

# РОЛЬ ЭЛЕКТРОННЫХ КОРРЕЛЯЦИЙ В ПРОЦЕССЕ ДВУХЭЛЕКТРОННОЙ ИОНИЗАЦИИ ГЕЛИЯ БЫСТРЫМИ ПРОТОНАМИ

*Е. М. Лобанова<sup>a</sup>, С. А. Шейнерман<sup>a\*</sup>, Л. Г. Герчиков<sup>b</sup>*

*<sup>a</sup> Санкт-Петербургский государственный морской технический университет  
198262, Санкт-Петербург, Россия*

*<sup>b</sup> Санкт-Петербургский государственный технический университет  
195251, Санкт-Петербург, Россия*

Поступила в редакцию 6 февраля 2007 г.

Рассмотрен процесс двухэлектронной ионизации атома гелия (ДИА) быстрыми протонами и изучена роль электронных корреляций в исследуемом процессе. Развита квантовомеханическая модель, учитывающая взаимодействие вылетающих электронов в континууме, а также динамическую экранировку зарядов разлетающихся частиц, зависящую от кинематики их разлета. Взаимодействие вылетающих электронов между собой и с ядром описывается в модели приближенных ЗС-функций, а динамическая экранировка зарядов — путем введения эффективных зарядов вылетающих электронов и иона-остатка, которые определяются импульсами частиц. Полученные замкнутые аналитические выражения для дифференциальных сечений ионизации были применены для случая компланарной геометрии разлета частиц при различных переданных атому импульсах. Анализ проведенных расчетов показал, что развита модель адекватно описывает имеющиеся экспериментальные данные. При этом учет динамического экранирования зарядов оказывает значительное влияние на сечение ДИА и существенно улучшает согласие теории и эксперимента.

PACS: 34.10.+x, 34.50.Fa

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Процессы двух- и многоэлектронной ионизации атомов интенсивно исследуются в последнее время. Интерес к ним обусловлен изучением коррелированного движения электронов, испущенных в таких процессах. Динамика испускания из атома даже двух электронов в полной мере к настоящему времени не ясна. Общеизвестно, что электронные корреляции играют большую роль в процессах ионизации, и без их учета невозможно правильно описать дифференциальные сечения двухэлектронной ионизации атомов (ДИА), полученные экспериментально [1]. Применение методов квантовой теории многих тел к описанию процессов ДИА [2] позволяет последовательно учитывать наиболее существенные электронные корреляции.

К настоящему времени наиболее полно роль элект-

ронных корреляций изучена в процессе двухэлектронной фотоионизации гелия. Исследование такого процесса при нерелятивистских энергиях налетающего фотона выявило заметную роль коррелированного движения электронов в начальном и конечном состояниях реакции, а также позволило изучить реакцию атома на переданный атому нулевой импульс (см. обзор [2] и цитируемую там литературу). Процессы двухэлектронной ионизации атома электронным или ионным ударом изучены значительно меньше.

Настоящая работа посвящена теоретическому изучению ДИА гелия при его столкновении с быстрым протоном. Такие процессы интенсивно исследуются в последние годы экспериментально [3–5] и позволяют изучать реакцию атома на ненулевой переданный импульс  $q$ . Анализ измеренных дифференциальных сечений позволяет судить о существенной роли электронных корреляций в изучаемом процессе.

\*E-mail: ssheiner@ss12686.spb.edu

Результаты первых измерений полностью дифференциальных сечений ДИА гелия быстрыми протонами приведены в публикации [3]. Дифференциальные сечения двухэлектронной ионизации измерены для случая компланарной геометрии при различных переданных атому импульсах и представлены в виде двумерных поверхностей как функции углов вылета удаляемых электронов. Целью настоящей работы является описание таких сечений в рамках квантовомеханического подхода и исследование влияния электронных корреляций на рассчитанные сечения.

В соответствии с условиями эксперимента будем рассматривать случай быстрых налетающих протонов (скорость протона  $V = 15.5$  ат.ед.). При этом описание процесса столкновения с хорошей точностью может быть проведено в рамках подхода, основанного на первом борновском приближении.

Анализ процессов ДИА [3] показывает, что наиболее существенным фактором, влияющим на сечение процесса, является кулоновское взаимодействие вылетающих электронов между собой и с ионом-остатком. Для описания этого взаимодействия была предложена модель так называемых ЗС-функций, которые были получены как приближенное решение точной трехчастичной задачи [6, 7]. Они представляют собой произведение трех кулоновских функций, зависящих от положения вылетающих электронов относительно иона остатка,  $r_1$ ,  $r_2$ , и расстояния между ними  $r_{12}$ . Такие функции описывают движение двух электронов в поле третьей частицы, учитывают взаимодействие электронов между собой и имеют правильное асимптотическое поведение в областях  $r_1 \rightarrow \infty$ ,  $r_2 \rightarrow \infty$ ,  $r_{12} \rightarrow \infty$ .

В последние годы ЗС-функции использовались при описании процесса ионизации атома водорода электронным ударом [7], процесса двухэлектронной фотоионизации атомов [8–14] и процесса двухэлектронной ионизации гелия быстрыми электронами [15, 16]. В ряде случаев проведенные расчеты адекватно описывали измеренные сечения. В процессах ДИА ионным ударом до настоящего времени ЗС-функции не использовались. Их применение сталкивается со значительными трудностями, связанными с необходимостью вычисления шестикратных интегралов. Методике вычисления таких интегралов будет посвящена отдельная работа.

В данной же работе для описания состояния вылетевших электронов в континууме мы будем использовать приближенные ЗС-функции, так называемые 2С-функции. При этом кулоновская функ-

ция относительного движения электронов заменяется множителем, зависящим только от относительного импульса электронов  $p_{12}$ , но не от расстояния между ними  $r_{12}$ . Такие функции ранее успешно использовались для изучения процессов ДИА ионным ударом при расчете корреляционной функции [17, 18] и позволили добиться приемлемого согласия с имеющимися экспериментальными данными. Кроме того, преимущество их применения состоит в том, что выражение для дифференциального сечения ДИА может быть записано в аналитической форме.

Следует отметить, что и ЗС- и 2С-функции, являясь приближенными решениями точной задачи, для некоторых кинематик ДИА недостаточно точно оценивают роль кулоновского взаимодействия разлетающихся частиц. Более точное решение трехчастичной задачи было получено в работе [19]. Волновые функции, вычисленные в этой работе, так называемые DSЗС-функции, имеют вид ЗС-функций, с эффективными зарядами взаимодействующих частиц, зависящими от их взаимного расположения. Такой эффект, получивший название динамической экранировки зарядов разлетающихся частиц, в ряде случаев оказывает заметное влияние на сечение процесса. Фактически DSЗС-функции наиболее полно по сравнению с ЗС- и 2С-функциями учитывают электронные корреляции благодаря введенному в них эффекту экранирования зарядов. Преимущество DSЗС-функции при описании коррелированного движения трех заряженных частиц было продемонстрировано в работах [20–23] при изучении двухэлектронной ионизации в процессах  $(e, 2e)$ . Подход, развитый в нашей работе, позволяет использовать эффективные заряды в модели 2С-функций и, тем самым, учесть эффект динамического экранирования и исследовать его влияние на сечение процессов ДИА.

