия при нерелятивистских энергиях не содержит спиновых операторов, спиновая функция атома не меняется и выпадает из рассмотрения. В силу принципа Паули симметрия координатной волновой функции относительно перестановки электронов также не меняется. В случае ионизации основного состояния гелия координатная волновая функция является симметричной. Далее, говоря о волновой функции системы, будем иметь в виду только ее координатную часть.

Общее выражение для амплитуды двойной фотоионизации имеет вид

$$M^{++} = \langle \Psi_f(1, 2) | \hat{\gamma}(1) + \hat{\gamma}(2) | \Psi_i(1, 2) \rangle = 2 \langle \Psi_f | \hat{\gamma} | \Psi_i \rangle. \quad (1)$$

Стоящие в скобках цифры 1 и 2 заменяют аргументы электронов. Оператор $\hat{\gamma}$ электрон-фотонного взаимодействия является одночастичным оператором. В координатном представлении

$$\hat{\gamma} = N_\gamma \left(-\frac{ie\nabla}{m} \right) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}, \quad N_\gamma = \sqrt{\frac{2\pi\alpha}{\omega}}. \quad (2)$$

Далее мы исключим множитель N_γ из амплитуды и учтем его в формуле для сечения. Здесь $\alpha = e^2 = 1/137$, \mathbf{k} , ω и \mathbf{e} — импульс, энергия и вектор поляризации фотона.

В качестве волновой функции Ψ_i начального состояния мы используем точные двухэлектронные функции гелия и гелиеподобных ионов. Конкретный вид этих функций понадобится только при получении численного результата. Волновая функция Ψ_f конечного состояния строится с помощью теории возмущений по межэлектронному взаимодействию. В нулевом приближении функция Ψ_f есть произведение одночастичных кулоновских функций ψ_p . В центральной части спектра оба фотоэлектрона имеют высокую энергию $E_{1,2} \sim \omega/2 \gg I$ и большие импульсы $p_{1,2} \gg \eta$. При этом кулоновский параметр ξ мал ($\xi_{1,2} = \eta/p_{1,2} \ll 1$) и волновые функции ψ_p непрерывного спектра могут быть разложены по этому параметру. Мы ограничимся низшими членами этого разложения — плоскими волнами. Тогда, оставляя только два первых члена разложения по межэлектронному взаимодействию, имеем

$$\Psi_f = \Psi_f^{(0)} + \Psi_f^{(1)}, \quad (3)$$

¹⁾ Расчет в [2] проведен для различных волновых функций начального состояния.

$$\begin{aligned}\Psi_f^{(0)} &= \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_{p_1}(\mathbf{r})\psi_{p_2}(\mathbf{r}') + \mathbf{p}_1 \leftrightarrow \mathbf{p}_2] \approx \\ &\approx \frac{1}{\sqrt{2}} [\exp(i\mathbf{p}_1 \cdot \mathbf{r}) \exp(i\mathbf{p}_2 \cdot \mathbf{r}') + \mathbf{p}_1 \leftrightarrow \mathbf{p}_2],\end{aligned}\quad (4)$$

$$\begin{aligned}\Psi_f^{(1)} &= G_{12} V_{12} \Psi_f^{(0)}, \\ G_{12} &= (E_f - H_1 - H_2 + i0)^{-1},\end{aligned}\quad (5)$$

$$E_f = E_1 + E_2 = \omega - I^{++} \approx \omega.\quad (6)$$

Здесь I^{++} — энергия двойной ионизации K -оболочки, V_{12} — оператор межэлектронного взаимодействия, G_{12} — двухчастичный гриновский оператор, H_1 , H_2 — одночастичные гамильтонианы. В плосковолновом приближении H_1 и H_2 являются гамильтонианами свободных частиц. Равенство (6) есть закон сохранения энергии для изучаемого процесса.

