ЖЭТФ, 2010, том 138, вып. 6 (12), стр. 1028–1036 © 2010

ФОТОИОНИЗАЦИЯ ГЕЛИЕПОДОБНЫХ ИОНОВ С ВОЗБУЖДЕНИЕМ nl-СОСТОЯНИЙ

А. И. Михайлов, А. В. Нефёдов *

*Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова Российской академии наук
188300, Гатчина, Ленинградская обл., Россия*

Поступила в редакцию 13 апреля 2010 г.

Рассмотрен процесс фотоионизации гелиеподобных ионов, сопровождаемый возбуждением остаточного иона в nl-состояние. Расчет выполнен в первом порядке теории возмущений по электрон-электронному взаимодействию с использованием кулоновских волновых функций в качестве нулевого приближения. Найдены формулы для сечений ионизации, имеющие скейлинговое поведение по заряду ядра мишени Z и главному квантовому числу n. Численные расчеты проведены во всей нерелятивистской области энергий. В пределе высоких и низких энергий получены простые разложения сечений по степеням параметра Зоммерфельда ξ. Дается сравнение с экспериментом.

1. ВВЕДЕНИЕ

Фотоионизация с возбуждением атома, как и двойная фотоионизация, целиком обусловлена межэлектронным взаимодействием и потому представляет определенный интерес при изучении электронных корреляций в атоме. В экспериментальном отношении ионизация с возбуждением изучена мало. В основном в качестве мишени использовался только гелий (см., например, [1–3] и ссылки там). Однако, в связи с появлением нового поколения источников синхротронного излучения, этот процесс стал актуален и для многоэлектронных атомных систем. Так, в работах [4–6] измерялось сечение двойной фотоионизации K-оболочек нейтральных атомов по выходу рентгеновских квантов, испускаемых при заполнении пустой K-оболочки. Поскольку две вакансии на K-оболочке образуются как при двойной ионизации, так и при ионизации с возбуждением, измеренное таким образом сечение будет суммой сечений $(\sigma^{++} + \sigma^{+*})$ этих процессов. Для сравнения теории с такими экспериментами надо рассчитать оба сечения.

Первые теоретические расчеты ионизации с возбуждением были выполнены Брауном [7], который рассматривал фотоионизацию гелия с переходом иона He^+ в ns- и np-состояния при энергии фотона от порога до 5 кэВ. Межэлектронное взаимодействие учитывалось только в начальном состоянии атома, что явно недостаточно в области низких энергий. Ионизация с возбуждением H^-, He и Li^+ при высоких нерелятивистских энергиях изучалась в работах [8, 9]. Формулы, пригодные для всех $Z \gg 1$ в этой же энергетической области, получены в работе [10]. Друкарев и др. [11] рассмотрели область промежуточных энергий фотона для атома He и гелиеподобных ионов. В качестве волновой функции начального состояния использовалась высокоточная численная функция, а волновая функция конечного состояния строилась в виде ряда по параметрам $\alpha Zc/v$ и $\alpha c/v$ с учетом ведущих членов разложения, где $\alpha \approx 1/137$ — постоянная тонкой структуры, c — скорость света, v — скорость вылетевшего электрона. Поскольку параметр αZc определяет характерную скорость K-электрона в атоме, понятно, что такой подход непригоден в низкоэнергетической области вблизи порога ионизации.

Целью настоящей работы являлось получение формул для сечения фотоионизации с переходом остаточного иона в nl-состояние ($n > 1$), пригодных для гелиеподобных ионов с $Z \gg 1$ во всей нерелятивистской области энергий. Полученные аналитические выражения содержат однократные интегралы и удобны для численных расчетов. Кроме того, в предельных случаях высоких и низких энергий они допускают разложение соответственно по кулоновским параметрам ξ и ξ^{-1} ($\xi = \alpha Zc/v$ называют еще параметром Зоммерфельда). В работе получены первые два члена этих разложений.

*E-mail: anef@thd.pnpi.spb.ru

Как и в работах [7–11], наш расчет проводился в дипольном приближении. Хорошо известно (см., например, [12]), что выход за рамки дипольного приближения вблизи порога эквивалентен учету членов порядка $k/\eta \ll 1$ (k — импульс фотона, η — средний импульс K-электрона), тогда как учет недипольности вдали от порога эквивалентен учету членов порядка $k/p \ll 1$ (p — импульс эжектированного электрона). Такими членами мы пренебрегаем. Предполагается, что $Z \gg 1$, но $\alpha Z \ll 1$. Последнее условие позволяет использовать нерелятивистский подход. Поскольку ряд теории возмущений по межэлектронному взаимодействию фактически является рядом по степеням параметра $1/Z$, точность нашего расчета ограничена членами порядка $1/Z$ и αZ.

В дальнейшем используется релятивистская система единиц, в которой $\hbar = 1$ и $c = 1$.

2. АМПЛИТУДА ПРОЦЕССА

Без учета членов порядка $(\alpha Z)^2$ электрон-фотонное взаимодействие имеет вид

$$\hat{V}_\gamma(\mathbf{r}) = m^{-1} N_\gamma e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} (\mathbf{e}\cdot\hat{\mathbf{p}}), \quad N_\gamma = \frac{\sqrt{4\pi\alpha}}{\sqrt{2\omega}}. \tag{1}$$

Здесь $\hat{\mathbf{p}}$ — оператор импульса электрона, который в координатном представлении записывается в градиентной форме $\hat{\mathbf{p}} = -i\nabla_r$, $\nabla_r = \partial/\partial\mathbf{r}$, m — масса электрона. Налетающий фотон характеризуется энергией ω, импульсом $\mathbf{k}$ и вектором поляризации $\mathbf{e}$, удовлетворяющим условиям $\mathbf{e}\cdot\mathbf{k} = 0$ и $\mathbf{e}^*\cdot\mathbf{e} = 1$. В дипольном приближении считается, что $k = 0$. Область нерелятивистских энергий ограничена условием $\omega \ll m$.

Амплитуда однофотонного двухэлектронного перехода есть

$$\mathcal{A} = 2\langle\Psi_f|\hat{V}_\gamma|\Psi_i\rangle, \tag{2}$$

где $\Psi_{i,f}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ — двухэлектронные волновые функции начального и конечного состояний атомной системы, зависящие от координат электронов $\mathbf{r}_1$ и $\mathbf{r}_2$. Множитель 2 возникает из-за взаимодействия фотона с обоими электронами и одночастичного характера оператора (1). Волновые функции $\Psi_{i,f}$ находим с помощью теории возмущений по межэлектронному взаимодействию $V_C(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \alpha/|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$, беря в качестве нулевого приближения кулоновские функции.

