

ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

На правах рукописи

Булычев Андрей Андреевич

**ЭЛЕКТРОННАЯ ИМПУЛЬСНАЯ
СПЕКТРОСКОПИЯ ЛЕГКИХ АТОМОВ И
МОЛЕКУЛ В ЭЛЕКТРОМАГНИТНОМ ПОЛЕ**

Специальность: 01.04.02 – Теоретическая физика

Диссертация на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Научные руководители:

д.ф.-м.н., профессор Веницкий Сергей Ильич

д.ф.-м.н. Чулуунбаатар Очбадрах

Дубна – 2015

Оглавление

Введение	3
Глава 1. Теоретические основы ЭИС атомов в переменном электромагнитном поле	14
1.1. Метод ЭИС	14
1.2. ЭИС в поле электромагнитной волны	19
1.3. Эффекты волковских функций	21
1.4. ЭИС атома водорода в лазерном поле	30
Глава 2. ЭИС атома гелия в поле электромагнитной волны	36
2.1. Возмущенные состояния атома и иона гелия	36
2.2. $(e, 2e)$ ионизация-возбуждение в лазерном поле	38
2.3. Основные выводы	45
Глава 3. $(e, 3e)$ ЭИС атома гелия в лазерном поле	48
3.1. Общие определения и основные приближения	48
3.2. Угловые распределения медленного электрона	52
3.3. $(e, 3 - 1e)$ сечения	58
3.4. Основные выводы	60
Глава 4. Двукратная фотоионизация легких молекул	63
4.1. Амплитуда и сечение $(\gamma, 2e)$ процесса	63
4.2. Двукратная фотоионизация молекулы водорода	65
4.3. Двукратная фотоионизация молекулы азота	70
4.4. Основные выводы	79
Заключение	81

Приложение А. Возмущенное $n = 2$ состояние иона He^+ в лазерном поле	83
Приложение Б. Вычисление S -матрицы для $(e, 3e)$ ЭИС атома гелия в лазерном поле	87
Список публикаций по теме диссертации	94
Список литературы	96

Введение

Актуальность работы. Электронная импульсная спектроскопия (ЭИС) представляет собой хорошо известный метод изучения электронной структуры атомов, молекул, кластеров и тонких пленок. В основе ЭИС лежит процесс квазиупругого выбивания электрона из мишени быстрым падающим электроном. Квазиупругая реакция характеризуется большой передачей импульса мишени, близкими по величине энергиями обоих быстрых электронов в конце реакции и близким к 90° углом между ними. При этом ион-остаток может находиться в основном или в возбуждённом состоянии (т.н. $(e, 2e)$ ЭИС), а также испустить медленный электрон ($(e, 3e)$ ЭИС). В конечном состоянии измеряются на совпадение энергии и углы вылета пары быстрых электронов, что позволяет на базе законов сохранения энергии и импульса определить энергию связи и импульсное распределение электрона в мишени. Таким образом, данный метод позволяет “заглянуть” вглубь мишени и изучить структуру её волновой функции. Наиболее полно эта методика представлена в обзорных работах [10–12], а также в монографии [13].

На сегодняшний день одним из наиболее активно развивающихся направлений в атомной и молекулярной физике является исследование процессов взаимодействия электромагнитного, в частности, синхротронного и лазерного, излучения с веществом. Электромагнитное излучение модифицирует как электронные состояния облучаемой мишени (вплоть до ионизации одного или более электронов), так и динамику различных процессов взаимодействия заряженных частиц (электронов, ионов) с мишенью. Недавно были проведены первые эксперименты по электронной ударной ионизации атомной мишени в лазерном поле с параметром Келдыша $\gamma \gg 1$, поставленные в режиме малой передачи импульса [14]. В настоящее время ведется подготовка экспериментов в кинематическом режиме большой передачи импульса и энергии, отвечающему методу ЭИС [15]. В этой связи развитие теории ЭИС в электромагнитном поле становится особенно ак-

туальным.

В диссертационной работе проводится теоретическое рассмотрение квазиупругих процессов в присутствии электромагнитного поля. Разработаны новые теоретические модели, с помощью которых выполнен анализ как $(e, 2e)$, так и $(e, 3e)$ реакций. Последний случай наиболее интересен с точки зрения исследования электрон-электронных корреляций в мишени. Как известно, альтернативным к $(e, 3e)$ методом является двукратная фотоионизация или т.н. $(\gamma, 2e)$ спектроскопия. Принципиальная разница между двумя методами заключается в том, что в $(e, 3e)$ процессе в отличие от $(\gamma, 2e)$ ионизации мишень поглощает не реальный, а виртуальный гамма-квант с продольной поляризацией (в нерелятивистском приближении), который испускается быстрым налетающим электроном. Таким образом, извлекаемая с помощью этих двух методов информация об электрон-электронных корреляциях в мишени является взаимодополняющей. В настоящей диссертации также проводится теоретическое рассмотрение двукратной фотоионизации молекул водорода и азота, сформулированы новые теоретические модели с коррелированными кулоновскими двухцентровыми функциями ионизированных электронов, методы расчета сечений и выполнен теоретический анализ, результаты которого были использованы при планировании и интерпретации данных недавних экспериментов.

Теория $(e, 2e)$ процессов на атомных мишенях в электромагнитном поле начала развиваться в 70-х годах прошлого века. При этом рассматривался кинематический режим малой передачи импульса, а в качестве мишеней выбирались атомы водорода и гелия. Было установлено, что дифференциальные сечения, отвечающие фиксированному суммарному числу фотонов, которыми обмениваются столкновительная система частиц и поле, сильно зависят от характеристик последнего (интенсивность, частота и поляризация). Общая теория метода $(e, 2e)$ ЭИС в электромагнитном поле была сформулирована только недавно в работе [16], где был рассмотрен простейший случай атомарной мишени – атом водорода. Влияние электромагнитного поля на быстрые падающий,

рассеянный и выбитый электроны учитывалось с помощью функций Гордона-Волкова, которые при “выключении” поля переходят в плоские волны. Однако, проблема того, как функции Гордона-Волкова искажают информацию об импульсном распределении электрона в атоме водорода в электромагнитном поле не обсуждалась. Вместе с тем, этот вопрос является важным с точки зрения определения потенциала метода $(e, 2e)$ ЭИС для исследования влияния электромагнитного поля на электронную структуру мишени. Еще одной важной проблемой является исследование чувствительности метода $(e, 2e)$ ЭИС к электрон-электронным корреляциям в мишени в электромагнитном поле, которые, очевидно, отсутствуют в случае атома водорода.

В случае многоэлектронных атомов помимо процессов однократной ионизации становятся возможными процессы многократной ионизации, например, двукратной. Как известно, процессы двукратной ионизации особенно информативны в отношении характера электрон-электронных корреляций в мишени. Так, например, первые ЭИС эксперименты по двукратной ионизации, поставленные на атоме гелия в Университете Тохоку (г. Сендай, Япония) [17, 18], продемонстрировали необходимость аккуратного теоретического описания электрон-электронных корреляций для анализа и интерпретации экспериментальных данных. Поскольку в настоящее время в Университете Тохоку ведутся работы по созданию установки, в которой ЭИС спектрометр будет совмещен с лазерной системой, возникает необходимость разработки теории в том числе $(e, 3e)$ ЭИС процессов на атомах в лазерном поле. О важности и сложности данной задачи говорит тот факт, что теория процессов двукратной ионизации электронным ударом в электромагнитном поле ранее не рассматривалась в литературе.

Наряду с процессами ионизации электронным ударом для изучения электрон-электронных корреляций могут также использоваться процессы фотоионизации, например двукратной фотоионизации или $(\gamma, 2e)$ ионизации. В литературе детально описаны $(\gamma, 2e)$ процессы на атомарных мишенях – благородных

газах, особенно гелии, однако более сложные объекты исследованы гораздо хуже. Несмотря на то, что детектирование двух ионизованных электронов от молекулярной мишени не намного сложнее, чем от атомарной, среди двухатомных молекул до недавнего времени экспериментально были изучены только $(\gamma, 2e)$ процессы на молекулах H_2 и D_2 . Данные о двукратной фотоионизации даже таких широко распространенных газов как N_2 и O_2 отсутствовали в литературе, несмотря на интерес к ним со стороны астрофизики и физики плазмы. Отчасти это объясняется отсутствием теоретических исследований подобных процессов – сложности связаны как с построением волновых функций основного и возбужденных состояний молекулы, так и с описанием испущенной фотоэлектронной пары. Однако если для описания основного состояния разработаны мощные приближенные методы, то динамика двух конечных фотоэлектронов в поле нескольких положительно заряженных центров остается малоисследованной задачей.

Процессы ионизации двухатомных молекул также позволяют наблюдать эффекты двухцентральной интерференции в распределении ионизованных электронов. Для этого необходимо знать направление межядерной оси молекулы в момент ионизации. Оно может быть определено по углам разлета двух ионов-остатков, если при рассеянии происходит диссоциация молекулярного иона. Подобные исследования проводились в случае $(e, 2e)$ ионизации молекул водорода [19], однако $(\gamma, 2e)$ процессы также могут эффективно использоваться для этих целей. Так, например, основное состояние иона азота N_2^+ метастабильно и его энергия выше, чем энергия двух разделенных $\text{N}^+(\text{}^3\text{P})$ ионов. Этот факт будет использован для постановки планируемого эксперимента по двукратной фотоионизации с определением направления межядерной оси молекулы. Таким образом, вопрос о теоретическом предсказании, анализе и интерпретации результатов $(\gamma, 2e)$ экспериментов для молекулярных квантовых систем является одной из важных задач современной квантовой теории молекул.

Актуальность представленных в диссертации исследований обусловлена

потребностями российских и международных научных программ и проектов. Исследования выполнялись автором в соответствии с научно-тематическим планом научно-исследовательских работ ОИЯИ и поддерживались грантами РФФИ («Разработка алгоритмов и математическое моделирование динамики атомно-молекулярных и квантоворазмерных систем под действием лазерных импульсов, налетающих частиц и электромагнитных полей», номер проекта 14-01-00420а).

Цель диссертационной работы.

Разработка теоретических моделей, методов расчета и их применение для теоретического анализа и интерпретации данных экспериментов по электронной ударной ионизации атомов в электромагнитном поле в кинематике квазиупругого удара и двукратной фотоионизации двухатомных молекул.

Достижение цели осуществляется решением следующих задач:

- исследование роли влияния электромагнитного поля на состояния (угловые распределения) быстрых электронов метода ЭИС;
- исследование чувствительности метода $(e, 2e)$ ЭИС в присутствии лазерного поля к волновой функции основного состояния мишени на примере атома гелия;
- разработка теории метода $(e, 3e)$ ЭИС в присутствии лазерного поля и исследование чувствительности этого метода к характеру электрон-электронных корреляций в мишени на примере атома гелия;
- изучение влияния межэлектронных корреляций в волновой функции мишени на дифференциальное сечение рассеяния процессов двукратной фотоионизации на примере молекул водорода и азота.

Научная новизна. Впервые выполнен теоретический анализ влияния лазерного поля на угловые распределения быстрых электронов в квазиупругом $(e, 2e)$ процессе, и показано, что даже малоинтенсивное и низкочастотное (по

атомным масштабам) электромагнитное поле существенно модифицирует эти распределения. Показано, что приближение плоских волн для описания быстрых электронов (с энергией кэВ и выше) в методе ЭИС в присутствии электромагнитного поля является недостаточным и в теоретических расчетах необходимо использовать функции Гордона-Волкова.

Проведено теоретическое исследование чувствительности метода ЭИС в присутствии лазерного поля к пробной волновой функции основного состояния атома гелия. Показано, что, когда конечный ион остается в возбужденном состоянии, чувствительность сечения к модели электрон-электронных корреляций в гелии усиливается по сравнению со случаем отсутствия поля. Для возбужденного иона проявляются различия даже между сильнокоррелированными функциями, которые не наблюдаются в отсутствие поля.

Впервые проведен теоретический анализ процесса двукратной ионизации электронным ударом атомной мишени в лазерном поле. Исследована чувствительность метода $(e, 3e)$ ЭИС в присутствии лазерного поля к волновой функции основного состояния атома гелия. Показано, что угловое распределение медленного испущенного электрона метода $(e, 3e)$ ЭИС в лазерном поле проявляет сильную чувствительность к модели электрон-электронных корреляций в гелии в отличие от случая отсутствия лазерного поля.

Проведен расчет процессов двукратной фотоионизации двухатомных молекул водорода и азота для описания угловых спектров двух медленных испущенных электронов. Показана необходимость учета электрон-электронных корреляций в пробной волновой функции начального, а также конечного состояния молекулы для интерпретации полных экспериментальных дифференциальных сечений двукратной фотоионизации. Получено хорошее согласие с результатами соответствующих недавних экспериментов.

Методы исследований. В работе используются методы квантовой теории столкновений, нестационарной теории возмущений, квантовой электродинамики, в том числе представление Фарри и волковские решения для состояний

заряженной частицы в поле электромагнитной волны.

Обоснованность и достоверность результатов. Полученные в диссертации результаты достоверны за счет использования строгих и апробированных методов квантовой теории столкновений, квантовой электродинамики, а также высокой степени автоматизации расчетов с применением современных компьютерных систем символьных вычислений. Обоснованность результатов подтверждается сопоставлением с результатами теоретических расчетов других авторов и результатами экспериментов.

Практическая значимость. Диссертационная работа является теоретическим и прикладным исследованием. Сформулированные теоретические модели позволяют описывать процессы электронной ударной однократной и двукратной ионизации атомов в электромагнитном поле, а также двукратной фотоионизации двухатомных молекул. Построенные интегральные представления амплитуд процессов рассеяния могут использоваться для проведения расчетов другими исследователями. Кроме того, разработанные численно-аналитические алгоритмы и программы применимы для исследования других реакций со схожей кинематикой. Разработаны алгоритмы расчетов многократных (вплоть до шестикратных) интегралов с кулоновскими функциями непрерывного спектра.

Развитые теоретические методы и подходы используются в планировании экспериментов ЭИС в лазерном поле в Университете Тохоку (г. Сендай, Япония) и для интерпретации данных экспериментов по двукратной фотоионизации молекул водорода и азота, выполненных во Франкфуртском университете (Германия) и в CNR-IMIP (г. Бари, Италия).