После подстановки (3), (4) в (1) получаем

$$M^{++} = \sqrt{2}(A^{(0)} + A^{(1)} + \mathbf{p}_1 \leftrightarrow \mathbf{p}_2),\quad (7)$$

$$\begin{aligned}A^{(0)} &= \langle \psi_{p_1} \psi_{p_2} | \hat{\gamma} | \Psi_i \rangle, \\ A^{(1)} &= \langle \psi_{p_1} \psi_{p_2} | V_{12} G_{12} \hat{\gamma} | \Psi_i \rangle.\end{aligned}\quad (8)$$

2.1. Расчет амплитуды $A^{(0)}$

Матричный элемент, определяющий амплитуду $A^{(0)}$, вычислим в координатном представлении:

$$\begin{aligned}A^{(0)} &= \frac{1}{m} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \exp(-i\mathbf{p}_1 \cdot \mathbf{r} - i\mathbf{p}_2 \cdot \mathbf{r}') (-ie\nabla) \times \\ &\times \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \Psi_i(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{e\mathbf{p}_1}{m} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \times \\ &\times \exp(-i\boldsymbol{\kappa}_1 \cdot \mathbf{r} - i\mathbf{p}_2 \cdot \mathbf{r}') \Psi_i(\mathbf{r}, \mathbf{r}'), \quad \boldsymbol{\kappa}_1 = \mathbf{p}_1 - \mathbf{k}.\end{aligned}\quad (9)$$

Подынтегральное выражение в (9) содержит две быстроосциллирующие функции и неудобно для численной оценки. Такую оценку легко получить, если перейти к новым переменным

$$\mathbf{R} = \frac{1}{2}(\mathbf{r} + \mathbf{r}'), \quad \boldsymbol{\rho} = \mathbf{r}' - \mathbf{r}.\quad (10)$$

При этом $d\mathbf{r} d\mathbf{r}'$ заменится на $d\mathbf{R} d\boldsymbol{\rho}$. Из (10) следует

$$\mathbf{r} = \mathbf{R} - \boldsymbol{\rho}/2, \quad \mathbf{r}' = \mathbf{R} + \boldsymbol{\rho}/2.\quad (11)$$

Тогда

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\kappa}_1 \mathbf{r} + \mathbf{p}_2 \mathbf{r}' &= \mathbf{q}\mathbf{R} + \mathbf{a}\boldsymbol{\rho}, \quad \mathbf{q} = \mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 - \mathbf{k}, \\ \mathbf{a} &= \mathbf{p}_2 - \mathbf{q}/2,\end{aligned}\quad (12)$$

$$\Psi_i(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \Phi_i(\mathbf{R}, \boldsymbol{\rho}).\quad (13)$$

Амплитуда $A^{(0)}$ преобразуется к виду

$$A^{(0)} = \frac{\mathbf{e} \cdot \mathbf{p}_1}{m} \int d\mathbf{R} e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}} \int d\boldsymbol{\rho} e^{-i\mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\rho}} \Phi_i(\mathbf{R}, \boldsymbol{\rho}).\quad (14)$$

Мы рассматриваем центральную область спектра, где переданный ядру импульс мал ($q \sim \eta$). Интеграл по \mathbf{R} содержит слабоосциллирующую функцию и насыщается при больших (порядка размера атома) $R \sim q^{-1} \sim \eta^{-1}$. Интеграл по $\boldsymbol{\rho}$, напротив, содержит быстроосциллирующую ($a \equiv |\mathbf{a}| \gg q$) функцию и насыщается при малых $\rho \sim a^{-1} \sim p_2^{-1}$. Его можно преобразовать следующим образом:

$$\begin{aligned}I(\mathbf{a}, \mathbf{R}) &\equiv \int d\boldsymbol{\rho} e^{-i\mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\rho}} \Phi_i(\mathbf{R}, \boldsymbol{\rho}) = \\ &= -\frac{1}{a^2} \int d\boldsymbol{\rho} \Phi_i(\mathbf{R}, \boldsymbol{\rho}) \Delta_\rho e^{-i\mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\rho}} = \\ &= -\frac{1}{a^2} \int d\boldsymbol{\rho} e^{-i\mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\rho}} \Delta_\rho \Phi_i(\mathbf{R}, \boldsymbol{\rho}) \approx \\ &\approx -\frac{1}{a^2} \int d\boldsymbol{\rho} e^{-i\mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\rho}} [\Delta_\rho \Phi_i(\mathbf{R}, \boldsymbol{\rho})]_{\rho \rightarrow 0}.\end{aligned}\quad (15)$$

