P4-2002-218

К. А. Кузаков[1], О. Чулуунбаатар, А. А. Гусев,
С. И. Виницкий, Ю. В. Попов[2]

# $(e,3e)$-РЕАКЦИИ ПРИ СРЕДНИХ ЭНЕРГИЯХ: ВИЗУАЛИЗАЦИЯ ЭФФЕКТОВ СРЕДНЕГО ПОЛЯ В АТОМЕ

Направлено в «ЖЭТФ»

---

[1]Институт Макса Планка, Вайнберг 2, 06120 Галле, Германия
[2]НИИЯФ МГУ, Москва

# Введение

Ионизация атомной мишени электронным ударом с одновременным измерением на совпадение продуктов реакции широко и интенсивно используется для исследования электронной структуры и механизмов ионизации атомов [1]. Режим большой передачи импульса от налетающего электрона одному из электронов атомной мишени, когда измеряется на совпадение быстрая электронная пара, особенно выгоден для изучения структуры волновой функции атома. В этом случае ионизационный механизм хорошо описывается моделью квазиупругого удара, и соответствующее дифференциальное сечение пропорционально спектральной функции ионизационной дырки в пространстве импульсов [2]. Однако такая простая картина процесса справедлива только при достаточно высоких энергиях налетающего электрона (3–5 кэВ), когда дифференциальные сечения малы и, следовательно, трудно измеримы в эксперименте. Поэтому довольно часто эксперименты проводятся при меньших энергиях (0.5–1 кэВ), что с точки зрения теории требует учета поправок к модели квазиупругого удара. На примере реакций однократной ионизации, или так называемых (e,2e)- реакций, эти поправки можно условно разбить на две категории: эйкональные поправки за счет эффекта среднего поля в атоме [3] и поправки за счет кулоновского взаимодействия электронов в конечном состоянии [4].

Экспериментально (e,2e)- реакции на различных мишенях в кинематике квазиупругого удара исследуются в течение длительного времени, с конца 60-х годов, после появления первых теоретических работ на эту тему [5]. Позже теоретически было предсказано, что (e,3e)- реакции, когда в результате встряски ион-остаток испускает третий медленный электрон, дают эксклюзивную информацию об электронных корреляциях в мишени. И даже если измеряется не угол медленного испущенного электрона, а лишь его энергия (т.н. (e,3-1e)- реакция), то и в этом случае мы можем изучать вклад высших парциальных волн полной волновой функции атома-мишени в дифференциальное сечение, а также радиальные корреляции электронов [6].

Совсем недавно в Италии, основываясь на теоретических предсказаниях [6], осуществлили первый (e,3-1e)- эксперимент на атоме $He$ в симметричной компланарной геометрии [7]. Измерения проводились при значениях энергии падающего электрона $E_0 = 580$ эВ, энергий обоих быстрых электронов $E_1 = E_2 = E = 250$ эВ и энергии медленного электрона $E_k = 1$ эВ. Отметим, что медленный испущенный электрон не детектировался в эксперименте, так как в случае атома гелия данное обстоятельство не принципиально- энергия этого электрона фиксирована законом сохранения. Четырехкратное дифференциальное сечение (в относительных единицах) $d^4\sigma/dE_1dE_2d\Omega_1d\Omega_2$ измерялось как функция угла разлета быстрых конечных электронов $\theta_1 = \theta_2 = \theta$ относительно вектор-импульса начального электрона $\vec{p}_0$. Было установлено, что экспериментальное сечение имеет некоторую характерную угловую структуру, которая позволяет говорить о наблюдении радиальных корреляций, однако оно оказалось примерно на 10° смещено в сторону больших углов разлета по сравнению с теоретическими расчетами в рамках приближения плоских волн [6], что указывает на необходимость учета поправок.

В настоящей работе впервые приводится последовательная теория поправок к механизму квазиупругого удара в реакциях двухкратной ионизации атомов электронным ударом. На основе приведенного формализма делаются приближения, которые отвечают случаю эйкональных [3] и квазиклассических [4] поправок, хорошо известных в теории квазиупругих (e,2e)- реакций. В рамках сделанных приближений выполняются расчеты дифференциальных сечений (e,3-1e)- реакций в гелии и проводится сравнение результатов с экспериментальными данными [7]. Используются атомные единицы.

# Теория

## Общие формулы

Обозначим через $(E_0, \vec{p}_0)$, $(E_1, \vec{p}_1)$, $(E_2, \vec{p}_2)$ и $(E_k, \vec{k})$ энергии и импульсы начального, одного и другого быстрых конечных электронов, а также медленного испущенного электрона. Традиционно определим переданный импульс $\vec{Q} = \vec{p}_0 - \vec{p}_1$, хотя в случае симметричной кинематики выбор вектора $\vec{p}_1$ ничем специально не обусловлен, и вектор $\vec{p} = \vec{p}_0 - \vec{p}_1 - \vec{p}_2$. Законы сохранения энергии и импульса имеют вид

$$E_0 + E_0^{He} = E_1 + E_2 + E_k, \tag{1}$$

$$\vec{p}_0 = \vec{p}_1 + \vec{p}_2 + \vec{k} + \vec{q}. \tag{2}$$

Для симметричных реакций $E_1 = E_2 = E \sim \frac{E_0}{2}$, и плоские углы $\theta_1 = \theta_2 = \theta \sim 45°$.