Результаты, представленные в диссертации, найдут и частично уже нашли применение в теоретических и экспериментальных исследованиях свойств атомов, молекул, кластеров и тонких пленок с помощью реакций ионизации электронным ударом и двукратной фотоионизации, которые проводятся в российских и зарубежных научных центрах, например, СГУ (г. Саратов), ИАТЭ НИЯУ МИФИ (г. Обнинск), НИИЯФ МГУ (г. Москва), РУДН (г. Москва), ТО-

ГУ (г. Хабаровск), ОИЯИ (г. Дубна), НИЦ Курчатовский институт (г. Москва), в Университете Тохоку (г. Сендай, Япония), Университете Лотарингии (Франция), CNR-IMIP (г. Бари, Италия).

На защиту выносятся следующие основные результаты:

- Показано, что даже низкочастотное и малоинтенсивное по атомным масштабам электромагнитное поле может существенно модифицировать состояния быстрых электронов (с энергией кэВ и выше) в методе ЭИС; сформулировано условие, при котором необходимо использовать приближение Гордона-Волкова вместо традиционного использования базиса плоских волн в методе ЭИС.
- Показано, что, когда конечный ион остается в возбужденном состоянии, чувствительность сечения к модели электрон-электронных корреляций в гелии усиливается по сравнению со случаем отсутствия поля. Для возбужденного иона проявляются различия даже между сильнокоррелированными пробными функциями атома, которые не наблюдаются в отсутствие поля.
- В присутствии лазерного поля угловое распределение медленного электрона ($e, 3e$) процесса оказывается сильно зависящим от модели электрон-электронных корреляций в атоме гелия в отличие от случая отсутствия поля.
- Показано, что дифференциальные сечения метода ($e, 3 - 1e$) ЭИС в низкочастотном малоинтенсивном электромагнитном поле практически совпадает с дифференциальным сечением в отсутствие поля.
- Показано, что электронные корреляции в модели основного состояния двухатомных молекул проявляются в угловом распределении испущенных электронов в процессе двукратной фотоионизации.

- В рамках модели коррелированных двухцентровых кулоновских функций для двухэлектронных состояний континуума получено хорошее согласие с результатами недавних экспериментов по двукратной фотоионизации молекул водорода и азота.

Апробация работы проводилась на следующих научных конференциях:

- International Conference on Photonic, Electronic, and Atomic Collisions 2011 (г. Белфаст, Великобритания).
- International Symposium on $(e, 2e)$, Double Photo-ionization and Related Topics & 16th International Symposium on Polarization & Correlation in Electronic & Atomic Collisions 2011 (г. Дублин, Ирландия).
- International Conference on Many Particle Spectroscopy of Atoms, Molecules, Clusters and Surfaces 2012 (г. Берлин, Германия).
- Saratov Fall Meeting, Laser Physics and Photonics, 2012 (г. Саратов, Россия).
- International Conference on Photonic, Electronic, and Atomic Collisions 2013 (г. Ланчжоу, Китай).
- International Symposium on $(e, 2e)$, Double Photo-ionization and Related Topics & 17th International Symposium on Polarization & Correlation in Electronic & Atomic Collisions 2013 (г. Хэфэй, Китай).
- Mathematical Modeling and Computational Physics 2013 (г. Дубна, Россия).
- The 5th International Conference on Contemporary Physics 2013, Улан-Батор, Монголия.
- Saratov Fall Meeting, Laser Physics and Photonics, 2014 (г. Саратов, Россия).
- The First STEPS Symposium on Photon Science 2015 (г. Токио, Япония).

Публикации. По материалам диссертационной работы подготовлено 9 публикаций в изданиях, рекомендованных ВАК РФ для публикации основных результатов диссертаций: 5 в реферируемых журналах [1–5] и 4 в сборниках трудов конференций [6–9].

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения и списка литературы. Объем диссертации – 104 страницы, в т.ч. 25 рисунков и 2 таблицы. Список литературы включает 83 наименования.

Личный вклад автора. Личный вклад соискателя в результаты является определяющим. Автор, работая с сотрудниками ОИЯИ, физического факультета МГУ, НИИЯФ МГУ, Университета Тохоку, Университета Лотарингии самостоятельно сформулировал теоретические модели и вывел аналитические представления амплитуд рассеяния, разработал алгоритмы и программы, по которым проводились численные расчеты, выполнил анализ теоретических результатов.

Основное содержание работы изложено в четырех главах.

Глава 1 посвящена изложению основ теории ЭИС атомов в переменном электромагнитном поле. Описаны базовые приближения и представлены в интегральном виде все основные формулы, необходимые для разработки теоретических моделей и численно-аналитических схем. Анализируется роль искажения состояний быстрых электронов в поле электромагнитной плоской волны в случаях ЭИС модельного атома с потенциалом усечённого гармонического осциллятора и ЭИС атома водорода. Основные результаты изложены в работах [1, 6, 7].

В главе 2 проводится теоретическое рассмотрение ЭИС атома гелия в электромагнитном поле. В рамках нестационарной теории возмущений сформулированы основные приближения для волновых функций атома He и иона He⁺ в лазерном поле. Выполнены аналитические и численные расчеты для N -фотонных дифференциальных сечений в случаях, когда ион He⁺ остается в основном или

первом возбужденном состояниях. Анализируется влияние различных моделей электрон-электронных корреляций в атоме гелия на дифференциальные сечения. Основные результаты изложены в работах [4, 8].

Глава 3 посвящена теоретическому анализу процесса $(e, 3e)$ ЭИС на атоме гелия в электромагнитном поле. Сформулирована общая теоретическая модель этого метода. Исследована зависимость углового распределения медленного испущенного электрона от характера электрон-электронных корреляций в атоме гелия. Также рассмотрен $(e, 3 - 1e)$ ЭИС процесс на атоме гелия в лазерном поле, т.е. когда медленный испущенный электрон не детектируется, и установлена общая закономерность поведения дифференциальных сечений, отвечающих данному методу. Основные результаты изложены в работах [5, 9].

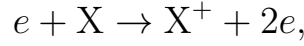
Глава 4 посвящена анализу $(\gamma, 2e)$ процессов на молекулах азота и водорода. Описана общая теория данных процессов. Рассматривается влияние модели электрон-электронных корреляций в начальном состоянии мишени-молекулы на дифференциальное сечение рассеяния. В рамках модели коррелированных двухцентровых кулоновских функций для двухэлектронных состояний континуума получено хорошее согласие с результатами недавних экспериментов по двукратной фотоионизации молекул водорода и азота. Основные результаты изложены в работах [2, 3].

Глава 1

Теоретические основы ЭИС атомов в переменном электромагнитном поле

1.1. Метод ЭИС

Прежде чем кратко сформулировать принципы ЭИС атомов, необходимо напомнить основные формулы нерелятивистской теории однократной ионизации атома налетающим электроном (т.н. $(e, 2e)$ процесс, см. рис. 1.1):



при высокой энергии падающего электрона ($\gtrsim 1$ кэВ) и большой передаче импульса испущенному (выбитому) электрону. Обозначим импульсы падающего, рассеянного и испущенного электронов через \mathbf{p}_0 , \mathbf{p}_s и \mathbf{p}_e соответственно, а их энергии через E_0 , E_s и E_e . Переданный импульс равен $\mathbf{Q} = \mathbf{p}_0 - \mathbf{p}_s$. Начальное состояние атома X и конечное состояние иона X^+ характеризуются волновыми функциями Φ_i и Φ_f и соответствующими энергиями \mathcal{E}_i и \mathcal{E}_f . Поскольку масса атомного ядра M_X очень большая в сравнении с электронной массой m_e , его можно считать неподвижным в лабораторной системе. При этом удобно связать центр системы координат с ядром.

Используя здесь и далее атомные единицы (а.е. или а.у. в англоязычной литературе, $e = \hbar = m_e = 1$), запишем полностью дифференциальное сечение (FDCS — fully differential cross section), в котором содержится наиболее детальная информация о процессе рассеяния

$$\frac{d^4\sigma}{dE_s d\Omega_s dE_e d\Omega_e} = \frac{p_e p_s}{(2\pi)^5 p_0} \left(\frac{1}{4} |T_s + T_e|^2 + \frac{3}{4} |T_s - T_e|^2 \right) \times \delta(E_0 + \mathcal{E}_i - E_s - E_e - \mathcal{E}_f). \quad (1.1)$$

Здесь направления импульсов конечных электронов задаются телесными углами Ω_s и Ω_e . Амплитуда T_s описывает прямой процесс, когда импульс рассе-

янного электрона равен \mathbf{p}_s , тогда как амплитуда T_e соответствует обменному процессу, когда импульс рассеянного электрона равен \mathbf{p}_e . При этом амплитуда, отвечающая захвату падающего электрона с испусканием двух атомарных электронов с импульсами \mathbf{p}_s и \mathbf{p}_e , пренебрежимо мала в условиях рассматриваемого кинематического режима и не учитывается в (1.1). В случае сложных атомов в (1.1) предполагается усреднение по начальным состояниям атома, если они точно не определены, и суммирование по конечным состояниям иона, вырожденным по энергии. Интегрируя сечение FDCS, например, по энергии испущенного электрона E_e , получаем трехкратное дифференциальное сечение (TDCS – triple differential cross section)

$$\frac{d^3\sigma}{dE_s d\Omega_s d\Omega_e} = \frac{p_e p_s}{(2\pi)^5 p_0} \left(\frac{1}{4} |T_s + T_e|^2 + \frac{3}{4} |T_s - T_e|^2 \right). \quad (1.2)$$

Амплитуда вычисляется по формуле (далее для определенности будем рассматривать “прямую” амплитуду T_s , опуская нижний индекс и замечая, что “обменная” амплитуда T_e получается из T_s заменой импульсных переменных $\mathbf{p}_s \leftrightarrow \mathbf{p}_e$)

$$T = \langle \Psi_f^-(\mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e) | V_i | \mathbf{p}_0 \Phi_i \rangle, \quad (1.3)$$

где V_i – полный потенциал взаимодействия падающего электрона с атомом.

Следует отметить, что выражение (1.3) справедливо лишь в случае нейтрального атома, когда начальное асимптотическое состояние (так называемая ин-асимптота [20]) сводится к

$$|\mathbf{p}_0 \Phi_i \rangle \equiv |\mathbf{p}_0 \rangle \otimes |\Phi_i \rangle$$

($|\mathbf{p}_0 \rangle$ – плоская волна падающего электрона) и удовлетворяет уравнению Шредингера

$$(H - V_i - E) |\mathbf{p}_0 \Phi_i \rangle = 0,$$

где H и $E = E_s + E_e + \mathcal{E}_f = E_0 + \mathcal{E}_i$ – полные гамильтониан и энергия сталкивающейся системы электрон–атом. Состояние рассеяния в конечном канале

$|\Psi_f^-(\mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e)\rangle$ учитывает все взаимодействия между конечными фрагментами. Оно удовлетворяет уравнению Шредингера

$$(H - E)|\Psi_f^-(\mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e)\rangle = 0$$

и имеет правильную кулоновскую асимптотику, чья специфика обусловлена дальнедействующим характером потенциалов между конечными фрагментами.

Перейдем теперь к краткой формулировке метода ЭИС. В основе метода ЭИС лежит процесс неупругого выбивания электрона из мишени быстрым падающим электроном. Такая кинематика реализуется в условиях порога Бете, когда переданная энергия (за вычетом энергии связи) и импульс “уносятся” испущенным из мишени электроном. Ключевым является требование высокой (как правило, несколько кэВ) энергии налетающего, рассеянного и испущенного электронов. В этом случае можно считать, что налетающий электрон взаимодействует только с одним электроном мишени – тем, который выбивается, – и пренебречь влиянием остальных частиц мишени на процесс рассеяния (т.н. бинарное приближение).

В теории ЭИС важную роль играет так называемый импульс отдачи $\mathbf{q} = \mathbf{p}_0 - \mathbf{p}_s - \mathbf{p}_e$, который в данном случае напрямую связан с импульсом конечного иона $\mathbf{k}_{ion} = \mathbf{q}$. Наиболее часто в экспериментах используют симметричную геометрию, в которой $E_s = E_e \simeq E_0/2$ и $\theta_s = \theta_e = 45^\circ$, где $\theta_{s(e)}$ – полярный угол рассеянного (испущенного) электрона относительно оси, направленной вдоль импульса падающего электрона \mathbf{p}_0 . Импульс \mathbf{q} изменяется посредством сканирования азимутального угла $\Delta\phi$, т.е. начальный импульс \mathbf{p}_0 располагается вне плоскости импульсов \mathbf{p}_s и \mathbf{p}_e (см. рис. 1.1). При данной геометрии из законов сохранения энергии и импульса следует, что значение $q = 0$ (порог Бете) никогда не достигается, и минимальное значение импульса отдачи при больших начальных энергиях $q_{min} \approx I/p_0$ ($I = \mathcal{E}_f - \mathcal{E}_i$ – потенциал ионизации) реализуется, когда все импульсы располагаются в одной плоскости.

Аппроксимируя в формуле (1.3) состояния быстрых рассеянного и испу-

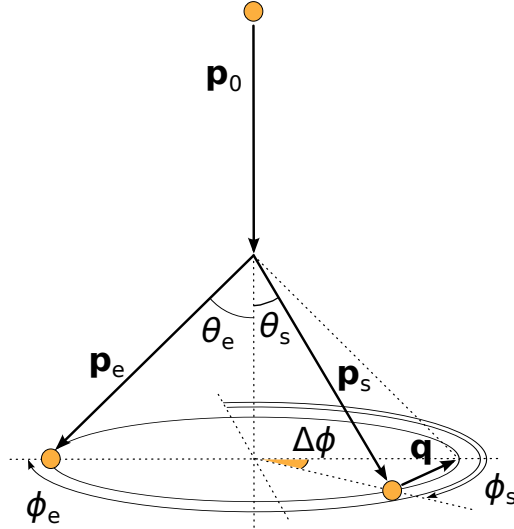


Рис. 1.1. Геометрия $(e, 2e)$ процесса.