Здесь $\Delta_\rho \equiv \nabla_\rho^2$ — оператор Лапласа по переменной $\boldsymbol{\rho}$. Выражение в квадратных скобках может быть найдено из уравнения Шредингера для гелия (гелиеподобного иона), записанного в переменных \mathbf{R} и $\boldsymbol{\rho}$:

$$\begin{aligned}\left(-\frac{\Delta_R}{4m} - \frac{\Delta_\rho}{m} - \frac{\alpha Z}{|\mathbf{R} - \boldsymbol{\rho}/2|} - \frac{\alpha Z}{|\mathbf{R} + \boldsymbol{\rho}/2|} + \frac{\alpha}{\rho} - \varepsilon_i \right) \times \\ \times \Phi_i(\mathbf{R}, \boldsymbol{\rho}) = 0,\end{aligned}\quad (16)$$

ε_i — энергия начального состояния.

Оставляя в (16) при $\rho \rightarrow 0$ только главные члены, получаем

$$[\Delta_\rho \Phi_i(\mathbf{R}, \boldsymbol{\rho})]_{\rho \rightarrow 0} = \frac{m\alpha}{\rho} \Phi_i(\mathbf{R}, 0).\quad (17)$$

После подстановки (17) в (15) имеем

$$\begin{aligned}I(\mathbf{a}, \mathbf{R}) &\approx -\frac{m\alpha}{a^2} \Phi_i(\mathbf{R}, 0) \int d\boldsymbol{\rho} \frac{e^{-i\mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\rho}}}{\rho} = \\ &= -\frac{4\pi\alpha}{a^4} m \Phi_i(\mathbf{R}, 0),\end{aligned}\quad (18)$$

$$A^{(0)} = -\frac{4\pi\alpha}{a^4} \mathbf{e} \cdot \mathbf{p}_1 S(\mathbf{q}),\quad (19)$$

$$\begin{aligned}S(\mathbf{q}) &= \int d\mathbf{R} e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}} \Phi_i(\mathbf{R}, 0) = \\ &= \int d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} \Psi_i(\mathbf{r}, \mathbf{r}).\end{aligned}\quad (20)$$

2.2. Расчет амплитуды $A^{(1)}$

Расчет амплитуды $A^{(1)}$ также выполним в координатном представлении:

$$A^{(1)} = \frac{1}{m} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \Psi_f^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') (-ie\nabla) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \Psi_i(\mathbf{r}, \mathbf{r}'), \quad (21)$$

$$\begin{aligned} \Psi_f^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') &= \langle \Psi_f^{(0)} | V_{12} G_{12} | \mathbf{r}, \mathbf{r}' \rangle = \\ &= \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \exp(-i\mathbf{p}_1 \cdot \mathbf{r}_1 - i\mathbf{p}_2 \cdot \mathbf{r}_2) \times \\ &\quad \times \frac{\alpha}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \langle \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 | G_{12} | \mathbf{r}, \mathbf{r}' \rangle, \quad (22) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 | G_{12} | \mathbf{r}, \mathbf{r}' \rangle &= \int \frac{d\mathbf{f}}{(2\pi)^3} \frac{ds}{(2\pi)^3} \times \\ &\quad \times \frac{\exp[i\mathbf{f} \cdot (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}) + i\mathbf{s} \cdot (\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}')] }{\omega - (f^2 + s^2)/2m + i0}. \quad (23) \end{aligned}$$