Полный гамильтониан системы "атом + электрон" записывается в виде

$$H = h_{10} + h_{20} + V_1 + V_2 + V_{12} + V_{13} + V_{23} + (h_{30} + V_3). \tag{3}$$

Для определенности индекс "1" относим к начальному электрону, индекс "2" – к выбиваемому быстрому электрону и индекс "3" – к испускаемому в результате встряски медленному электрону. Их симметрии учтем позже. Кроме того, в (3) $V_i$ – оператор взаимодействия электрона с бесконечно тяжелым ядром, $V_{ij}$ – оператор взаимодействия двух электронов, $h_{i0}$ – свободный гамильтониан $i$-го электрона.

Выделим в потенциалах $V_{1j}$ "короткодействующую" $V_{1j}^{in}$ и "дальнодействующую" $V_{1j}^{out}$ части для того, чтобы далее использовать хорошо разработанный в теории многочастичного рассеяния аппарат канальных гамильтонианов [8]. Запишем теперь точную амплитуду рассматриваемого процесса следующим образом:

$$T = \langle \Psi^{(-)} | V_{12}^{in} + V_{13}^{in} | \Psi_0^{(+)}(\vec{p}_0) \rangle, \tag{4}$$

где волновая функция начального состояния удовлетворяет уравнению

$$[\mathrm{E} - (h_{10} + V_1 + V_{12}^{out} + V_{13}^{out}) - (h_{20} + h_{30} + V_2 + V_3 + V_{23})] | \Psi_0^{(+)}(\vec{p}_0) \rangle = 0. \tag{5}$$

Чтобы максимально просто учесть взаимодействие налетающего электрона с атомом в начальном состоянии, сделаем замену $V_1 + V_{12}^{out} + V_{13}^{out} \to \widetilde{V}_0$ и будем рассматривать движение электрона в поле эффективного потенциала $\widetilde{V}_0$. С учетом этого обстоятельства выражение (4) преобразуется к виду

$$T \approx \langle \Psi^{(-)} | V_{12}^{in} + V_{13}^{in} | \chi_0^{+}(\vec{p}_0), \Phi_0 \rangle, \tag{6}$$

где $|\Phi_0\rangle$ – волновая функция атома гелия в основном состоянии, а $|\chi_0^{+}(\vec{p}_0)\rangle$ – искаженная волна падающего электрона. Заметим, что эффективный потенциал $\widetilde{V}_0$ стремится к нулю при достаточном удалении электрона от атома, и искаженная волна переходит в плоскую, как и должно быть.

Слагаемое в (6), включающее оператор $V_{12}^{in}$, описывает прямое выбивание быстрого электрона "2" налетающим электроном "1" (как при прямом ударе в бильярде), тогда как слагаемое, включающее оператор $V_{13}^{in}$, описывает обменный процесс, когда медленный электрон "3" выбивается быстрым электроном "1", а быстрый электрон "2" образуется в результате встряски. Амплитуда такого процесса может иметь заметную величину по сравнению с прямой амплитудой лишь в случае очень сильных электронных корреляций в атоме гелия, которые мы здесь не предполагаем. В дальнейших расчетах мы опускаем обменный член.

Займемся теперь преобразованием полной волновой функции $|\Psi^{(-)}\rangle$, которая удовлетворяет уравнению

$$[\mathrm{E}-(h_{10}+V_1+V_{13})-(h_{20}+V_2+V_{23})-V_{12}-(h_{30}+V_3)]|\Psi^{(-)}\rangle = 0. \quad (7)$$

Построим снова эффективные потенциалы по принципу $V_i+V_{i3} \to \widetilde{V}_i$ $(i=1,2)$, Заметим, что эффективные потенциалы в конечном состоянии отличаются от $\widetilde{V}_0$, поскольку при достаточном удалении каждого быстрого электрона от иона он "видит" заряд $Z=1$, так как ядро экранировано медленным электроном. Такое упрощение приводит к факторизации функции $|\Psi^{(-)}\rangle$:

$$|\Psi^{(-)}\rangle = |\psi^{(-)}\rangle|\varphi^{-}(\vec{k})\rangle.$$

Функция $|\varphi^{-}(\vec{k})\rangle$– кулоновская волновая функция медленного электрона в поле ядра $Z=2$, а функция $|\psi^{(-)}\rangle$ удовлетворяет уравнению

$$[\mathrm{E}-\frac{k^2}{2}-h_{10}-h_{20}-\widetilde{V}_1-\widetilde{V}_2-V_{12}]|\psi^{(-)}\rangle = 0. \quad (8)$$

Для удобства записи положим $E'=\mathrm{E}-\frac{k^2}{2}$, введем в рассмотрение периферический квазисвободный гамильтониан

$$H_0^{as} = h_{10}+h_{20}+V_{12}^{out} \quad (9)$$

и запишем уравнение Шредингера (8) в новых обозначениях

$$[E'-H_0^{as}-\widetilde{V}_1-\widetilde{V}_2-V_{12}^{in}]|\psi^{(-)}\rangle = 0, \quad (10)$$

откуда следует формально интегральное уравнение Липпманна-Швингера

$$|\psi^{(-)}\rangle = |\psi_0^{(-)}\rangle + G_{(1,2)}^{-}(E')V_{12}^{in}|\psi^{(-)}\rangle. \quad (11)$$

В (11) введена функция Грина

$$G^{-}_{(1,2)}(E') = (E' - H_0^{as} - \widetilde{V}_1 - \widetilde{V}_2 - i0)^{-1}.$$

Введем теперь оператор парной амплитуды $t_{12}^{in}$, который удовлетворяет уравнению

$$t_{12}^{in} = V_{12}^{in} + V_{12}^{in} G^{-}_{(1,2)}(E') t_{12}^{in}. \tag{12}$$

