

ДВУХЭЛЕКТРОННАЯ ФОТОИОНИЗАЦИЯ АТОМА ГЕЛИЯ ВБЛИЗИ ПОРОГА

М. С. Юрьев

Рассматривается задача о выбивании двух атомных электронов одним фотоном. Сечение такого процесса отлично от нуля лишь при учете электронной корреляции. Для учета корреляции применяется теория возмущений по межэлектронному взаимодействию, причем учитывается корреляция как в начальном, так и в конечном состоянии. Вычисление матричных элементов производится с помощью кулоновской функции Грина. Получено сечение двухэлектронной фотоионизации атома гелия в области энергий налетающего фотона ~ 100 эв. Изучено распределение вылетевших фотоэлектронов по энергии.

В в е д е н и е

Двухэлектронная фотоионизация (ДФИ) гелия представляет существенный теоретический и экспериментальный интерес. Теоретически ДФИ интересна как процесс, целиком обусловленный электронной корреляцией. Можно сказать, что ДФИ является «нуль-эффектом» для корреляции, т. е. таким эффектом, вероятность которого точно равна нулю в отсутствие межэлектронного взаимодействия. Такие процессы особенно удобны для испытания различных методов учета электронной корреляции, так как в них корреляция определяет не маленькие поправки, а всю вероятность процесса. Кроме того, ДФИ имеет и «теоретически-прикладное» значение, так как силы осцилляторов, соответствующие этим переходам, вносят непренебрежимый вклад в суммы сил осцилляторов, особенно в среднюю энергию возбуждения, необходимую для вычисления лэмбовского сдвига [1].

Экспериментально сечение ДФИ гелия было измерено в работе [2]. Однако результаты [2] не дают всей интересующей информации. В ней измерено лишь полное сечение ДФИ в довольно ограниченной области спектра. В теоретических работах [3, 4] при вычислении сечения ДФИ учитывается электронная корреляция лишь в начальном состоянии, электроны в конечном состоянии считаются невзаимодействующими. Такое рассмотрение возможно, когда энергия фотона $\omega \gg I_2$ (I_2 — потенциал двукратной ионизации), однако в области энергии вблизи порога законность описания конечного состояния как движения двух невзаимодействующих электронов в кулоновском поле ядра далеко не очевидна. Такое рассмотрение недостаточно для количественного описания явления, а кроме того, не может дать даже качественно правильного ответа на некоторые вопросы, например на вопрос о распределении вылетевших электронов по углу между ними. В настоящей работе проведен учет корреляций как в начальном, так и в конечном состоянии, и показано, что существуют области энергий, в которых вклад межэлектронного взаимодействия в сечение ДФИ является значительным.

П о с т а н о в к а з а д а ч и

Сечение ДФИ гелия определяется следующей формулой: ¹

$$\sigma^{++}(\omega) = 4\pi^2 a_0 \sum_{l_1 l_2} \int d\varepsilon_1 d\varepsilon_2 \delta(\varepsilon_1 + \varepsilon_2 - h\omega + I_2) |M_{if}|^2, \quad (1)$$

¹ Здесь и ниже используются атомные единицы.

где α — постоянная тонкой структуры; ω — энергия налетающего фотона; ε_1 и ε_2 — энергии фотоэлектронов; M_{if} — матричный элемент взаимодействия атома со светом, относительно которого делаем обычное нерелятивистское дипольное приближение, с хорошей точностью выполняющееся вблизи порога ДФИ гелия ($I_2 \sim 80$ эв). Хорошо известно (см., например, [5]), что M_{if} можно выбрать в одной из двух эквивалентных форм: в форме дипольной длины или дипольной скорости. В данной работе расчеты проводились с матричным элементом в форме дипольной длины. Отметим, что при ДФИ фотоэлектроны могут иметь произвольные угловые моменты l_1 и l_2 , но суммарный их момент $L = 1$. Поэтому l_1 и l_2 связаны между собой соотношением $l_2 = l_1 \pm 1$, и сумма в (1) фактически однократная.