щенного электронов плоскими волнами, т.е.

$$|\Psi_f^-(\mathbf{p}_s, \mathbf{p}_e)\rangle \approx |\mathbf{p}_s\rangle \otimes |\mathbf{p}_e\rangle \otimes |\Phi_f\rangle,$$

TDCS рассматриваемого процесса в борновском приближении плоских волн (PWBA – plane wave Born approximation) можно записать в виде [13]

$$\frac{d^3\sigma}{dE_s d\Omega_s d\Omega_e} = \frac{p_s p_e}{(2\pi)^5 p_0} \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{ee} |\mathcal{F}_{if}(-\mathbf{q})|^2, \quad (1.4)$$

где $\mathcal{F}_{if}(-\mathbf{q}) = \langle -\mathbf{q} | \otimes \langle \Phi_f | \Phi_i \rangle$ – неупругий формфактор перехода [10] (или структурная функция [13]), который в одноэлектронном приближении сводится с точностью до константы к импульсному распределению $|\varphi(-\mathbf{q})|^2$ на электронной орбитали, из которой произошла ионизация. В формуле (1.4)

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{ee} = \frac{(4\pi)^2}{|\mathbf{p}_0 - \mathbf{p}_s|^4} \left(1 + \frac{|\mathbf{p}_0 - \mathbf{p}_s|^4}{|\mathbf{p}_0 - \mathbf{p}_e|^4} - \frac{|\mathbf{p}_0 - \mathbf{p}_s|^2}{|\mathbf{p}_0 - \mathbf{p}_e|^2} \right) \quad (1.5)$$

представляет собой моттовское сечение электрон-электронного рассеяния, которое учитывает обменные эффекты. В случае геометрии, изображенной на рис. 1.1, переданный импульс $Q = |\mathbf{p}_0 - \mathbf{p}_s| = |\mathbf{p}_0 - \mathbf{p}_e|$ фиксирован, сечение (1.4) как функция кинематических переменных зависит только от импульса \mathbf{q} и по этой причине его часто называют импульсным профилем (momentum profile [13]).

Теория ЭИС базируется на предположении о применимости PWBA. С формальной точки зрения, относительный вклад высших борновских членов в амплитуду “вымирает” с ростом энергии падающего электрона как $\sim E_0^{-1/2}$, и, следовательно, для больших начальных энергий E_0 можно ожидать доминирующего вклада PWBA. Однако, на энергетической поверхности, когда выполняется закон сохранения энергии и энергия во входном канале реакции равна ее значению в выходном, высшие матричные элементы плосковолнового борновского ряда представлены расходящимися интегралами [21].

Причина этого явления хорошо известна: стандартный формализм многоканальной теории рассеяния, в основе которого лежат интегральные уравнения Липшмана-Швингера (ЛШ), либо интегральные уравнения резольвентного типа (Фаддеева, Вейнберга-ван Винтера и др.), непосредственно неприменим к системам заряженных частиц. Это связано с тем, что в данных уравнениях не выделены так называемые кулоновские сингулярности (исключением являются уравнения Веселовой [22, 23], определяющие трехчастичную амплитуду при энергиях ниже порога развала, в которых явно выделены двухчастичные кулоновские сингулярности). Существование таких сингулярностей предсказывается стандартной теорией кулоновского рассеяния [24–27] и, на самом деле, следует из общей теории инфракрасных расходимостей в КЭД [28, 29]. Однако выделение кулоновских сингулярностей, отвечающих развалу системы на три и более фрагментов, в уравнениях резольвентного типа осуществить до последнего времени не удалось. Попытка выделить трехчастичную кулоновскую сингулярность в уравнениях Фаддеева, предпринятая в [30, 31], привела к однородному уравнению для коэффициента перед этой сингулярностью. Единственное, что удалось сделать, — это установить связь между фаддеевскими компонентами амплитуды развала.

Чтобы избежать вышеупомянутых проблем, для описания динамики систем заряженных частиц в работах Шаблова и др. [11, 32–35] были сформулированы модифицированные ЛШ уравнения для волновых операторов кулонов-

ского рассеяния, свободные члены которых адекватно описывают искажение траекторий сталкивающихся частиц. Такой подход, в частности, устанавливает соотношение между физической амплитудой процесса и нефизической, расходящейся на энергетической поверхности амплитудой, которая следует из стандартного ЛШ формализма для случая короткодействующих потенциалов. На его основе становится возможным развитие теории перенормировки плоскотоволнового борновского ряда для квазиупругой $(e, 2e)$ реакции с целью устранения его расходимости и оценки применимости PWBA. Результаты теоретического анализа [11, 36], выполненного на базе данного подхода, а также сопоставление теоретических расчетов с экспериментальными данными [13, 17, 37] позволяют сформулировать важный вывод, что энергия 1 кэВ на улетающий электрон достаточна, по крайней мере для атомов водорода и гелия, чтобы говорить о подавляющем доминировании приближения PWBA, которое несет основную информацию о волновой функции мишени, вплоть до $q \approx 2$.

1.2. ЭИС в поле электромагнитной волны

Рассмотрим ЭИС процесс на атомной мишени в поле линейно поляризованной плоской электромагнитной волны, предполагая, что поле включается и выключается адиабатически при $t \rightarrow \mp\infty$, соответственно. Электрическая компонента $\mathbf{F}(t)$ и векторный потенциал $\mathbf{A}(t)$ имеют вид

$$\mathbf{F}(t) = \mathbf{F}_0 \cos \omega t, \quad \mathbf{A}(t) = -\frac{c}{\omega} \mathbf{F}_0 \sin \omega t, \quad (1.6)$$

где \mathbf{F}_0 — амплитуда поля, а ω — его частота. Пространственной зависимостью поля (1.6) пренебрегаем, поскольку далее рассматривается случай инфракрасного лазера, чья длина волны на несколько порядков превышает характерные атомные размеры. Величина электрического поля предполагается малой по сравнению с внутриатомным полем F_a ($F_0/F_a \lesssim 0.01$). Как отмечалось во введении, в диссертационной работе исследуется случай лазерного поля с пара-

метром Келдыша $\gamma \gg 1$. Это означает, что эффект ионизации, производимый полем, обусловлен многофотонными процессами и, в силу слабости рассматриваемого поля, пренебрежимо мал на фоне $(e, 2e)$ ионизации. Данное условие также необходимо, чтобы в ЭИС эксперименте атомная мишень “не разрушалась” под воздействием поля до того, как произойдет $(e, 2e)$ столкновение.

В случае отсутствия поля, который обсуждался в предыдущем разделе, S -матричный элемент, отвечающий ЭИС процессу на атомной мишени, дается согласно PWBA следующим выражением:

$$S_{fi} = 2\pi i \langle \mathbf{p}_s \mathbf{p}_e \Phi_f | v_{ee} | \mathbf{p}_0 \Phi_i \rangle \delta(E_s + E_e + \mathcal{E}_f - E_0 - \mathcal{E}_i), \quad (1.7)$$

где v_{ee} — кулоновское взаимодействие между налетающим и выбиваемым электроном. Для вычисления S -матричного элемента в присутствии поля (1.6), заметим, что оно не меняет электрон-электронного потенциала v_{ee} , но влияет на состояния фрагментов в начальном и конечном каналах $(e, 2e)$ реакции. Используя представление Фарри [38, 39], матричный элемент (1.7) с учетом указанного влияния внешнего поля (1.6) можно представить в виде [16]

$$S_{fi} = -i \int_{-\infty}^{\infty} dt \langle \chi_{\mathbf{p}_s}(t) \chi_{\mathbf{p}_e}(t) \Psi_f(t) | v_{ee} | \chi_{\mathbf{p}_0}(t) \Psi_i(t) \rangle. \quad (1.8)$$

Состояния падающего, рассеянного и выбитого электронов представляют собой т.н. нерелятивистские волковские функции, которые являются решениями нестационарного уравнения Шредингера для электрона в поле монохроматической плоской волны [40]:

$$\chi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) = \exp \left\{ i \left[\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - Et - \alpha_{\mathbf{p}} \cos \omega t - \zeta(t) + \frac{1}{c} \mathbf{A}(t) \cdot \mathbf{r} \right] \right\}, \quad (1.9)$$

$$E = \frac{p^2}{2}, \quad \alpha_{\mathbf{p}} = \frac{\mathbf{p} \cdot \mathbf{F}_0}{\omega^2}, \quad \zeta(t) = \frac{1}{2c^2} \int_{-\infty}^t A^2(t') dt'.$$

При отсутствии поля волковские функции переходят в плоские волны

$$\chi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) \rightarrow \exp[i(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - Et)]. \quad (1.10)$$

Следуя теореме Флоке [41], начальное и конечное состояния мишени в поле (1.6) можно представить как [42]

$$|\Psi_{i,f}(t)\rangle = e^{-iE_{i,f}t} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-in\omega t} |\psi_{i,f}^{(n)}(E_{i,f})\rangle, \quad (1.11)$$

где $E_{i,f}$ — квазиэнергия, смещенная относительно энергии невозмущенного состояния $\mathcal{E}_{i,f}$ на штарковский сдвиг в переменном электрическом поле $\Delta_{i,f}$ [43], а кет-вектора $|\psi_{i,f}^{(n)}(E_{i,f})\rangle$ не зависят от времени.

Согласно (1.8), (1.9) и (1.11), полностью дифференциальное сечение облучаемой ($e, 2e$) реакции можно представить в виде суммы по процессам с различным числом поглощенных ($N < 0$) или испущенных ($N > 0$) фотонов:

$$\frac{d^4\sigma}{dE_s dE_e d\Omega_s d\Omega_e} = \sum_{N=-\infty}^{\infty} \frac{d^3\sigma_N}{dE_s d\Omega_s d\Omega_e} \delta(E_s + E_e + E_f - E_0 - E_i + U_p + N\omega), \quad (1.12)$$

где $U_p = F_0^2/4\omega^2$ — пондеромоторный потенциал, а сечение для процесса с определенным числом фотонов N можно привести к форме, аналогичной (1.4),

$$\frac{d^3\sigma_N}{dE_s d\Omega_s d\Omega_e} = \frac{p_s p_e}{(2\pi)^3 p_0} \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{ee} |\mathcal{F}_N(\mathbf{q})|^2. \quad (1.13)$$

Здесь

$$\mathcal{F}_N(\mathbf{q}) = \frac{\omega}{2\pi} \int_{-\pi/\omega}^{\pi/\omega} dt e^{i(E_i - E_f - \frac{q^2}{2} - U_p - N\omega)t} \langle \chi_{\mathbf{q}}(t) \Psi_f(t) | \Psi_i(t) \rangle \quad (1.14)$$

— амплитуда так называемого N -фотонного импульсного профиля.

Формулы (1.12), (1.13) и (1.14) являются базовыми для теоретических расчетов ЭИС процессов на атомах в лазерном поле.

1.3. Эффекты волковских функций

Резюмируя предыдущий раздел, основные положения теории ЭИС в лазерном поле можно свести к следующему: 1) борновское приближение по элек-

трон-электронному взаимодействию и 2) волковские функции для описания состояний быстрых электронов в континууме. В работе [16] на примере атома водорода было показано, что даже слабое по атомным масштабам поле (интенсивность $I = 4 \cdot 10^{12}$ Вт/см², частота $\omega = 1.17$ эВ) может существенно исказить вид дифференциального сечения рассеяния по сравнению с бесполевым случаем. Однако в ней не обсуждалось, насколько этот эффект обусловлен влиянием лазерного поля на электроны в континууме. На первый взгляд, влияние поля с амплитудой $F_0 \lesssim 0.01$ а.е. и частотой $\omega \sim 1$ эВ на электроны с 1-2 кэВ энергиями не должно быть сильным, и поэтому в качестве асимптотических состояний можно ограничиться плоскими волнами вместо волковских функций. Данный раздел посвящен изучению именно этого вопроса. Для ответа на него сравниваются сечения в случае, когда электроны в континууме описываются либо плоскими волнами, либо волковскими функциями. Показано, что эффект волковских функций может существенно исказить вид дифференциального сечения.

Рассматривается процесс, изображенный на рис. 1.2. Быстрый электрон рассеивается на мишени в присутствии лазерного поля, что приводит к ионизирующему столкновению в результате которого из мишени выбивается один электрон. Столкновение проходит в режиме большой передачи энергии и импульса. Таким образом, в конечном состоянии присутствует пара электронов — рассеянный и выбитый. Напомним, что мы рассматриваем линейно поляризованное лазерное поле (1.6), предполагая, что оно включается и выключается адиабатически при $t \rightarrow \mp\infty$. Его частота ω и интенсивность I таковы, что значение параметра Келдыша $\gamma \gg 1$, что означает, что процессы фотоионизации могут идти только в многофотонном режиме и несущественны по сравнению с электронной ударной ионизацией. Кроме того, мы считаем применимым дипольное приближение, в рамках которого амплитуда электрического поля одинакова во всей области столкновения.

В качестве мишени рассматривается электрон в потенциале гармоническо-

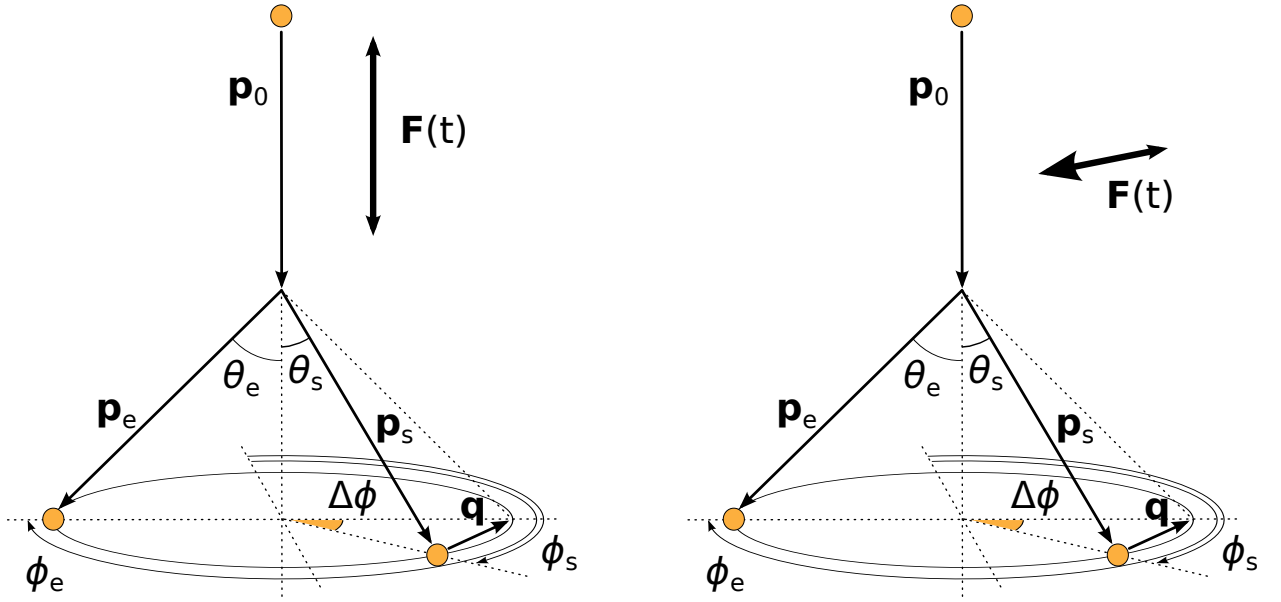


Рис. 1.2. Геометрия ЭИС эксперимента в электромагнитном поле. Рассматриваются две ориентации электрической компоненты поля $\mathbf{F}(t)$: в одном случае она лежит в плоскости рассеяния коллинеарно импульсу налетающего электрона (LP \parallel , левый рисунок), в другом — перпендикулярна плоскости рассеяния (LP \perp , правый рисунок).