Из (11) и (12) следует

$$V_{12}^{in} |\psi^{(-)}\rangle = t_{12}^{in} |\psi_0^{(-)}\rangle. \tag{13}$$

Аналогично преобразуем функцию $|\psi_0^{(-)}\rangle$, т.е. из дифференциального уравнения

$$(E' - H_0^{as} - \widetilde{V}_1 - \widetilde{V}_2)|\psi_0^{(-)}\rangle = 0$$

построим интегральное

$$|\psi_0^{(-)}\rangle = |\psi^{as}\rangle + G_0^{as}(E')(\widetilde{V}_1 + \widetilde{V}_2)|\psi_0^{(-)}\rangle, \tag{14}$$

где асимптотическая функция Грина $G_0^{as}(E') = (E' - H_0^{as} - i0)^{-1}$, и $(E' - H_0^{as})|\psi^{as}\rangle = 0$. Определим оператор $\tau_{12}$, который удовлетворяет уравнению

$$\tau_{12} = (\widetilde{V}_1 + \widetilde{V}_2) + (\widetilde{V}_1 + \widetilde{V}_2) G_0^{as}(E') \tau_{12}. \tag{15}$$

В этих обозначениях решение уравнения (14) выглядит следующим образом:

$$|\psi_0^{(-)}\rangle = (1 + G_0^{as}(E')\tau_{12})|\psi^{as}\rangle. \tag{16}$$

Укажем на следующее важное свойство оператора $\tau_{12}$: если пренебречь периферийными взаимодействиями, т.е. положить в (15) $V^{out} = 0$, то при $E = p_1^2/2 + p_2^2/2$

$$(1 + G_0^{-}(E)\tau_{12})|\vec{p}_1, \vec{p}_2\rangle = |\chi_1^{-}(\vec{p}_1), \chi_2^{-}(\vec{p}_2)\rangle,$$

т.е. произведение двух плоских волн превращается в произведение искаженных волн [9].

Сделаем еще два упрощения. Во-первых, заметим, что уравнение (12) можно разбить на два:

$$t_{12}^{in} = t_{12}^{0} + t_{12}^{0} G_0^{as}(E') t_{12}^{in},$$

$$t_{12}^{0} = V_{12}^{in} + V_{12}^{in} G_0^{as}(E') \tau_{12}^{in} G_0^{as}(E') t_{12}^{0}.$$

Для дальнейших расчетов мы положим $t_{12}^0 \approx V_{12}^{in}$. Во-вторых, положим внутри атома $G_0^{as}(E') \approx G_0^-(E')$.

Собирая все вместе, получим из (6) для матричного элемента следующее выражение

$$T(\vec{p}_0; \vec{p}_1, \vec{p}_2, \vec{k}) \equiv T_{12} \approx \int \frac{d\vec{p}_2\,'}{(2\pi)^3} \langle \vec{p}_2\,', \varphi^-(\vec{k}) | \Phi_0 \rangle$$

$$\langle \psi^{as}(\vec{p}_1, \vec{p}_2) | (1 + \tau_{12} G_0^+(E')) t_{12}^{in} | \chi_0^+(\vec{p}_0), \vec{p}_2\,' \rangle. \qquad (17)$$

В выражении (17) амплитуда электрон-электронного взаимодействия удовлетворяет уравнению

$$t_{12}^{in} = V_{12}^{in} + V_{12}^{in} G_0^+(E') t_{12}^{in},$$

и при стремлении радиуса обрезания к бесконечности переходит в известную кулоновскую амплитуду.

Пятикратное дифференциальное сечение (e,3e)- реакции после усреднения по спиновым состояниям электронов "1" и "2" и с учетом симметрии электронов "2" и "3" записывается в виде

$$\frac{d^5\sigma}{dE_1 dE_k d\Omega_1 d\Omega_2 d\Omega_k} = \frac{2p_1 p_2 k}{(2\pi)^8 p_0} \left[ \frac{3}{4} |T_{12} - T_{21}|^2 + \frac{1}{4} |T_{12} + T_{21}|^2 \right], \qquad (18)$$

а четырехкратное дифференциальное сечение (e,3-1e)- реакции получается из (18) интегрированием по $d\Omega_k$.

## Приближения

При получении формулы (17) мы ограничились учетом однократного полного взаимодействия налетающего электрона с одним из электронов атома-мишени. Все, что стоит левее оператора $t_{12}^{in}$ в (17), описывает движение быстрых электронов в среднем поле ядра (эйкональные поправки) и искривление их траекторий вследствие взаимного отталкивания при движении от иона к детекторам. Если всеми этими эффектами пренебречь, то из (17) будет следовать приближение плоских волн (PWIA – plane wave impuls approximation):

$$T_{12}^{PWIA} \approx \langle \vec{p}_1 + \vec{p}_2 - \vec{p}_0, \varphi^-(\vec{k})|\Phi_0\rangle t_{12}\left(\vec{p}_0 - \tfrac{\vec{p}_1+\vec{p}_2}{2}, \tfrac{\vec{p}_1-\vec{p}_2}{2}; \tfrac{(\vec{p}_1-\vec{p}_2)^2}{4} + i0\right). \tag{19}$$

Подробные формулы для вычисления дифференциальных сечений (e,3e)- и (e,3-1e)- реакций в этом случае даны в работах [2, 6], и мы их здесь приводить не будем. Укажем лишь, что сечение реакции $He(e,3-1e)He^{++}$ пропорционально сумме квадратов модулей парциальных составляющих матричного элемента $\langle \vec{p}_1 + \vec{p}_2 - \vec{p}_0, \varphi^-(\vec{k})|\Phi_0\rangle$. При небольших импульсах $k$ и $p$ это сечение достаточно чувствительно к радиальным корреляциям электронов в мишени, когда электроны располагаются в атоме на разных $s$-орбитах.

