

ДВОЙНАЯ ИОНИЗАЦИЯ АТОМОВ МНОГОЗАРЯДНЫМИ ИОНАМИ И СИЛЬНЫМ ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫМ ПОЛЕМ: ЭФФЕКТЫ КОРРЕЛЯЦИИ В НЕПРЕРЫВНОМ СПЕКТРЕ

Л.П.Пресняков, Д.Б.Усков

*Физический институт им. П.Н.Лебедева РАН
117924 Москва, Россия*

Поступила в редакцию 4 июня 1997 г.

Развивается нестационарная теория двойной ионизации двухэлектронных атомов в столкновениях с многозарядными ионами или под действием интенсивного электромагнитного поля. Сформулирован подход, позволяющий исследовать обе задачи единым методом. Получена двухэлектронная волновая функция непрерывного спектра, учитывающая взаимодействие электронов с атомным ядром, внешним ионизатором и между собой, в виде произведения кулоновских волн с модифицированными параметрами Зоммерфельда. Результаты расчетов по двойной ионизации атомов гелия многозарядными ионами находятся в хорошем количественном согласии с имеющимися экспериментальными данными.

PACS: 34.50.Jb, 34.80.Rm

При анализе ионизации атомов ионным ударом или интенсивным электромагнитным полем влияние нестационарного внешнего потенциала (сравнимого с внутриатомным и превышающего его) необходимо учитывать уже в нулевом порядке, то есть в волновых функциях непрерывного спектра в конечном канале реакции. Для одноэлектронных процессов теория Келдыша [1] позволяет исследовать важнейшие характеристики многофотонной ионизации и допускает обобщение на случай ионизации многозарядными ионами [2]. Обе задачи целесообразно рассматривать совместно, поскольку они могут решаться в рамках единого подхода, причем имеющийся экспериментальный материал по ион-атомным столкновениям может существенно помочь в анализа процесса многофотонной ионизации. В частности, модификация [2] теории [1], связанная с выходом за рамки теории возмущений при расчете амплитуд и вероятностей переходов, дает хорошее количественное описание совокупности экспериментальных данных по ионизации атомов [2] и нейтрализации отрицательных ионов [3] при столкновениях с многозарядными ионами. Другой поправкой к теории и ее модификации [2] является замена обобщенных плоских волн [1] на кулоновские волновые функции в поле атомного остова с учетом дополнительно импульса, приобретаемого электроном в поле ионизатора [4–6]. Это приводит к увеличению вероятности ионизации в сильных полях и аналитически правильному описанию области применимости теории возмущений (однофотонный фотоэффект, кулон-борновский предел в физике столкновений).

Анализ двойной ионизации требует, в дополнение к указанному выше, учета межэлектронной корреляции в волновых функциях непрерывного спектра. Такая задача возникает уже в теории однократной ионизации атомов электронным ударом. Ранее [7] было показано, что использование неискаженной двухчастичной волновой функции межэлектронного отталкивания ведет к чрезмерному занижению результатов. Для учета частичного экранирования межэлектронного отталкивания в различных областях конфигурационного пространства было предложено [7] введение эффективного заряда. Этот подход

дал первое количественное описание экспериментальных данных по сечениям возбуждения и ионизации атомов $H(1s)$ электронами. Системы из трех частиц, связанных между собой кулоновским взаимодействием в непрерывном спектре, в настоящее время являются объектом интенсивных исследований, как экспериментальных, так и теоретических. Эффективный заряд (или эффективный параметр Зоммерфельда) взаимодействующих частиц находится из физических соображений [8] либо из приближенных решений [9,10] уравнения Шредингера. В последнем случае он зависит от координат частиц. Расчеты этими методами [8-10] дают хорошее согласие с экспериментальными данными по дифференциальным сечениям ионизации атомов $H(1s)$ электронами [8,11].

Решаемая в настоящей работе задача является четырехчастичной для случая взаимодействия атомов с ионами и трехчастичной во внешнем поле в случае многофотонной ионизации. Используя подход [2,6], сведем задачу в обоих случаях к системе трех частиц во внешнем нестационарном поле. Это достигается разложением кулоновского взаимодействия электронов с налетающим ионом по мультиполям с удержанием только дипольного члена. Нестационарное уравнение Шредингера (в атомных единицах) имеет вид

$$i \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left[\sum_{j=1,2} \left(-\frac{1}{2} \Delta_{r_j} - \frac{Z}{r_j} - \mathbf{r}_j \mathbf{B}(t) \right) + \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \right] \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t). \quad (1)$$

