

ЖУРНАЛ
ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ
И ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

ОСНОВАН В МАРТЕ 1873 ГОДА
ВЫХОДИТ 12 РАЗ В ГОД
МОСКВА

ТОМ 116, ВЫПУСК 6(12)
ДЕКАБРЬ, 1999
«НАУКА»

ДВОЙНАЯ ИОНИЗАЦИЯ И ИОНИЗАЦИЯ С ВОЗБУЖДЕНИЕМ В
КОМПТОНОВСКОМ РАССЕЯНИИ ВЫСОКОЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ФОТОНОВ
НА МЕТАСТАБИЛЬНЫХ СОСТОЯНИЯХ ГЕЛИЕПОДОБНЫХ ИОНОВ

©1999

А. И. Михайлов*, И. А. Михайлов

*Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова Российской академии наук
188350, Гатчина, Ленинградская обл., Россия*

Поступила в редакцию 3 марта 1999 г.

Изучаются двойная ионизация и ионизация с возбуждением в комптоновском рассеянии на метастабильных состояниях гелиеподобных ионов. Вычислены энергетическое распределение электронов для двойной ионизации и полные сечения для обоих процессов. Расчет проводился в первом порядке теории возмущений по межэлектронному взаимодействию с кулоновскими волновыми функциями в качестве нулевого приближения. Полученные формулы применимы только в высокоэнергетической нерелятивистской области. Предполагается, что $Z \gg 1$, но $\alpha Z \ll 1$ (Z — заряд ядра, α — постоянная тонкой структуры).

PACS: 32.80.-t; 32.80.Cy

1. ВВЕДЕНИЕ

Взаимодействие электронов с фотонами описывается одночастичным оператором. Поэтому при поглощении или рассеянии одного фотона одновременный вылет двух электронов из атома (двойная ионизация) или вылет одного электрона с переходом второго электрона в более высокое состояние (ионизация с возбуждением) возможны только за счет электрон-электронного взаимодействия. В настоящее время эти процессы

*E-mail: mikhailo@thd.npni.spb.ru

© Российская академия наук, Отделение общей физики и астрономии,
Институт физических проблем им. П. Л. Капицы, 1999 г.

широко изучаются теоретически и экспериментально с целью получения сведений об электронных корреляциях в атомах и ионах [1]. Значительное внимание исследователей привлекают атом гелия и гелиевая изоэлектронная последовательность как простейшие многоэлектронные системы. Использование их в качестве мишеней позволяет относительно просто проверить различные модели учета межэлектронного взаимодействия. В отсутствие экспериментальных данных сравнение расчетов, проведенных с использованием теории возмущений, с расчетами, основанными на использовании различных вариационных функций, делает возможным провести отбор тех коррелированных волновых функций, которые наилучшим образом описывают поведение системы в изучаемом процессе. Большая часть работ относится к основному состоянию гелия. Процессы в метастабильном гелии тоже интересны, так как позволяют получить информацию о межоболочечных корреляциях. Первые такие расчеты с использованием многопараметрических вариационных волновых функций выполнены для двойной ионизации при поглощении фотона с энергией ω порядка нескольких килоэлектронвольт [2, 3]. Однако при $\omega > \eta$ (η — средний импульс $1s$ -электрона, $\eta \simeq 7 \text{ кэВ}^{\text{1)}$ для He) доминирующим процессом взаимодействия электрона с фотоном является не фотопоглощение, а рассеяние фотона электроном (комптоновское рассеяние) [4]. Двойная ионизация в комптоновском рассеянии (двойной комптон-эффект) на основном 1^1S -состоянии гелия исследовалась в ряде работ [5–8]. В настоящей работе рассмотрена двойная ионизация и ионизация с возбуждением при рассеянии высокоэнергетических фотонов на 2^1S - и 2^3S -состояниях гелиеподобных ионов в нерелятивистской области энергий. Расчет выполнен с использованием теории возмущений по межэлектронному взаимодействию с кулоновскими волновыми функциями в качестве нулевого приближения. Предполагается, что $Z \gg 1$, но $\alpha Z \ll 1$ (Z — заряд ядра, α — постоянная тонкой структуры). Полученные формулы можно применять также для расчета двойной ионизации стабильных многозарядных ионов, содержащих более двух электронов.

2. ВЫВОД ОБЩЕГО ВЫРАЖЕНИЯ ДЛЯ АМПЛИТУДЫ ПРОЦЕССА

Будем рассматривать асимптотическую нерелятивистскую область энергий фотона $\eta \ll \omega \ll m$ (m — масса электрона),

Графически процесс рассеяния фотона электроном изображается тремя диаграммами Фейнмана (рис. 1). Графики a и b называются полюсными и описывают двухфотонный переход через промежуточные состояния. В импульсном представлении, которым далее мы будем пользоваться, вершине с входящей фотонной линией соответствует оператор γ_1 :

$$\begin{aligned} \langle f' | \gamma_1 | f \rangle &= \sqrt{\frac{2\pi\alpha}{\omega_1}} \frac{\mathbf{e}_1}{m} \left(\mathbf{f} + \frac{i}{2} [\boldsymbol{\sigma} \mathbf{k}_1] \right) \langle f' | \mathbf{f} + \mathbf{k}_1 \rangle, \\ \langle f' | f \rangle &= (2\pi)^3 \delta(\mathbf{f}' - \mathbf{f}), \end{aligned} \quad (1)$$

а вершине с выходящей фотонной линией — оператор γ_2^* :

$$\langle f' | \gamma_2^* | f \rangle = \sqrt{\frac{2\pi\alpha}{\omega_2}} \frac{\mathbf{e}_2^*}{m} \left(\mathbf{f} - \frac{i}{2} [\boldsymbol{\sigma} \mathbf{k}_2] \right) \langle f' | \mathbf{f} - \mathbf{k}_2 \rangle, \quad (2)$$

¹⁾ В работе используется система единиц $\hbar = c = 1$.