С учетом симметрии волновых функций амплитуда (2) может быть представлена в виде суммы четырех членов [13]:

$$\mathcal{A} = \sqrt{2}(\mathcal{A}_a + \mathcal{A}_b + \mathcal{A}_c + \mathcal{A}_d), \tag{3}$$

где

$$\mathcal{A}_a = \langle\psi_p\psi_{nl}|\hat{V}_\gamma G(E_a) V_C|\psi_{1s}\psi_{1s}\rangle, \tag{4}$$

$$\mathcal{A}_b = \langle\psi_p\psi_{nl}|V_C G(E_b) \hat{V}_\gamma|\psi_{1s}\psi_{1s}\rangle, \tag{5}$$

$$\mathcal{A}_c = \langle\psi_{nl}\psi_p|\hat{V}_\gamma G(E_c) V_C|\psi_{1s}\psi_{1s}\rangle, \tag{6}$$

$$\mathcal{A}_d = \langle\psi_{nl}\psi_p|V_C G(E_b) \hat{V}_\gamma|\psi_{1s}\psi_{1s}\rangle. \tag{7}$$

Здесь ψ_{1s}, ψ_{nl} и ψ_p — одноэлектронные кулоновские функции дискретного ($1s$- и nl-состояний) и сплошного спектров, соответствующие энергиям E_{1s}, E_{nl} и E_p; $G(E)$ — одночастичная кулоновская функция Грина с энергией E. В выражениях (4)–(7) промежуточные энергии определяются следующим образом:

$$E_a = 2E_{1s} - E_{nl}, \tag{8}$$

$$E_b = E_p + E_{nl} - E_{1s} = \omega + E_{1s}, \tag{9}$$

$$E_c = 2E_{1s} - E_p. \tag{10}$$

Второе соотношение в (9) возникает в силу закона сохранения энергии $2E_{1s} + \omega = E_p + E_{nl}$. Матричные элементы (4)–(7) могут быть представлены четырьмя диаграммами Фейнмана (см. рис. 1). Графики *а* и *в* описывают взаимодействие в начальном состоянии, а графики *б* и *г* — в конечном.

Дальнейший расчет будем проводить в импульсном представлении. При этом оператору V_C соответствует фотонный пропагатор в кулоновской калибровке $D(\mathbf{f}) = 4\pi\alpha/f^2$, описывающий обмен кулоновским фотоном с импульсом $\mathbf{f}$. Оператору $\hat{V}_\gamma$ в дипольном приближении отвечает матричный элемент

$$\langle\mathbf{f}|\hat{V}_\gamma|\mathbf{f}'\rangle = m^{-1} N_\gamma (\mathbf{e}\cdot\mathbf{f})(2\pi)^3 \delta(\mathbf{f} - \mathbf{f}'). \tag{11}$$

Для амплитуды $\mathcal{A}_a$ имеем

$$\mathcal{A}_a = \int \frac{d\mathbf{f}}{(2\pi)^3} F_a(\mathbf{p}, \mathbf{f}) D(\mathbf{f}) F_{nl}(\mathbf{f}), \tag{12}$$

$$F_a(\mathbf{p}, \mathbf{f}) = \int \frac{d\mathbf{f}_1}{(2\pi)^3} \langle\psi_p|\hat{V}_\gamma G(p_a)|\mathbf{f}_1\rangle\langle\mathbf{f}_1 + \mathbf{f}|\psi_{1s}\rangle, \tag{13}$$

$$F_{nl}(\mathbf{f}) = \int \frac{d\mathbf{f}_2}{(2\pi)^3} \langle\psi_{nl}|\mathbf{f}_2\rangle\langle\mathbf{f}_2 - \mathbf{f}|\psi_{1s}\rangle. \tag{14}$$

Функция Грина $G(p_a) = G(E_a)$ с учетом того, что промежуточный импульс $p_a = \sqrt{2mE_a + i0}$.

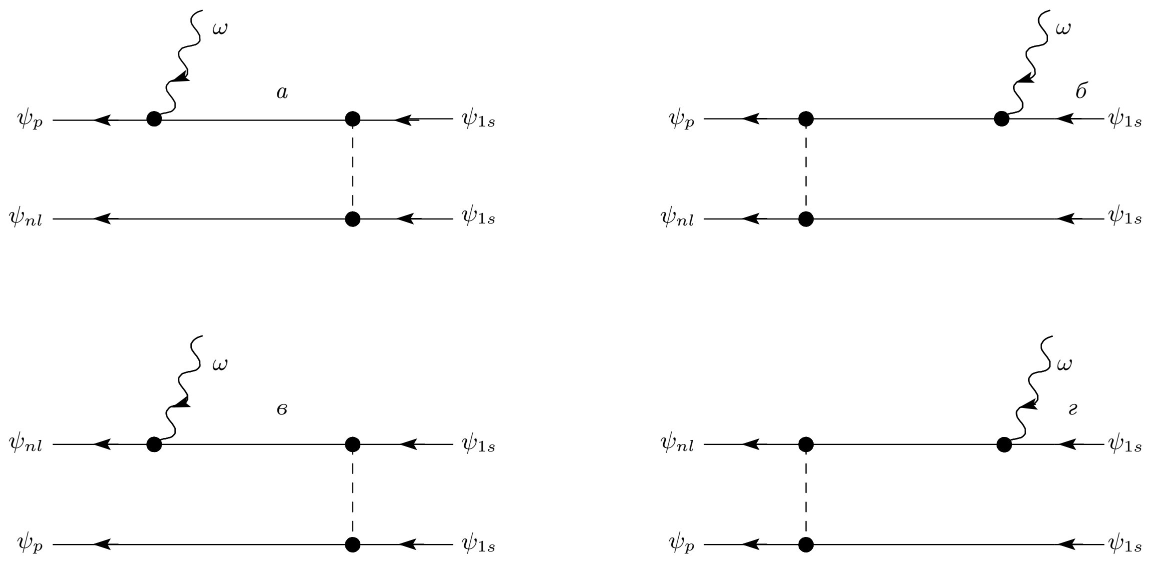

Рис. 1. Диаграммы Фейнмана для фотоионизации с возбуждением nl-состояния. Сплошные прямые линии описывают электроны в кулоновском поле ядра