Анализ выражения для $A^{(1)}$ показывает, что главный вклад порядка $\alpha\eta/p_1^4$ в амплитуду набирается в области $f \sim s \sim \eta$, тогда как вклад от области $f \sim s \sim p_1$ оказывается в $(p_1/\eta)^3$ раз меньше. Поэтому для G_{12} можно использовать более простое выражение, которое получается из (23), если там пренебречь членом $(f^2 + s^2)/2m$ по сравнению с ω . Тогда

$$\langle \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 | G_{12} | \mathbf{r}, \mathbf{r}' \rangle = \frac{1}{\omega} \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}) \delta(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}'), \quad (24)$$

$$\Psi_f^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{\alpha}{\omega} \frac{\exp(-i\mathbf{p}_1 \cdot \mathbf{r} - i\mathbf{p}_2 \cdot \mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}. \quad (25)$$

Подставляя (25) в (21) и интегрируя по частям, получаем

$$\begin{aligned} A^{(1)} &= \frac{\alpha}{m\omega} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \left(\frac{\mathbf{e} \cdot \mathbf{p}_1}{\rho} + \frac{i\mathbf{e} \cdot \boldsymbol{\rho}}{\rho^3} \right) \times \\ &\quad \times \exp(-i\mathbf{p}_1 \cdot \mathbf{r} - i\mathbf{p}_2 \cdot \mathbf{r}' + i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \Psi_i(\mathbf{r}, \mathbf{r}'). \quad (26) \end{aligned}$$

Дальнейший расчет выполнить несложно, если опять перейти к переменным \mathbf{R} и $\boldsymbol{\rho}$. Учитывая только главный член разложения по q/p_1 , находим простое выражение для $A^{(1)}$:

$$\begin{aligned} A^{(1)} &= \frac{\alpha}{m\omega} \int d\mathbf{R} d\boldsymbol{\rho} \left(\frac{\mathbf{e} \cdot \mathbf{p}_1}{\rho} + \frac{i\mathbf{e} \cdot \boldsymbol{\rho}}{\rho^3} \right) \times \\ &\quad \times \exp(-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R} - i\mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\rho}) \Phi_i(\mathbf{R}, \boldsymbol{\rho}) \approx \\ &\quad \approx \frac{\alpha}{m\omega} \int d\mathbf{R} \exp(-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}) \Phi_i(\mathbf{R}, 0) \times \\ &\quad \times \int d\boldsymbol{\rho} \exp(-i\mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\rho}) \left(\frac{\mathbf{e} \cdot \mathbf{p}_1}{\rho} + \frac{i\mathbf{e} \cdot \boldsymbol{\rho}}{\rho^3} \right) = \\ &\quad = \frac{2\pi\alpha}{m\omega} \frac{\mathbf{e} \cdot \mathbf{q}}{a^2} S(\mathbf{q}). \quad (27) \end{aligned}$$

2.3. Вывод выражения для амплитуды M^{++} процесса

Чтобы найти амплитуду M^{++} , надо к $A^{(0)}$ и $A^{(1)}$ добавить обменные члены. С учетом закона сохранения импульса получаем

$$\begin{aligned} A^{(0)} + \mathbf{p}_1 \leftrightarrow \mathbf{p}_2 &= -4\pi\alpha S(\mathbf{q}) \left(\frac{\mathbf{e} \cdot \mathbf{p}_1}{a^4} + \frac{\mathbf{e} \cdot \mathbf{p}_2}{b^4} \right) = \\ &= -4\pi\alpha S(\mathbf{q}) \left[\mathbf{e} \cdot \mathbf{p}_1 \left(\frac{1}{a^4} - \frac{1}{b^4} \right) + \frac{\mathbf{e} \cdot \mathbf{q}}{b^4} \right], \quad (28) \end{aligned}$$

$$a = |\mathbf{p}_2 - \mathbf{q}/2|, \quad b = |\mathbf{p}_1 - \mathbf{q}/2|, \quad (29)$$

$$A^{(1)} + \mathbf{p}_1 \leftrightarrow \mathbf{p}_2 = \frac{2\pi\alpha}{m\omega} \mathbf{e} \cdot \mathbf{q} S(\mathbf{q}) \left(\frac{1}{a^2} + \frac{1}{b^2} \right). \quad (30)$$

Сравнивая (28) и (30), видим, что вследствие сокращения главных членов в полной (с учетом обменных слагаемых $\mathbf{p}_1 \leftrightarrow \mathbf{p}_2$) амплитуде $A^{(0)}$, она оказалась одного порядка малости с полной амплитудой $A^{(1)}$, что и явилось причиной их совместного рассмотрения.