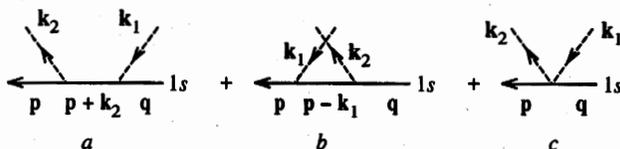


Рис. 1. Диаграммы Фейнмана для рассеяния фотона на электроне. Штриховые линии — фотоны, сплошные линии — электроны, $q = p + k_2 - k_1$

где e_1 и k_1 (e_2 и k_2) — соответственно вектор поляризации и импульс поглощаемого (излучаемого) фотона. Вершине с двумя фотонными линиями (график с на рис. 1) соответствует оператор Q :

$$\langle f' | Q | f \rangle = \frac{2\pi\alpha}{\sqrt{\omega_2\omega_1}} \frac{e_2^* e_1}{m} \langle f' | f + k \rangle, \quad k = k_1 - k_2. \quad (3)$$

При рассеянии фотона на связанном электроне сплошным линиям на рис. 1 соответствуют кулоновские функции.

Оценим графики на рис. 1 в рассматриваемой области энергий. Известно [9], что при рассеянии на свободном электроне энергия падающего фотона (ω_1) распределяется между рассеянным фотоном (ω_2) и электроном (E_p) следующим образом:

$$\omega_2 \simeq \omega_1 - \frac{\omega_1^2}{m}(1-t), \quad E_p = \omega_1 - \omega_2 \simeq \frac{\omega_1^2}{m}(1-t), \quad (4)$$

$t = \cos\theta$, θ — угол рассеяния фотона.

При рассеянии на связанном электроне основной вклад в сечение процесса дает та кинематическая область, где переданный ядру импульс q мал ($q \sim \eta$). В результате энергии рассеянного фотона и эжектированного электрона тоже определяются формулами (4). Тогда импульс электрона $p \sim \omega_1$, и при $\omega_1 \gg \eta$ в качестве волновой функции ионизованного электрона можно взять плоскую волну, а вместо кулоновской функции Грина — свободную функцию, так как энергия E' и импульс p' промежуточного электрона достаточно велики:

$$E' = \omega_1 + E_{1s} \simeq \omega_1 \gg I, \quad p' \gg \eta, \quad I = \eta^2/2m, \quad \eta = m\alpha Z.$$

Опуская спиновые члены в операторах γ_i , имеем следующую оценку для полюсных графиков:

$$F_a \simeq \langle p | \gamma_2^* G \gamma_1 | 1s \rangle \sim \frac{\alpha}{\omega_1} \frac{e_2^* p}{m} \frac{1}{E' - E_p} \frac{e_1 p}{m} \langle q | 1s \rangle \sim \frac{\alpha}{m^2} \langle q | 1s \rangle, \quad (5)$$

$$q = p + k_2 - k_1,$$

$$F_b \simeq \langle p | \gamma_1 G \gamma_2^* | 1s \rangle \sim \frac{\alpha}{m^2} \langle q | 1s \rangle. \quad (6)$$

Спиновые члены операторов γ_i дадут такой же вклад, так как $p \sim \omega_2 \sim \omega_1$. Контактный график с, вычисленный при тех же условиях, по порядку величины равен

$$F_c \simeq \langle p|Q|1s \rangle \sim \frac{\alpha}{m\omega_1} \langle q|1s \rangle. \tag{7}$$

Сравнивая (5)–(7),

$$\frac{F_a}{F_c} \sim \frac{F_b}{F_c} \sim \frac{\omega_1}{m}, \tag{8}$$

видим, что в области энергий $I \ll \omega_1 \ll m$ полюсные графики малы и могут быть отброшены. Все сказанное справедливо и для двойного комптон-эффекта (двойной ионизации при рассеянии фотона) [8].

Поскольку оператор Q является одноэлектронным оператором, амплитуда двухэлектронного перехода с учетом свойств симметрии волновых функций может быть представлена в виде

$$M^{++} = \langle \Psi_f(1, 2)|Q(1) + Q(2)|\Psi_i(1, 2) \rangle = 2\langle \Psi_f(1, 2)|Q(1)|\Psi_i(1, 2) \rangle \tag{9}$$

(цифры в скобках есть краткие обозначения переменных интегрирования, относящихся к электронам 1 и 2; Ψ_i (Ψ_f) — двухэлектронная волновая функция начального (конечного) состояния).

В нерелятивистском приближении волновые функции могут быть представлены в виде произведения пространственной функции на спиновую. Оператор Q не содержит спиновых матриц, поэтому спиновая часть волновой функции в (9) не меняется и выпадает из рассмотрения. Поскольку полная волновая функция должна быть антисимметричной относительно перестановки электронов, характер симметрии пространственной функции, определяемый полным электронным спином, остается неизменным.

Волновые функции $\Psi_{i,f}$ будем искать в низшем порядке теории возмущений по электрон-электронному взаимодействию, используя в качестве нулевого приближения кулоновские функции $\Psi_{i,f}^{(0)}$:

$$\Psi_i = \Psi_i^{(0)} + G_i^{(2)}(1 - P_i)V_{12}\Psi_i^{(0)}, \quad \Psi_f = \Psi_f^{(0)} + G_f^{(2)}V_{12}\Psi_f^{(0)}. \tag{10}$$