Здесь r_j – координаты электронов, отсчитанные от ядра с зарядом Z двух-электронного атома, а коэффициенты \mathbf{B} равны

$$\mathbf{B}(t) = q\mathbf{R}(t)/R^3(t) \quad \text{или} \quad \mathbf{B}(t) = \mathbf{E} \cdot \cos(\omega t) \quad (2)$$

в случае взаимодействия с ионом с зарядом q или внешним полем с амплитудой \mathbf{E} и частотой ω , соответственно. Междудерное расстояние $\mathbf{R}(t)$ считается заданной функцией времени. Решение ищется в виде

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) = \exp \left[i \sum_{j=1,2} (\mathbf{p}_j \mathbf{r}_j - 1/2 \int_0^t p_j^2(\tau) d\tau) \right] \prod_{j=1,2} F_j(\mathbf{r}_j, \mathbf{p}_j) \Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2), \quad (3)$$

$$\mathbf{p}_j = \mathbf{k}_j + \mathbf{A}(t), \quad \mathbf{A}(t) = \int_0^t \mathbf{B}(\tau) d\tau,$$

$$F_j = \exp(\pi\nu_j/2) \Gamma(1 + i\nu_j) F(-i\nu_j, 1, -i\eta_j), \quad \nu_j = Z/p_j, \quad \eta_j = \mathbf{p}_j \mathbf{r}_j + p_j r_j. \quad (4)$$

Экспоненциальный множитель в (3) является произведением двух обобщенных плоских волн [1], произведение вырожденных гипергеометрических функций (4) превращает эти плоские волны в кулоновские волновые функции, описывающие движение каждого из электронов в поле атомного остова и внешнем нестационарном поле, \mathbf{k}_j – импульсы электронов в отсутствие внешнего поля. Поскольку основная зависимость от времени содержится в экспоненциальном сомножителе (3), то можно считать, что корреляционная функция Φ зависит от времени только параметрически, что соответствует приближению возмущенных стационарных состояний в теории атомных столкновений. Возникающие при подстановке (3) в (1) градиентные коэффициенты оценим в той части

конфигурационного пространства, где векторы p_j и r_j коллинеарны, то есть положим

$$(F_j^{-1} \nabla_{r_j} F_j) \nabla_{r_j} \Phi \approx i\nu_j (r_j/r_j) \nabla_{r_j} \Phi \approx i\nu_j n_j a^{-1} \nabla_{r_j} \Phi, \quad n_j = p_j/p_j, \quad (5)$$

где a – характерный размер атома мишени. Здесь целесообразно ввести координаты для центра инерции двух электронов и расстояния между ними, в которых уравнение для Φ разделяется. Поскольку уравнение по координате центра инерции не содержит потенциалов, его решение можно положить равным единичной константе. Оставшееся уравнение приобретает вид

$$\left[\Delta_{r_{12}} - \frac{1}{r_{12}} + i \left(p_{12} + \frac{\nu_1}{a} n_1 - \frac{\nu_2}{a} n_2 \right) \nabla_{r_{12}} \right] \Phi = 0, \quad (6)$$

$$r_{12} = r_1 - r_2, \quad p_{12} = p_1 - p_2 \equiv k_1 - k_2$$

и допускает точное решение

$$\Phi(r_{12}) = \exp(-\pi\nu/2) \Gamma(1 + i\nu) F(-i\nu, 1, i\eta), \quad \eta = d_{12} r_{12} - d_{12} r_{12}, \quad (7)$$

$$d_{12} = k_1 - k_2 + (\nu_1 n_1 - \nu_2 n_2)/a, \quad \nu = Z/d_{12}.$$

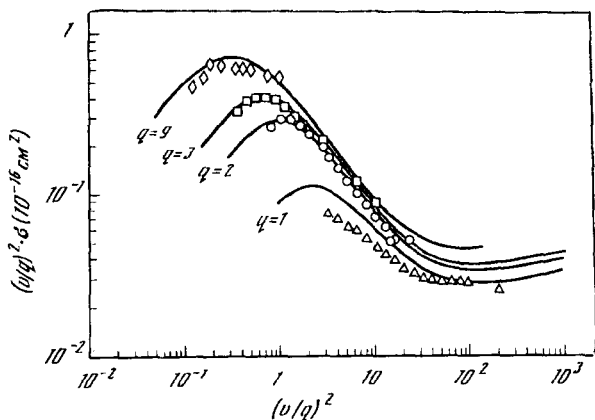
Формулой (7) совместно с (3) решается задача о двухэлектронной волновой функции непрерывного спектра в поле атомного остова и внешнем нестационарном поле. Во всех сомножителях (3) импульсы (и связанные с ними параметры Зоммерфельда) явно зависят от характеристик внешнего поля (2). При стремлении величины B к нулю корреляционная функция (7) сохраняет зависимость от k_1 и k_2 , выходящую за рамки приближения незранированного межэлектронного отталкивания, и может быть использована и в других трехчастичных задачах.