Для учета корреляции мы применим теорию возмущения по межэлектронному взаимодействию.² Это систематический метод, позволяющий последовательно уточнять полученные результаты путем учета более высоких приближений. Он дает возможность в рамках одного расчета получить результаты сразу для всего одноэлектронного ряда. В качестве нулевого приближения выбираются водородоподобные функции.

В нулевом порядке матричный элемент M_{if} равен нулю. В первом порядке по $1/Z$ получим

$$M_{if} = \int \Psi_0 r_{12}^{-1} (H_0 - \varepsilon_0)^{-1} (z_1 + z_2) \Psi_E^0 d\tau + \int \Psi_0 (z_1 + z_2) (H_0 - E_0)^{-1} r_{12}^{-1} \Psi_E^0 d\tau. \quad (2)$$

Здесь H_0 — невозмущенный гамильтониан; Ψ_0 и Ψ_E^0 — невозмущенные волновые функции; ε_0 и E_0 — соответствующие собственные значения; r_{12} — межэлектронное расстояние; z — координата.

Матричный элемент (2) является двухэлектронным, но, используя одночастичный характер оператора дипольного момента и тот факт, что невозмущенные волновые функции — произведение одноэлектронных функций, можно свести вычисление (2) к одноэлектронной задаче с эффективным потенциалом. Получаем

$$\begin{aligned} \langle i | M | f \rangle = & \sqrt{2} \sum_{m=-l_1}^{l_1} \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & 1 \\ m & -m & 0 \end{pmatrix} \{ \langle \psi_{\varepsilon_1, l_1} | V(\varepsilon_2, l_2) (h - \omega_3)^{-1} z | \psi_0 \rangle + \\ & + \langle \psi_{\varepsilon_2, l_2} | V(\varepsilon_1, l_1) (h - \omega_3)^{-1} z | \psi_0 \rangle + \langle \psi_{\varepsilon_1, l_1} | z (h - \omega_2)^{-1} V(\varepsilon_2, l_2) | \psi_0 \rangle + \\ & + \psi_{\varepsilon_2, l_2} | z (h - \omega_1) V(\varepsilon_1, l_1) | \psi_0 \rangle \}, \end{aligned} \quad (3)$$

где $h = -(1/2)\nabla^2 - Z/r$ — одночастичный гамильтониан; $\omega_1 = 2\varepsilon_0 - \varepsilon_1$; $\omega_2 = 2\varepsilon_0 - \varepsilon_2$; $\omega_3 = \varepsilon_1 + \varepsilon_2 - \varepsilon_0$; ψ_0 , $\psi_{\varepsilon, l}$ — водородные функции основного состояния и сплошного спектра с энергией ε ;

$$V(\varepsilon, l) = \int \psi_0 r_{12}^{-1} \psi_{\varepsilon, l} d\tau. \quad (4)$$

Для вычисления матричных элементов резольвенты $(h - \omega)^{-1}$ используем функцию Грина $G_l(1, 2; \omega)$. Так как нулевое приближение водородное, то это будет кулоновская функция Грина (КФГ). Ее явный вид хорошо известен [7]

$$G_l(1, 2; \omega) = \sum_{l, m} g_l(1, 2; \omega) Y_{lm}^*(\Omega_1) Y_{lm}(\Omega_2), \quad (5)$$

где

$$\begin{aligned} g_l(1, 2; \omega) = & \frac{\nu}{r_1 r_2} \frac{\Gamma(l+1-\nu)}{\Gamma(2l+2)} M_{\nu, l+1/2} \left(\frac{2r_1}{\nu} \right) W_{\nu, l+1/2} \left(\frac{2r_2}{\nu} \right), \\ & \nu = 1/\sqrt{-2\omega}, \end{aligned} \quad (6)$$

$M_{\nu, \mu}(x)$ и $W_{\nu, \mu}(x)$ — функции Уиттекера [8]. Подставляя (6) в (4), интегрируя по углам и суммируя по квантовому числу m , получим