Здесь V_{12} — оператор межэлектронного взаимодействия (в координатном представлении $V_{12} = \alpha/|r_1 - r_2|$), $P_i = |\Psi_i^{(0)}\rangle\langle\Psi_i^{(0)}|$ — оператор проектирования, $G_{i,f}^{(2)}$ — функции Грина для двух не взаимодействующих между собой электронов, находящихся в поле ядра Z :

$$G_{i,f}^{(2)} = (E_{i,f}^{(0)} - H_1 - H_2 + i0)^{-1}, \tag{11}$$

$$E_i^{(0)} = E_{1s} + E_{2s}, \quad E_f^{(0)} = E_{p_1} + E_{p_2},$$

H_1 и H_2 — одночастичные кулоновские гамильтонианы, действующие на одноэлектронные функции $\psi(i)$:

$$H_i\psi_{n\ell}(i) = E_{n\ell}\psi_{n\ell}(i), \quad H_i\psi_p(i) = E_p\psi_p(i).$$

Здесь индексы $n\ell$ относятся к дискретному состоянию, а индекс p — к состоянию непрерывного спектра. Энергия $E_f^{(0)}$ в (11) написана для случая, когда в конечном состоянии оба электрона свободны. Нормированные функции нулевого приближения имеют вид

$$\Psi_i^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{2}}\{\psi_{1s}(1)\psi_{2s}(2) \pm \psi_{1s}(2)\psi_{2s}(1)\}, \tag{12}$$

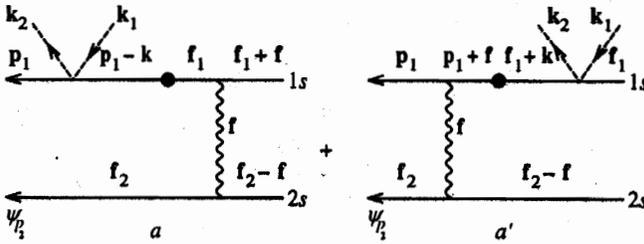


Рис. 2. Фейнмановские амплитуды для двойной ионизации в комптоновском рассеянии, учитывающие электрон-электронное взаимодействие в начальном (а) и конечном (а') состояниях. Волнистая линия изображает межэлектронное взаимодействие (обмен кулоновским фотоном). Линия между двумя вершинами с жирной точкой посередине соответствует кулоновской функции Грина. На этой линии сохраняется энергия, но не импульс

$$\Psi_f^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \psi_{p_1}(1)\psi_{p_2}(2) \pm \psi_{p_1}(2)\psi_{p_2}(1) \}, \tag{13}$$

p_1, p_2 — импульсы ионизованных электронов, знак $+(-)$ относится к синглетному (триплетному) состоянию. Так как в изучаемом процессе симметрия системы не меняется, в формулах (12) и (13) берется один и тот же знак — либо плюс, либо минус.

Подставляя (10)–(13) в (9), получаем

$$M^{++} = \{ \langle \psi_{p_1}\psi_{p_2} | Q G_c(E_i) V_{12} + V_{12} G_c(E_f) Q | \psi_{1s}\psi_{2s} \rangle \pm (1s \leftrightarrow 2s) \} \pm \{ p_1 \leftrightarrow p_2 \}. \tag{14}$$

Здесь $G_c(E) = (E - H_1)^{-1}$ — одночастичная кулоновская функция Грина с энергией E ,

$$E_i = E_i^{(0)} - E_{p_2} = -\frac{5}{4}I - E_{p_2}, \quad E_f = E_f^{(0)} - E_{2s} = \omega - I, \quad \omega = \omega_1 - \omega_2. \tag{15}$$

Равенства (15) написаны с учетом закона сохранения энергии:

$$E_{p_1} + E_{p_2} = \omega + E_{1s} + E_{2s} = \omega - \frac{5}{4}I. \tag{16}$$

Члены, входящие в выражение для амплитуды (14) и содержащие функцию Грина $G_c(E_i)$, учитывают межэлектронное взаимодействие в начальном состоянии, тогда как члены с $G_c(E_f)$ учитывают это взаимодействие в конечном состоянии.

Изобразим графически первые два члена в (14) (рис. 2). Импульсы на линиях расставлены для случая, когда ψ_{p_1} можно заменить плоской волной.

Хорошо известно [10, 11], что в случае двойной фотоионизации (двойного фотоэффекта) энергия поглощенного фотона распределяется крайне неравномерно: один из электронов уносит почти всю энергию, а другой является медленным. В двойном комптон-эффекте энергия налетающего фотона делится между тремя частицами (два электрона и фотон), поэтому оба электрона в конечном состоянии могут оказаться медленными. Однако, как и в фотоэффекте, наиболее вероятна ситуация, когда один электрон медленный, а второй получает значительную энергию в соответствии с законами кинематики (4) для комптон-эффекта на свободном электроне [8]. Таким образом, главный вклад в сечение дают две крайние области энергетического спектра электронов: $E_{p_1} \gg E_{p_2}$ для графиков a и a' на рис. 2 и $E_{p_2} \gg E_{p_1}$ для тех же графиков с

переставленными импульсами p_1 и p_2 . При получении полного сечения надо учесть тождественность фотоэлектронов и ввести множитель $1/2$. Можно, однако, рассматривать только одну краевую область, например $E_{p_1} \gg E_{p_2}$, и не делить сечение на 2.

Сравним вклады в амплитуду от графиков a и a' на рис. 2. Так как эти графики различаются только верхними линиями, оценим матричные элементы, входящие в верхние линии. Оценку дадим для случая, когда $p_1 \gg \eta$ и потому $|\psi_{p_1}\rangle \approx |p_1\rangle$. Опуская общий для обоих графиков множитель от оператора Q , получим

$$F_a = \int \langle p_1 - k | G_c(E_i) | f_1 \rangle \langle f_1 + f | 1s \rangle \frac{df_1}{(2\pi)^3} \sim \langle q | G_c(E_i) | 1s \rangle = \frac{\langle q | 1s \rangle}{E_i - E_{1s}} \sim \frac{\langle q | 1s \rangle}{\eta \alpha Z}, \quad (17)$$

$$F_{a'} = \int \langle p_1 + f | \frac{1}{E_f - H_0} | f_1 + k \rangle \langle f_1 | 1s \rangle \frac{df_1}{(2\pi)^3} \sim \frac{\langle q | 1s \rangle}{E_f - E_{a'}}, \quad (18)$$

$$E_{a'} = \frac{(p_1 + f)^2}{2m}, \quad H_0 | f \rangle = \frac{f^2}{2m} | f \rangle.$$