Если положить $V_{12}^{out} = 0$, то

$$\langle \psi^{as}(\vec{p}_1, \vec{p}_2)|\vec{p}_1\,', \vec{p}_2\,'\rangle = (2\pi)^6 \delta(\vec{p}_1 - \vec{p}_1\,')\delta(\vec{p}_2 - \vec{p}_2\,'), \tag{20}$$

и из (17) будет следовать приближение искаженных волн (DWIA - distorted wave impuls approximation):

$$T_{12}^{DWIA} \approx \int \frac{d\vec{p}_2\,'}{(2\pi)^3} \langle \vec{p}_2\,', \varphi^-(\vec{k})|\Phi_0\rangle \langle \chi^-(\vec{p}_1), \chi^-(\vec{p}_2)|t_{12}|\chi_0^+(\vec{p}_0), \vec{p}_2\,'\rangle. \tag{21}$$

Формула (21) все же достаточно сложна для вычислений с какими-либо реальными искаженными волнами, однако на помощь здесь приходит идея оптического эйконала, впервые примененная к случаю (e,2e)- реакций в работах [3]. Каждая искаженная волна представляется в виде

$$\langle \vec{p}_i\,'|\chi^-(\vec{p}_i)\rangle = (2\pi)^3\delta(\vec{n}_i\,' - \vec{n}_i)\delta(p_i' - \sqrt{2(E_i - \bar{V})}). \qquad (22)$$

Такое же представление для простоты выбирается и для входящей волны $|\chi_0^+(\vec{p}_0)\rangle$, хотя, как отмечалось выше, она отличается от выходящих. Данное приближение носит название эйконального импульсного приближения (EWIA - eikonal wave impuls approximation). В рамках этого приближения $T_{12}^{EWIA}$ выглядит так же, как $T_{12}^{PWIA}$, однако модули всех импульсов в формуле для $T_{12}^{EWIA}$ следует заменить на $\bar{p}_s = \sqrt{2(E_s - \bar{V})}$.

В принципе, величина $\bar{V}$ является комплексным подгоночным параметром, однако в данной работе мы ее фиксировали в соответствии с теоремой вириала $\bar{V} = E_0^{He}$

Вернемся к формуле (20). Дельта-функции здесь отражают движение электронов вдоль прямых траекторий за пределами атома, которые условно характеризуются радиусом $r_0$. Как было показано в работах [4], при включении потенциала $V_{12}^{out}$ эффект функции $|\psi^{as}(\vec{p}_1, \vec{p}_2)\rangle$ тоже можно условно представить формулой (20), однако дельта-функции теперь будут описывать движение электронов вдоль классических траекторий ("трубок" [10]), которые искривляются вследствие их взаимного отталкивания. Если, например, в случае симметричной геометрии, электрон входит во "внешнюю" область с энергией $E$ и под углом $\theta_0$ к направлению импульса начального электрона, то он попадет в детектор, имея ту же энергию, но под углом $\theta = \theta_0 + \Delta\theta$, где

$$\Delta\theta = \frac{1}{Er_0}\frac{\cos\theta_0}{\sin^2\theta_0}. \qquad (23)$$

В данной работе мы фиксируем параметр $r_0$, исходя из соображений равенства среднего поля среднему кулоновскому полю с зарядом $Z = -\sqrt{-E_0^{He}}$, т.е. $-E_0^{He} = \sqrt{-E_0^{He}}/r_0$, откуда следует $r_0 \approx 0.6$.

Таким образом, с учетом квантовых эйкональных и квазиклассических поправок мы получаем сечение (18), по форме совпадающее с сечением в рамках PWIA, но где все импульсы вычисляются по формуле (22), а углы разлета электронов заменены на $\theta - \Delta\theta$ ($\theta$ - угол наблюдения электрона).

## Результаты и обсуждение

Для расчетов сечений по вышеприведенным формулам использовались три вариационные функции атома гелия.

Недавно был предложен сравнительно новый метод генерации семейства функций связанных состояний атома гелия [11]. В этом подходе функция атома гелия представима в виде

$$\tilde{\Phi}(s, v, w) = \sum_{i,j,k=0} C_{i,j,2k} U_i(s) V_j(v) W_{2k}(w), \tag{24}$$

где

$$\begin{gathered} s = r_1 + r_2,\ v = \frac{r_{12}}{r_1 + r_2},\ w = \frac{r_1 - r_2}{r_{12}}, \\ U_i(s) = N_i e^{-\alpha_i s} L_i^5(2\alpha_i s),\ V_j(v) = \overline{N}_j P_j^{(0,2)}(2v-1), \\ W_{2k}(w) = \hat{N}_{2k} P_{2k}^{(1,1)}(w), \end{gathered} \tag{25}$$

и

$$N_i = \sqrt{\frac{i!(2\alpha_i)^6}{(i+5)!}},\ \overline{N}_j = \sqrt{2j+3},\ \hat{N}_{2k} = \sqrt{\frac{(k+1)(4k+3)}{2(2k+1)}} - \tag{26}$$

константы нормировки. В формулах (24)-(26) $L_i^5$- обобщенные полиномы Лагерра, $P_j^{(q,t)}$- полиномы Якоби и $\alpha_i$- вариационные параметры. Выбирая единственный вариационный параметр $\alpha$, имеем ортогональный набор базисных функций, нормированных условиями

$$\int_0^\infty s^5 U_n(s) U_m(s) ds = \delta_{n,m},\ \int_0^1 v^2 V_n(v) V_m(v) dv = \delta_{n,m},$$

$$\int_0^1 (1-w^2)W_{2n}(w)W_{2m}(w)dw = \delta_{n,m}.$$

Размер базиса определяется выбором вариационного параметра. Для функции, которую мы обозначаем ниже аббревиатурой CPV, параметр $\alpha = 1.704$. В точной волновой функции основного состояния гелия $\alpha = \sqrt{-E_0^{He}}$ [12], и приближённому значению энергии $E_0^{He} = -2.903$, используемому в практике расчетов (e,2e)- и (e,3e)-процессов, отвечает как раз величина $\alpha = 1.704$, которая определяет 12 членов в разложении (24).