го осциллятора $V(r) = \omega_0 r^2/2$. Преимущество такого выбора в том, что динамика данной системы в присутствии поля известна точно [44]. Предполагается, что электрон до включения поля находился в основном состоянии. Соответствующая волновая функция имеет вид:

$$\psi_T(\mathbf{r}_1, t) = \left(\frac{\omega_0}{\pi}\right)^{3/4} \times \exp\left(i\left\{-\frac{3}{2}\omega_0 t + f(t) + \mathbf{p}(t) \cdot [\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}(t)] + \frac{1}{c}\mathbf{A}(t) \cdot \mathbf{r}_1 + \frac{i}{2}\omega_0[\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}(t)]^2\right\}\right), \quad (1.15)$$

где

$$f(t) = (\lambda - 1)U_p t - \beta(\lambda\eta - 1) \sin 2\omega t, \quad \mathbf{p}(t) = -\frac{\lambda}{c}\mathbf{A}(t), \quad \mathbf{r}(t) = -\frac{\lambda}{\omega_0^2}\mathbf{F}(t),$$

а также

$$U_p = \frac{F_0^2}{4\omega^2}, \quad \beta = \frac{F_0^2}{8\omega^3}, \quad \lambda = \frac{\omega_0^2}{\omega_0^2 - \omega^2}, \quad \eta = \frac{\omega_0^2 + \omega^2}{\omega_0^2 - \omega^2}.$$

Если гармонический потенциал обрезать на расстоянии $r_c \gg \max r(t)$ и заметить на постоянный $V(r > r_c) = V(r_c)$, то на нижних состояниях это практически не отразится. Такой осциллятор конечной высоты может служить в качестве модели атома, в отличие от точного гармонического потенциала, в котором процессы ионизации невозможны.

Подставляя выражения для волковских функций (1.9) и состояния мишени (1.15) в амплитуду перехода (1.8), можно записать выражение для полностью дифференциального сечения в виде

$$\frac{d^4\sigma}{dE_s dE_e d\Omega_s d\Omega_e} = \sum_{N=-\infty}^{\infty} \frac{d^3\sigma_N}{dE_s d\Omega_s d\Omega_e} \delta(E_e + E_s - E_0 - \mathcal{E}_g + \lambda U_p + N\omega),$$

где $\mathcal{E}_g = 3\omega_0/2$ — энергия основного состояния осциллятора. Сечение, соответствующее поглощению ($N < 0$) или испусканию ($N > 0$) N фотонов дается выражением (1.13):

$$\frac{d^3\sigma_N}{dE_s d\Omega_s d\Omega_e} = \frac{p_s p_e}{(2\pi)^3 p_0} \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{ee} |\mathcal{F}^{(N)}(\mathbf{q})|^2, \quad (1.16)$$

где

$$\begin{aligned} \mathcal{F}^{(N)}(\mathbf{q}) = & \psi_g(\mathbf{q}) \exp\left(-\frac{\lambda^2}{\omega_0} U_p\right) \sum_{l=-\infty}^{+\infty} \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} i^N J_{N+2l-2m-n}(\lambda\alpha_{\mathbf{p}}) J_{-l}(\beta\lambda\eta) \\ & \times I_m\left(-\frac{\lambda^2}{\omega_0} U_p\right) I_n\left(-\frac{\omega}{\omega_0} \lambda\alpha_{\mathbf{p}}\right). \end{aligned} \quad (1.17)$$

Здесь J_N и I_N — функции Бесселя от вещественного и мнимого аргумента [45] соответственно, а $\psi_g(\mathbf{q})$ волновая функция основного состояния осциллятора в импульсном представлении

$$\psi_g(\mathbf{q}) = \left(\frac{4\pi}{\omega_0}\right)^{3/4} \exp\left(-\frac{q^2}{2\omega_0}\right). \quad (1.18)$$

Если вместо волковских функций использовать плоские волны, то выражение для сечения принимает вид

$$\frac{d^4\sigma}{dE_s dE_e d\Omega_s d\Omega_e} = \sum_{N=-\infty}^{\infty} \frac{d^3\sigma_N}{dE_s d\Omega_s d\Omega_e} \delta(E_s + E_e - E_0 - E_g + \lambda' U_p + N\omega),$$

где $\lambda' = \lambda - 1$ и $d^3\sigma_N$ дается выражением (1.4), в котором

$$\begin{aligned} \mathcal{F}^{(N)}(\mathbf{q}) &= \psi_g(\mathbf{q}) \exp\left(-\frac{\lambda'^2}{\omega_0} U_p\right) \\ &\times \sum_{l=-\infty}^{+\infty} \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} i^N J_{N+2l-2m-n}(\lambda' \alpha_{\mathbf{p}}) J_{-l}(\beta[\lambda\eta - 4\lambda' - 1]) \\ &\times I_m\left(-\frac{\lambda'^2}{\omega_0} U_p\right) I_n\left(-\frac{\omega}{\omega_0} \lambda' \alpha_{\mathbf{p}}\right). \end{aligned} \quad (1.19)$$

Стоит заметить, что в бесполовом случае импульсный профиль $\mathcal{F}^{(N)}$, задаваемый выражениями (1.17) и (1.19) сводится к

$$\mathcal{F}^{(N)}(\mathbf{q}) = \delta_{N0} \psi_g(\mathbf{q}),$$

где $\psi_g(\mathbf{q})$ определено в (1.18).

Чтобы изучить роль влияния поля на электроны в континууме, проведем сравнение дифференциальных сечений, полученных с использованием волковских функций и плоских волн. В рассматриваемой кинематике энергия налетающего электрона $E_0 = 2$ кэВ. Сечения изучаются как функции величины импульса \mathbf{q} (см. рис. 1.1). Параметры лазерного поля те же, что и у Nd:YAG лазера, использованного в первых экспериментах по рассеянию в присутствии лазерного поля: энергия фотона $\hbar\omega = 1.17$ эВ, интенсивность $I = 4 \cdot 10^{12}$ Вт/см². Энергия осциллятора $\omega_0 = 1/3$ а.е. ≈ 9 эВ, что значительно превышает фотонную энергию. Кроме того, эта величина значительно превышает амплитуду электрического поля $F_0 \approx 10^{-2}$ а.е., поэтому взаимодействие лазерного поля с мишенью можно рассматривать в пертурбативном режиме. Рассматриваются две ориентации электрической компоненты поля (см. рис. 1.2). В одном случае поле лежит в плоскости рассеяния и коллинеарно импульсу налетающего электрона: $\mathbf{F}_0 \parallel \mathbf{p}_0$ — этот случай обозначается LP \parallel . В другом оно перпендикулярно плоскости рассеяния: $\mathbf{F}_0 \perp \mathbf{p}_s$, $\mathbf{F}_0 \perp \mathbf{p}_0$, что обозначается как LP \perp .

Если для учета влияния поля на состояния электронов в континууме и в мишени используются различные приближенные методы, выражение для ам-

плитуды перехода (1.8), вообще говоря, перестает быть инвариантным относительно выбора калибровки электромагнитного поля. В атомной физике наиболее широко используются калибровки скорости и длины, и выбор между ними может отразиться на точности результатов расчетов. Для ответа на данный вопрос применительно к рассматриваемой задаче было проведено сравнение точного состояния осциллятора (1.15) с состояниями, построенными по теории возмущений в двух указанных калибровках (см. рис. 1.3). Видно, что в первом порядке теории возмущений решение в калибровке длины практически совпадает с точным аналитическим, тогда как калибровка скорости дает существенно отличный результат. Таким образом, в рассматриваемом случае калибровка длины является более подходящей для использования в теории возмущений. Также существуют указания, что она является предпочтительной и в более общем случае атомной мишени [46].

Результаты расчетов сечений в двух вышеуказанных геометриях для различного числа поглощенных и испущенных фотонов представлены на рис. 1.4. Для удобства результаты с плоскими волнами в случае $N = \pm 1$ увеличены в 300 раз. Амплитуда сечения максимальна при $N = 0$ и уменьшается с ростом числа участвующих в реакции фотонов. Это объясняется малой интенсивностью поля и нерезонансной частотой — в этом случае вероятность многофотонных процессов значительно снижается с ростом числа фотонов. При анализе вида сечения полезны следующие свойства функций Бесселя: $J_0(0) = I_0(0) = 1$ и $J_N(0) = I_N(0) = 0$ при $N \neq 0$. Так как в выражениях (1.17) и (1.19) аргументы функций Бесселя J_{-l} и I_m меньше, чем 10^{-1} , то основной вклад в суммы обеспечивается членами с $l = m = 0$.

В LP|| геометрии при $N = 0$ сечения как с плоскими волнами, так и с волковскими функциями практически совпадают с сечением в отсутствие поля. Причина этого в том, что в соответствии с выражениями (1.17) и (1.19) они с точностью до кинематического фактора определяются выражениями $|J_0(\lambda\alpha_{\mathbf{q}})\psi_g(\mathbf{q})|^2$ и $|J_0(\lambda'\alpha_{\mathbf{q}})\psi_g(\mathbf{q})|^2$. В LP|| геометрии значение параметра $\alpha_{\mathbf{q}}$ в аргументе функ-

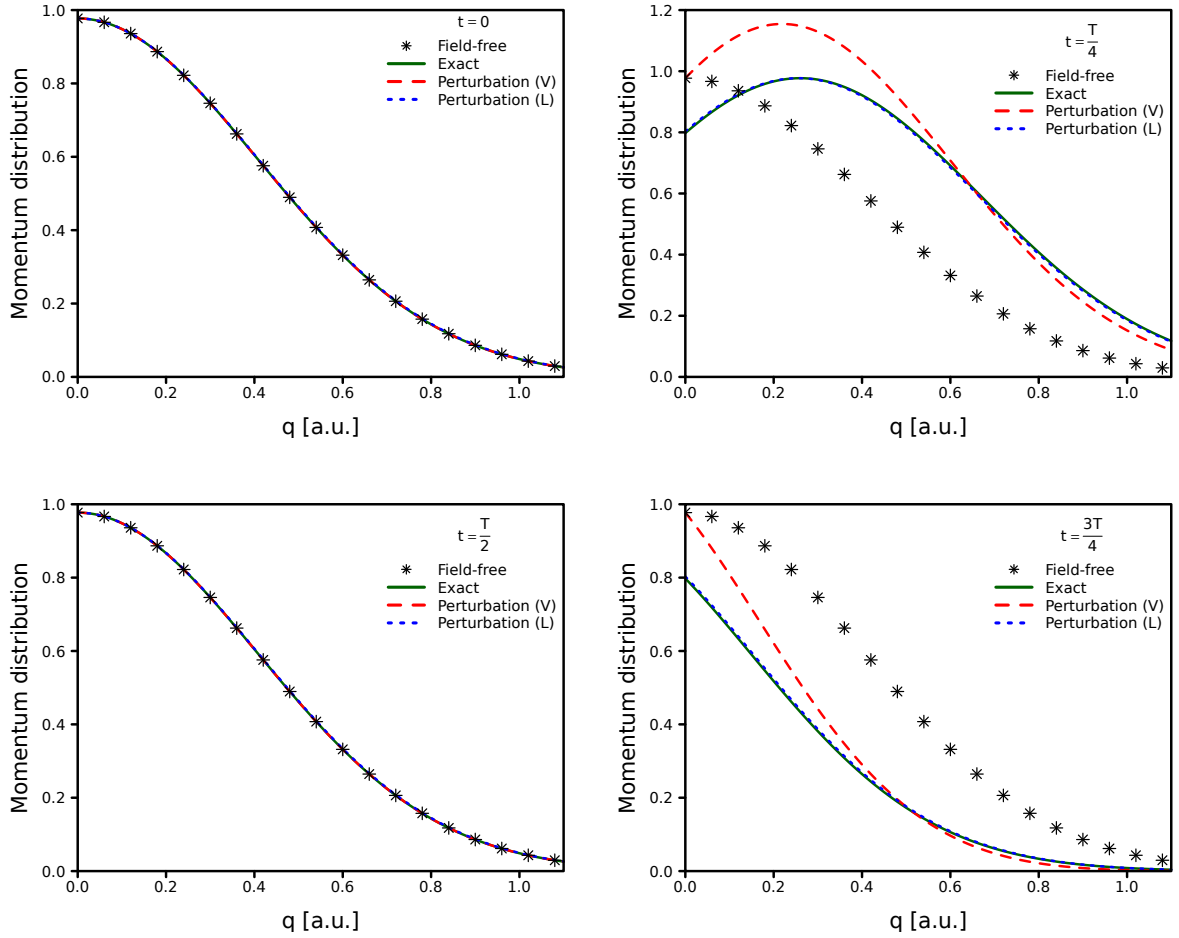


Рис. 1.3. Эволюция импульсного распределения основного состояния электрона в гармоническом потенциале в присутствии лазерного поля в течение одного периода осцилляций поля $T = 2\pi/\omega$. Теория возмущений в калибровке длины (L) дает хорошее согласие с точным аналитическим решением (Exact), тогда как результаты в калибровке скорости (V) заметно отличаются. Точками показано импульсное распределение основного состояния осциллятора в бесполевым случае (Field-free).