При оценке диаграмм a и a' мы полагали $f \sim \eta$ (интегралы по f насыщаются при $f \sim \eta$). На диаграмме a' импульс промежуточного электрона $p_{a'} \simeq p_1 \gg \eta$, и потому кулоновская функция Грина в (18) заменена на свободную функцию Грина. Используя (15) и (4) с E_{p_1} вместо E_p , получим

$$E_f - E_{a'} \simeq E_{p_1} - \left(E_{p_1} + \frac{1}{m} p_1 f \right) \approx -\frac{1}{m} p_1 f \sim \alpha Z \omega_1, \quad (19)$$

так как $E_f \approx E_{p_1} \approx (\omega_1^2/m)(1-t)$ и $p_1 \sim \omega_1$. После подстановки (19) в (18) имеем

$$F_{a'} \sim \frac{\langle q | 1s \rangle}{\omega_1 \alpha Z}, \quad \frac{F_{a'}}{F_a} \sim \frac{\eta}{\omega_1}. \quad (20)$$

При перестановке одноэлектронных конечных состояний ($p_1 \leftrightarrow p_2$) энергия E_f (15) не меняется, а энергия E_i (15) становится большой: $|E_i| \sim E_{p_1} \sim \omega \gg I$. В результате графики с переставленными линиями ψ_{p_1} и ψ_{p_2} окажутся того же порядка малости, что и график a' на рис. 2. Все эти графики могут быть отброшены в рассматриваемой области энергий фотона ($\eta \ll \omega_1 \ll m$). Тогда в выражении (14) для амплитуды останутся только два члена:

$$M^{++} = \langle \psi_{p_1} \psi_{p_2} | Q G_c(E_i) V_{12} | \psi_{1s} \psi_{2s} \rangle \pm (1s \leftrightarrow 2s) = M_a \pm M_b, \quad (21)$$

которым соответствуют две диаграммы Фейнмана на рис. 3.

3. РАСЧЕТ АМПЛИТУДЫ ДВОЙНОГО КОМПТОН-ЭФФЕКТА

Перейдем к вычислению амплитуды M^{++} . В импульсном представлении оператору межэлектронного взаимодействия V_{12} соответствует фотонный пропагатор $D(f)$ равный

$$D(f) = \frac{4\pi\alpha}{f^2}. \quad (22)$$

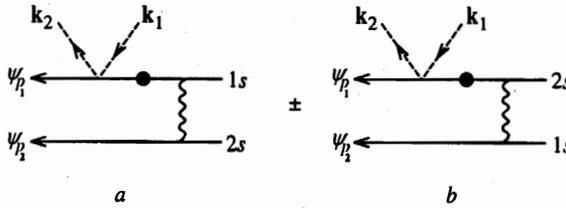


Рис. 3. Фейнмановские диаграммы, дающие основной вклад в двойной комптон-эффект на 2^1S - и 2^3S -состояниях гелиеподобных ионов

Уберем из выражения для амплитуды множители $4\pi\alpha$ от фотонного пропагатора (22) и $2\pi\alpha(\omega_1\omega_2)^{-1/2}\mathbf{e}_2^*\mathbf{e}_1/m$ от оператора Q (3), включив их в выражение для сечения. Обе краевые области дают одинаковый вклад в сечение, и потому достаточно рассмотреть только одну из них, например ту, где $p_1 \sim \omega_1 \gg \eta$, а $p_2 \ll p_1$. Используя в качестве волновой функции ψ_{p_1} быстрого электрона плоскую волну, получим

$$M_a = \int \frac{d\mathbf{f}}{(2\pi)^3} \frac{1}{f^2} F_1(\mathbf{p}_1, \mathbf{f}) F_2(\mathbf{p}_2, \mathbf{f}), \tag{23}$$

$$F_1(\mathbf{p}_1, \mathbf{f}) = \int \frac{d\mathbf{f}_1}{(2\pi)^3} \langle \mathbf{q} | G_c | \mathbf{f}_1 \rangle \langle \mathbf{f}_1 + \mathbf{f} | 1s \rangle = N_1 \left(-\frac{\partial}{\partial \eta_1} \right) \langle \mathbf{q} | G_c V_{i\eta_1} | -\mathbf{f} \rangle, \tag{24}$$

$$\mathbf{q} = \mathbf{p}_1 + \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1, \quad \eta_1 = \eta = m\alpha Z, \quad N_1^2 = \eta^3/\pi,$$

$$F_2(\mathbf{p}_2, \mathbf{f}) = \int \frac{d\mathbf{f}_2}{(2\pi)^3} \langle \psi_{p_2} | \mathbf{f}_2 \rangle \langle \mathbf{f}_2 - \mathbf{f} | 2s \rangle N_2 \Gamma_{\eta_2} \left(-\frac{\partial}{\partial \eta_2} \right) \langle \psi_{p_2} | V_{i\eta_2} | \mathbf{f} \rangle, \tag{25}$$

$$\Gamma_{\eta_2} = 1 + \frac{\eta}{2} \frac{\partial}{\partial \eta_2}, \quad \eta_2 = \frac{\eta}{2}, \quad N_2^2 = \frac{\eta_2^3}{\pi},$$

$$\langle \mathbf{f}' | V_{i\lambda} | \mathbf{f} \rangle = \frac{4\pi}{(\mathbf{f}' - \mathbf{f})^2 + \lambda^2}. \tag{26}$$

Необходимые для расчета волновые функции $1s$ - и $2s$ -состояний в импульсном представлении взяты из работы [12]. Энергия E электрона в промежуточном состоянии (энергия функции Грина G_c) одинакова для диаграмм a и b на рис. 3 и совпадает с энергией E_i (15):

$$E = -\left(\frac{5}{4} + \varepsilon_2\right) I, \quad \varepsilon_2 = \frac{E_{p_2}}{I} = \frac{p_2^2}{\eta^2}. \tag{27}$$