В импульсном представлении кулоновская волновая функция K-электрона может быть записана в виде

$$\langle \mathbf{f}_1 + \mathbf{f} | \psi_{1s} \rangle = N_1 \left(-\frac{\partial}{\partial \eta} \right) \langle \mathbf{f}_1 | V_{i\eta} | -\mathbf{f} \rangle, \tag{15}$$

где $N_1^2 = \eta^3/\pi$ и $\eta = m\alpha Z$. Матричный элемент

$$\langle \mathbf{f} | V_{i\lambda} | \mathbf{f}' \rangle = \frac{4\pi}{(\mathbf{f} - \mathbf{f}')^2 + \lambda^2} \tag{16}$$

есть фурье-образ потенциала Юкавы $e^{-\lambda r}/r$. Подставляя (15) в (13), а также используя условие полноты

$$\int \frac{d\mathbf{f}}{(2\pi)^3} |\mathbf{f}\rangle\langle\mathbf{f}| = 1, \tag{17}$$

получим

$$F_a(\mathbf{p}, \mathbf{f}) = N_1 \left(-\frac{\partial}{\partial \eta} \right) \langle \psi_p | \hat{V}_\gamma G(p_a) V_{i\eta} | -\mathbf{f} \rangle. \tag{18}$$

В данной работе мы ограничимся рассмотрением переходов только в ns-состояния остаточного иона. Вывод формул для сечений ионизации с возбуждением других состояний будет дан в следующей работе.

Кулоновскую волновую функцию ns-состояния можно представить в виде

$$\langle \psi_{ns} | \mathbf{f}_2 \rangle = N_n D_\nu \left(-\frac{\partial}{\partial \nu} \right) \langle 0 | V_{i\nu} | \mathbf{f}_2 \rangle \Big|_{\nu = \eta_n}, \tag{19}$$

$$D_\nu = \sum_{k=0}^{n-1} \frac{(n-1)!(2\eta_n)^k}{(n-k-1)!k!(k+1)!} \frac{\partial^k}{\partial \nu^k}, \tag{20}$$

где $N_n^2 = \eta_n^3/\pi$ и $\eta_n = \eta/n$. После взятия производных по ν в формуле (19) нужно положить $\nu = \eta_n$.

С учетом соотношений (15), (19) и операторного тождества [14]

$$V_{a+i\nu} V_{b+i\mu} = \int\limits_{\nu+\mu}^{\infty} d\lambda \, V_{a+b+i\lambda} \tag{21}$$

находим

$$F_{ns}(\mathbf{f}) = N_1 N_n D_\nu \left(-\frac{\partial}{\partial \nu} \right) \langle \mathbf{f} | V_{i\nu} | 0 \rangle \Big|_{\nu = \eta + \eta_n}. \tag{22}$$

Здесь после взятия производных по ν нужно положить $\nu = \eta + \eta_n$.

Подставляя (18), (22) в (12) и используя равенство

$$f^{-2} \langle \mathbf{f} | V_{i\nu} | 0 \rangle = \nu^{-2} \langle \mathbf{f} | (V_0 - V_{i\nu}) | 0 \rangle, \tag{23}$$

получаем амплитуду $\mathcal{A}_a$ в виде

$$\mathcal{A}_a = 4\pi\alpha N_1^2 N_n \Gamma_\nu \langle \psi_p | \hat{V}_\gamma G(p_a) V_{i\mu} | 0 \rangle \Big|_{\nu = \eta + \eta_n}, \tag{24}$$

где

$$\Gamma_\nu = D_\nu \frac{\partial}{\partial \nu} \frac{1}{\nu^2}, \tag{25}$$

$\mu = \eta + \nu$. Дифференциальный оператор Γ_ν обладает нетривиальным свойством, а именно: действуя на функцию, не зависящую от ν, он дает нуль после подстановки $\nu = \eta + \eta_n$. Это свойство использовано при выводе соотношения (24). Используя формулу (11) и интегральное представление для волновой функции непрерывного спектра [14, 15], находим

$$\langle\psi_p|\hat{V}_\gamma G(p_a)V_{i\mu}|0\rangle = m^{-1}N_pN_\gamma(\mathbf{e}\cdot\mathbf{\Gamma})\hat{\mathcal{I}}_\xi(t)\times \\ \times\langle\mathbf{v}-\mathbf{p}t|V_{pt+i\varepsilon}G(p_a)V_{i\mu}|0\rangle\big|_{\varepsilon\to 0}, \quad (26)$$

$$N_p^2 = \frac{2\pi\xi}{1-e^{-2\pi\xi}}, \quad \mathbf{\Gamma} = ip\nabla_p - \mathbf{p}\frac{\partial}{\partial\varepsilon},$$

$$\hat{\mathcal{I}}_\xi(t) = \frac{1}{2\pi i}\oint^{(0^+,1^+)}\frac{dt}{t}\left(\frac{-t}{1-t}\right)^{i\xi}.$$

Здесь $\mathbf{v} = \mathbf{p}$, но $\nabla_p = \partial/\partial\mathbf{p}$ не действует на $\mathbf{v}$ и $\xi = \eta/p$. В интегральном операторе $\hat{\mathcal{I}}_\xi(t)$ контур интегрирования огибает точки 0 и 1 против часовой стрелки. Матричный элемент, входящий в (26), может быть выражен через однократный интеграл [16]:

$$\langle\mathbf{f}'|V_{i\nu}G(p_1)V_{i\mu}|\mathbf{f}\rangle = \\ = -im\int_0^1\frac{dx}{\Lambda_1(x)}(\exp)_1\langle\mathbf{f}'|V_{i\nu+\Lambda_1(x)}|\mathbf{f}x\rangle, \quad (27)$$