Выразим энергии и импульсы фотоэлектронов через $\Delta = E_1 - E_2$:

$$\begin{aligned} E_1 &= \frac{\omega + \Delta}{2}, \quad E_2 = \frac{\omega - \Delta}{2}, \\ p_1^2 &= m(\omega + \Delta), \quad p_2^2 = m(\omega - \Delta). \quad (31) \end{aligned}$$

В центральной части спектра переданный ядру импульс q мал. Поэтому законы сохранения энергии и импульса можно представить в виде

$$E_1 + E_2 = \omega, \quad \mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 = \mathbf{k}. \quad (32)$$

Решая совместно эти уравнения, находим ограничение на Δ :

$$|\Delta| \leq \omega \sqrt{\frac{\omega}{m}} \ll \omega. \quad (33)$$

Условие (33) определяет границы центральной области спектра. В низшем порядке по параметру $(\omega/m)^{1/2}$ имеем

$$E_1 = E_2 = \frac{\omega}{2}, \quad p_1 = p_2 = \sqrt{m\omega}, \quad (34)$$

$$b^4 - a^4 = 4m\omega(m\Delta - \mathbf{p}_1 \cdot \mathbf{q}) \simeq 4m\omega \mathbf{p}_1 \cdot \mathbf{k}. \quad (35)$$

Складывая (28) и (30), замечаем, что члены, пропорциональные $\mathbf{e} \cdot \mathbf{q}$, сокращаются²⁾, и приходим к простому выражению для M^{++} :

$$M^{++} = -4\pi\alpha\sqrt{2}F, \quad (36)$$

$$F = S(\mathbf{q}) \frac{4(\mathbf{e} \cdot \mathbf{n}_1)(\mathbf{k} \cdot \mathbf{n}_1)}{(m\omega)^2}, \quad \mathbf{n}_1 = \frac{\mathbf{p}_1}{p_1}.$$

3. ВКЛАД ЦЕНТРАЛЬНОЙ ОБЛАСТИ СПЕКТРА В ПОЛНОЕ СЕЧЕНИЕ ДВОЙНОЙ ИОНИЗАЦИИ

Дифференциальное сечение двойной ионизации определяется следующей формулой:

$$d\sigma^{++} = N_\gamma^2 |M^{++}|^2 \frac{d\mathbf{p}_1 d\mathbf{p}_2}{(2\pi)^6} 2\pi\delta(E_1 + E_2 - \omega). \quad (37)$$

Подставляя (36) в (37), получаем вклад центральной области спектра в сечение:

$$d\sigma_{c.r.}^{++} = (4\pi\alpha)^3 |F|^2 \frac{d\mathbf{p}_1 d\mathbf{p}_2}{\omega(2\pi)^5} \delta(E_1 + E_2 - \omega). \quad (38)$$

Чтобы вычислить полное сечение, перейдем от $d\mathbf{p}_2$ к $d\mathbf{q}$ и заменим $d\mathbf{p}_1$ на $m p_1 dE_1 d\Omega_1$. Из определения \mathbf{q} (12) следует, что энергия E_2 будет функцией E_1 и \mathbf{q} :

$$E_2 = E_1 - \frac{\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{p}_1}{m} + \frac{\boldsymbol{\kappa}^2}{2m}, \quad \boldsymbol{\kappa} = \mathbf{k} + \mathbf{q}. \quad (39)$$

С учетом этой зависимости при снятии δ -функции в (38) получим

$$\int dE_1 \delta(E_1 + E_2 - \omega) = \left(2 - \frac{\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{p}_1}{p_1^2}\right)^{-1} \approx \frac{1}{2}. \quad (40)$$