Подставляя (24), (25) в (23), представим M_a в виде

$$M_a = \langle \psi_a | G_c | \mathbf{q} \rangle, \tag{28}$$

$$\langle \psi_a | = N_1 N_2 \Gamma_{\eta_2} \frac{\partial^2}{\partial \eta_2 \partial \eta_1} \int \frac{d\mathbf{f}}{(2\pi)^3} \frac{1}{f^2} \langle \psi_{p_2} | V_{i\eta_2} | \mathbf{f} \rangle \langle -\mathbf{f} | V_{i\eta_1}. \tag{29}$$

Аналогичный расчет диаграммы b на рис. 3 дает

$$M_b = \langle \psi_b | G_c | \mathbf{q} \rangle, \quad (30)$$

$$\langle \psi_b | = N_1 N_2 \Gamma_m \frac{\partial^2}{\partial \eta_2 \partial \eta_1} \int \frac{d\mathbf{f}}{(2\pi)^3} \frac{1}{f^2} \langle \psi_{p_1} | V_{i\eta_1} | \mathbf{f} \rangle \langle -\mathbf{f} | V_{i\eta_2} | \psi_b \rangle. \quad (31)$$

Объединяя (28) и (30), получим полную амплитуду M^{++} (21):

$$M^{++} = \langle \psi | G_c | \mathbf{q} \rangle, \quad \psi = \psi_a \pm \psi_b. \quad (32)$$

Знак $+(-)$ берется для синглетного (триплетного) состояния.

4. СЕЧЕНИЕ ДВОЙНОГО КОМПТОН-ЭФФЕКТА

Усредненное и просуммированное по поляризациям фотонов сечение двойной комптоновской ионизации равно

$$d\sigma_C^{++} = \frac{(4\pi\alpha)^4}{8m^2} (1+t^2) |M^{++}|^2 d\Gamma, \quad t = \cos\theta, \quad (33)$$

$$d\Gamma = \frac{d\mathbf{p}_1 d\mathbf{p}_2 d\mathbf{k}_2}{\omega_1 \omega_2 (2\pi)^8} \delta(E_{p_1} + E_{p_2} + \omega_2 - \omega_1 - E_{1s} - E_{2s}). \quad (34)$$

Если в (32) вместо G_c использовать свободную функцию Грина, то легко показать, что $|M^{++}|^2 \sim (q^2 + \eta^2)^{-4}$ и потому сечение определяется областью малых переданных импульсов $q \lesssim \eta$. Заменяя $d\mathbf{p}_1$ на $d\mathbf{q}$ и интегрируя по ω_2 , получим следующее выражение для фазового объема $d\Gamma$ в нерелятивистской области [8]:

$$d\Gamma = \frac{d\mathbf{q} d\mathbf{p}_2}{(2\pi)^8} d\Omega_{k_2}. \quad (35)$$

Распространяя интеграл по \mathbf{q} на все пространство (это можно сделать, так как большие q дают малый вклад в интеграл), находим

$$S(p_2) = \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} |M^{++}|^2 = \langle \psi | G_c^2 | \psi \rangle = \sum_N \frac{|\langle \psi | N \rangle|^2}{(E - E_N)^2}. \quad (36)$$

Суммирование в (36) проводится по всем одноэлектронным кулоновским состояниям дискретного и непрерывного спектров, число N заменяет совокупность квантовых чисел, энергия E определена в (27).

Интегрируя по углу вылета фотона, получаем

$$d\sigma_C^{++} = \frac{\alpha^2}{\pi} \sigma_C^+ S(p_2) d\mathbf{p}_2, \quad (37)$$

$$\sigma_C^+ = 2\sigma_T, \quad \sigma_T = \frac{8}{3} \pi r_e^2, \quad r_e = \frac{\alpha}{m}. \quad (38)$$

Здесь σ_T — томсоновское сечение рассеяния фотона на свободном электроне, σ_C^+ — сечение однократной ионизации при рассеянии фотона на двухэлектронном атоме (ионе).

Точный расчет величины $S(p_2)$ представляет собой трудную задачу. Ее можно значительно упростить, приняв во внимание следующие два обстоятельства. Во-первых, как будет показано ниже, дифференциальное сечение быстро убывает с ростом энергии ε_2 медленного электрона. Полное сечение процесса определяется областью малых $\varepsilon_2 < 1$, и для его получения достаточно вычислить $S(p_2)$ в этой области. Во-вторых, вклад самого нижнего состояния ($N = 1$) в (36) при малых ε_2 значительно превышает вклад от всех остальных состояний. С приемлемой точностью можно ограничиться в (36) первым членом суммы, то есть положить

$$S(p_2) \simeq \frac{|\langle \psi_a \pm \psi_b | 1s \rangle|^2}{(E - E_{1s})^2}. \quad (39)$$

Используя для вектора состояния $|1s\rangle$ выражение

$$|1s\rangle = N_1 \left(-\frac{\partial}{\partial \eta} \right) V_{i\eta} |0\rangle \quad (40)$$

и легко проверяемое тождество

$$-\frac{\partial}{\partial \eta} V_{i\eta} V_{i\lambda} = -\frac{\partial}{\partial \eta} V_{i\lambda} V_{i\eta} = V_{i(\lambda+\eta)}, \quad (41)$$

получим

$$\langle \psi_a | 1s \rangle = N_1^2 N_2 \Gamma_m \left(-\frac{\partial}{\partial \nu} \right) \frac{1}{\nu^2} \langle \psi_{p_2} | V_{i\nu} - V_{i(\nu+\nu)} | 0 \rangle, \quad (42)$$

$$\langle \psi_b | 1s \rangle = N_1^2 N_2 \Gamma_m \left(-\frac{\partial}{\partial \eta_2} \right) \frac{1}{(\eta_2 + \eta)^2} \langle \psi_{p_2} | V_{i\eta} - V_{i(\eta+\nu)} | 0 \rangle, \quad (43)$$