ции Бесселя нулевого порядка постоянно и равно $\alpha_q \approx 0.2$. Значения λ и λ' приблизительно $\lambda \approx 1$ и $\lambda' \approx 0.03$, поэтому [45] $J_0(\lambda\alpha_q) \approx J_0(\lambda'\alpha_q) \approx 1$. Однако ситуация становится качественно иной в случае $N = \pm 1$, где результаты расчетов с волковскими функциями отличаются от случая плоских волн практически на три порядка. Такая разница объясняется в основном различием между аргументами $\lambda\alpha_q$ и $\lambda'\alpha_q$ функций Бесселя, которое возникает из-за фактора

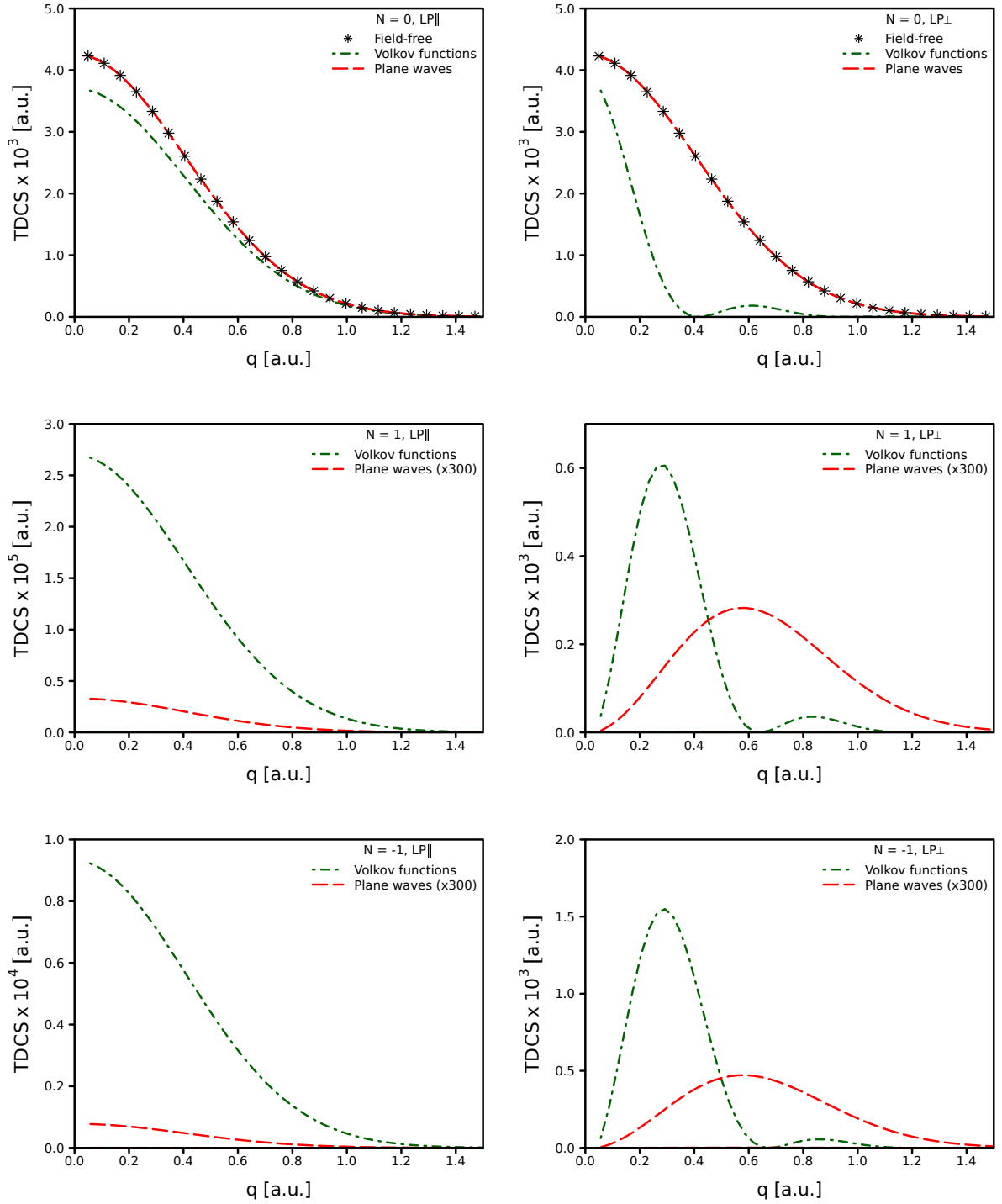


Рис. 1.4. Дифференциальное сечение рассеяния (TDCS) в присутствии лазерного поля, определяемое выражением (1.4), в LP|| (слева) и LP⊥ (справа) геометриях. Пунктирная линия соответствует случаю, когда состояния электронов в континууме описываются плоскими волнами (Plane waves), точка-пунктир — волковскими функциями (Volkov functions), точки — сечение в бесполовом случае (Field-free).

$\exp(-i\alpha_{\mathbf{p}} \cos \omega t)$ в волковских функциях (1.9).

В $LP\perp$ геометрии, в отличие от $LP\parallel$, результаты с волковскими функциями и плоскими волнами существенно различаются даже при $N = 0$. Это можно объяснить наличием функции Бесселя $J_0(\lambda\alpha_{\mathbf{q}})$, аргумент которой приближенно равен $\lambda\alpha_{\mathbf{q}} \approx 5.8 \cdot q$. В $LP\perp$ он меняется при варьировании угла выхода одного из электронов из плоскости рассеяния $\Delta\phi$, тогда как в $LP\parallel$ он был постоянен. Наблюдаемые на графиках осцилляции могут быть объяснены наличием функции $J_N(\lambda\alpha_{\mathbf{q}})$, так как узлы на графиках совпадают с узлами функции Бесселя. Поскольку $J_{-N}(\alpha_{\mathbf{q}}) = (-1)^N J_N(\alpha_{\mathbf{q}})$ [45], структура осцилляций при N и $-N$ одинакова. При всех значениях N результаты с волковскими функциями существенно отличаются от результатов с плоскими волнами, причем не только по амплитуде, но и по форме. Последнее отличие особенно важно, поскольку в ЭИС экспериментах на атомных и молекулярных системах обычно используется произвольная шкала интенсивности и значение имеет именно форма сечения, а не его абсолютная величина. Согласно выражению (1.19), плосковолновые результаты при $N = 0$ одинаковы в $LP\parallel$ и $LP\perp$ геометриях. Согласно выражению (1.17), для $N = \pm 1$ поведение плосковолновых результатов в $LP\perp$ геометрии в основном определяется (особенно при малых значениях q) зависимостью $\alpha_{\mathbf{q}}$ от \mathbf{q} , которая обсуждалась выше.

На основании приведенных результатов можно сделать следующие выводы. Форма дифференциального сечения сильно зависит от направления электрического поля. Даже в случае умеренных частот ($\omega \sim 0.1$ а.е.) и слабых интенсивностей ($F_0 \sim 10^{-2}$ а.е.) действие поля на электроны в континууме с кэВ-ными энергиями существенно влияет как на форму, так и на величину импульсных профилей. В соответствии с приведенным анализом, влияние волковских функций определяется параметром $\alpha_{\mathbf{q}} = |\mathbf{F}_0\mathbf{q}|/\omega^2$. Так, когда $\alpha_{\mathbf{q}} \ll 1$, эффект поля на быстрые электроны мал. Стоит заметить, что определение $\alpha_{\mathbf{q}}$ включает классическую амплитуду осцилляций электрона в лазерном поле $x_0 = F_0/\omega^2$.

Так как в атомных и молекулярных системах наиболее интересная область

значений q обычно составляет несколько а.е., то можно пренебречь влиянием поля на электроны в континууме, если выполнено условие $x_0 \ll 1$ а.е. Например, при частоте $\omega \sim 0.1$ а.е., из него следует, что $F_0 \lesssim 10^{-3}$ а.е. Однако при таких величинах поля его влияние на состояние мишени будет незначительным, если частота лазерного поля не резонансна с атомной. В резонансном режиме даже слабое поле может привести к значительной заселенности верхних уровней. Тем самым открывается уникальная возможность измерять импульсное распределение на возбужденных уровнях, тогда как в бесполевого случае доступно для измерений только основное состояние. С другой стороны, можно измерять сечение в геометрии $\mathbf{F}_0 \perp \mathbf{q}$, в которой эффект влияния поля на несвязанные электроны оказывается подавленным. Недостатком такой геометрии является то, что она позволяет изучать импульсное распределение только в направлении, перпендикулярном \mathbf{F}_0 , тогда как эффект поля на мишень максимален в направлении, коллинеарном \mathbf{F}_0 .

1.4. ЭИС атома водорода в лазерном поле

Данный раздел посвящен теоретическому анализу ЭИС атома водорода в электромагнитном поле. В отличие от случая электрона в осцилляторном потенциале, рассматривавшемся в предыдущем разделе, точное выражения для состояния атомарного водорода в поле (1.6) неизвестно, поэтому здесь приходится использовать приближенные методы.

Состояние атома водорода в поле будем искать в рамках нестационарной теории возмущений [47]. В предыдущем разделе было показано, что калибровка длины приводит к более аккуратным результатам в рамках теории возмущений по сравнению с калибровкой скорости. Используя эту калибровку, в первом

порядке теории возмущений для волновой функции атома водорода имеем [16]

$$\Psi_H(\mathbf{r}, t) = \exp(-i\mathcal{E}_{1s}t) \exp\left[-\frac{i}{c}\mathbf{A}(t)\mathbf{r}\right] \times \left[\varphi_{1s}(\mathbf{r}) - \frac{1}{2} \sum_{n \neq 1s} \left(e^{i\omega t} \frac{\langle n|\mathbf{F}_0\mathbf{r}|1s\rangle}{\omega_{n,1s} + \omega} + e^{-i\omega t} \frac{\langle n|\mathbf{F}_0\mathbf{r}|1s\rangle}{\omega_{n,1s} - \omega} \right) \varphi_n(\mathbf{r}) \right], \quad (1.20)$$

где $\varphi_{1s}(\mathbf{r})$ и $\varphi_n(\mathbf{r})$ — стационарные волновые функции основного и возбужденных состояний атома водорода в отсутствие лазерного поля, \mathcal{E}_{1s} — энергия невозмущенного $1s$ состояния, $\omega_{n,1s} = \mathcal{E}_n - \mathcal{E}_{1s}$. Далее, используем низкочастотное приближение $\omega_{n,1s} \gg \omega$ и при суммировании по возбужденным состояниям n заменим энергии $\omega_{n,1s}$ некоторым средним значением $\omega_{cl} \sim |\mathcal{E}_{1s}|$, что отвечает хорошо известному контактному приближению (см., например, [48]). В результате получим

$$\Psi_H(\mathbf{r}, t) = e^{-\frac{i}{c}A(t)\mathbf{r}} e^{-i\mathcal{E}_{1s}t} \left(1 - \frac{1}{\omega_{cl}} \mathbf{F}_0\mathbf{r} \cos(\omega t) \right) \varphi_{1s}(\mathbf{r}). \quad (1.21)$$

В случае, когда быстрые электроны описываются волковскими функциями (1.9), а возмущенная волновая функция атома водорода дается формулой (1.21), полностью дифференциальное сечение рассеяния рассматриваемого ($e, 2e$) процесса в соответствии с общей теорией (1.12) может быть представлено в виде суммы по процессам с различным суммарным числом поглощенных или испущенных фотонов:

$$\frac{d^4\sigma}{dE_s dE_e d\Omega_s d\Omega_e} = \sum_{N=-\infty}^{\infty} d^3\sigma_N \delta(E_s + E_e + U_p - E_0 - \mathcal{E}_{1s} + N\omega), \quad (1.22)$$

где $d^3\sigma_N$ дается формулой (1.13)

$$\frac{d^3\sigma_N}{dE_s d\Omega_s d\Omega_e} = \frac{p_s p_e}{(2\pi)^3 p_0} \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{ee} |\mathcal{F}^{(N)}(\mathbf{q})|^2,$$

в которой

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_{1s}^N(\mathbf{q}) &= i^N \int_0^{2\pi} \frac{d\xi}{2\pi} e^{i[N\xi - \alpha_{\mathbf{q}} \sin(\xi) - \beta \sin(2\xi)]} \times \\ &\times \left[1 - \frac{4i \sin \xi}{\omega_{cl} \left(1 + \left(\mathbf{q} + \frac{\mathbf{F}_0}{\omega} \cos \xi \right)^2 \right)} \left(\omega^2 \alpha_{\mathbf{q}} + \frac{\mathbf{F}_0^2}{\omega} \cos \xi \right) \right] \varphi_{1s} \left(\mathbf{q} + \frac{\mathbf{F}_0}{\omega} \cos \xi \right), \end{aligned} \quad (1.23)$$

и введено обозначение $\beta = F_0^2/8\omega^3$.

Если в расчетах используются плоские волны вместо волковских функций, сечение принимает вид

$$\frac{d^4\sigma}{dE_s dE_e d\Omega_s d\Omega_e} = \sum_{N=-\infty}^{\infty} d^3\sigma_N \delta(E_s + E_e - E_0 - \mathcal{E}_{1s} + N\omega),$$

где $d^3\sigma_N$ также может быть представлено в виде (1.13). При этом (ср. (1.23))

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_{1s}^N(\mathbf{q}) &= i^N \int_0^{2\pi} \frac{d\xi}{2\pi} e^{iN\xi} \times \\ &\times \left[1 - \frac{4i \sin \xi}{\omega_{cl} \left(1 + \left(\mathbf{q} + \frac{\mathbf{F}_0}{\omega} \cos \xi \right)^2 \right)} \left(\omega^2 \alpha_{\mathbf{q}} + \frac{\mathbf{F}_0^2}{\omega} \cos \xi \right) \right] \varphi_{1s} \left(\mathbf{q} + \frac{\mathbf{F}_0}{\omega} \cos \xi \right). \end{aligned} \quad (1.24)$$

Чтобы получить представление о роли эффектов, связанных с волковскими функциями, проведем, так же как и в предыдущем разделе, сравнение результатов численных расчетов в симметричной некопланарной геометрии (см. рис. 1.2), используя как волковские функции, так и плоские волны. В рассматриваемой геометрии энергия налетающего электрона $E_0 = 2 \text{ КэВ} - E_{1s}$, что при отсутствии поля приводит к энергиям $E_s = E_e = 1 \text{ КэВ}$ для рассеянного и выбитого электронов. Дифференциальные сечения исследуются как функции q . Параметры лазера такие же, как и в первых ($e, 2e$) экспериментах в лазерном поле [14, 49]: энергия фотона $\omega = 1.17 \text{ эВ}$, интенсивность $I = 4 \cdot 10^{12} \text{ Вт/см}^2$. Частота излучения значительно ниже частоты перехода $1s \rightarrow 2p$ в атоме водорода $\omega_{1s \rightarrow 2p} = 10.2 \text{ эВ}$, а амплитуда электрического поля $F_0 \approx 10^{-2} \text{ а.е.}$ значительно меньше характерного внутриатомного поля водорода $F_H \sim 1 \text{ а.е.}$ Величину

динамического штарковского сдвига $1s$ уровня атома водорода в таком поле можно оценить как $\Delta_{1s} = -9F_0^2/4 \approx 2.25 \cdot 10^{-4}$ а.е. [43], т.е. она находится за пределами характерного энергетического разрешения метода ЭИС (~ 1 эВ). Кроме того, для рассматриваемых параметров поля величина пондеромоторного потенциала есть $U_p = 0.42$ эВ, что также меньше характерного энергетического разрешения метода ЭИС. Таким образом, связанная с U_p поправка к значению импульса отдачи протона q составляет $\sim 10^{-3}$ а.е., т.е. является пренебрежимо малой величиной. Исследуются две ориентации электрического поля лазера: 1) вектор напряженности поля лежит в плоскости рассеяния и коллинеарен импульсу налетающего электрона, т.е. $\mathbf{F} \parallel \mathbf{p}_0$, и 2) вектор напряженности поля перпендикулярен плоскости рассеяния, т.е. $\mathbf{F} \perp \mathbf{p}_0$ и $\mathbf{F} \perp \mathbf{p}_s$. Эти случаи обозначаются как LP \parallel и LP \perp соответственно (см. рис. 1.2).