Коэффициенты разложения функции CPV приобретают следующие значения:

$$\begin{array}{lll}
C_{2,0,0} = \ \ 1.2527(^-3), & C_{2,0,2} = \ \ 2.4228(^-3), & C_{2,1,0} = -5.4914(^-4), \\
C_{2,1,2} = \ \ 1.0809(^-3), & C_{1,0,0} = -3.5932(^-2), & C_{1,0,2} = -2.2368(^-2), \\
C_{1,1,0} = -2.3084(^-2), & C_{1,1,2} = -9.6204(^-3), & C_{0,0,0} = \ \ 1.5613(^-0), \\
C_{0,0,2} = \ \ 7.9653(^-2), & C_{0,1,0} = \ \ 1.6744(^-1), & C_{0,1,2} = \ \ 3.3650(^-2).
\end{array}$$

Функция CPV нормирована на шестимерный объем условием

$$2\pi^2 \int_0^\infty s^5 ds \int_0^1 v^2 dv \int_0^1 (1-v^2w^2)dw\tilde{\Phi}^2(s,v,w) = 1.$$

Помимо CPV-функции мы использовали в расчетах для сравнения еще две пробные функции. Это одна из лучших функций Бонама и Коля (BK) [13]:

$$\begin{aligned}\Phi^{BK}(\vec{r}_1,\vec{r}_2) = N\,[\phi(a,b)(1 + Ar_{12}\exp(-\lambda r_{12})) \\ +\phi(c,d)(B + C\exp(-\mu r_{12})) + D\phi(e,f)]\,,\end{aligned} \tag{27}$$

где

$$\phi(a,b) = \exp(-ar_1)\exp(-br_2) + \exp(-ar_2)\exp(-br_1).$$

и вариационные параметры имеют следующие значения:

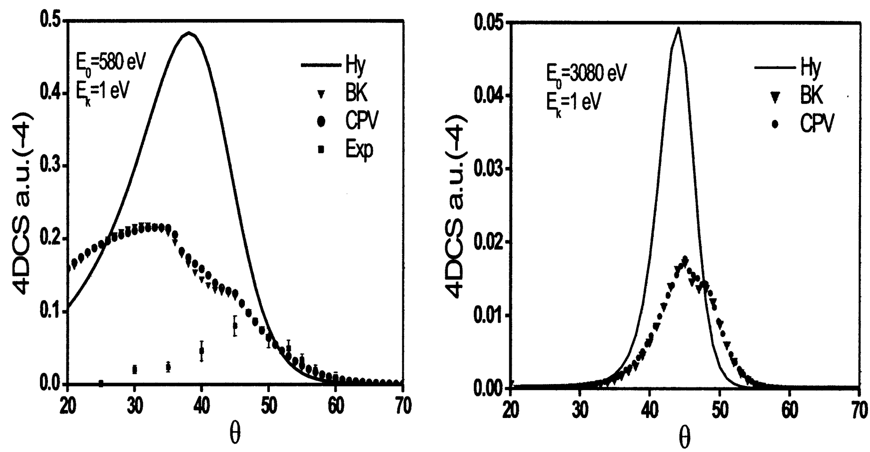
$$N = 0.740417,\ a = 1.3511,\ b = 2.2541,\ A = 0.1190,\ \lambda = 1.0956,$$
$$c = 1.5596,\ d = 1.7065,\ B = 0.6153,\ C = -0.7787,$$
$$\mu = 0.3481,\ e = 2.0741,\ f = 3.9535,\ D = 0.0927.$$

Энергия связи $E_0^{He}(BK) = -2.903$.

Кроме того, была использована простейшая однокомпонентная функция Хиллерааса (Hy) [14], принадлежащая семейству (24)

$$\Phi^{Hy}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{\alpha^3}{\pi} \exp(-\alpha s) = \frac{\alpha^3}{\pi} \exp(-\alpha(r_1 + r_2)), \qquad (28)$$

при значении вариационного параметра $\alpha = 27/16$, что соответствует энергии $E_0^{He}(Hy) = -2.848$.




а б

Рис. 1. Абсолютные сечения 4DCS для (e,3-1e)- ионизации гелия в симметричной компланарной геометрии в приближении плоских волн (19) при а) $E_0 = 580$ эВ, $E_k = 1$ эВ; б) $E_0 = 3080$ эВ, $E_k = 1$ эВ, для трех различных функций: сплошная линия - Hy, треугольники - BK, кружки - CPV. На рис. 1,а приведены результаты эксперимента, нормированные на значения функции CPV при угле $\theta = 50°$