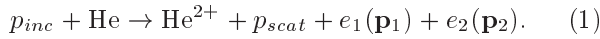
В соответствии с условиями эксперимента [3] мы рассмотрели случай компланарной геометрии и равного деления энергий, когда оба атомных электрона испускаются с одинаковой энергией в плоскости рассеяния (плоскость, содержащая импульсы налетающего и рассеянного протонов). Для таких кинематических условий мы рассчитали дифференциальные сечения испускания электронов как функцию их углов вылета  $\theta_1$ ,  $\theta_2$ , а также как функцию среднего угла эмиссии  $\theta_s = (\theta_1 + \theta_2)/2$  и разности углов вылета  $\theta_d = \theta_1 - \theta_2$ . Проведенное сравнение результатов расчетов дифференциальных сечений с экспериментальными данными показало, что развитая нами модель адекватно описывает процесс ДИА. Динами-

ческое экранирование зарядов оказывает существенное влияние на сечение ДИА, и его учет позволяет приблизить рассчитанные сечения к экспериментально наблюдаемым [3].

В работе используется атомная система единиц, в которой  $|e| = m_e = \hbar = 1$ .

## 2. ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОЕ СЕЧЕНИЕ ПРОЦЕССА ДВУХЭЛЕКТРОННОЙ ИОНИЗАЦИИ АТОМОВ

Мы рассматриваем процесс двухэлектронной ионизации атома гелия протонным ударом, схема которого имеет вид



В конечном состоянии процесса имеются четыре заряженных частицы: рассеянный протон  $p_{scat}$ , двукратный ион гелия  $\text{He}^{2+}$  и два выбитых из атома электрона, движущихся с импульсами  $\mathbf{p}_1$  и  $\mathbf{p}_2$ . Поскольку в рассматриваемом эксперименте налетающий протон является быстрым (его скорость  $V = 15.5$  ат. ед.) и передаваемая атому энергия невелика (порядка нескольких ат. ед.), после столкновения с атомом протон быстро покидает зону реакции и не оказывает существенного влияния на движение вылетающих электронов. Поэтому для описания состояния налетающего и рассеянного протонов можно использовать плоские волны. Это эквивалентно описанию процесса в рамках первого борновского приближения, критерий применимости которого хорошо выполняется в рассматриваемом случае:  $Q/V \approx 0.06 \ll 1$ , где  $Q$  — заряд налетающей частицы.

Запишем дифференциальное сечение процесса, при котором столкновение заряженной частицы, имеющей скорость  $V$ , с атомом приводит к выбиванию двух электронов с импульсами  $\mathbf{p}_1$ ,  $\mathbf{p}_2$  и передаче атому импульса  $\mathbf{q}$ . В рассматриваемом приближении такое сечение представляется в виде

$$\frac{d^8\sigma}{d\mathbf{p}_1 d\mathbf{p}_2 dq d\varphi_q} = \frac{q}{4\pi^2 V^2} |T_{fi}|^2, \quad (2)$$

где матричный элемент взаимодействия

$$T_{fi} = \left\langle \Psi_{p_1 p_2}(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b) e^{i\mathbf{P}' \cdot \mathbf{r}} \times \right. \\ \left. \times \left| \frac{2Q}{r} - \frac{Q}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_a|} - \frac{Q}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_b|} \right| \Psi_{at}(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b) e^{i\mathbf{P} \cdot \mathbf{r}} \right\rangle. \quad (3)$$

Здесь  $\mathbf{P}'$ ,  $\mathbf{P}$  — импульсы рассеянного и налетающего протонов;  $\mathbf{r}$ ,  $\mathbf{r}_a$ ,  $\mathbf{r}_b$  — радиус-векторы протона и удаляемых электронов;  $\mathbf{q} = \mathbf{P} - \mathbf{P}'$  — импульс,

переданный атому;  $\varphi_q$  — азимутальный угол вектора  $\mathbf{q}$  относительно импульса налетающих протонов;  $\Psi_{at}(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b)$  и  $\Psi_{p_1 p_2}(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b)$  — волновые функции электронов в начальном и конечном состояниях. Полярный угол  $\theta_q$  между векторами  $\mathbf{V}$  и  $\mathbf{q}$  определяется законом сохранения энергии:

$$\cos \theta_q = \frac{p_1^2/2 + p_2^2/2 + E_{ion}}{qV}, \quad (4)$$

где  $E_{ion} = 79$  эВ — энергия двукратной ионизации атома гелия.

Согласно выражениям (2), (3) процесс ДИА происходит следующим образом. Однократное взаимодействие налетающего протона с одним из атомных электронов приводит к его удалению из атома. Вылет другого электрона происходит в результате изменения поля иона-остатка после удаления первого электрона. Взаимодействие двух вылетающих электронов между собой и с ионом остатка в процессе разлета частиц описывается двухэлектронной функцией конечного состояния  $\Psi_{p_1 p_2}(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b)$ .

В качестве такой волновой функции в нашем подходе мы будем использовать приближенную волновую ЗС-функцию [17]. Эта функция строится как антисимметризованное произведение кулоновских волновых функций,  $\varphi_{p_i}$ , описывающих движение каждого из электронов в кулоновском поле иона-остатка, и множителя  $F_{int}$ , учитывающего взаимодействие электронов:

$$\Psi_{p_1 p_2}(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b) = \frac{1}{\sqrt{2}} \times \\ \times [\varphi_{p_1}(\mathbf{r}_a)\varphi_{p_2}(\mathbf{r}_b) + \varphi_{p_1}(\mathbf{r}_b)\varphi_{p_2}(\mathbf{r}_a)] F_{int}^{av}(p_{12}), \quad (5)$$

где кулоновская волновая функция имеет вид

$$\varphi_{p_i}(\mathbf{r}) = \\ = (2\pi)^{-3/2} \exp(i\mathbf{p}_i \cdot \mathbf{r}) \Gamma(1 - i\xi_i) \exp\left(-\frac{\pi\xi_i}{2}\right) \times \\ \times {}_1F_1(i\xi_i; 1; -i(p_i r + \mathbf{p}_i \cdot \mathbf{r})), \quad (6)$$

а параметр  $\xi_i$  определяется импульсом электрона:  $\xi_i = -2/p_i$ .