На рис. 1.5 представлены результаты численных расчетов TDCS для двух указанных выше ориентаций поля и различного числа поглощенных/испущенных системой электрон-атом фотонов. Во всех представленных случаях величина TDCS наибольшая при $N = 0$ и значительно спадает с ростом $|N|$. Это объясняется тем, что вероятность многофотонного процесса резко падает с ростом числа вовлеченных фотонов, если лазерное поле слабое и частота не резонансная.

В LP \parallel геометрии TDCS при $N = 0$ как для волковских функций (1.9), так и для плоских волн (1.10) близко к сечению при отсутствии поля. Причина этого в том, что последнее с точностью до кинематического фактора определяется импульсным распределением $1s$ орбитали $|\psi_{1s}(\mathbf{q})|^2$, тогда как первые два задаются выражениями (1.23) и (1.24) соответственно. В отличие от (1.24), в (1.23) в фазе экспоненты присутствуют члены $\alpha_{\mathbf{q}} \sin(\xi)$ и $\beta \sin(2\xi)$, которые и ответственны за различия в результатах. Значение параметра $\alpha_{\mathbf{q}}$ в LP \parallel постоянно и равно $\alpha_{\mathbf{q}} \approx 0.2$, величина β не зависит от q и для выбранных параметров поля $\beta \approx 0.18$. При $N = \pm 1$ результаты перестают совпадать, и сечение с использованием волковских функций оказывается почти на порядок больше сечения,

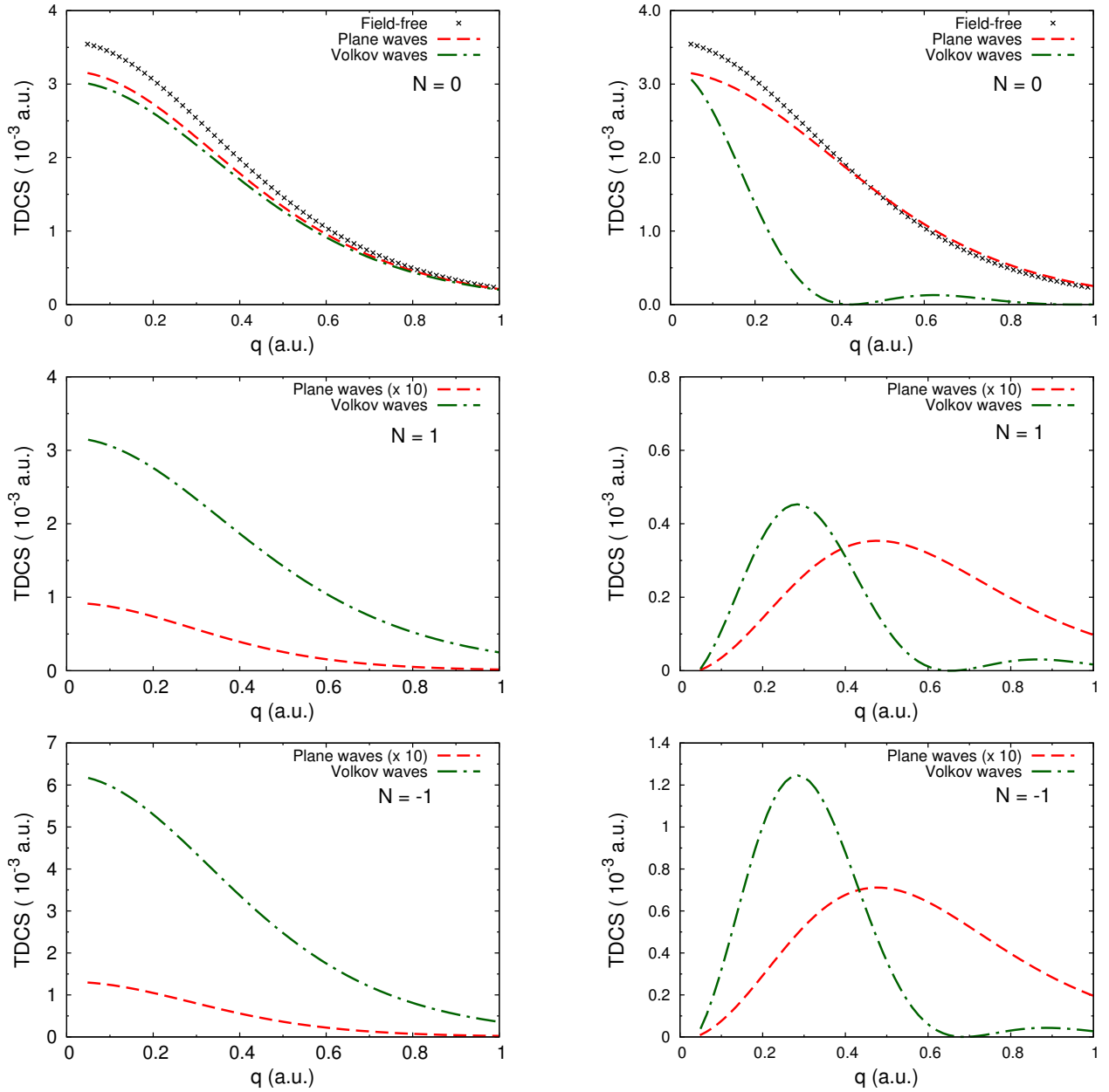


Рис. 1.5. $d^3\sigma_N$ ($N = 0, 1, -1$) в $LP\parallel$ (слева) и $LP\perp$ (справа) геометриях. Пунктирная линия соответствует случаю, когда состояния электронов в континууме описываются плоскими волнами (Plane waves), точка-пунктир — волковскими функциями (Volkov waves), точки — сечение в бесполевоом случае (Field-free).

посчитанного с плоскими волнами.

В отличие от $LP\parallel$, в $LP\perp$ геометрии сечение с волковскими функциями для $N = 0$, приведенное на рис. 1.5, значительно отличается от сечения в отсутствие поля. Это различие обусловлено тем, что в $LP\perp$ случае параметр α_q меняется в зависимости от q , тогда как в $LP\parallel$ случае его значение было постоянным: в $LP\perp$

геометрии его можно оценить как $\alpha_{\mathbf{q}} \approx 5.4 \cdot q$, а в LP \parallel геометрии, напомним, $\alpha_{\mathbf{q}} \approx 0.2$. Используя интегральное представление функции Бесселя [45]

$$J_N(x) = i^{-N} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\phi}{2\pi} e^{i(N\phi + x \cos \phi)},$$

выражение (1.23) и при больших значениях \mathbf{q} можно грубо аппроксимировать как $J_N(-\alpha_{\mathbf{q}})\psi_{1s}(\mathbf{q})$. Наблюдаемые на рис. 1.5 осцилляции сечения можно связать с поведением функции $J_N(-\alpha_{\mathbf{q}})$. Это подтверждается тем, что узлы сечения близки к узлам функций Бесселя. Т.к. $J_{-N}(x) = (-1)^N J_N(x)$ то вид осцилляций для N и $-N$ одинаков.

На рис. 1.5 в LP \perp геометрии результаты при использовании плоских волн существенно отличаются от результатов с волковскими функциями для всех значений N , причем как по форме, так и по интенсивности. Отличие по форме особенно важно, так как обычно в ЭИС экспериментах на атомных системах используется произвольная шкала интенсивностей и, таким образом, в них изучается только форма сечения.

На основании представленных численных результатов можно сделать выводы, аналогичные сделанным по результатам теоретического анализа, выполненного в предыдущем разделе. Таким образом, резюмируя результаты предыдущего и данного разделов, можно сказать, что наибольший потенциал метода ЭИС в лазерном поле для изучения импульсных распределений электронов в атомах может быть достигнут в случае, когда реализуется резонансный режим и амплитуда поля такова, что $\alpha_{\mathbf{q}} \ll 1$. В резонансном режиме даже слабое поле может эффективно “связывать” основное и возбужденное состояния в атоме. Это предоставляет уникальную возможность измерять импульсное распределение электронов на возбужденных атомных орбиталях, в то время как без поля можно измерить распределение только в основном состоянии ¹.

¹ Анализ резонансного случая можно найти в [16].

Глава 2

ЭИС атома гелия в поле электромагнитной ВОЛНЫ

С точки зрения экспериментальной реализации ЭИС атомов в лазерном поле, более удобной мишенью является гелий, а не водород, так как последний в отличие от гелия обладает высокой реакционной способностью в атомарном состоянии. Сравнение результатов ЭИС экспериментов на гелии в отсутствие поля [13, 17, 37] с теоретическими расчетами показывает, что импульсные профили практически нечувствительны к модели волновой функции атома гелия, если конечный ион He^+ остается в основном состоянии после $(e, 2e)$ столкновения. Напротив, процессы $(e, 2e)$ ионизации-возбуждения, т.е. когда ион He^+ остается в возбужденном состоянии, оказываются очень чувствительными к характеру электрон-электронных корреляций в гелии. В этой связи представляется интересным исследовать, как присутствие лазерного поля может повлиять на данную чувствительность. $(e, 2e)$ реакции на гелии в присутствии лазерного поля изучались ранее теоретически в работах [49–52] для кинематического режима малой передачи импульса. Однако, в этих работах не исследовалась роль, которую играет модель волновой функции гелия, и также не обсуждались процессы ионизации-возбуждения. В этой главе проводится теоретический анализ ЭИС атома гелия в лазерном поле, при этом основной акцент делается на процессы ионизации-возбуждения (очевидно, такие процессы отсутствуют в случае атома водорода, рассмотренного в предыдущей главе).

2.1. Возмущенные состояния атома и иона гелия

Рассмотрим проблему нахождения состояний атома He и иона He^+ в поле (1.6), когда частота последнего много меньше энергий возбуждения в этих

системах. Поскольку точные аналитические выражения для состояний атома $\Psi_i(t)$ и иона $\Psi_f(t)$ гелия в поле неизвестны, для их построения приходится применять приближенные методы. Это приводит к тому, что выражение (1.8) перестает быть инвариантным относительно выбора калибровки электромагнитного поля. Ниже рассмотрим калибровку длины, которая приводит к более аккуратным результатам (см. [46], а также раздел 1.3).

Используя низкочастотное и контактное приближения (см. раздел 1.4), состояния атома He и иона He^+ в поле (1.6), которые переходят в невозмущенные основные состояния этих систем при $t \rightarrow \mp\infty$ соответственно, в первом порядке теории возмущений даются выражениями [4]

$$\Psi_i(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) = e^{-i\mathcal{E}_{He}t} \left[1 - \frac{\mathbf{F}_0 \cdot (\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)}{\omega_{cl}} \cos \omega t \right] \Phi_i(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2), \quad (2.1)$$

$$\Psi_f(\mathbf{r}, t) = e^{-i\mathcal{E}_{1s}t} \left(1 - \frac{\mathbf{F}_0 \cdot \mathbf{r}}{\omega_{cl}} \cos \omega t \right) \varphi_{1s}(\mathbf{r}), \quad (2.2)$$

где Φ_i и φ_{1s} — волновые функции невозмущенных основных состояний He и He^+ соответственно, а $\omega_{cl} \sim |\mathcal{E}_{He(1s)}|$ — соответствующий контактный параметр (см., например, [53, 54]). Легко видеть, что в случае лазера с амплитудой электрического поля $F_0 \lesssim 0.01$ а.е. члены первого порядка вносят пренебрежимо малые поправки.

Состояние иона He^+ в поле (1.6), отвечающее невозмущенному водородоподобному состоянию $n = 2$ при адиабатическом выключении поля, можно искать в виде линейной комбинации водородоподобных состояний с $n = 2$:

$$|\Psi_f(t)\rangle = \sum_{l=0,1} \sum_{m=-l}^l a_{lm}(t) e^{-i\mathcal{E}_{n=2}t} |2lm\rangle. \quad (2.3)$$

Подставляя разложение (2.3) в нестационарное уравнение Шредингера, находим

(см. приложение А)

$$\Psi_{2s}(\mathbf{r}, t) = e^{-i\mathcal{E}_{n=2}t} \left[\cos\left(\frac{3F_0}{Z\omega} \sin \omega t\right) \varphi_{2s}(\mathbf{r}) - i \sin\left(\frac{3F_0}{Z\omega} \sin \omega t\right) \varphi_{2p_0}(\mathbf{r}) \right], \quad (2.4)$$

$$\Psi_{2p_0}(\mathbf{r}, t) = e^{-i\mathcal{E}_{n=2}t} \left[\cos\left(\frac{3F_0}{Z\omega} \sin \omega t\right) \varphi_{2p_0}(\mathbf{r}) - i \sin\left(\frac{3F_0}{Z\omega} \sin \omega t\right) \varphi_{2s}(\mathbf{r}) \right], \quad (2.5)$$

$$\Psi_{2p_{\pm 1}}(\mathbf{r}, t) = e^{-i\mathcal{E}_{n=2}t} \varphi_{2p_{\pm 1}}(\mathbf{r}). \quad (2.6)$$

Если параметр F_0/ω мал, данные выражения совпадают с первым порядком теории возмущений.