Интегрирование по q можно проводить в интервале от нуля до бесконечности, так как область $q > \eta$ дает малый вклад в сечение из-за быстрого убывания величины $|S(\mathbf{q})|^2$ с ростом q^3 . Тогда

$$\frac{d\sigma_{c.r.}^{++}}{d\Omega_1} = \frac{2^7 \pi \alpha^3}{(m\omega)^3} p_1 B (\mathbf{e} \cdot \mathbf{n}_1)^2 (\mathbf{n} \cdot \mathbf{n}_1)^2, \quad \mathbf{n} = \frac{\mathbf{k}}{\omega}, \quad (41)$$

$$B = \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} |S(\mathbf{q})|^2 = \int d\mathbf{r} \Psi_i^2(\mathbf{r}, \mathbf{r}). \quad (42)$$

²⁾ Впервые на сокращение членов, пропорциональных $\mathbf{e} \cdot \mathbf{q}$, в амплитуде двойного фотоэффекта в центральной области спектра было указано в работе [9].

³⁾ Если в качестве $\Psi_i(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ взять произведение кулоновских функций $\varphi_{1s}(\mathbf{r})\varphi_{1s}(\mathbf{r}')$, то $S(\mathbf{q}) = [\mu^2/(q^2 + \mu^2)]^2$, где $\mu = 2\eta$.

Интегрирование выражения (41) по углам выполняется элементарно. Результат надо еще поделить на 2, учитывая тождественность двух конечных электронов:

$$\sigma_{c.r.}^{++} = \frac{2^8 \pi^2 \alpha^3}{15 m^5} \left(\frac{m}{\omega}\right)^{5/2} B. \quad (43)$$

4. СЕЧЕНИЕ ОДНОКРАТНОЙ ФОТОИОНИЗАЦИИ

Получим сечение σ^+ однократной ионизации атома гелия в нерелятивистском приближении для высокочастотного фотона и произвольной симметричной функции начального состояния. Амплитуда однократного фотоэффекта есть⁴⁾

$$M^+ = 2 \langle \Psi_f | \hat{\gamma} | \Psi_i \rangle = \frac{\sqrt{2}}{m} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \times$$

$$\times \left[e^{-i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}} \varphi_{1s}(\mathbf{r}') + e^{-i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}'} \varphi_{1s}(\mathbf{r}) \right] \times$$

$$\times (-i\mathbf{e} \nabla) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \Psi_i(\mathbf{r}, \mathbf{r}'). \quad (44)$$

Здесь $p = \sqrt{2m\omega}$, кулоновский параметр $\xi = \eta/p = \sqrt{I/\omega} \ll 1$, поэтому в качестве волновой функции свободного электрона используется плоская волна, а связанный электрон в конечном состоянии описывается кулоновской волновой функцией φ_{1s} (мы рассматриваем ионизацию основного состояния атома гелия). Двухэлектронная волновая функция начального состояния $\Psi_i(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ может быть любой аналитической функцией или задаваться численно.

Интегрируя по частям, преобразуем (44) к виду

$$M^+ = \frac{\sqrt{2}}{m} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \times$$

$$\times \left\{ \mathbf{e} \cdot \mathbf{p} e^{-i\eta(\mathbf{p}-\mathbf{k}) \cdot \mathbf{r}} \varphi_{1s}(\mathbf{r}') - i\eta \frac{\mathbf{e} \cdot \mathbf{r}}{r} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \varphi_{1s}(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}'} \right\} \times$$

$$\times \Psi_i(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \approx \frac{\sqrt{2}}{m} \mathbf{e} \mathbf{p} \times$$

$$\times \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' e^{-i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}} \varphi_{1s}(\mathbf{r}') \Psi_i(\mathbf{r}, \mathbf{r}'). \quad (45)$$

При получении (45) учтено, что $\omega/p = \sqrt{\omega/2m} \ll 1$, и оставлен только главный член в разложении по этому параметру, т. е. использовано дипольное приближение.