где

$$\Lambda_1(x) = \sqrt{(p_1^2 - f^2x)(1-x) - \mu^2 x},$$

$$(\exp)_1 = \exp\left(i\eta\int_x^1\frac{dy}{y\Lambda_1(y)}\right),$$

$$p_1 = \sqrt{2mE_1 + i0}.$$

Преобразуем выражение (26) с помощью (27) и вычислим контурный интеграл. Получим

$$\langle\psi_p|\hat{V}_\gamma G(p_a)V_{i\mu}|0\rangle = \\ = -i4\pi N_pN_\gamma(\mathbf{e}\cdot\mathbf{\Gamma})\int_0^1\frac{dx}{\Lambda_a(x)}\frac{(\exp)_a}{a}\left(\frac{a}{b}\right)^{i\xi}, \quad (28)$$

$$a = v^2 + \varkappa^2, \quad b = (\mathbf{p}-\mathbf{v})^2 - (p+i\varkappa)^2, \quad \varkappa = \varepsilon - i\Lambda_a(x),$$

$$\Lambda_a(x) = \sqrt{p_a^2(1-x) - \mu^2 x},$$

$$(\exp)_a = \exp\left(i\eta\int_x^1\frac{dy}{y\Lambda_a(y)}\right).$$

После действия дифференциального оператора $\mathbf{\Gamma}$ на подынтегральное выражение в формуле (28) нужно положить $\mathbf{v} = \mathbf{p}$ и $\varepsilon \to 0$. В результате имеем

$$\langle\psi_p|\hat{V}_\gamma G(p_a)V_{i\mu}|0\rangle = -8\pi N_pN_\gamma(\mathbf{e}\cdot\mathbf{p})(1-i\xi)\times \\ \times\int_0^1 dx\frac{(\exp)_a}{a^2}\left(\frac{a}{b}\right)^{i\xi}\Big|_{\substack{\mathbf{v}=\mathbf{p}\\ \varepsilon\to 0}}. \quad (29)$$

Соответственно, амплитуда (24) принимает вид

$$\mathcal{A}_a = -8\pi N(\mathbf{e}\cdot\mathbf{p})(1-i\xi)\times \\ \times\Gamma_\nu\int_0^1 dx\frac{(\exp)_a}{a^2}\left(\frac{a}{b}\right)^{i\xi}\Big|_{\nu=\eta+\eta_n}, \\ N = 4\pi\alpha N_1^2N_nN_pN_\gamma, \\ a = \varkappa^2 + p^2, \quad b = (\varkappa - ip)^2. \quad (30)$$

Перейдем теперь к вычислению графика *б* на рис. 1, который учитывает межэлектронное взаимодействие в конечном состоянии

$$\mathcal{A}_b = \int\frac{d\mathbf{f}}{(2\pi)^3}F_b(\mathbf{p},\mathbf{f})D(\mathbf{f})F_{ns}(\mathbf{f}), \quad (31)$$

$$F_b(\mathbf{p},\mathbf{f}) = m^{-1}N_\gamma\int\frac{d\mathbf{f}'}{(2\pi)^3}\frac{d\mathbf{f}_1}{(2\pi)^3}\langle\psi_p|\mathbf{f}'-\mathbf{f}\rangle\times \\ \times\langle\mathbf{f}'|G(p_b)|\mathbf{f}_1\rangle(\mathbf{e}\cdot\mathbf{f}_1)\langle\mathbf{f}_1|\psi_{1s}\rangle. \quad (32)$$

Используя для функции ψ_{1s} представление (15), имеем

$$(\mathbf{e}\cdot\mathbf{f}_1)\langle\mathbf{f}_1|\psi_{1s}\rangle = \eta N_1(\mathbf{e}\cdot\nabla_k)\langle\mathbf{f}_1|V_{i\eta}|\mathbf{k}\rangle\big|_{k\to 0}. \quad (33)$$

Для ψ_p воспользуемся следующим интегральным представлением [14]:

$$\langle\psi_p|\mathbf{f}\rangle = N_p\hat{\mathcal{I}}_\xi(t)\left(-\frac{\partial}{\partial\varepsilon}\right)\langle\mathbf{p}(1-t)|V_{pt+i\varepsilon}|\mathbf{f}\rangle\big|_{\varepsilon\to 0}. \quad (34)$$

Подставляя соотношения (33), (34) в (32) и дважды применяя условие полноты (17), получаем

$$F_b(\mathbf{p},\mathbf{f}) = N_1N_pN_\gamma\frac{\eta}{m}(\mathbf{e}\cdot\nabla_k)\hat{\mathcal{I}}_\xi(t)\left(-\frac{\partial}{\partial\varepsilon}\right)\times \\ \times\langle\mathbf{f}+\mathbf{p}(1-t)|V_{pt+i\varepsilon}G(p_b)V_{i\eta}|\mathbf{k}\rangle\big|_{\substack{k\to 0\\ \varepsilon\to 0}}. \quad (35)$$

Матричный элемент, входящий в выражение (35), определяется формулой (27). С учетом этого имеем

$$F_b(\mathbf{p},\mathbf{f}) = -i\eta N_1N_pN_\gamma(\mathbf{e}\cdot\nabla_k)\hat{\mathcal{I}}_\xi(t)\times \\ \times\left(-\frac{\partial}{\partial\varepsilon}\right)\int_0^1\frac{dx}{\Lambda_b(x)}(\exp)_b\times \\ \times\langle\mathbf{f}+\mathbf{p}(1-t)|V_{pt+\Lambda_b(x)+i\varepsilon}|\mathbf{k}x\rangle\big|_{\substack{k\to 0\\ \varepsilon\to 0}}, \quad (36)$$

где

$$\Lambda_b(x) = \sqrt{(p_b^2 - k^2 x)(1-x) - \eta^2 x},$$

$$(\exp)_b = \exp\left(i\eta \int_x^1 \frac{dy}{y\Lambda_b(y)} \right),$$

$$p_b = \sqrt{2mE_b + i0}.$$

Используя равенства (22) и (23), преобразуем произведение двух последних сомножителей под интегралом в правой части (31) к виду

$$D(\mathbf{f})F_{ns}(\mathbf{f}) = 4\pi\alpha N_1 N_n \Gamma_\nu \langle 0|V_{i\nu}|\mathbf{f}\rangle\Big|_{\nu=\eta+\eta_n}. \qquad (37)$$

Оператор Γ_ν определен уравнением (25). После подстановки (36) и (37) в (31) с помощью операторного тождества (21) получаем

$$\mathcal{A}_b = -i\eta N(\mathbf{e}\cdot\nabla_k)\Gamma_\nu \int_0^1 \frac{dx}{\Lambda_b(x)} \times$$
$$\times (\exp)_b \hat{\mathcal{I}}_\xi(t) \langle \mathbf{p}(1-t)|V_{pt+i\chi}|\mathbf{k}x\rangle\Big|_{\substack{k\to 0\\ \nu=\eta+\eta_n}}, \qquad (38)$$