При использовании точной ЗС-функции [7] величина  $F_{int}$  описывается кулоновской волновой функцией относительного движения вылетающих электронов, зависящей от  $\mathbf{r}_{ab}$ . Используемое нами приближение для ЗС-функции [17] состоит в замене вырожденной гипергеометрической функции в выражении для кулоновской волны ее значением в некоторой средней точке:

$$F_{int}^{av}(\alpha, p_{12}) = \Gamma(1 - i\xi_{12}) \exp(-\pi\xi_{12}/2) \times \\ \times {}_1F_1(i\xi_{12}; 1; -ip_{12}\alpha), \quad (7)$$

где параметр  $\xi_{12}$  зависит от относительного импульса электронов  $p_{12} = |\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2|$  как

$$\xi_{12} = \frac{1}{|\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2|}. \quad (8)$$

Параметр  $\alpha$  определяется путем усреднения вектора  $\mathbf{r}_{ab}$  по волновой функции начального состояния электронов в атоме гелия,  $\Psi_{at}(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b)$ :

$$\alpha = \langle r_{ab} (1 + \cos(\widehat{\mathbf{p}_{12}, \mathbf{r}_{ab}})) \rangle. \quad (9)$$

По существу такое приближение сводится к приближению 2С-функций [2], поэтому в дальнейшем мы будем называть функции (5)–(9) 2С-функциями. Отметим, что наиболее простым приближением для множителя  $F_{int}^{av}$  является использование так называемого фактора Зоммерфельда  $F_{Som}$  [24], что соответствует значению  $\alpha = 0$  в выражении (7). Это приближение применялось в работе [25] для описания углового распределения в двухэлектронной фотоионизации. Использование более точного приближения (7)–(9) позволило лучше описать экспериментальные данные по измерению корреляционной функции  $R$  в процессах ДИА при столкновении ионов с атомом гелия [17, 18, 26].

Для вычисления волновой функции начального состояния атомных электронов нами использовалось приближение Хартри–Фока. При этом двухэлектронная волновая функция начального состояния представляет собой произведение двух одноэлектронных функций:

$$\Psi_{at}(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b) = \varphi_{1s}(\mathbf{r}_a)\varphi_{1s}(\mathbf{r}_b). \quad (10)$$

Волновые функции Хартри–Фока,  $\varphi_{1s}$ , описывают независимое движение электронов в некотором усредненном поле, но не учитывают их остаточного взаимодействия. Таким образом, используя эти функции, мы пренебрегаем корреляцией электронов в начальном состоянии. Как показали расчеты [17, 25], такие корреляции оказываются менее существенными в рассматриваемом процессе. Использование функций Хартри–Фока позволяет существенно упростить расчеты и провести необходимое интегрирование в замкнутой аналитической форме.

Одноэлектронная функция Хартри–Фока  $\varphi_{1s}$  хорошо аппроксимируется набором из пяти экспонент:

$$\varphi_{1s}(r) = \sum_{i=1}^5 B_i \exp(-\beta_i r), \quad (11)$$

где параметры  $B_i, \beta_i$  равны  $B_1 = 2.5895, B_2 = 1.638, B_3 = 0.752, B_4 = -0.33, B_5 = 0.103, \beta_1 = 1.4171, \beta_2 = 2.3768, \beta_3 = 4.3963, \beta_4 = 6.527, \beta_5 = 7.9425$ .

Следует отметить, что в выбранном приближении волновые функции начального (10) и конечного (5) состояний электронов не являются ортогональными. Однако, как показывают расчеты [16], погрешность вычисления сечения двухэлектронной ионизации вследствие неортогональности волновых функций не превышает 10 %.

Использование приближения (11) при вычислении матричного элемента (3) позволяет получить замкнутое аналитическое выражение для дифференциального сечения ионизации:

$$\begin{aligned} \frac{d^8\sigma}{d\mathbf{p}_1 d\mathbf{p}_2 dq d\varphi_q} &= \frac{2}{\pi^6} \left(\frac{Q}{V}\right)^2 \frac{1}{q^3} \times \\ &\times |F_{int}^{av}(\alpha, p_{12})|^2 |F_{Som}(\xi_1)|^2 |F_{Som}(\xi_2)|^2 \times \\ &\times \left| 8\pi A_0(p_1) A_0(p_2) - A_1(p_1, q, \theta_{p_1}, \theta_q) A_0(p_2) - \right. \\ &\quad \left. - A_0(p_1) A_1(p_2, q, \theta_{p_2}, \theta_q) \right|^2. \quad (12) \end{aligned}$$

Здесь  $Q$  и  $V$  — заряд и скорость налетающего протона, а матричные элементы определяются соотношениями

$$A_0(p_i) = \sum_{j=1}^5 B_j \frac{\beta_j + \xi_i p_i}{(\beta_j^2 + p_i^2)^2} \exp\left(2\xi_i \arctg \frac{p_i}{\beta_j}\right), \quad (13)$$

$$A_1(p_i, q, \theta_{p_i}, \theta_q) = \sum_{j=1}^5 B_j I^{(anal)}(\beta_j, p_i, q, \theta_{p_i, q}), \quad (14)$$

$$\begin{aligned} I^{(anal)}(\beta, p, q, \theta_{pq}) &= \\ &= 4\pi \frac{(q^2 - p^2 + \beta^2 - 2ip\beta)^{i\xi-1}}{(p^2 + q^2 - 2pq \cos \gamma + \beta^2)^{i\xi+2}} \times \\ &\times [(q^2 - p^2 + \beta^2 - 2ip\beta)\beta - \\ &- \xi p(p^2 + q^2 - 2pq \cos \gamma - \beta^2) - \\ &- 2i\xi\beta p(p - q \cos \gamma)], \quad (15) \end{aligned}$$

где  $\gamma \equiv \theta_{\mathbf{p}, \mathbf{q}} = \angle(\mathbf{p}, \mathbf{q})$ .

Отметим, что соотношение (12) допускает простую интерпретацию динамики процесса ДИА. Амплитуда  $A_1$  описывает процесс удаления электрона из атома протонным ударом, в то время как амплитуда  $A_0$  описывает процесс ионизации в результате встряски — изменения поля иона-остатка в результате удаления первого электрона.