На рис. 1,а представлен расчет четырехкратного дифференциального сечения реакции $He(e, 3-1e)He^{++}$ в абсолютных единицах с использованием формулы (19), т.е. в приближении плоских волн. Кинематические условия соответствуют экспериментальным [7] и перечислены во Введении. Поскольку экспериментальное сечение было измерено в относительных единицах, эксперимент на рис. 1,а отнормирован на расчет с коррелированными функциями при угле $\theta = 50°$. На рис. 1,б представлено сечение той же реакции при энергии $E_0 = 3080$ эВ и $E_k = 1$ эВ. Из сравнения рисунков видно, что в пределе больших энергий кривые сечений сосредоточиваются вокруг угла $\theta = 45°$. Видно также, что коррелированные пробные функции дают картинку, значительно отличающуюся от некоррелированной, хартри-фоковской функции гелия. Вместо одного пика просматриваются два небольших пика. На это обстоятельство обращено внимание в работе [2]. Как следует из (22) и (23), поправки играют все менее значительную роль как при увеличении начальной энергии, так и при больших углах разлета электронов. Таким образом, результаты, представленные на рис. 1,б, являются иллюстрацией возможности прямого исследования электронных корреляций, когда поправками можно пренебречь. Напротив, заметная разница между теоретическими кривыми и экспериментом на рис. 1,а является не прямым указанием на неадекватность моделей электронных корреляций, использованных в расчетах, а говорит о необходимости учета поправок в данном случае.

На рис. 2 представлены расчеты в относительных единицах в приближении оптического эйконала. Здесь уже все расчеты и эксперимент отнормированы при угле $\theta = 50°$. Сдвиг теоретических кривых вправо неравномерен и составляет в среднем $5 - 10°$, однако он явно недостаточен для описания эксперимента.

На рис. 3 представлены расчеты в относительных единицах в приближении оптического эйконала + квазиклассические угловые поправки. Здесь также все расчеты и эксперимент отнормированы при угле $\theta = 50°$. Дополнительный сдвиг теоретических кривых вправо составляет в среднем $3 - 6°$. Коррелированные функции

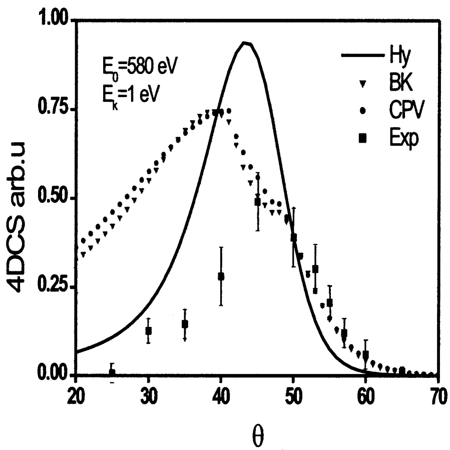



Рис. 2. Относительные сечения 4DCS для (e,3-1e)- ионизации гелия в симметричной компланарной геометрии в приближении оптического эйконала (22) при $E_0 = 580$ эВ, $E_k = 1$ эВ. Все сечения и эксперимент нормированы на значения при $\theta = 50°$. Обозначения кривых те же, что и на рис. 1,а

обеспечивают практически полное совпадение теории и эксперимента справа от угла $\theta = 45°$, в отличие от функции Hy. Однако в области малых углов коррелированные функции "терпят полное фиаско". Можно сказать, что за исключением некоторого выброса при $\theta = 30°$ эксперимент в целом значительно лучше воспроизводится простейшей функцией Hy. Напоминаем, что расчеты не включают каких-либо подгоночных параметров.

Сравнение теории и эксперимента позволяет сделать следующие заключения.

Во-первых, эйкональные и квазиклассические поправки дают возможность визуально наблюдать, причем раздельно, эффект среднего атомного поля и движения квантовых частиц по классическим траекториям вне атома. Эта визуализация выражается в

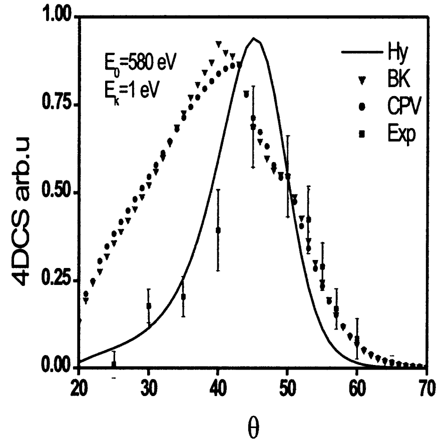



Рис. 3. То же, что на рис. 2, но с добавлением угловой квазиклассической поправки (23) (см. текст)

сдвиге теоретических кривых, рассчитанных в приближении плоских волн, вправо на вполне определенный угол, зависящий как от величины среднего поля, так и от среднего радиуса атома. Ранее аналогичный вывод был сделан на основе исследования релятивистских (e,2e)-симметричных экспериментов на $K$-оболочках атомов меди, серебра и золота [15].

Во-вторых, сечения, рассчитанные с коррелированными волновыми функциями, хуже воспроизводят экспериментальные данные, чем сечения, рассчитанные с функцией Hy, включающей только $s$-орбиталь. Как отмечалось выше, сечение (e,3-1e)-реакции является прямой суммой модулей интегралов типа

$$F_l(p,k) = (4\pi)^2 \int\limits_0^\infty \int\limits_0^\infty r_1^2 r_2^2 j_l(pr_1) R_l(k,r_2) \Phi_l(r_1,r_2) dr_1 dr_2, \qquad (29)$$

где $R_l$ - парциальная кулоновская волна, $\Phi_l$ - парциальная волновая функция гелия. Из рис. 1,б следует, что в сечениях, рассчитанных с коррелированными функциями, вклад $s$-волны существенно подавлен, и на этом фоне начинают играть роль вклады высших парциальных волн, значение которых в функции Ф не превышает 1 – 2% . Здесь значение импульса р $= |\vec{p}_0 - \vec{p}_1 - \vec{p}_2|$ мало, однако аналогичную картину мы наблюдаем и при исследовании реакции $p + He \rightarrow H + e + He^{++}$ при сверхмалых углах рассеяния быстрого протона, где при расчетах однократного дифференциального сечения как функции угла рассеяния присутствует та же сумма [17]. Там величина переданного импульса, заменяющего $p$ в формуле (29), составляет уже несколько атомных единиц.