² Такой подход к задаче двухэлектронной фотоионизации был впервые предложен в работе [6], где, однако, вычисления сечений проведено не было.

$$\langle i | M | f \rangle = \sqrt{2} \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \left\{ \sqrt{\frac{2l_1+1}{2l_2+1}} P_{\varepsilon_1 l_1}^{\varepsilon_2 l_2}(1, \omega_3) + \sqrt{\frac{2l_2+1}{2l_1+1}} P_{\varepsilon_2 l_2}^{\varepsilon_1 l_1}(1, \omega_3) + \right. \\ \left. + \sqrt{\frac{2l_1+1}{2l_2+1}} Q_{\varepsilon_1 l_1}^{\varepsilon_2 l_2}(l_2, \omega_2) + \sqrt{\frac{2l_2+1}{2l_1+1}} Q_{\varepsilon_2 l_2}^{\varepsilon_1 l_1}(l_1, \omega_1) \right\}, \quad (7)$$

где

$$P_{\varepsilon l'}^{\varepsilon' l}(1, \omega) = \langle R_{\varepsilon, l} | V_r(\varepsilon', l') g_1(1, 2; \omega) r | R_{\varepsilon, l} \rangle, \quad (8a)$$

$$Q_{\varepsilon l'}^{\varepsilon' l}(l'', \omega) = \langle R_{\varepsilon, l} | r g_l \cdot (1, 2, \omega) V_r(\varepsilon', l') | R_{\varepsilon, l} \rangle, \quad (8b)$$

$$V_r(\varepsilon, l) = \int_0^{\infty} R_0(r) \frac{r^l}{r^{l+1}} R_{\varepsilon, l} r^2 dr, \quad (8в)$$

$R_0, R_{\varepsilon, l}$ — радиальные части волновых функций ψ_0 и $\psi_{\varepsilon, l}$.

Формулы (1)–(8) позволяют рассчитать сечение ДФИ, если известен способ вычисления кулоновской функции Грина. Специфика данной задачи с вычислительной точки зрения состоит в том, что нужно уметь вычислять КФГ, как для положительных, так и для отрицательных значений энергетического параметра, для произвольных значений углового момента l . Кроме того, так как интегралы (8a) сходятся весьма медленно, необходимо вычислять КФГ в широком интервале изменения аргументов. Нами был составлен и реализован на ЭВМ БЭСМ-6 алгоритм вычисления КФГ, удовлетворяющий этим требованиям.

Полное сечение и распределение фотоэлектронов по энергиям

В таблице приведены значения полного сечения двухэлектронной фотоионизации гелия как функции $\varepsilon = h\omega - I_2$, т. е. превышения энергии падающего фотона над потенциалом ионизации. При суммировании по l в формуле (1) мы ограничивались учетом двух членов, т. е. рассматривались фотоэлектроны с моментами $l_1=0, l_2=1$ и $l_1=1, l_2=0,2$. Для изучения

Полное сечение двукратной фотоионизации атома гелия

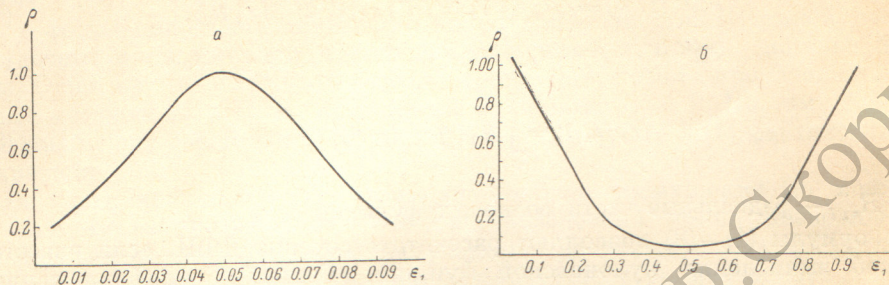
ε , ат. ед.	$\sigma^{++} \cdot 10^{20}$, см ²	$\sigma_d^{++} \cdot 10^{20}$, см ²	Δ , %
0.1	0.385	0.391	0.43
0.2	1.28	1.30	1.66
0.4	0.960	0.868	1.70
0.6	0.553	0.341	1.01
0.8	0.387	0.234	1.03
1.0	0.327	0.194	1.23