где $\nu = 2\eta$, $|0\rangle$ — плосковолновое состояние с нулевым импульсом. Входящий в (42), (43) матричный элемент с кулоновской волновой функцией непрерывного спектра вычислен в работах [13, 14]:

$$\langle \psi_{p_2} | V_{i\lambda} | 0 \rangle = 4\pi N_{p_2} \frac{(\lambda + ip_2)^{i\xi_2 - 1}}{(\lambda - ip_2)^{i\xi_2 + 1}}, \quad N_{p_2} \approx \sqrt{2\pi\xi_2}, \quad \xi_2 = \frac{\eta}{p_2}. \quad (44)$$

После подстановки (44) в (42), (43) и выполнения операций дифференцирования приходим к выражениям

$$\langle \psi_a | 1s \rangle = \frac{N_{p_2} N_2}{\eta^2} \left\{ \varphi \left(\frac{1}{2}, 1 \right) - \varphi(a, 1) + \frac{1}{2} \varphi \left(\frac{1}{2}, 2 \right) - \frac{5}{2} \varphi(a, 2) + 12 \varphi(a, 3) \right\}, \quad (45)$$

$$\langle \psi_b | 1s \rangle = \frac{N_{p_2} N_2}{\eta^2} \frac{64}{3} \varphi(a, 3), \quad a = \frac{5}{2}, \quad (46)$$

$$\varphi(q, k) = (q^2 + \varepsilon_2)^{-k} \exp \left(-\frac{2}{\sqrt{\varepsilon_2}} \arctg \frac{\sqrt{\varepsilon_2}}{q} \right). \quad (47)$$

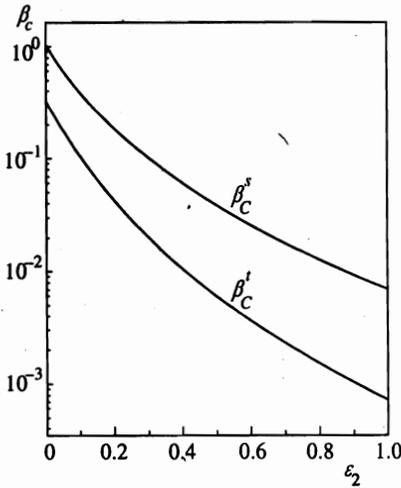


Рис. 4. Энергетические распределения медленных электронов ($\beta_C = Z^2 d\sigma_C^{++}/d\epsilon_2 \sigma_C^+$) в двойном комптон-эффекте на состояниях 2^1S (β_C^s) и 2^3S (β_C^t) гелиеподобных ионов

Так как матричные элементы (45), (46), а следовательно, и $S(p_2)$ не зависят от углов, медленные электроны вылетают изотропно (угловое распределение быстрых электронов аналогично распределению электронов по углам в обычном комптон-эффекте). Заменяя $d\Omega_{p_2}$ на 4π и переходя от dp_2 к $d\epsilon_2$, получим

$$N_{p_2}^2 dp_2 = (2\pi)^2 \eta^3 d\epsilon_2. \tag{48}$$

Подставляя (45), (46) в (39), а (39) в (37), с учетом (48) приходим к энергетическим распределениям медленных электронов при ионизации синглетных (s) и триплетных (t) состояний гелиеподобных ионов:

$$\frac{d\sigma_C^{++}/d\epsilon_2}{\sigma_C^+} = \frac{\beta_C^{s,t}(\epsilon_2)}{Z^2}, \quad \beta_C^{s,t}(\epsilon_2) = 2 \left(\frac{\phi^{s,t}(\epsilon_2)}{1/4 + \epsilon_2} \right)^2, \tag{49}$$

$$\phi^{s,t}(\epsilon_2) = \varphi\left(\frac{1}{2}, 1\right) - \varphi(a, 1) + \frac{1}{2}\varphi\left(\frac{1}{2}, 2\right) - \frac{5}{2}\varphi(a, 2) + A^{s,t}\varphi(a, 3), \tag{50}$$

$$A^s = \frac{100}{3}, \quad A^t = -\frac{28}{3}. \tag{51}$$

Зависимости $\beta_C^{s,t}(\epsilon_2)$ построены на рис. 4.

При увеличении ϵ_2 от 0 до 1 значения β_C уменьшаются более чем в 100 раз. В синглетном состоянии оба электрона могут находиться в одной точке пространства, тогда как в триплетном это невозможно. В среднем расстояния между электронами в синглетном состоянии меньше, а взаимодействие между ними более сильное, чем в триплетном состоянии. Поэтому при всех ϵ_2 значения β_C^s превосходят значения β_C^t . С ростом ϵ_2 величина β_C^t уменьшается значительно быстрее, чем β_C^s , так как с увеличением переданной энергии (ϵ_2) возрастает роль малых расстояний.

В дальнейшем нам понадобятся значения β_C при $\epsilon_2 = 0$. Приведем их точные значения:

$$\beta_C^s(0) = 1.0424, \quad \beta_C^t(0) = 0.3327. \tag{52}$$

Взяв интеграл по ε_2 от (49), получим отношение полных сечений двойной и однократной ионизаций в комптоновском рассеянии:

$$R_C = \frac{\sigma_C^{++}}{\sigma_C^+} = \frac{B_C^{s,t}}{Z^2}, \quad B_C^s = 0.132, \quad B_C^t = 0.033. \quad (53)$$

В случае рассеяния на основном состоянии двухэлектронного атома $R_C = 0.048/Z^2$ [8, 15], что составляет 1.2% для $Z = 2$. Последнее экспериментальное значение этой величины для атома гелия, измеренное при $\omega = 97.8$ кэВ, равно $(0.98 \pm 0.09)\%$ [16].