Взаимодействие между вылетающими электронами является наиболее существенным фактором, влияющим на сечение ДИА. Это взаимодействие в нашей модели 2С-функций описывается введением

множителя  $F_{int}$ . Однако сравнение теории и эксперимента [20, 21] показывает, что 2С-функции, как и 3С-функции, фактически переоценивают роль этого взаимодействия. Подобный эффект возникает в результате частичного экранирования зарядов электронов в процессе их движения. В работе [19] было развито приближение, позволяющее учесть эффект динамического экранирования путем введения эффективных зарядов  $Z_{eff}$ , зависящих от взаимного положения частиц  $\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b$ . Однако введение зарядов  $Z_{eff}(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b)$  существенно изменяет структуру волновой 2С-функции (5)–(9), поскольку функции  $\varphi_{p_i}, F_{int}^{av}$  становятся фактически трехчастичными. В результате вычисление амплитуды ДИА (2), (3) можно провести только путем шестимерного численного интегрирования [20]. В качестве простейшего приближения, сохраняющего структуру 3С-функции, в работе [21] было предположено, что координаты вылетевших электронов в выражениях для эффективных зарядов  $Z_{eff}(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b)$  пропорциональны их скоростям:  $r_i \propto V_i, r_{12} \propto V_{12}$ . Такое приближение позволяет заменить в функциональных выражениях для эффективных зарядов  $Z_{eff}$  [19] зависимости от координат электронов на зависимости от их импульсов. С учетом этой замены эффективные заряды представляются в виде

$$(Z_I Z_1)_{eff} = Z_I Z_1 + \left( \frac{3 + \cos^2 4\alpha_1}{4} \frac{p_{12}}{p_1 + p_2} \right)^2 \times \frac{p_1^2}{p_{12}(p_1 + p_2)}, \quad (16)$$

$$(Z_I Z_2)_{eff} = Z_I Z_2 + \left( \frac{3 + \cos^2 4\alpha_2}{4} \frac{p_{12}}{p_1 + p_2} \right)^2 \times \frac{p_2^2}{p_{12}(p_1 + p_2)} \quad (17)$$

для взаимодействия электронов 1 и 2 с ядром и

$$(Z_1 Z_2)_{eff} = Z_1 Z_2 - \left( \frac{3 + \cos^2 4\alpha_1}{4} \frac{p_{12}}{p_1 + p_2} \right)^2 \times \frac{p_1}{p_{12}(p_1 + p_2)} - \left( \frac{3 + \cos^2 4\alpha_2}{4} \frac{p_{12}}{p_1 + p_2} \right)^2 \frac{p_2}{p_{12}(p_1 + p_2)}, \quad (18)$$

для взаимодействия электронов между собой. Здесь  $Z_{1,2}$  — заряды вылетевших электронов,  $Z_I$  — заряд ядра иона-остатка,

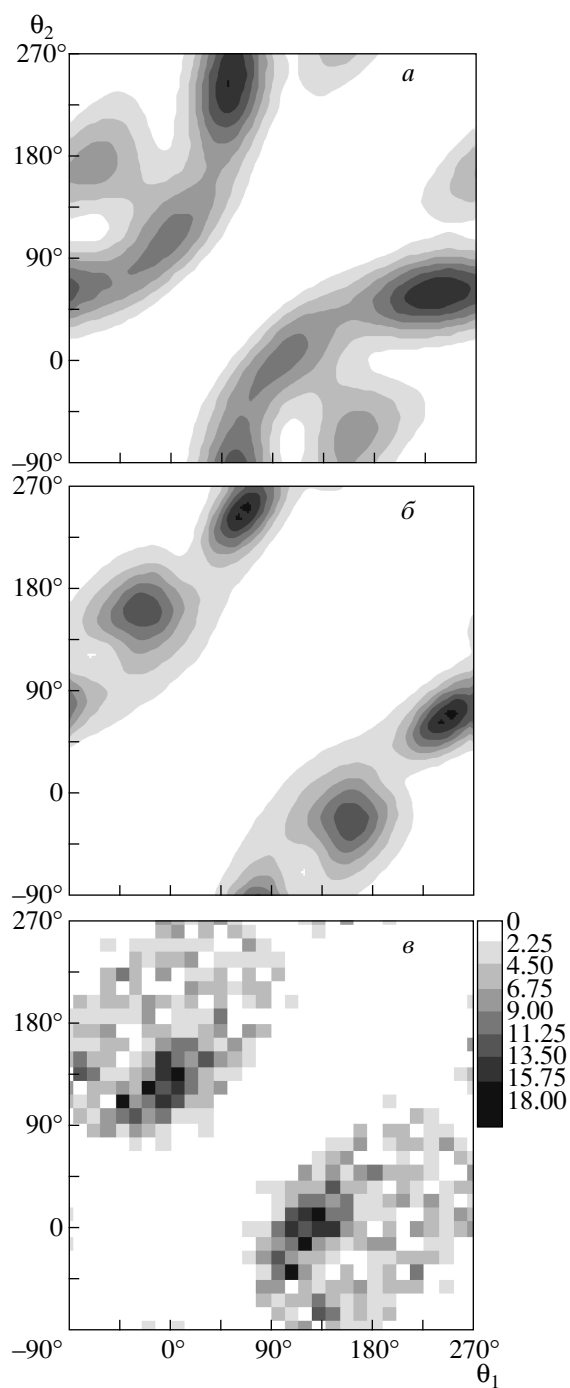
$$\alpha_1 = \arccos \frac{p_2}{\sqrt{p_1^2 + p_2^2}}, \quad \alpha_2 = \arccos \frac{p_1}{\sqrt{p_1^2 + p_2^2}}.$$

Использование  $Z_{eff}$  вместо  $Z_1 = Z_2 = -Z_I/2 = -1$  в формулах (13)–(15) позволяет учесть дополнительные корреляции в движении удаляемых из атома электронов, не включенные в 3С- и 2С-функции. Отметим, что данная модель динамического экранирования успешно использовалась в работах по  $(e, 2e)$ -процессам [20–23].