Примечание. $\varepsilon = h\omega - I_2$ — превышение энергии фотона над порогом двукратной ионизации; σ^{++} — сечение ДФИ, рассчитанное с учетом корреляций, как в начальном, так и в конечном состоянии; σ_d^{++} — сечение ДФИ, рассчитанное с учетом корреляций только в начальном состоянии; $\Delta = \sigma^{++}/\sigma^{++}$ — отношение сечения ДФИ к сечению однократной фотоионизации.

вклада высших моментов при двух энергиях ($\varepsilon = 0.1$ ат. ед. и $\varepsilon = 1$ ат. ед.) было сосчитано сечение с учетом f - и g -парциальных волн. Оказалось, что вклад этих моментов в сечение не превышает 20%. Представляет интерес вопрос о роли корреляций в конечном состоянии. В таблице приведены сечения σ^{++} , рассчитанные с учетом корреляций как в начальном, так и в конечном состоянии, и сечение σ_d^{++} , вычисленное с учетом корреляций только в дискретном спектре. Видно, что вблизи порога разница между этими сечениями незначительна, но затем растет и при $\varepsilon = 1$ ат. ед. эти сечения различаются в 1.5 раза. Таким образом, учет корреляций

в конечном состоянии оказывается существенным в области энергий ~ 1 ат. ед. (~ 30 эв) за порогом.

Кроме полного сечения, были вычислены распределения электронов по энергиям при различных энергиях падающего фотона. Оказалось, что электронный спектр меняет свой характер по мере увеличения час-



Распределение фотоэлектронов по энергии при различных энергиях фотона.

ϵ — суммарная энергия двух электронов; ϵ_1 — энергия одного из электронов; σ_1 — сечение ДФИ, при которой один из электронов получает энергию ϵ_1 ; $\rho = \sigma_1 / \sigma_1^{\max}$ — отношение сечения $\sigma_1(\epsilon_1)$ к максимальному при данной суммарной энергии. а — $\epsilon = 0.1$ ат. ед.; б — $\epsilon = 1$ ат. ед.

тоты фотона. Вблизи порога (см. рисунок, а) электроны с наибольшей вероятностью делят энергию пополам. Это соответствует предположению Ванье [9] о «динамическом экранировании». При $\epsilon \sim 30$ эв (см. рисунок, б), наоборот, один из электронов, как правило, получает почти всю фотонную энергию. В работе Брауна [4] был рассчитан электронный спектр при $\epsilon \sim 1$ кэв. Качественно картина совпадает с рисунком, б, при этом минимум в середине еще более глубокий.

В заключение автор приносит благодарность Л. Н. Лабзовскому, Ю. Ю. Дмитриеву за полезные советы, Е. Г. Друкареву, М. П. Казачкову за обсуждение результатов работы.

Литература

- [1] E. E. Salpeter, M. H. Zaidi. Phys. Rev., 125, 248, 1962.
- [2] T. A. Carlson. Phys. Rev., 156, 142, 1967.
- [3] F. W. Byron, C. J. Joachin. Phys. Rev., 164, 1, 1967.
- [4] R. L. Brown. Phys. Rev., A1, 586, 1970.
- [5] У. Фаю, Дж. Купер. Спектральные распределения сил осцилляторов в атомах. Изд. «Наука», М., 1972.
- [6] Ю. Ю. Дмитриев, Л. Н. Лабзовский. Вестн. ЛГУ, № 22, 5, 1971.
- [7] E. C. Hostler. J. Math. Phys., 5, 591, 1964.
- [8] Э. Т. Уиттекер, Дж. Н. Ватсон. Курс современного анализа. Физматгиз, М., 1963.
- [9] G. H. Wannier. Phys. Rev., 90, 817, 1953.

Поступило в Редакцию 5 ноября 1973 г.