Далее рассмотрим интеграл

$$J(\mathbf{p}, \mathbf{r}') = \int d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}} \Psi_i(\mathbf{r}, \mathbf{r}'). \quad (46)$$

⁴⁾ Множитель $\sqrt{2\pi\alpha/\omega}$ от оператора $\hat{\gamma}$ включен в формулу для сечения.

Используя теорему Грина и малость $r \sim p^{-1}$, получаем

$$\begin{aligned} J(\mathbf{p}, \mathbf{r}') &= -\frac{1}{p^2} \int d\mathbf{r} \Psi_i \Delta e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}} = \\ &= -\frac{1}{p^2} \int d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}} \Delta \Psi_i \approx \\ &\approx -\frac{1}{p^2} \int d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}} (\Delta \Psi_i)|_{r \rightarrow 0}. \end{aligned} \quad (47)$$

Из уравнения Шредингера для атома гелия в переменных \mathbf{r}, \mathbf{r}' ,

$$\left(-\frac{\Delta}{2m} - \frac{\Delta'}{2m} - \frac{\alpha Z}{r} - \frac{\alpha Z}{r'} + \frac{\alpha}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} - \varepsilon_i \right) \times \Psi_i(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = 0, \quad (48)$$

где Δ (Δ') — оператор Лапласа по переменной \mathbf{r} (\mathbf{r}'), следует соотношение

$$\Delta \Psi_i(\mathbf{r}, \mathbf{r}')|_{r \rightarrow 0} = -\frac{2\eta}{r} \Psi_i(0, \mathbf{r}'). \quad (49)$$

Подставляя (49) в (47), находим

$$J(\mathbf{p}, \mathbf{r}') = \frac{8\pi\eta}{p^4} \Psi_i(0, \mathbf{r}'), \quad (50)$$

а затем амплитуду (45):

$$\begin{aligned} M^+ &= \frac{\sqrt{2}}{m} \mathbf{e} \cdot \mathbf{p} \int d\mathbf{r}' \varphi_{1s}(\mathbf{r}') J(\mathbf{p}, \mathbf{r}') = \\ &= \sqrt{2} \frac{\mathbf{e} \cdot \mathbf{p}}{m} \frac{8\pi\eta}{p^4} N, \end{aligned} \quad (51)$$

$$N = \int d\mathbf{r} \varphi_{1s}(\mathbf{r}) \Psi_i(0, \mathbf{r}). \quad (52)$$

В одночастичном приближении с кулоновскими волновыми функциями имеем

$$N = N_{1s} = (\eta^3/\pi)^{1/2}.$$

Дифференциальное и полное сечения однократной фотоионизации K -оболочки атома даются формулами

$$\begin{aligned} d\sigma^+ &= \frac{2\pi\alpha}{\omega} |M^+|^2 \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3} 2\pi\delta(E + I - \omega) = \\ &= \frac{\alpha}{2\pi\omega} |M^+|^2 m p d\Omega_p, \end{aligned} \quad (53)$$

$$\sigma^+ = \frac{32\sqrt{2}\pi^2\alpha^3 Z^2}{3m^5} \left(\frac{m}{\omega}\right)^{7/2} N^2. \quad (54)$$

5. ВКЛАД ЦЕНТРАЛЬНОЙ ОБЛАСТИ В ОТНОШЕНИЕ СЕЧЕНИЙ

Отношение нерелятивистских сечений двукратной и однократной ионизаций в высокочастотном пределе можно представить в виде суммы R_0 (вклад краевой части спектра) и R' (вклад центральной части спектра):

$$R = \frac{\sigma^{++}}{\sigma^+} = \frac{\sigma_{e.r.}^{++}}{\sigma^+} + \frac{\sigma_{c.r.}^{++}}{\sigma^+} = R_0 + R'. \quad (55)$$