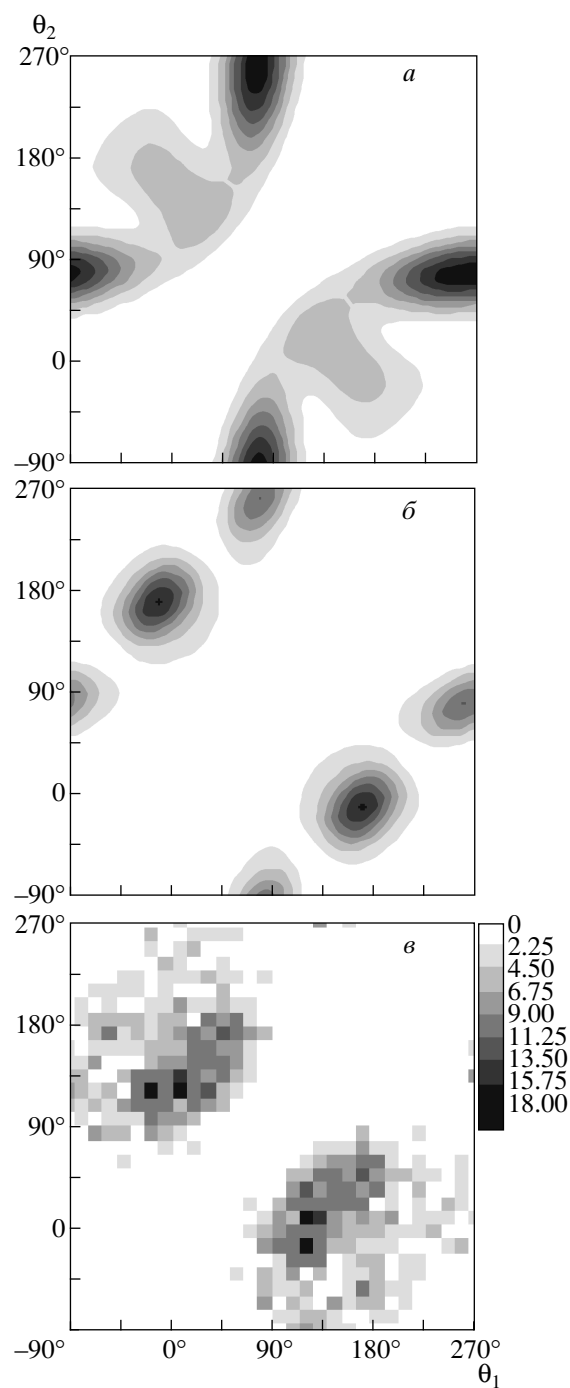
### 3. РЕЗУЛЬТАТЫ И АНАЛИЗ

Мы рассчитали согласно соотношениям (12)–(18) дифференциальные сечения двухэлектронной ионизации гелия быстрыми протонами,  $V = 15.5$  ат.ед., и сравнили полученные результаты с экспериментальными данными работы [3]. В соответствии с условиями эксперимента мы рассмотрели случай компланарной геометрии и равного деления энергии, когда оба атомных электрона испускаются в плоскости рассеяния с равными энергиями в диапазоне  $0 \leq E_e \leq 25$  эВ. Сечения ионизации рассчитывались для трех диапазонов значений импульса  $q$ , переданного налетающим протоном атому гелия:  $0.2 < q < 0.8$ ,  $0.8 < q < 1.4$ ,  $1.4 < q < 2.0$  ат.ед. Дифференциальное сечение, рассчитанное по формуле (12), интегрировалось по величине переданного импульса  $q$  в каждом из рассматриваемых диапазонов. Далее проводилось интегрирование по энергии вылетевших электронов в диапазоне  $0 \leq E_{e_1} = E_{e_2} \leq 25$  эВ. Полученные таким образом распределения интенсивности электронной эмиссии  $f$  как функции углов вылета электронов  $\theta_1$  и  $\theta_2$  представлены на рис. 1–3 для трех диапазонов значений переданных импульсов. Углы вылета отсчитываются от направления импульса налетающих протонов. Рисунки 1а, 2а, 3а представляют расчеты в модели 2С-функций без учета экранировки зарядов, рис. 1б, 2б, 3б — рассчитанные сечения с учетом экранировки и рис. 1в, 2в, 3в — сечения, измеренные в эксперименте [3].

Вид углового распределения вылетающих электронов может быть легко интерпретирован с учетом двух факторов: направления переданного атому импульса  $\mathbf{q}$  и кулоновского отталкивания электронов в процессе их разлета. Очевидно, что с наибольшей вероятностью электрон, выбиваемый из атома протонным ударом, вылетает в направлении  $\mathbf{q}$ . В этом можно убедиться, проанализировав угловую зависимость амплитуды ионизации протонным ударом  $A_1$ . Помимо главного максимума при  $\theta_i = \theta_q$  в зависимости  $A_1(p_i, q, \theta_{p_i}, \theta_q)$  имеется второй, более слабый максимум при  $\theta_i = \theta_q + \pi$  (14), соответствующий си-



**Рис. 1.** Угловые распределения вылетающих электронов в компланарной геометрии при переданных атому импульсах  $q$  в интервале от 0.2 до 0.8 ат. ед.  $\theta_1$  и  $\theta_2$  — полярные углы, отсчитанные от направления импульса налетающего пучка протонов. Вылетевшие электроны имеют равные энергии в диапазоне  $0 < E_{e_1} = E_{e_2} < 25$  эВ. Расчеты в модели 2С-функций без учета (*а*) и с учетом (*б*) динамической экранировки зарядов; экспериментальное распределение из работы [3] (*в*)



**Рис. 2.** То же, что на рис. 1, но для переданных атому импульсов  $q$  в интервале от 0.8 до 1.4 ат. ед.

туации, когда импульс  $\mathbf{q}$  получает атомное ядро, а электрон вылетает в результате отдачи в направлении, обратном  $\mathbf{q}$ . Амплитуда ионизации с удалением другого электрона в результате встряски  $A_0$  сама по себе не зависит от угла вылета электрона (см. (13)).

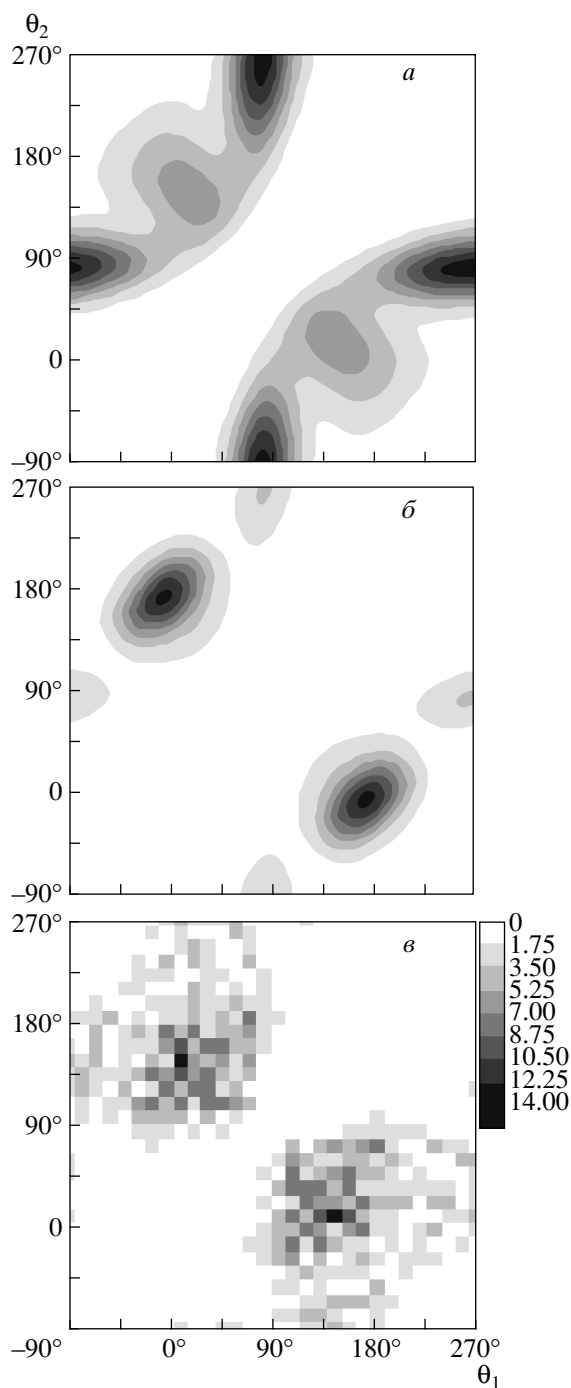


Рис. 3. То же, что на рис. 1, но для переданных атому импульсов  $q$  в интервале от 1.4 до 2.0 ат. ед.