2.2. $(e, 2e)$ ионизация-возбуждение в лазерном поле

В соответствии с общей теорией выражение для дифференциального сечения можно привести к форме суммы по процессам с различным числом поглощенных ($N < 0$) или испущенных ($N > 0$) фотонов (1.12):

$$\frac{d\sigma}{dE_s dE_e d\Omega_s d\Omega_e} = \sum_{N=-\infty}^{\infty} d^3\sigma_N \delta(E_s + E_e + \mathcal{E}_f - E_0 - \mathcal{E}_{He} + U_p + N\omega), \quad (2.7)$$

где \mathcal{E}_f — энергия невозмущенного иона в конечном состоянии, $U_p = F_0^2/4\omega^2$ — пондеромоторный потенциал. N -фотонное дифференциальное сечение дается выражением

$$d^3\sigma_N = \frac{p_s p_e}{4\pi^3 p_0} \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{ee} |\mathcal{F}_N(\mathbf{q})|^2, \quad (2.8)$$

где $(d\sigma/d\Omega)_{ee}$ — моттовское сечение электрон-электронного рассеяния, учитывающее обменные эффекты, а выражение для импульсного профиля в присутствии лазерного поля $\mathcal{F}_N(\mathbf{q})$ имеет вид

$$\mathcal{F}_N(\mathbf{q}) = \frac{\omega}{2\pi} \int_{-\pi/\omega}^{\pi/\omega} dt e^{i(\mathcal{E}_{He} - \mathcal{E}_f - \frac{q^2}{2} - U_p - N\omega)t} \langle \chi_{\mathbf{q}}(t) \Psi_f(t) | \Psi_i(t) \rangle. \quad (2.9)$$

Мы рассматриваем геометрию, изображенную на рис. 1.2. Углы вылета выбитого и рассеявшегося электронов одинаковы и составляют 45° по отношению к направлению налетающего электрона: $\theta_s = \theta_e = 45^\circ$. Их энергии также

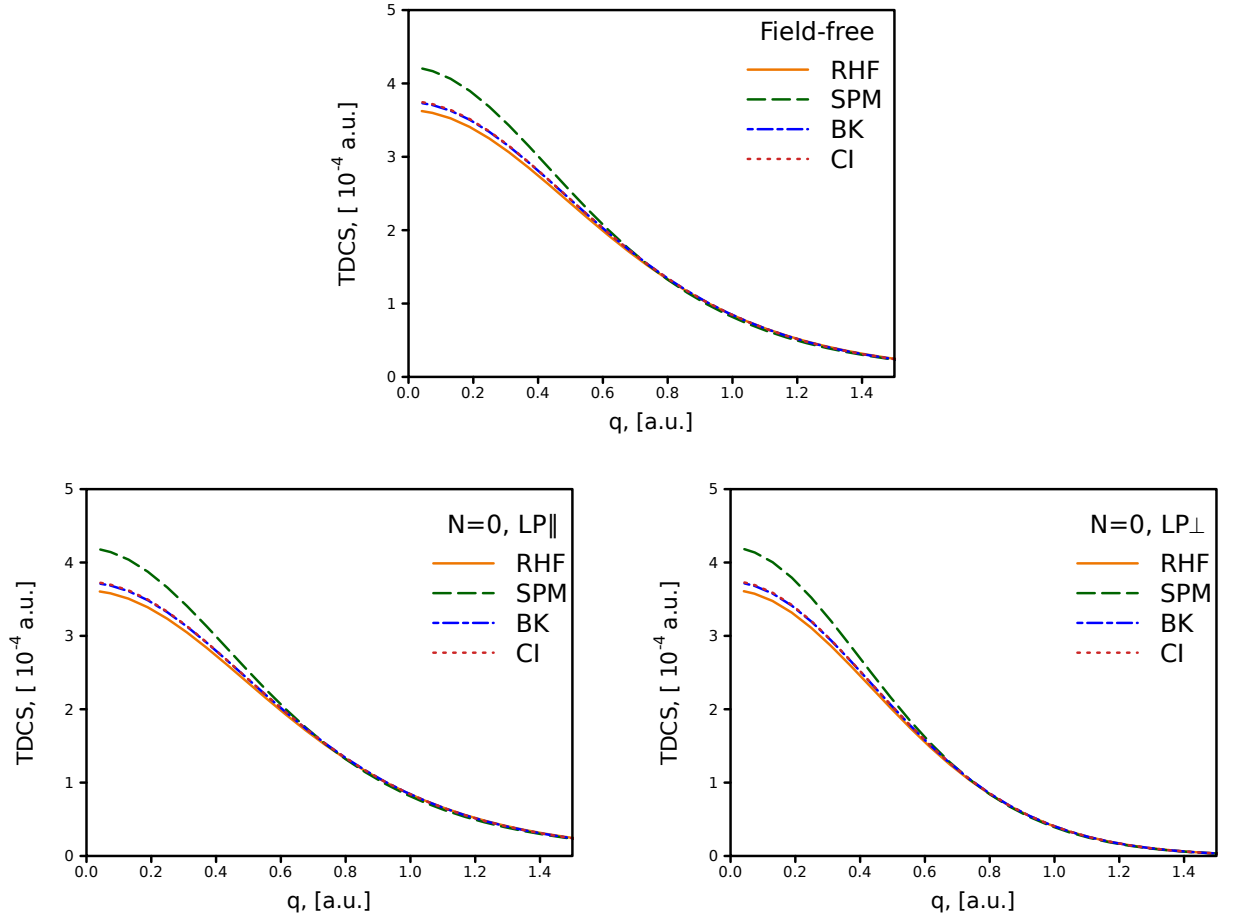


Рис. 2.1. Дифференциальные сечения рассеяния в бесполевоом случае (Field-Free) и в присутствии поля в LP \parallel и LP \perp геометриях, когда суммарное число поглощенных и испущенных фотонов $N = 0$. Ион He^+ после реакции остается в основном состоянии $n = 1$.

равны: $E_s = E_e = E$. Дифференциальное сечение изучается как функция величины импульса q , который связан с изменением угла выхода одного из электронов из плоскости рассеяния $\Delta\phi$. Значение энергии налетающего электрона $E_0 = 6$ кэВ $-\mathcal{E}_{\text{He}}$ ($\mathcal{E}_{\text{He}} = -2.90356$ а.е.) и область значений q таковы, что в отсутствие лазерного поля эффекты искажения плоских волн и эффекты, связанные со вторым борновским приближением, малы (см. [37]). Рассматривается два направления электрической компоненты лазерного поля (см. рис. 1.2): \mathbf{F}_0 параллельно \mathbf{p}_0 (LP \parallel геометрия) и \mathbf{F}_0 перпендикулярно \mathbf{p}_0 и \mathbf{p}_s (LP \perp геометрия). Частота $\omega = 1.55$ эВ и интенсивность лазерного поля $I = 5 \cdot 10^{11}$ Вт/см 2 выбраны с учетом возможной экспериментальной реализации [15].

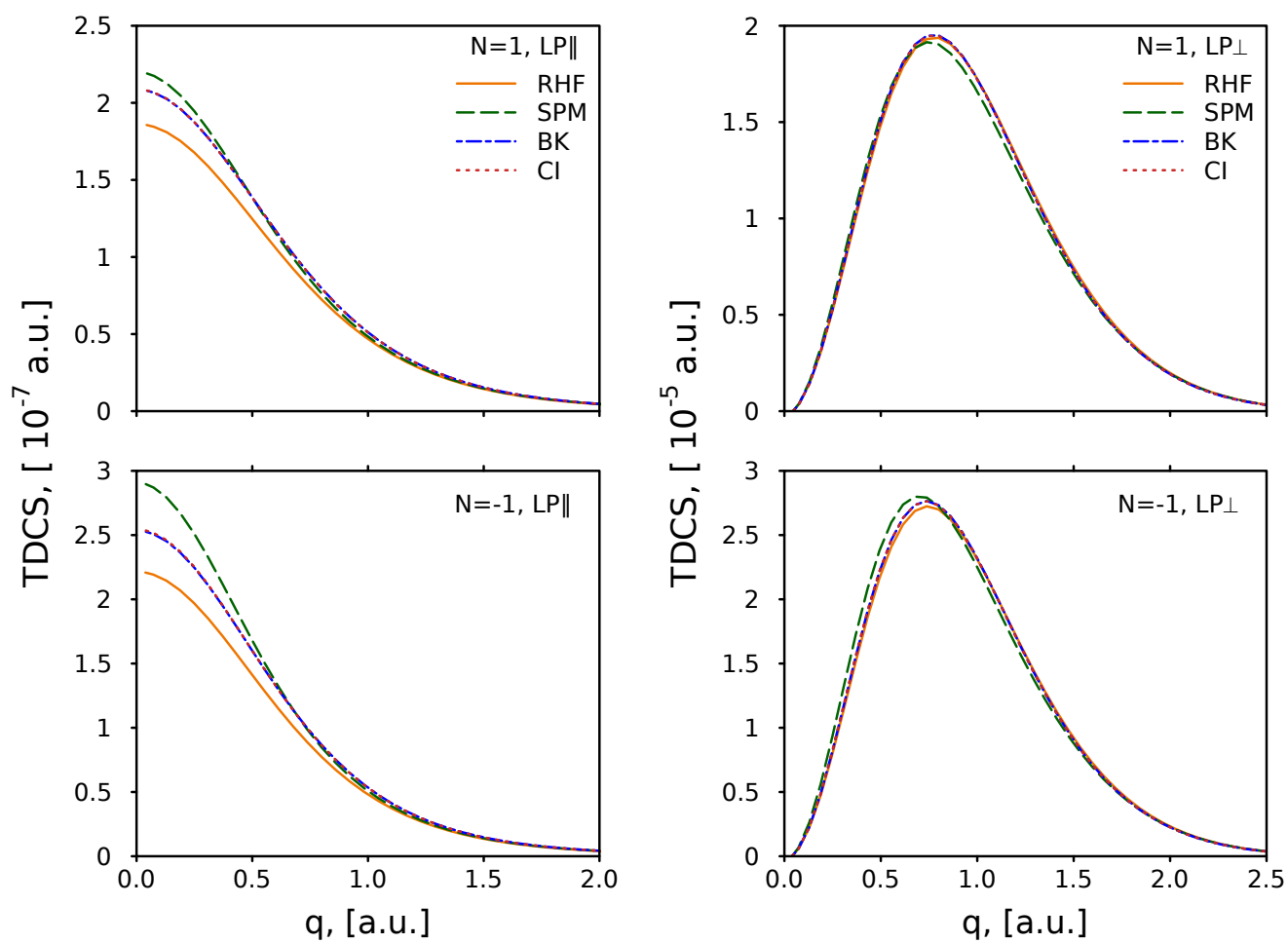


Рис. 2.2. Дифференциальные сечения $(e, 2e)$ на атоме гелия в присутствии лазерного поля, в случае, когда ион He^+ остается в основном состоянии. Суммарное число испущенных или поглощенных фотонов $N = \pm 1$.

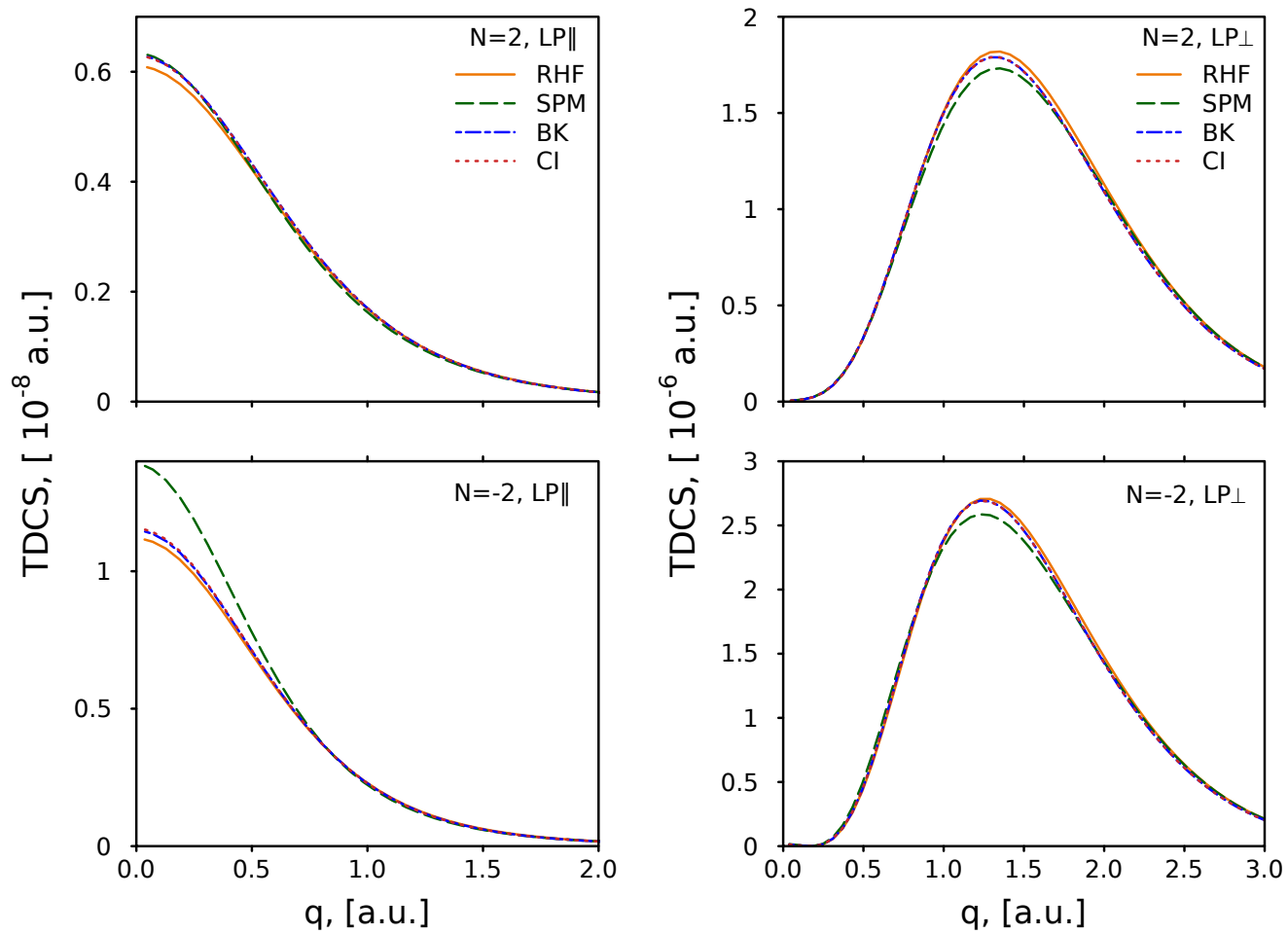


Рис. 2.3. То же, что на рис 2.2, но при $N = \pm 2$.