где $\chi = \nu - i\Lambda_b(x)$. Контурный интеграл «снимается» по теореме о вычетах. Вычисляя градиент по $\mathbf{k}$, приходим к выражению для $\mathcal{A}_b$ в виде следующего однократного интеграла:

$$\mathcal{A}_b = -8\pi i\eta N(\mathbf{e}\cdot\mathbf{p})(1-i\xi)\Gamma_\nu \int_0^1 \frac{dx\,x}{\Lambda_b(x)} \times$$
$$\times \frac{(\exp)_b}{A^2}\left(\frac{A}{B}\right)^{i\xi}\Big|_{\nu=\eta+\eta_n}, \qquad (39)$$

$$A = \chi^2 + p^2, \quad B = (\chi - ip)^2.$$

Обменные амплитуды (6) и (7) также сводятся к однократным интегралам. Далее удобно ввести безразмерные амплитуды $\mathcal{M}_i$, связанные с $\mathcal{A}_i$ следующим соотношением:

$$\mathcal{A}_i = 4\pi\,\eta^{-7} N(\mathbf{e}\cdot\mathbf{p})\mathcal{M}_i. \qquad (40)$$

Здесь все импульсы, входящие в $\mathcal{M}_i$, выражены в единицах $\eta = m\alpha Z$, а энергии — в единицах $I = \eta^2/2m$. Безразмерный импульс эжектированного электрона есть просто $\xi^{-1} = p/\eta$. Безразмерные энергии электрона $\varepsilon_p = E_p/I = \xi^{-2}$ и фотона $\varepsilon_\gamma = \omega/I$ связаны друг с другом законом сохранения энергии, который записывается теперь как $\varepsilon_p = \varepsilon_\gamma - 2 + n^{-2}$.

Приведем явные выражения для амплитуд $\mathcal{M}_i$:

$$\mathcal{M}_a = -2(1-i\xi)\Gamma_\nu \int_0^1 dx\, x^{-1/\zeta}\left(\frac{\zeta+\lambda}{\zeta+\mu}\right)^{2/\zeta} \times$$
$$\times \Phi_2(\lambda)\Big|_{\nu=1+n^{-1}}, \qquad (41)$$

$$\mathcal{M}_b = -2i(1-i\xi)\Gamma_\nu \int_0^1 \frac{dx}{\Lambda} x^{1-i/\beta}\left(\frac{\beta+\Lambda}{\beta+i}\right)^{2i/\beta} \times$$
$$\times Q_2(\nu - i\Lambda)\Big|_{\nu=1+n^{-1}}, \qquad (42)$$

$$\mathcal{M}_c = (1-i\xi)D_\nu\nu \int_0^1 \frac{dx}{\rho} x^{1-1/q}\left(\frac{q+\rho}{q+\nu}\right)^{2/q} \frac{\partial}{\partial\rho}\frac{1}{1+\rho} \times$$
$$\times \frac{\partial}{\partial\rho}\frac{1}{(1+\rho)^2}\left[\Phi_1(1) - \Phi_1(2+\rho)\right]\Big|_{\nu=n^{-1}}, \qquad (43)$$

$$\mathcal{M}_d = -i(1-i\xi)D_\nu \frac{\partial^2}{\partial\nu^2} \times$$
$$\times \int_0^1 \frac{dx}{\Lambda}\frac{x^{1-i/\beta}}{(\nu-1-i\Lambda)^3}\left(\frac{\beta+\Lambda}{\beta+i}\right)^{2i/\beta} \times$$
$$\times \left[Q_1(1) - Q_1(\nu - i\Lambda)\right]\Big|_{\nu=1+n^{-1}}, \qquad (44)$$

$$\Phi_k(z) = \frac{\exp\left[-2\xi\,\mathrm{arctg}(1/z\xi)\right]}{(z^2+\xi^{-2})^k},$$

$$Q_k(z) = \frac{(z+i/\xi)^{i\xi-k}}{(z-i/\xi)^{i\xi+k}},$$

$$\mu = 1+\nu, \quad \zeta = \sqrt{2-n^{-2}}, \quad \lambda = \sqrt{\zeta^2(1-x)+\mu^2 x},$$

$$\Lambda = \sqrt{\beta^2(1-x) - x + i0}, \quad \beta = \sqrt{\varepsilon_\gamma - 1},$$

$$\rho = \sqrt{q^2(1-x)+\nu^2 x}, \quad q = \sqrt{2+\xi^{-2}},$$

$$D_\nu = \sum_{k=0}^{n-1}\frac{(n-1)!}{(n-k-1)!k!(k+1)!}\left(\frac{2}{n}\right)^k \frac{\partial^k}{\partial\nu^k}.$$

После взятия производных по ν нужно положить $\nu = n^{-1}$ в формуле (43) и $\nu = 1+n^{-1}$ в остальных случаях. Для вещественных положительных значений z функции $Q_k(z)$ и $\Phi_k(z)$ равны. Оператор Γ_ν определен формулой (25). Положительная мнимая добавка, входящая в выражение для Λ, позволяет выбрать правильную ветвь многозначной функции.

3. СЕЧЕНИЕ ИОНИЗАЦИИ С ВОЗБУЖДЕНИЕМ ns-СОСТОЯНИЙ

Дифференциальное сечение фотоионизации гелиеподобного иона с переходом остаточного иона в ns-состояние связано с амплитудой $\mathcal{A}$ соотношением

$$d\sigma_{ns}^{+*} = 2\pi\overline{|\mathcal{A}|^2}\frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3}\,\delta(E_p + E_{ns} - \omega - 2E_{1s}), \quad (45)$$

$$\mathcal{A} = \sqrt{2}\sum_i \mathcal{A}_i = 4\pi\sqrt{2}\,\eta^{-7}N(\mathbf{e}\cdot\mathbf{p})\mathcal{M}. \quad (46)$$

Здесь $\mathcal{M} = \sum_i \mathcal{M}_i$ и суммирование выполняется по всем амплитудам (41)–(44). Черта над $|\mathcal{A}|^2$ означает усреднение по поляризациям фотона, которое сводится к формуле

$$\frac{1}{2}\sum_{polar}|(\mathbf{e}\cdot\mathbf{p})|^2 = \frac{p^2}{2}\sin^2\theta, \quad (47)$$

где θ — угол, образуемый импульсами электрона $\mathbf{p}$ и фотона $\mathbf{k}$. Амплитуда $\mathcal{M}$ от углов не зависит. Учитывая равенство

$$(4\pi)^2\eta^{-14}N_1^4N_n^2N_p^2 = \frac{32\xi}{\eta^5n^3(1-e^{-2\pi\xi})}, \quad (48)$$

и исключая δ-функцию от энергии, получим

$$d\sigma_{ns}^{+*} = 2^9\pi^2\alpha^3\,\frac{mp^2}{\omega\eta^4}\,\frac{|\mathcal{M}|^2\sin^3\theta\,d\theta}{n^3(1-e^{-2\pi\xi})}. \quad (49)$$

Угловое распределение вылетевших электронов имеет точно такое же поведение, как в однократном фотоэффекте: оно обращается в нуль для вылета «вперед» ($\theta = 0$) и «назад» ($\theta = \pi$) и имеет максимум при $\theta = \pi/2$.