5. ИОНИЗАЦИЯ С ВОЗБУЖДЕНИЕМ В КОМПТОНОВСКОМ РАССЕЯНИИ

Ионизация с возбуждением (или ионизационное возбуждение) в состоянии с $n > 2$, как и двойная ионизация, является двухэлектронным процессом и в случае комптоновского рассеяния целиком определяется межэлектронным взаимодействием. Амплитуду M^{++} этого процесса можно изобразить диаграммами Фейнмана (рис. 3), только вместо волновой функции медленного электрона ψ_{p_2} должна стоять волновая функция связанного состояния $\psi_{n\ell m}$. Учитывая, что [14]

$$\langle \psi_{n\ell m} | V_{i\lambda} | 0 \rangle = 4\pi N_n \frac{(\lambda - \eta_n)^{n-1}}{(\lambda + \eta_n)^{n+1}} \delta_{\ell 0} \delta_{m 0}, \quad N_n^2 = \frac{\eta_n^3}{\pi}, \quad \eta_n = \frac{\eta}{n}, \quad (54)$$

и сравнивая (54) с (44), заключаем, что амплитуда M^{++} получается из амплитуды M^{++} с помощью замены $N_{p_2} \rightarrow N_n$ и $p_2 \rightarrow i\eta_n$. Тогда формула для сечения ионизационного возбуждения следует из (37), если отбросить $d\mathbf{p}_2/(2\pi)^3$ и заменить $S(p_2)$ на

$$S'(n) = \frac{N_n^2}{N_{p_2}^2} S(p_2)|_{p_2 \rightarrow i\eta_n}. \quad (55)$$

Это сечение имеет вид

$$\frac{\sigma_C^{++}(n)}{\sigma_C^+} = 8\pi^2 \alpha^2 S'(n) = \frac{Q_C^{s,t}(n)}{Z^2}, \quad (56)$$

$$Q_C^{s,t}(n) = \frac{2}{n^3} \beta_C^{s,t}(\varepsilon_2 \rightarrow -n^{-2}) = \frac{4}{n^3} \left(\frac{\phi_n^{s,t}}{2^{-2} - n^{-2}} \right)^2. \quad (57)$$

Функция $\phi_n^{s,t}$ определяется формулой (50), в которой надо провести замену

$$\varphi(q, k) \rightarrow \varphi_n(q, k) = \frac{(q - n^{-1})^{n-k}}{(q + n^{-1})^{n+k}}. \quad (58)$$

Значения $Q_C^{s,t}$ для разных n приведены в таблице. Как видно из (54), при сделанных допущениях возбуждаются только s -состояния. Вероятность возбуждения состояний с другим угловым моментом значительно меньше. Она может быть найдена при учете в (36) более высоких членов разложения.

Значения $Q_C^{s,t}$ для разных n

n	$Q_C^s(n)$	$Q_C^t(n)$	n	$Q_C^s(n)$	$Q_C^t(n)$
3	0.3953	0.1602	8	4.889(-3)	1.608(-3)
4	0.0731	0.0265	9	3.301(-3)	1.079(-3)
5	2.728(-2)*	0.943(-2)	10	2.341(-3)	0.762(-3)
6	1.347(-2)	0.454(-2)	20	2.681(-4)	0.860(-4)
7	7.736(-3)	2.569(-3)	100	2.087(-6)	0.666(-6)

* $A(-n) \equiv A \cdot 10^{-n}$.

Из формулы (57) следует, что при больших n существует приближенное равенство:

$$Q_C^{s,t}(n \gg 1) \simeq \frac{2}{n^3} \beta_C^{s,t}(0). \tag{59}$$

Подставляя в это уравнение значения (52), получаем для $n = 10$ и $n = 100$

$$Q_C^s(10) \simeq 2.085 \cdot 10^{-3}, \quad Q_C^t(10) \simeq 0.665 \cdot 10^{-3},$$

$$Q_C^s(100) \simeq 2.085 \cdot 10^{-6}, \quad Q_C^t(100) \simeq 0.665 \cdot 10^{-6}.$$

Сравнивая эти числа с табличными значениями, замечаем, что для $n = 10$ различия составляют около 10%, тогда как при $n = 100$ согласие очень хорошее.

Авторы признательны М. Я. Амусье за предложение темы настоящей работы.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Дадим численную оценку отброшенным членам в (39). Точное значение $S(p_2)$ (36) отличается от приближенного значения (39) на величину

$$\Delta S = \sum_{N=2}^{\infty} \frac{\langle \psi | N \rangle \langle N | \psi \rangle}{(E - E_N)^2} \approx \frac{1}{E^2} (\langle \psi | \psi \rangle - \langle \psi | 1s \rangle^2). \tag{П.1}$$

Поскольку $E = -I(5/4 + \epsilon_2)$, а $E_N = -I/N^2$ (либо $E_N = E_p > 0$), при замене $(E - E_N)^2$ на E^2 вклад в ΔS от дискретного спектра немного уменьшается, а от непрерывного спектра возрастает. В результате приближенная оценка (П.1) будет слегка завышена; при ее получении использовано условие полноты

$$\sum_{N=1}^{\infty} |N\rangle \langle N| = 1.$$

Учитывая (32), имеем

$$\langle \psi | \psi \rangle = \langle \psi_a | \psi_a \rangle + \langle \psi_b | \psi_b \rangle \pm 2 \langle \psi_a | \psi_b \rangle. \tag{П.2}$$