Величина R_0 не зависит от энергии фотона, ее значение сейчас хорошо установлено: $R_0 = 1.67\%$ [5, 10]. Вклад R' , напротив, линейно зависит от энергии фотона, что легко установить, поделив (43) на (54):

$$R' = \frac{4\sqrt{2}}{5Z^2} C \frac{\omega}{m}, \quad (56)$$

$$C = \frac{B}{N^2} = \frac{\int d\mathbf{r} |\Psi_i(\mathbf{r}, \mathbf{r}')|^2}{\left| \int d\mathbf{r} \varphi_{1s}(\mathbf{r}) \Psi_i(0, \mathbf{r}) \right|^2}. \quad (57)$$

Формула (56) отличается от формулы Друкарева [2] только множителем $1/2$. К сожалению, в работе [2] нет деталей расчета, поэтому мы не можем указать причину расхождения. Появившаяся позднее работа Корнберга и Мираглия [5] также содержит ошибки, так как в ней не учтено межэлектронное взаимодействие в конечном состоянии, что приводит к появлению в выражении для R' членов, пропорциональных ω^{-1} . Однако член, пропорциональный ω , получен в [5] правильно, правда, для волновой функции $\Psi_i(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ специального вида. Используя такую же функцию, мы получаем $R' = 3.49 \cdot 10^{-5} \omega$ [кэВ], тогда как Корнберг и Мираглия дают $4.02 \cdot 10^{-5} \omega$ [кэВ]. Различие в 15% объясняется тем, что мы взяли для σ^+ формулу (54), а Корнберг и Мираглия формулу из работы [11] с волновой функцией основного состояния из работы [12]. Преимущество нашего подхода заключается в том, что мы используем одну и ту же волновую функцию начального состояния для двукратной и однократной ионизаций, в то время как Корнберг и Мираглия берут разные начальные функции для σ^{++} и σ^+ .

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Мы вывели формулы, описывающие вклад центральной области электронного энергетического спектра в полное сечение двойной ионизации и в отношение сечений двойной и однократной ионизаций

для начальных волновых функций самого общего вида. Мы утверждаем, что вклад центральной области в отношении сечений, полученный ранее в [2], завышен в два раза. Результат для R' , полученный в [5], ошибочен. Он содержит члены, пропорциональные ω и ω^{-1} . Член, пропорциональный ω , правильно описывает вклад центральной области в R , тогда как член, пропорциональный ω^{-1} , должен сократиться при учете межэлектронного взаимодействия в конечном состоянии.

Авторы признательны РФФИ за финансовую поддержку (гранты № 01-02-17246 и № 00-15-96610).

ЛИТЕРАТУРА

1. M. Ya. Amusia, E. G. Drukarev, V. G. Gorshkov, and M. P. Kazachkov, *J. Phys. B* **8**, 1248 (1975).
2. E. G. Drukarev, *Phys. Rev. A* **51**, R2684 (1995).
3. E. G. Drukarev and F. F. Karpeshin, *J. Phys. B* **9**, 399 (1976).
4. А. И. Михайлов, И. А. Михайлов, *ЖЭТФ* **114**, 1537 (1998).
5. M. A. Kornberg and J. E. Miraglia, *Phys. Rev. A* **60**, R1743 (1999).
6. R. Krivec, M. Ya. Amusia, and V. B. Mandelzweig, *Phys. Rev. A* **64**, 012713 (2001).
7. M. Haftel, R. Krivec, and V. B. Mandelzweig, *J. Comp. Phys.* **123**, 149 (1996).
8. R. Krivec, V. B. Mandelzweig, and K. Varga, *Phys. Rev. A* **61**, 062503 (2000).
9. E. G. Drukarev, N. B. Avdonina, and R. H. Pratt, *J. Phys. B* **34**, 1 (2001).
10. A. S. Kheifets and I. Bray, *Phys. Rev. A* **58**, 4501 (1998).
11. A. L. Stewart and T. G. Webb, *Proc. Phys. Soc.* **82**, 532 (1963).
12. N. Sabelli and J. Hinze, *J. Chem. Phys.* **50**, 648 (1969).