Входящий в правую часть (49) размерный множитель выразим через безразмерные величины и боровский радиус $a_0 = 1/m\alpha$:

$$\frac{mp^2}{\omega\eta^4} = \frac{2a_0^2}{\alpha^2Z^4}\,\frac{\varepsilon_p}{\varepsilon_\gamma}. \quad (50)$$

После интегрирования по углу θ получаем полное сечение в скалированном по Z виде:

$$\sigma_{ns}^{+*} = \frac{2^{12}}{3}\,\frac{\pi\sigma_0}{Z^4n^3}\,K(n,\xi), \quad (51)$$

$$K(n,\xi) = \frac{\varepsilon_p}{\varepsilon_\gamma}\,\frac{|\mathcal{M}|^2}{1-e^{-2\pi\xi}}, \quad (52)$$

где $\sigma_0 = \alpha\pi a_0^2 \approx 0.642$ Мб, $\varepsilon_p = \xi^{-2}$, $\varepsilon_\gamma = \xi^{-2} + 2 - n^{-2}$. Формулы (51) и (52) справедливы во всей нерелятивистской области энергий, удовлетворяющей условию $2 - n^{-2} \le \varepsilon_\gamma \ll 2(\alpha Z)^{-2}$. Функция $K(n,\xi)$ не содержит явной зависимости от Z, т. е. является универсальной. При высоких и низких энергиях ее можно разложить соответственно по параметрам ξ и ξ^{-1}. Мы нашли по два ведущих члена этих разложений. Так, в околопороговой области имеем

$$K(n,\xi) \approx B_1 - B_2\xi^{-2}, \quad \xi \gg 1. \quad (53)$$

Для асимптотически высоких нерелятивистских энергий

$$K(n,\xi) \approx \frac{\xi^8}{e^{2\pi\xi}-1}\left(C_1 - C_2\xi^2\right), \quad \xi \ll 1. \quad (54)$$

Отметим, что мы не разлагаем по параметру $\pi\xi$, который может быть не мал. Значения коэффициентов разложения для разных n приведены в табл. 1, откуда видно, что вторые коэффициенты всегда больше первых.

Часто в экспериментах по фотоионизации измеряют отношение сечения изучаемого процесса к сечению однократного фотоэффекта σ^+. Рассмотрение процесса на гелиеподобных ионах в ведущем порядке нерелятивистской теории возмущений дает для σ^+ аналитическую формулу [17]

$$\sigma^+ = \frac{2^{10}\pi\sigma_0}{3Z^2\varepsilon_\gamma^4}\,\frac{e^{-4\tau\,\mathrm{arcctg}\,\tau}}{1-e^{-2\pi\tau}}, \quad (55)$$

где $\tau = 1/\sqrt{\varepsilon_\gamma - 1}$, $\sigma_0 = \alpha\pi a_0^2$. Для отношения сечений получим скалированное по Z выражение:

$$R(ns) = \frac{\sigma_{ns}^{+*}}{\sigma^+} = \frac{4\varepsilon_\gamma^4}{Z^2n^3}\,\frac{1-e^{-2\pi\tau}}{e^{-4\tau\,\mathrm{arcctg}\,\tau}}\,K(n,\xi). \quad (56)$$

Функция $H(n,\xi) = n^3Z^2R(ns)$ является универсальной для всех Z. Ее зависимость от ξ и n показана на рис. 2. Видно, что при всех n она выходит на высокоэнергетическую асимптотику при $\xi \lesssim 0.1$ и на пороговую величину при $\xi \gtrsim 10$. Область быстрого изменения $H(n,\xi)$ заключена в интервале $0.5 \lesssim \xi \lesssim 5$. При $\xi \approx 0.3$ все функции имеют неглубокий минимум. Как видно из рис. 2, при $n > 6$ кривая $H(n,\xi)$ практически перестает изменяться с ростом n, т. е. почти достигает своих предельных (при $n \to \infty$) значений. Значения универсальной функции $H(n,\xi)$ в пределе высоких ($\xi \to 0$) и низких ($\xi \to \infty$) энергий для нескольких n приведены в табл. 1.

На рис. 3 показаны вклады отдельных диаграмм Фейнмана (см. рис. 1) в $H(n,\xi)$ для случая $n = 2$. Их характерное поведение в зависимости от переменной

Таблица 1. Коэффициенты разложений (53), (54) и предельные значения функции $H(n,\xi)$

n	$B_1 \cdot 10^3$	$B_2 \cdot 10^3$	C_1	C_2	$H(n,\xi),\ \xi\to 0$	$H(n,\xi),\ \xi\to\infty$
2	1.99	5.02	0.182	0.837	0.729	2.02
3	1.24	3.10	0.115	0.624	0.461	1.56
4	1.07	2.66	0.100	0.569	0.398	1.44
5	1.00	2.48	0.093	0.545	0.374	1.40
6	0.97	2.39	0.090	0.533	0.361	1.37
7	0.94	2.34	0.088	0.526	0.353	1.36
8	0.93	2.30	0.087	0.522	0.349	1.35
9	0.92	2.28	0.086	0.519	0.346	1.34