Можно ли из этого заключить, что функция гелия устроена значительно проще, и модель Хартри - Фока все же ближе к реальности? Ответить на этот вопрос можно было бы, увеличив начальную энергию и тем самым уменьшив роль поправок. Но и из имеющихся экспериментальных данных можно сделать коекакие заключения в пользу коррелированных функций. В распределении экспериментальных точек есть определенные детали, которые не удается описать, а именно выброс в районе $\theta = 30°$. Поправки сдвигают теоретические кривые и меняют их форму достаточно плавно, да и сами кривые ведут себя монотонно в области $\theta = 30°$. Поэтому логично предположить, что приближения, сделанные нами в отношении среднего искажающего поля, все-таки довольно грубы, хотя и дают возможность оценить роль поправок. По всей видимости, расхождение теоретических кривых и экспериментального распределения в районе 30° может иметь следующее объяснение. Строго говоря, оба гелиевых электрона имеют одинаковые "предстартовые" условия только в рамках модели Хартри - Фока. Даже простейшие функции с радиальными корреляциями [16] описывают электроны, "сидящие" на разных $s$-орбитах (с разными радиусами):

$$\Phi^{SPM}(\vec{r}_1,\vec{r}_2)=\frac{1}{\sqrt{N}}\left(e^{-ar_1-br_2}+e^{-br_1-ar_2}\right);$$
$$N=128\pi^2\left\{\frac{1}{(4ab)^3}+\frac{1}{(a+b)^6}\right\}. \tag{30}$$

В (30) $a = 1.188530$, $b = 2.183171$. При $a = b$ функция (30) переходит в (28). Вместо среднего атомного поля и радиуса атома можно теперь ввести понятие среднего поля на орбите (в соответствии с теоремой вириала $\bar{V}_a = -a^2$ и $\bar{V}_b = -b^2$) и радиуса орбиты ($r_a = a^{-1}$ и $r_b = b^{-1}$). Выражение для четырехкратного дифференциального сечения можно представить в виде

$$\frac{d\sigma}{dE_1dE_2d\Omega_1d\Omega_2}=\frac{2p_1p_2k}{(2\pi)^8p_0}\int d\Omega_k\left|t_{12}^a\zeta^a+t_{12}^b\zeta^b\right|^2. \tag{31}$$

В выражении (31) в отношении углов и импульсов проводятся те же процедуры, которые сформулированы в разделе "**Приближения**", однако теперь при вычислении поправок учитывается индекс орбиты. Кроме того,

$$\zeta^a=\frac{1}{\sqrt{N}}\int d\vec{r}_1\varphi^{-*}(\vec{k},\vec{r}_1)e^{-br_1}\int d\vec{r}_2e^{-i\vec{p}_a\vec{r}_2}e^{-ar_2},$$

$$\zeta^b=\frac{1}{\sqrt{N}}\int d\vec{r}_1\varphi^{-*}(\vec{k},\vec{r}_1)e^{-ar_1}\int d\vec{r}_2e^{-i\vec{p}_b\vec{r}_2}e^{-br_2}.$$

В случае $a = b$ подынтегральное выражение в (31) отвечает приближению среднего атомного поля, а в приближении плоских волн переходит в (19).

Результаты расчетов сечения с функцией SPM в приближении среднего атомного поля и по формуле (31) представлены на рис. 4. Легко видеть, что пики как-бы меняются местами, и теперь в районе углов $\theta = 30°$ наблюдается необходимая угловая структура. В целом описание экспериментальных данных также значительно более удовлетворительное, чем на рис. 3. Интересно отметить, что в (e,3e)-экспериментах Ламам - Беннани [18] также была отмечена до сих пор необъясненная аномалия как раз при относительном угле испущенных электронов $\theta_{12} \approx 60^\circ$, хотя в этих экспериментах оба испущенных электрона очень медленные.

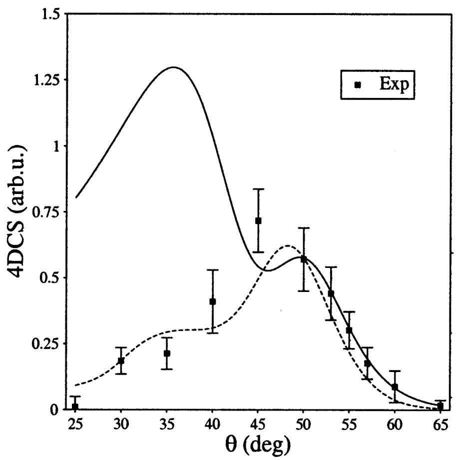



Рис. 4. Относительное сечение 4DCS для (e,3-1e)-ионизации гелия в симметричной компланарной геометрии для функции SPM, вычисленное в приближении среднего атомного поля (сплошная линия) и по формуле (31) (пунктир). Энергии и нормировка сечений те же, что на рис. 2

При расчетах по формуле (31) мы рассмотрели влияние мнимой части оптического потенциала в (22) на величину сечения, когда $\bar{V} = \bar{V}_R + i\bar{V}_I$, $V_I > 0$. В целом это влияние не очень существенное и в основном немного уменьшает сечение в области углов $30 - 40^\circ$ при росте $|V_I|$. На рис. 4 $V_I = 0.2V_R$.