Однако вследствие интерференции электрон, удаляемый в результате встряски, вылетает преимущественно в направлении электрона, выбитого протонным ударом. В наших расчетах эта конструктивная интерференция между вылетающими электронами

возникает благодаря симметризации волновой функции  $\Psi_{p_1 p_2}$  (5) и, как следствие, интерференции амплитуд  $A_0$  и  $A_1$  в выражении для дифференциального сечения рассеяния (12). Поэтому, если бы между вылетающими электронами отсутствовало кулоновское взаимодействие, то в угловом распределении вылетающих электронов наблюдалось бы два максимума: основной при  $\theta_1 = \theta_2 = \theta_q$  и дополнительный при  $\theta_1 = \theta_2 = \theta_q + \pi$ . Направление вектора  $\mathbf{q}$  имеет некоторый разброс в результате разброса энергий вылетающих электронов,  $0 \leq E_e \leq 25$  эВ, и из-за различных значений модуля  $q$  в каждом из трех рассматриваемых диапазонов (см. (4)). Так, для малых переданных импульсов  $0.2 < q < 0.8$  возможные направления вектора  $\mathbf{q}$  лежат в интервале  $5^\circ < \theta_q < 75^\circ$ . Для больших значений  $q$  интервал возможных углов  $\theta_q$  уменьшается и смещается к точке  $\theta_q = 90^\circ$ . При  $0.8 < q < 1.4$  возможные направления вектора  $\mathbf{q}$  лежат в интервале  $45^\circ < \theta_q < 85^\circ$  и при  $1.4 < q < 2.0$  — в интервале  $80^\circ < \theta_q < 88^\circ$ .

Кулоновское взаимодействие между вылетающими электронами радикально меняет картину углового распределения. Кулоновское отталкивание, описываемое множителем  $|F_{int}^{av}(\alpha, p_{12})|^2$  в выражении для дифференциального сечения рассеяния (12), гораздо сильнее эффективного притяжения между электронами, возникающего в результате их интерференции. Электроны вылетают преимущественно не в одном направлении,  $\theta_1 \approx \theta_2$ , а в противоположных,  $\theta_1 \approx \theta_2 + \pi$ . Действительно, на рис. 1–3 видно, что и в эксперименте и в двух проведенных расчетах наблюдается минимум в испускании при  $\theta_1 \approx \theta_2$ , на диагонали интенсивность испускания практически равна нулю. В то же время максимумы интенсивности располагаются в области испускания электронов в противоположных направлениях,  $\theta_1 \approx \theta_2 + \pi$ .

При увеличении угла между векторами  $\mathbf{p}_1$  и  $\mathbf{p}_2$  в результате кулоновского отталкивания электронов возможны два типа эволюции углового распределения. Во-первых, импульсы вылетающих электронов могут располагаться симметрично относительно преимущественного направления вектора  $\mathbf{q}$  при прямом ударе или  $-\mathbf{q}$  при ионизации в результате отдачи. При стремлении разности  $\theta_1 - \theta_2$  к  $180^\circ$  эти максимумы практически сливаются,  $\theta_{2,1} \approx \theta_q \pm \pi/2$ . Подобные максимумы видны на всех рис. 1–3, появляются они парами в соответствии с симметрией относительно замены  $\theta_1 \leftrightarrow \theta_2$ . На рис. 1а можно различить два отдельных максимума при  $\theta_1 \approx 0$ ,  $\theta_2 \approx 111^\circ$  и при  $\theta_1 \approx -66^\circ$ ,  $\theta_2 \approx 179^\circ$ , соответствующие прямой ионизации и ионизации с отдачей. На остальных рис. 1–3 эти максимумы сливаются. С

ростом переданного импульса ширина этих максимумов уменьшается, а их центр смещается в направлении линии  $\theta_1 + \theta_2 = 180^\circ$  в соответствии с изменением направлений вектора  $\mathbf{q}$  и уменьшением их разброса.

Другая возможная кинематика разлета электронов, обеспечивающая максимум их испускания при сильном межэлектронном отталкивании, следующая. Один электрон вылетает в направлении  $\mathbf{q}$ , другой — в обратном направлении  $-\mathbf{q}$ . Максимумы такого сорта имеются в рассчитанных нами угловых распределениях, но отсутствуют в эксперименте. Соотношение между величинами двух этих типов максимумов зависит от силы межэлектронного взаимодействия. Действительно, в расчетах без учета эффекта экранировки зарядов (рис. 1а, 2а, 3а) максимумы второго типа являются основными. Эффективное экранирование зарядов уменьшает силу отталкивания электронов, движущихся в противоположных направлениях, и благодаря этому заметно ослабляет максимумы второго типа по сравнению с максимумами первого типа (см. рис. 1б, 2б, 3б). Сравнение рассчитанных распределений  $f(\theta_1, \theta_2)$  с экспериментальными (рис. 1в, 2в, 3в) показывает таким образом, что 2С-функции существенно переоценивают взаимодействие электронов между собой. Учет экранирования зарядов позволяет уменьшить этот недостаток модели кулоновских функций и приблизить значения рассчитанных дифференциальных сечений к экспериментально наблюдаемым.