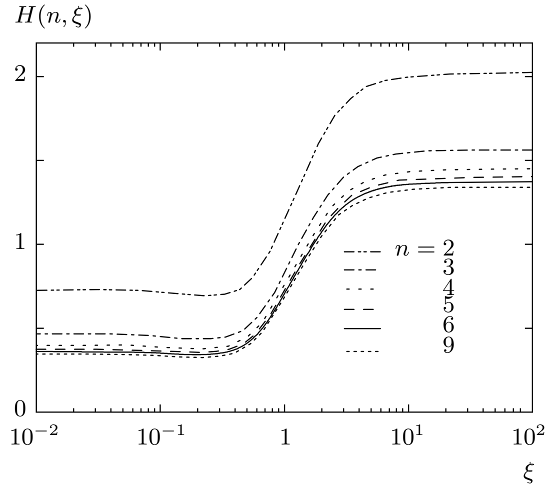

Рис. 2. Графики функций $H(n,\xi)$ в зависимости от переменной ξ и главного квантового числа n

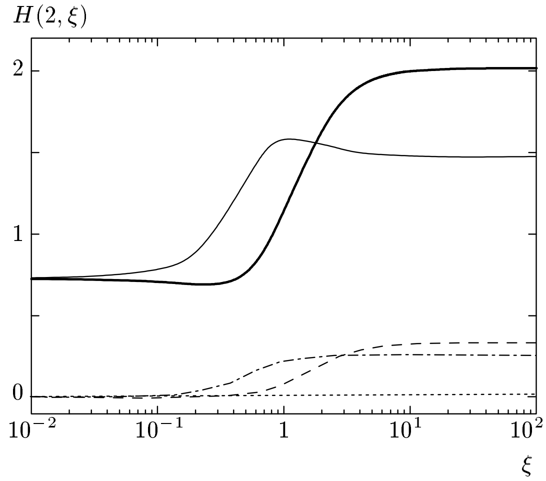

Рис. 3. Вклады отдельных диаграмм Фейнмана в $H(n,\xi)$ для случая $n = 2$. Сплошная тонкая линия — вклад диаграммы рис. 1*а*, штрихпунктирная — диаграммы рис. 1*б*, пунктирная — диаграммы рис. 1*в*, штриховая — диаграммы рис. 1*г*, сплошная жирная — полный вклад всех диаграмм

ξ качественно сохраняется и для других значений n. При высоких энергиях (малые ξ) только диаграмма рис. 1*а* дает вклад в сечение и величина этого вклада совпадает с результатами работы [10]. Область высоких энергий, рассмотренная в работе [10], определялась условием $\xi \ll 1$. Настоящая работа позволяет определить ее значительно точнее. Как видно на рис. 3, диаграмма рис. 1*а* полностью доминирует при $\xi \lesssim 0.2$ и продолжает доминировать при других ξ. Вклад от диаграмм рис. 1*б* и рис. 1*г*, описывающих взаимодействие в конечном состоянии, становится заметным при $\xi \gtrsim 0.5$. Обращает на себя внимание очень малый вклад от диаграммы рис. 1*в*, являющейся обменной по отношению к диаграмме рис. 1*а*, хотя никакой дополнительной параметрической малости эта диаграмма не содержит. Разумеется, вклады отдельных диаграмм являются калибровочно-зависимыми. Только при учете полного набора из четырех графиков результат становится калибровочно-инвариантным.

На рис. 4 построена $H(n,\xi)$ для $n = 2$ с учетом (сплошная линия) и без учета (пунктирная линия) интерференционных членов, возникающих при возведении в квадрат модуля суммы фейнмановских графиков. Такими членами иногда необоснованно пренебрегают в различных модельных расчетах отдельных вкладов в ионизационные сечения коррелированных процессов (см., например, [18]). Как видно, роль интерференционных членов особенно существенна в области быстрого изменения $H(n,\xi)$. При

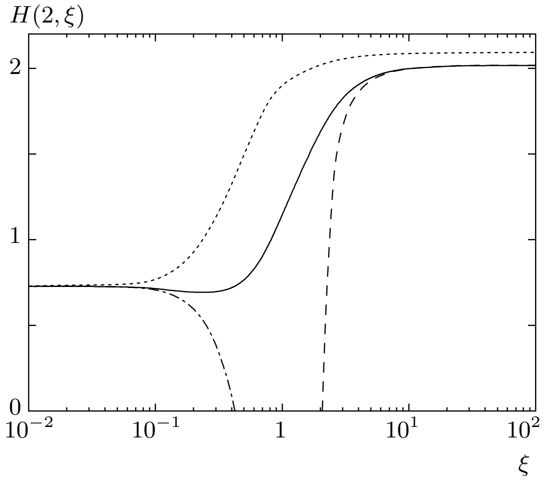

Рис. 4. Функция $H(n,\xi)$ для $n=2$ как когерентная (сплошная линия) и некогерентная (пунктирная линия) суммы вкладов фейнмановских графиков. Аппроксимация по формуле (53) — штриховая линия, (54) — штрихпунктирная линия

малых ξ диаграммы Фейнмана складываются некогерентно, поскольку в этом случае при выбранной нами кулоновской калибровке весь вклад в сечение дает только диаграмма рис. 1*a*. На рис. 4 мы построили также функции $H(n,\xi)$ с использованием разложений (53) и (54). Видно, что низкоэнергетическое поведение сечения хорошо описывается формулой (53) при $\xi \gtrsim 4$, тогда как формула (54) хорошо описывает высокоэнергетическое поведение при $\xi \lesssim 0.2$. В промежуточной области $0.3 \lesssim \xi \lesssim 3$ формулы (53) и (54) непригодны для вычисления сечений. Из сравнения с точным ответом видно, что ряды по параметрам ξ и ξ^{-1} знакопеременные и плохо сходящиеся.

4. СРАВНЕНИЕ С ЭКСПЕРИМЕНТОМ

В экспериментах обычно измеряют сечение ионизации с переходом остаточного иона на всю n-ю оболочку, т. е. величину $R_n = \sum_{l=0}^{n-1} R(nl)$. Соответственно, для сравнения с экспериментом надо знать все парциальные величины $R(nl)$. Известно (см., например, [10]), что при больших энергиях ($\xi \ll 1$) весь вклад в сечение процесса дают переходы только в ns-состояния. В промежуточной области энергий и вблизи порога существенны и другие переходы. Однако, как показано в работе [11], переходами в состояние с $l \geqslant 2$ можно пренебречь. Например, вклад в сечение от переходов в d-состояния составляет не более 5 %, тогда как вклад от p-состояний — порядка 30 %. Поэтому с хорошей точностью можно положить

$$R_n \approx R(ns) + R(np). \tag{57}$$

Детали расчета $R(np)$ в настоящей работе не рассматриваются. Приведем полученные нами численные значения R_n в сравнении с результатами эксперимента для атома He в околопороговой области. Измерения, выполненные в работе [3], по-видимому, наиболее точные. Кроме того, они согласуются с рекомендованными значениями [2]. Следует заметить, что используемый нами метод расчета требует малости параметра $1/Z$, что едва ли выполняется для гелия. Тем не менее, табл. 2 показывает неплохое совпадение с экспериментальными результатами. Для каждой энергии фотона верхняя строчка дает экспериментальный результат (число в скобках указывает экспериментальную погрешность), нижняя – результат нашего расчета.