Несмотря на качественное согласие с экспериментом, мы относимся к этому результату с определенной осторожностью, так как функция SPM все же очень простая. В более реалистических функциях типа BK и CPV достаточно трудно выделить четко определенные орбиты электронов, на что указывают слабо выраженные пики в сечении. Однако можно предположить, что в случае разумной модели искажающего потенциала, который является не константой, а функцией координаты, сечения для функций ВК и CPV тоже будут воспроизводить наблюдаемую угловую структуру за счет "взаимодействия" между эффектами искажения и корреляций. Пока же мы воздерживаемся от заключения, что некоррелированная функция типа Хартри - Фока лучше описывает эксперимент. Для такого вывода следует поставить (e,3-1e)-эксперимент при более высокой начальной энергии налетающего электрона, скажем, как на рис. 1б. При этом попутно можно будет ответить на вопрос, какая модель распределения полей в атоме правильная.

Авторы благодарны Л.Авалди за предоставление в наше распоряжение экспериментальных данных. Работа поддержана грантами РФФИ № 00-01-00617, № 00-02-16337 и № 03-02-16489.

## Литература

[1] Many-Particle Spectroscopy of Atoms, Molecules, Clusters and Surfaces, ed. by J. Berakdar and J. Kirschner, Kluwer Academics/Plenum Publishers, New York (2001), Parts I and II.

[2] В.Г. Неудачин, Ю.В. Попов, Ю.Ф. Смирнов, УФН **169**, 1111 (1999).

[3] I.E. McCarthy, E. Weigold, Phys. Rep. **27**, 275 (1976); R. Camilloni, A. Giardini-Guidoni, I.E. McCarthy, and G. Stefani, J. Phys. B **13**, 397 (1980).

[4] L. Avaldi, R. Camilloni, Yu. V. Popov, and G. Stefani, Phys. Rev. A. **33**, 851 (1986); Ю. В. Попов, Л. Авалди, Р. Камиллони, Дж. Стефани, ЖЭТФ **90**, 1191 (1986).

[5] Ю. Ф. Смирнов, В. Г. Неудачин, Письма в ЖЭТФ **3**, 298 (1966).

[6] Yu.V. Popov, C. Dal Cappello, and K. Kouzakov, J. Phys. B **29**, 5901 (1996).

[7] P.Bolognesi, C.C.Jia, A.Lahmam-Bennani, and L.Avaldi, Abstracts of Int. Conf. on Electron and Photon Impact Ionization and Related Topics (Metz, France, 2002), p. P34.

[8] С.П. Меркурьев, Л.Д. Фаддеев. Квантовая теория рассеяния для систем нескольких частиц. Москва: Наука, 1985.

[9] A.M. Popova, Yu.V. Popov, J. Phys. A **16**, 2743 (1983).

[10] В.П. Маслов. Асимптотические методы и теория возмущений. Москва: Наука, 1988.

[11] O. Chuluunbaatar, I.V. Puzynin, and S.I. Vinitsky. J. Phys. B **34**, L425 (2001)

[12] Yu.V. Popov, L.U. Ancarani, Phys. Rev. A **62**, 42702 (2000).

[13] R.A. Bonham and D.A. Kohl, J. Chem. Phys. **45**, 2471 (1966)

[14] H.A. Bethe and E.E. Salpeter, "Quantum mechanics of one and two electron atoms", Springer-Verlag, Berlin, 1957.

[15] Yu.V. Popov, N.M. Kuzmina, J. Phys. B **26**, 1215 (1993); Ю.В. Попов, Н.М. Кузьмина, Вестник МГУ, серия физика, астрономия **34**, 26 (1993).

[16] J.N. Silverman, O. Platas, and F.A. Matsen, J. Chem. Phys. **45**, 1402 (1960).

[17] Ю.В.Попов, О.Чулуунбаатар, С.И.Виницкий, У.Анкарани, К.Даль Каппелло, П.С.Виницкий, ЖЭТФ **122**, 717 (2002).

[18] A. Kheifets, I. Bray, A. Lahmam-Bennani *et al.*, J. Phys. B **32**, 5047 (1999).

Получено 25 сентября 2002 г.

Кузаков К. А. и др. Р4-2002-218

$(e,3e)$-реакции при средних энергиях:
визуализация эффектов среднего поля в атоме

На примере гелия представлена теория квазиупругих $A(e,3e)A^{++}$ и $A(e,3-1e)A^{++}$ атомных реакций в симметричной плоской геометрии при средних энергиях начального электрона порядка нескольких сотен эВ. Сравнение с недавним $(e,3-1e)$-экспериментом показало возможность наглядно наблюдать эффект среднего поля в атоме, а также постстолкновительные эффекты.

Работа выполнена в Лаборатории информационных технологий ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна, 2002

Перевод авторов

Kouzakov K. A. et al. P4-2002-218

$(e,3e)$ Reactions at Moderate Energies:
Visualization of Average Field Effects in Atom

In the case of helium atom the theory is presented for quasielastic $A(e,3e)A^{++}$ and $A(e,3-1e)A^{++}$ atomic reactions in the coplanar symmetric geometry at incident electron energy of several hundreds eV. The comparison with the recent $(e,3-1e)$ experiment has allowed one to observe the effect of the mean atomic field as well as postcollisional effects.

The investigation has been performed at the Laboratory of Information Technologies, JINR.

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna, 2002

Редактор *М. И. Зарубина*
Макет *Н. А. Киселевой*

Подписано в печать 18.10.2002.
Формат 60 × 90/16. Бумага офсетная. Печать офсетная.
Усл. печ. л. 1,25. Уч.-изд. л. 1,0. Тираж 360 экз. Заказ № 53577.

Издательский отдел Объединенного института ядерных исследований
141980, г. Дубна, Московская обл., ул. Жолио-Кюри, 6.