Для более точного сравнения рассчитанных сечений между собой и с экспериментальными данными представляется целесообразным рассмотреть зависимость дифференциальных сечений ДИА от среднего угла вылета электронов  $\theta_s = (\theta_1 + \theta_2)/2$  и от их разности  $\theta_d = \theta_1 - \theta_2$ . Для этого мы спроецировали двумерные угловые распределения электронной эмиссии  $f(\theta_1, \theta_2)$ , представленные на рис. 1–3, на направления  $\theta_1 = \theta_2$  и  $\theta_1 = -\theta_2$ . Полученные зависимости интенсивности ДИА от  $\theta_s$  и  $\theta_d$  представляются в виде:

$$I(\theta_s) = \int_0^\pi f\left(\theta_s + \frac{\theta_d}{2}, \theta_s - \frac{\theta_d}{2}\right) d\theta_d,$$

$$I(\theta_d) = \int_0^\pi f\left(\theta_s + \frac{\theta_d}{2}, \theta_s - \frac{\theta_d}{2}\right) d\theta_s.$$

В распределение интенсивности  $I(\theta_d)$  в интервале  $0 < \theta_d < \pi$  дают вклад события ДИА с  $0 < \theta_s < \pi$ ,

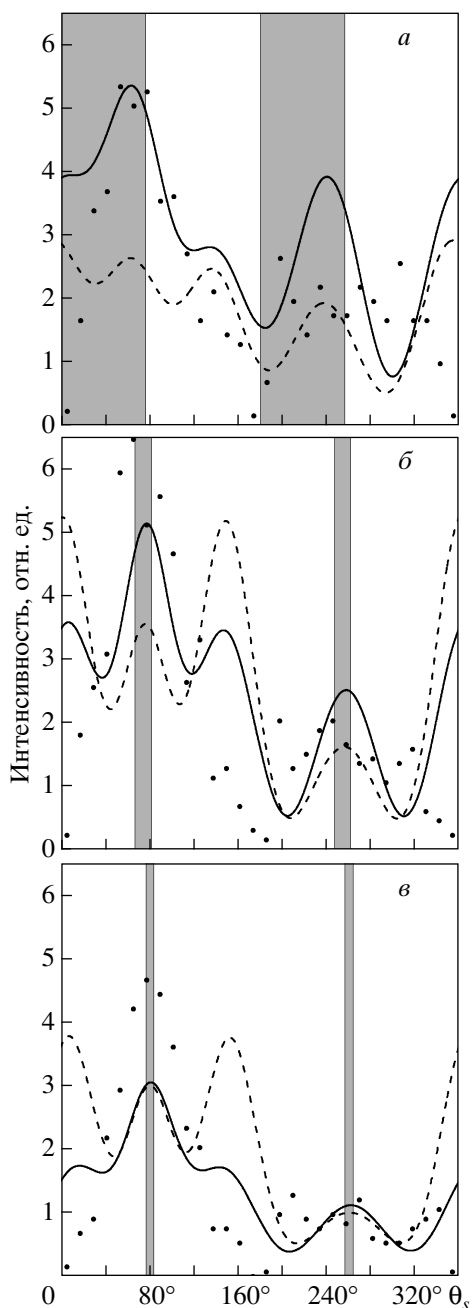
а в интервале  $\pi < \theta_d < 2\pi$  — события с  $\pi < \theta_s < 2\pi$ . Результаты расчета этих интенсивностей представлены на рис. 4, 5. Штриховыми кривыми показаны угловые распределения электронов, рассчитанные без учета экранировки заряда, сплошными кривыми — с учетом экранировки и точками — экспериментально наблюдаемое распределение.

На рис. 4 в распределении интенсивности электронной эмиссии, рассчитанной без учета экранировки, хорошо видны четыре отдельных максимума. Один из них соответствует ионизации в результате прямого соударения налетающего протона с одним из атомных электронов. Его положение определяется средним направлением вектора  $\mathbf{q}$ . Для трех диапазонов переданного импульса оно составляет соответственно  $63^\circ$ ,  $77^\circ$  и  $82^\circ$ . Другой максимум отстоит от первого на  $180^\circ$  и соответствует ионизации атома, при которой импульс  $\mathbf{q}$  передается ядру, а электрон вылетает в результате отдачи. С ростом переданного импульса соотношение между этими двумя максимумами меняется в пользу прямой ионизации. Эта тенденция наблюдается в обоих вариантах расчета и в эксперименте.

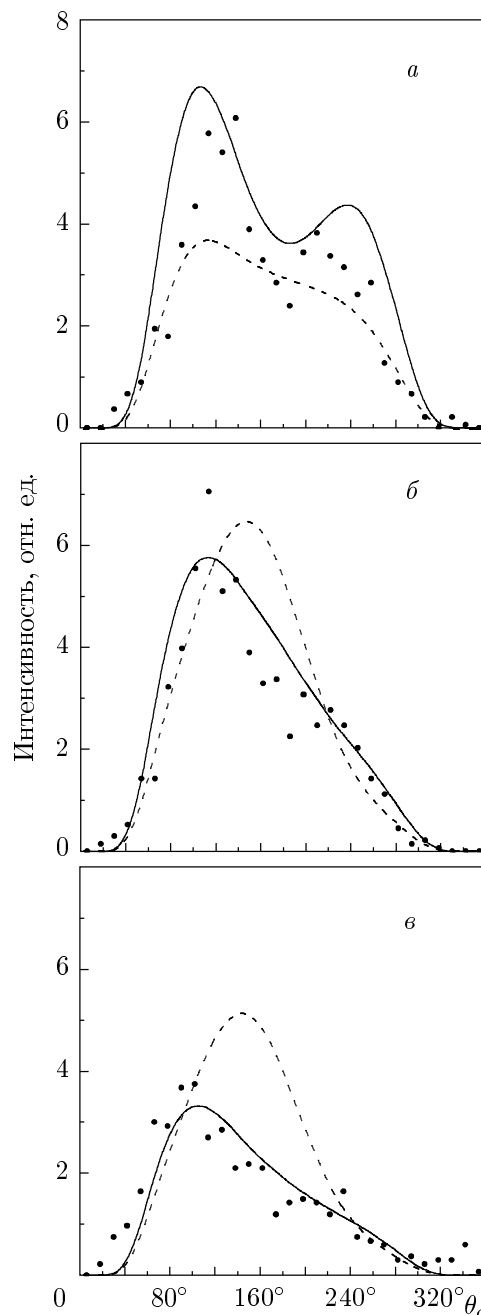
Между этими двумя максимумами на штриховых кривых рис. 4 имеются еще два дополнительных максимума, соответствующие ионизации, при которой один электрон вылетает в направлении  $\mathbf{q}$ , а другой электрон — в обратном направлении. Интенсивность в этих максимумах превосходит при больших  $q$  интенсивность в первых двух максимумах. Учет динамической экранировки зарядов электронов существенно уменьшает амплитуды этих максимумов и приводит рассчитанное распределение интенсивности ДИА к качественному согласию с экспериментом.