Поскольку в низшем порядке теории возмущений в качестве энергии связи используется кулоновское значение, которое в случае атома гелия существенно отличается от экспериментального, удобнее сравнивать теорию с экспериментом при одинаковых значениях энергии эжектированного электрона. При заданном значении фотонной энергии ω мы вычисляем избыточную энергию, равную $\omega - I^{+*}_{exp}(n)$. Это есть энергия ионизованного электрона E_p, которая в качестве входного параметра используется в теоретическом расчете. Иначе говоря, безразмерные величины ε_p и ε_γ определяются через E_p. Величина $I^{+*}_{exp}(n)$ есть экспериментальная пороговая энергия процесса, равная

$$I^{+*}_{exp}(n) = I^{+}_{exp} + I(1-n^{-2}). \tag{58}$$

Здесь $I^{+}_{exp} = 24.6$ эВ, $I = m(\alpha Z)^2/2 = 54.4$ эВ.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В нерелятивистском приближении в рамках теории возмущений по межэлектронному взаимодействию получены универсальные для всех Z формулы для сечений σ^{+*}_{ns} фотоионизации гелиеподобных ионов с возбуждением остаточного иона в ns-состояние. Формулы пригодны во всей нерелятивистской области энергий, включая пороговую область. В пределе малых и больших энергий получены разложения сечений соответственно по параметрам ξ^{-1} и ξ. Показано, что при $n > 8$ величина $n^3\sigma^{+*}_{ns}$ практически не зависит от n. Достигнуто разумное согласие с экспериментальными результатами.

Таблица 2. Сравнение эксперимента [3] и теории (данная работа)

ω, эВ	R_2, %	R_3, %	R_4, %	R_5, %	R_6, %
89.5	8.17(4) 6.38	1.51(3) 1.66	0.57(6) 0.69	0.284(28) 0.351	0.168(25) 0.203
100.0	7.63(4) 5.68	1.38(3) 1.43	0.53(5) 0.58	0.264(25) 0.294	0.147(22) 0.169
120.0	6.96(5) 4.83	1.16(3) 1.16	0.41(4) 0.46	0.193(20) 0.231	0.106(20) 0.133
160.0	6.39(10) 3.87	0.96(4) 0.87	0.35(4) 0.33	0.139(20) 0.168	0.075(20) 0.095

Из-за универсального поведения функций $K(n,\xi)$ и $H(n,\xi)$ полученные результаты могут быть применимы не только для гелиеподобных ионов, но также и для произвольных атомных мишеней, удовлетворяющих условиям $Z \gg 1$ и $\alpha Z \ll 1$. При этом рассмотренные нами диаграммы дают главный вклад в сечение, а корреляционные поправки подавлены малым параметром порядка $1/Z$. Процедура учета эффекта экранирования «активных» K-электронов «пассивными» электронами других оболочек была предложена в работе [19] и оказалась пригодной для описания различных ионизационных процессов на основе универсальных скейлингов [19–22].

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 08-02-00460-а).

ЛИТЕРАТУРА

1. S. Svensson, A. Kikas, A. Ausmees et al., J. Phys. B **28**, L293 (1995).
2. J. M. Bizau and F. J. Wuilleumier, J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom. **71**, 205 (1995).
3. R. Wehlitz, I. A. Sellin, O. Hemmers et al., J. Phys. B **30**, L51 (1997).
4. E. P. Kanter, R. W. Dunford, B. Krässig et al., Phys. Rev. Lett. **83**, 508 (1999).
5. E. P. Kanter, I. Ahmad, R. W. Dunford et al., Phys. Rev. A **73**, 022708 (2006).
6. S. Huotari, K. Hämäläinen, R. Diamant et al., Phys. Rev. Lett. **101**, 043001 (2008).
7. R. L. Brown, Phys. Rev. A **1**, 341 (1970).
8. A. Dalgarno and H. R. Sadeghpour, Phys. Rev. A **46**, R3591 (1992).
9. Z. Fan, H. R. Sadeghpour, and A. Dalgarno, Phys. Rev. A **50**, 3174 (1994).
10. М. Я. Амусья, А. И. Михайлов, ЖЭТФ **111**, 862 (1997).
11. E. G. Drukarev, E. Z. Liverts, M. Ya. Amusia et al., Phys. Rev. A **77**, 012715 (2008).
12. A. I. Mikhailov, A. V. Nefiodov, and G. Plunien, J. Phys. B **42**, 231003 (2009).
13. A. I. Mikhailov, I. A. Mikhailov, A. N. Moskalev et al., Phys. Rev. A **69**, 032703 (2004).
14. V. G. Gorshkov, A. I. Mikhailov, and V. S. Polikanov, Nucl. Phys. **55**, 273 (1964).
15. Л. Ф. Витушкин, А. И. Михайлов, Опт. и спектр. **50**, 11 (1981).
16. В. Г. Горшков, В. С. Поликанов, Письма в ЖЭТФ **9**, 464 (1969).
17. В. Б. Берестецкий, Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский, *Квантовая электродинамика*, Наука, Москва (1989), с. 241.
18. J. Hoszowska, A. S. Kheifets, J.-Cl. Dousse et al., Phys. Rev. Lett. **102**, 073006 (2009).
19. A. I. Mikhailov, I. A. Mikhailov, A. V. Nefiodov et al., Письма в ЖЭТФ **78**, 141 (2003).
20. A. I. Mikhailov, A. V. Nefiodov, and G. Plunien, Phys. Lett. A **372**, 4451 (2008).
21. A. I. Mikhailov, A. V. Nefiodov, and G. Plunien, Phys. Lett. A **372**, 5171 (2008).
22. A. I. Mikhailov, A. V. Nefiodov, and G. Plunien, ЖЭТФ **136**, 885 (2009).