Используя (29), получаем

$$\langle \psi_a | \psi_a \rangle = N^2 D D' \int \frac{d\mathbf{f} d\mathbf{f}'}{(2\pi)^6} \frac{1}{f^2} \langle \psi_{p_2} | V_{i\eta_2} | \mathbf{f} \rangle \frac{8\pi\nu}{[(\mathbf{f} - \mathbf{f}')^2 + \nu^2]^2} \langle \mathbf{f}' | V_{i\eta'_2} | \psi_{p_2} \rangle \frac{1}{f'^2}, \quad (\text{П.3})$$

$$N = N_1 N_2, \quad D = \Gamma_{\eta_2} \frac{\partial}{\partial \eta_2}, \quad D' = \Gamma_{\eta'_2} \frac{\partial}{\partial \eta'_2}, \quad \nu = 2\eta.$$

Расчет (П.3) значительно облегчается, если сделать замену $[(\mathbf{f} - \mathbf{f}')^2 + \nu^2]^2 \rightarrow (f^2 + \nu^2) \times (f'^2 + \nu^2)$. В результате интегралы расцепляются и дальнейшие вычисления выполняются элементарно:

$$\begin{aligned} \langle \psi_a | \psi_a \rangle &\approx \frac{N^2 \nu}{2\pi} \left(D \int \frac{d\mathbf{f}}{(2\pi)^3} \langle \psi_{p_2} | V_{i\eta_2} | \mathbf{f} \rangle \frac{1}{f^2} \langle \mathbf{f} | V_{i\nu} | 0 \rangle \right)^2 = \\ &= \frac{N^2}{2\pi \nu^3} (\Gamma_{\eta_2} \langle \psi_{p_2} | V_{i\eta_2} - V_{i(\eta_2 + \nu)} | 0 \rangle)^2 = \\ &= \frac{1}{4p_2} \left[\varphi \left(\frac{1}{2}, 1 \right) - \varphi \left(\frac{5}{2}, 1 \right) + \frac{1}{2} \varphi \left(\frac{1}{2}, 2 \right) + \frac{3}{2} \varphi \left(\frac{5}{2}, 2 \right) \right]^2. \end{aligned} \quad (\text{П.4})$$

Как показал анализ (см. также [8]), проведенная замена дает незначительную переоценку матричного элемента (П.3).

Аналогично вычисляются остальные матричные элементы в правой части (П.2).

Приведем их окончательные выражения:

$$\langle \psi_b | \psi_b \rangle = \frac{2}{p_2} \{ F^2 - F[\varphi(2, 2) + 6\varphi(2, 3)] + 2\varphi^2(2, 2) \}, \quad F = \varphi(1, 1) - \varphi(2, 1). \quad (\text{П.5})$$

$$\begin{aligned} \langle \psi_a | \psi_b \rangle &= \frac{8}{9p_2} \left\{ \left[\varphi(1, 1) - \varphi \left(\frac{5}{2}, 1 \right) \right] [\varphi(2, 2) - 2\varphi(2, 3)] + \right. \\ &\quad \left. + \varphi \left(\frac{5}{2}, 2 \right) \left[\varphi \left(\frac{1}{2}, 1 \right) - \varphi(2, 1) + \frac{1}{2} \varphi \left(\frac{1}{2}, 2 \right) + \varphi(2, 2) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (\text{П.6})$$

Обозначим через S_1 приближенное значение (39) для $S(p_2)$. Используя (П.4)–(П.6) и (45)–(47), получим

$$\frac{\Delta S}{S_1} \Big|_{\varepsilon_2=0} < 2\%, \quad \frac{\Delta S}{S_1} \Big|_{\varepsilon_2=1/4} < 8\%, \quad \frac{\Delta S}{S_1} \Big|_{\varepsilon_2=3/4} < 25\%. \quad (\text{П.7})$$

Относительный вклад отброшенных в (39) членов растет с увеличением ε_2 , однако абсолютные значения S_1 и ΔS быстро уменьшаются с ростом ε_2 . Так, при $\varepsilon_2 = 1/4$ величины S_1 и ΔS на порядок, а при $\varepsilon_2 = 3/4$ на два порядка меньше соответствующих величин при $\varepsilon_2 = 0$. Поэтому замена бесконечной суммы (36) одним ее членом (39) приведет к ошибке в интегральном сечении (53), не превышающей 10%.

Литература

1. J. H. McGuire, N. Berrah, R. J. Bartlett et al., J. Phys. B **28**, 913 (1995).
2. Z. Teng and R. Shakeshaft, Phys. Rev. A **49**, 3597 (1994).
3. R. C. Forrey, H. R. Sadeghpour, J. D. Baker et al., Phys. Rev. A **51**, 2112 (1995).
4. J. R. Samson, C. H. Greene, and R. J. Bartlett, Phys. Rev. Lett. **71**, 201 (1993).

5. L. R. Andersson and J. Burgdörfer, Phys. Rev. Lett. 71, 50 (1993).
6. K. Hino, P. M. Bergstrom, and J. H. Macek, Phys. Rev. Lett. 72, 1620 (1994).
7. T. Surić, K. Pisk, B. A. Logan, and R. H. Pratt, Phys. Rev. Lett. 73, 790 (1994).
8. М. Я. Амуся и А. И. Михайлов, Phys. Lett. A 199, 209 (1995); J. Phys. B 28, 1723 (1995).
9. А. И. Ахиезер, В. Б. Берестецкий, *Квантовая электродинамика*, Наука, Москва (1969).
10. T. A. Carlson, Phys. Rev. 156, 142 (1967).
11. М. Я. Амуся, Е. Г. Друкрев, В. Г. Горшков, and М. Р. Казахков, J. Phys. B 8, 1248 (1975).
12. М. Я. Амуся, А. И. Михайлов, И. А. Михайлов, ЖЭТФ 113, 539 (1998).
13. A. Nordsieck, Phys. Rev. 93, 785 (1954).
14. М. Я. Амуся, А. И. Михайлов, ЖЭТФ 111, 862 (1997).
15. T. Surić, K. Pisk, and R. H. Pratt, Phys. Lett. A 211, 289 (1996).
16. L. Spielberger, H. Bräuning, A. Muthig et al., Phys. Rev. A 59, 371 (1999).