Более заметно кулоновское отталкивание вылетающих электронов проявляется в зависимости интенсивности их испускания от относительного угла их вылета  $\theta_d$ . В отсутствие этого взаимодействия интенсивность испускания максимальна при  $\theta_d = 0$ . Включение кулоновского взаимодействия увеличивает этот угол до  $150^\circ$  (штриховые кривые на рис. 5), в то время как интенсивность испускания электронов в одном направлении практически стремится к нулю. Однако сравнение этого расчета с экспериментальными данными наглядно показывает, что 2С-функции переоценивают силу кулоновского взаимодействия электронов, испущенных в противоположных направлениях. Положения максимумов экспериментальных распределений смещено относительно расчетных на  $30^\circ$ – $40^\circ$  в сторону меньших углов. Учет динамического экранирования зарядов





**Рис. 4.** Интенсивность электронной эмиссии как функция среднего угла испускания электронов  $\theta_s$  при  $0.2 < q < 0.8$  (а),  $0.8 < q < 1.4$  (б),  $1.4 < q < 2.0$  (в) ат. ед. Рассматривается случай компланарной геометрии при равных энергиях вылетевших электронов  $0 < E_{e_1} = E_{e_2} < 25$  эВ. Штриховые линии — расчет в модели 2С-функций, сплошные линии — в модели 2С-функций с учетом динамической экранировки заряда. Точками показаны значения, извлеченные из экспериментальных распределений работы [3]. Серым цветом выделены допустимые диапазоны углов  $\theta_q$  переданного атому импульса  $q$



**Рис. 5.** Интенсивность электронной эмиссии как функция относительного угла испускания электронов  $\theta_d$  при  $0.2 < q < 0.8$  (а),  $0.8 < q < 1.4$  (б),  $1.4 < q < 2.0$  (в) ат. ед. Все обозначения и параметры, как на рис. 4

электронов корректирует этот недостаток модели 2С-функций и значительно улучшает согласие теории (сплошные кривые) и эксперимента.

Отметим также зависимость распределений интенсивности на рис. 5 от величины переданного им-

пульса. Положение максимума распределения смещается с ростом  $q$  в область меньших углов. Для трех диапазонов  $q$  положения максимумов составляют соответственно  $125^\circ$ ,  $115^\circ$  и  $100^\circ$ . Эта зависимость объясняется тем, что с ростом  $q$  увеличивается и суммарный импульс вылетающих электронов. Поскольку импульс регистрируемых электронов ограничен по величине, рост суммарного импульса приводит к уменьшению угла  $\theta_d$ .

#### 4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Простая квантовомеханическая модель 2С-функций применена для описания процесса ДИА гелия протонным ударом. Согласно развитому подходу ДИА происходит в результате выбивания одного электрона протонным ударом и удаления второго электрона благодаря встряске. Окончательное распределение вылетающих электронов формируется под воздействием кулоновского взаимодействия удаляемых электронов в процессе их разлета. Проведены расчеты дифференциальных сечений ДИА как с учетом эффективного экранирования зарядов электронов в процессе их разлета, так и без него. Сравнение полученных результатов с экспериментальными данными показывает, что модель 2С-функций фактически переоценивает силу кулоновского взаимодействия вылетающих электронов. Учет динамического экранирования путем введения эффективных зарядов вылетающих электронов и иона остатка, позволяет скорректировать этот недостаток модели 2С-функций. Достигнутое при этом качественное согласие теории и эксперимента позволяет говорить об адекватности использованной модели. Дальнейший прогресс в расчете дифференциальных сечений ДИА может быть достигнут с использованием более точных 3С-функций для описания состояния вылетающих электронов в континууме.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. J. Ullrich, R. Moshhammer, A. Dorn et al., Rep. Progr. Phys. **66**, 1463 (2003).
2. J. S. Briggs and V. Schmidt, J. Phys. B: Atom. Mol. Opt. Phys. **33**, R1 (2000).
3. D. Fischer, R. Moshhammer, A. Dorn et al., Phys. Rev. Lett. **90**, 243201 (2003).
4. D. Fischer, M. Schulz, R. Moshhammer et al., J. Phys. B: Atom. Mol. Opt. Phys. **37**, 1103 (2004).
5. M. Schulz, D. Fischer, R. Moshhammer et al., J. Phys. B: Atom. Mol. Opt. Phys. **38**, 1363 (2005).
6. G. Garibotti and J. E. Miraglia, Phys. Rev. A **21**, 572 (1980).
7. M. Brauner, J. S. Briggs, and H. Klar, J. Phys. B: Atom. Mol. Opt. Phys. **22**, 2265 (1989).
8. F. Maulbetsch and J. S. Briggs, J. Phys. B: Atom. Mol. Opt. Phys. **26** L647 (1993).
9. F. Maulbetsch and J. S. Briggs, J. Phys. B: Atom. Mol. Opt. Phys. **26**, 1679 (1993).
10. F. Maulbetsch and J. S. Briggs, J. Phys. B: Atom. Mol. Opt. Phys. **27**, 4095 (1994).
11. F. Maulbetsch and J. S. Briggs, J. Phys. B: Atom. Mol. Opt. Phys. **28**, 551 (1995).
12. F. Maulbetsch, M. Pont, J. S. Briggs et al., J. Phys. B: Atom. Mol. Opt. Phys. **28**, L341 (1995).
13. M. Pont, R. Shakeshaft, F. Maulbetsch et al., Phys. Rev. A **53**, 3671 (1996).
14. S. P. Lucey, J. Rasch, C. T. Whelan et al., J. Phys. B: Atom. Mol. Opt. Phys. **31**, 1237 (1998).
15. P. Lamy, B. Joulakian, C. Dal Cappello et al., J. Phys. B: Atom. Mol. Opt. Phys. **29**, 2315 (1996).
16. S. Jones and D. H. Madison, Phys. Rev. Lett. **91**, 073201 (2003).
17. L. G. Gerchikov and S. A. Sheinerman, J. Phys. B: Atom. Mol. Opt. Phys. **34**, 647 (2001).
18. L. G. Gerchikov, S. A. Sheinerman, M. Schulz et al., J. Phys. B: Atom. Mol. Opt. Phys. **35**, 2783 (2002).
19. J. Berakdar, Phys. Rev. A **53**, 2314 (1996).
20. S. Jones, D. H. Madison, and D. A. Konovalov, Phys. Rev. A **55**, 444 (1997).
21. J. Berakdar, J. Roder, J. S. Briggs et al., J. Phys. B: Atom. Mol. Opt. Phys. **29**, 6203 (1996).
22. J. Berakdar, J. S. Briggs, I. Bray et al., J. Phys. B: Atom. Mol. Opt. Phys. **32**, 895 (1999).
23. X. F. Jia, M. H. Liu, S. Y. Sun et al., Phys. Rev. A **69**, 062707 (2004).
24. А. Мессиа, *Квантовая механика*, Наука, Москва (1978), гл. 11.
25. S. A. Sheinerman and V. Schmidt, J. Phys. B: Atom. Mol. Opt. Phys. **32**, 5205 (1999).
26. M. Schulz, R. Moshhammer, W. Schmitt et al., Phys. Rev. Lett. **84**, 863 (2000).