Если принять во внимание, что двойная ионизация в широком диапазоне параметров реализуется как двухступенчатый процесс, то есть последовательность одноэлектронных, то двухэлектронная вероятность может быть представлена в виде

$$W(k_1, k_2) = \int \int dk_1 dk_2 \frac{1}{2} |a_1(k_1) a_2(k_2) \zeta(k_1, k_2) + a_1(k_2) a_2(k_1) \zeta(k_2, k_1)|^2. \quad (8)$$

Здесь a_1 и a_2 – амплитуды вероятности “независимых” одноэлектронных процессов ионизации и фактор ζ определяет эффект межэлектронной корреляции. Для ионизации атомов многозарядными ионами величины a_1 и a_2 вычислялись нами ранее [2,3,6] без учета корреляционной функции (7). В общем случае функция ζ , входящая в (8), может быть выделена в виде сомножителя только при факторизации волновой функции начального (связанного) состояния по координатам обоих электронов. Функциональные свойства корреляционного фактора $\zeta(k_1, k_2)$ и асимптотические выражения будут обсуждены в отдельной публикации. Здесь в качестве примера мы приведем результаты расчета сечений двухэлектронной ионизации атомов He в сопоставлении с имеющимися в литературе экспериментальными данными (см. рисунок).

Основным результатом настоящей работы является возможность описания двойной ионизации двухэлектронных атомов (ион H^- , атом He и He-подобные ионы) на основе подхода, применимого для решения задач физики атомных



Параметризованное сечение отрыва двух электронов от атома гелия при столкновениях с многозарядными ионами как функция величины $(v/q)^2$, где v – относительная скорость столкновения в атомных единицах, q – заряд иона. Сплошные кривые – результаты расчетов в рамках представленной теории (заряды q указаны рядом с кривыми). Экспериментальные данные: Δ – $q = 1$, \circ – $q = 2$, \square – $q = 3$, данные из работ [12,13]; \diamond – $q = 9$ работа [14]

столкновений и многофотонной ионизации. Полученные волновые функции непрерывного спектра в конечном канале в явном виде учитывают влияние ионизатора (иона или электромагнитного поля), а также межэлектронного взаимодействия. Указанная корреляция имеет нетривиальный характер и может быть использована в других задачах, связанных с выходом двух электронов в непрерывный спектр. Сравнение расчетов с экспериментальными данными указывает на перспективность дальнейшего развития данного подхода.

Авторы глубоко признательны В.Л.Гинзбургу, С.П.Гореславскому, Н.Б.Делоне, Д.А.Киржницу и И.И.Собельману за интерес к работе и обсуждению. Работа поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (проект 96-02-16090) и Международным научно-техническим центром (проект 076/95).

1. Л.В.Келдыш, ЖЭТФ **47**, 1945 (1964).
2. Л.П.Пресняков, Д.Б.Усков, ЖЭТФ **86**, 862 (1984).
3. F.Melchert, M.Benner, S.Krudener et al., Phys. Rev. Lett. **74**, 888 (1995).
4. J.Z.Kaminski, Physica Scripta **A42**, 417 (1990).
5. M.H.Mittelman, Phys. Rev. **A50**, 3249 (1994).
6. L.P.Presnyakov, H.Tawara, I.Yu.Tolstikhina, and D.B.Uskov, J. Phys. **B28**, 785 (1995).
7. Л.А.Вайнштейн, Л.П.Пресняков, И.И.Собельман, ЖЭТФ **45**, 2015 (1963); Л.П.Пресняков, ЖЭТФ **47**, 1134 (1964).
8. J.Berakdar and J.S.Briggs, Phys. Rev. Lett. **72**, 3799 (1994).
9. E.O.Alt and A.M.Mukhamedzhanov, Phys. Rev. **A47**, 2004 (1993).
10. J.Berakdar, Phys. Rev. **A53**, 3214 (1996).
11. S.Jones, D.H.Madison, and D.A.Konovalov, Phys. Rev. **A55**, 444 (1997).
12. H.Knudsen, L.Andersen, P.Hvelplund et al., J. Phys. **B17**, 3545 (1984).
13. M.B.Shah and H.B.Gilbody, J. Phys. **B18**, 899 (1984).
14. J.L.Shinpaugh, J.M.Sanders, J.M.Hall et al., Phys. Rev. **A45**, 2922 (1992).