Рассматриваются четыре модели основного состояния атома гелия: функция Рутана-Хартри-Фока (RHF [55]), одна из функций Сильвермана-Платаса-Мэтсена (SPM [56]), функция Бонама-Коля (БК [57]) и построенная по принципу конфигурационного взаимодействия (CI) функция Митроя и др. [58].

Функция Рутана-Хартри-Фока представляет собой произведение одночастичных функций:

$$\Phi_{RHF}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \varphi(\mathbf{r}_1)\varphi(\mathbf{r}_2), \quad (2.10)$$

$$\varphi(\mathbf{r}) = \sum_{j=1}^5 a_j \varphi_{1s}(r, Z = \gamma_j) = \sum_{j=1}^5 a_j \left(\frac{\gamma_j^3}{\pi} \right)^{1/2} e^{-\gamma_j r}.$$

Она некоррелирована и ее энергия связи $\mathcal{E}_{He} = -2.86168$ а.е.

Функция Сильвермана-Платаса-Мэтсена строится как комбинация водородоподобных s - и p -орбиталей и включает угловые и радиальные корреляции

$$\Phi_{SPM}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{(1 + \lambda^2)^{1/2}} \left\{ N_{1s} [\varphi_{1s}(r_1, a)\varphi_{1s}(r_2, b) + \varphi_{1s}(r_1, b)\varphi_{1s}(r_2, a)] \right. \\ \left. + \frac{\lambda}{\sqrt{3}} \sum_{m=-1}^1 \varphi_{2p_m}(\mathbf{r}_1, g)\varphi_{2p_m}^*(\mathbf{r}_2, g) \right\}. \quad (2.11)$$

Энергия связи $\mathcal{E}_{He} = -2.89523$ а.е.

Функция Бонама-Коля является сильнокоррелированной за счет членов вида $r_{12}e^{-ar_1-br_2-\lambda r_{12}}$:

$$\Phi_{BK}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = N [\phi(a, b)(1 + Ar_{12}e^{-\lambda r_{12}}) + \phi(c, d)(B + Ce^{-\mu r_{12}}) + D\phi(e, f)], \quad (2.12)$$

$$\phi(a, b) = e^{-ar_1-br_2} + e^{-ar_2-br_1},$$

где N – нормировочный коэффициент. Энергия связи $\mathcal{E}_{He} = -2.90349$ а.е.

Наконец, функция Митроя построена по принципу конфигурационного взаимодействия. В ней используется 21 орбиталь слэттеровского типа ($9s, 5p, 3d, 3f, 1g$):

$$\Phi_{CI}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \sum_{n=1}^5 \sum_{l=0}^{n-1} N_{nl} P_{nl}(r_1) P_{nl}(r_2) \sum_{m=-l}^l Y_{lm}^*(\hat{\mathbf{r}}_1) Y_{lm}(\hat{\mathbf{r}}_2). \quad (2.13)$$

где $P_{nl}(r)$ — радиальная часть т.н. натуральной орбитали [59]. Ее энергия $\mathcal{E}_{He} = -2.90315$ а.е. Данная функция, как и модель ВК (2.12), является сильнокоррелированной.

Вначале рассмотрим случай, когда конечный ион гелия остается в основном состоянии $n = 1$ (модифицированном лазером). На рис. 2.1 показано, как дифференциальное сечение, отвечающее $(e, 2e)$ процессу с невозбужденным ионом He^+ в конечном состоянии модифицируется полем в случае, когда суммарное число поглощенных и испущенных во время реакции фотонов $N = 0$. В отсутствие поля сечения для различных волновых функций близки друг к другу (см. также [17]). В частности, точные сильнокоррелированные функции ВК и СИ дают практически одинаковый результат. На рис. 2.1 такая же картина наблюдается и в лазерном поле. Эффект лазера практически незаметен в $LP\parallel$ геометрии и становится более-менее заметным в $LP\perp$ случае при больших \mathbf{q} , где сечения в присутствии поля несколько меньше бесполевого.

На рис. 2.2 и 2.3 показано сечение для $n = 1$, в случаях, когда в процессе реакции поглощается или испускается один или два фотона. Величина этих сечений гораздо меньше, чем при $N = 0$, особенно в $LP\parallel$ геометрии. Это объясняется низкой интенсивностью лазерного поля — вероятность многофотонных процессов значительно снижается по мере роста числа участвующих фотонов. В $LP\perp$ геометрии результаты для различных функций гелия даже более близки, чем на рис. 2.1. Кроме того, по форме они качественно отличаются от $LP\parallel$, где результаты похожи на рис. 2.1. Также как и на рис. 2.1, сечения ВК и СИ функций отличаются слабо.

Сечения для $(e, 2e)$ процесса с возбуждением иона при $N = 0$ показаны на рис. 2.4. Как и ожидалось (см., например, [17]), в отсутствие поля сечение с некоррелированной RHF-функцией значительно отличается — как по форме, так и по величине — от сечений с коррелированными функциями (SPM, ВК и СИ). Лазерное поле слабо влияет на сечения, за исключением области больших \mathbf{q} в $LP\perp$ геометрии, где величина сечения меньше, чем в бесполевого случае.

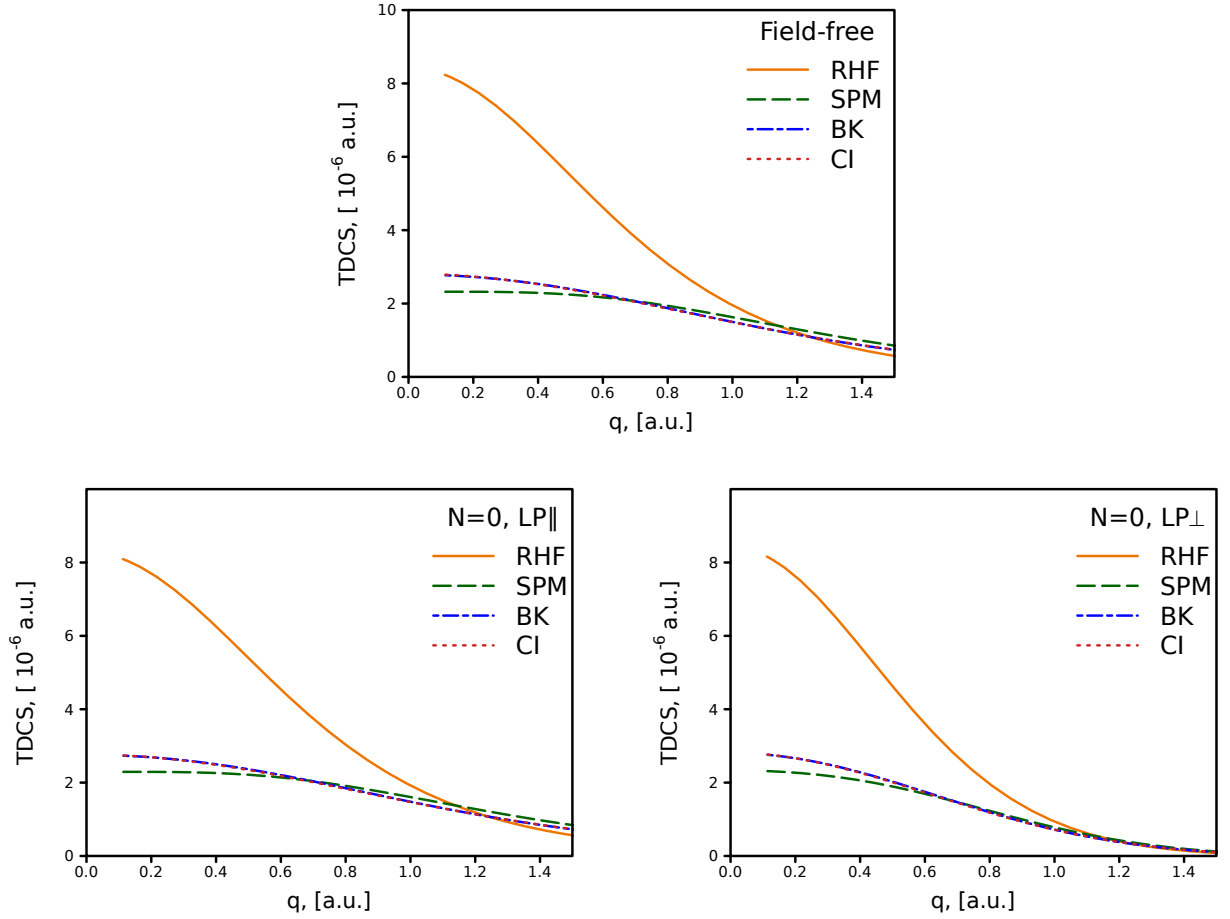


Рис. 2.4. Дифференциальные сечения рассеяния в бесполевоом случае (Field-Free) и в присутствии поля в LP \parallel и LP \perp геометриях, когда суммарное число поглощенных и испущенных фотонов $N = 0$. Ион He^+ после реакции переходит в первое возбужденное состояние $n = 2$.

Аналогично рис. 2.1, результаты с ВК и СИ функциями практически неотличимы.

Сечения в присутствии поля для $N = \pm 1$ и $N = \pm 2$ показаны на рис. 2.5 и 2.6. Так же, как и в случае невозбужденного иона, сечения значительно меньше, чем в бесполевоом случае и случае с $N = 0$, особенно в LP \parallel геометрии. Как и при $n = 1$, в LP \parallel геометрии зависимость сечений от \mathbf{q} такая же, как и в бесполевоом случае. Однако в LP \perp она качественно отличается — в этом случае при малых q наблюдаются нули, а не максимумы. Особый интерес представляет тот факт, что ВК и СИ функции становятся различимы, по крайней мере в LP \parallel геометрии. В частности, в этой геометрии при $N = -2$ импульсный профиль

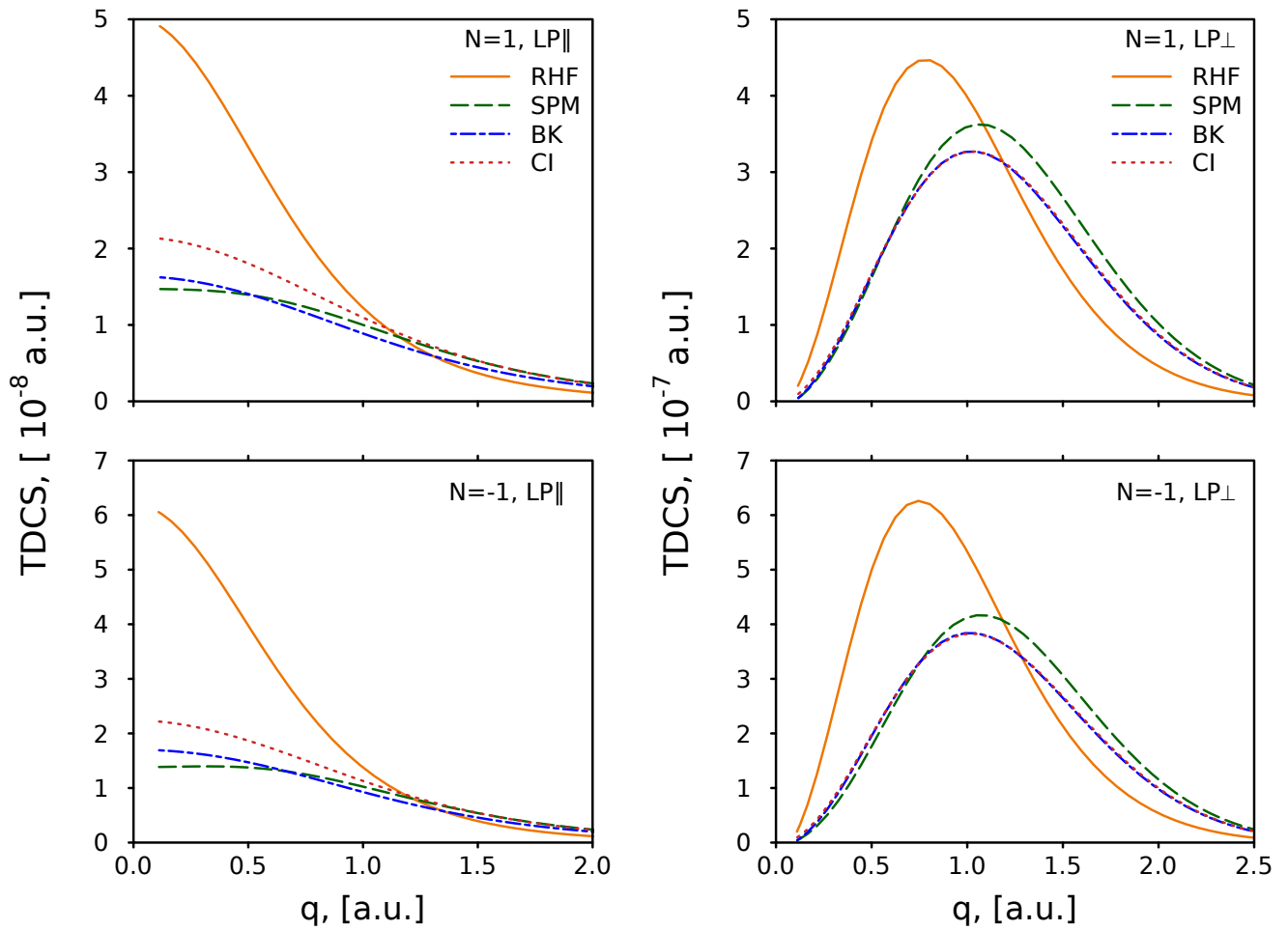


Рис. 2.5. Дифференциальные сечения $(e, 2e)$ на атоме гелия в присутствии лазерного поля, в случае, когда ион He^+ переходит в первое возбужденное состояние. Суммарное число испущенных или поглощенных фотонов $N = \pm 1$.

CI функции почти в два раза больше, чем BK.

2.3. Основные выводы

В данной главе был проведен теоретический анализ процесса ионизации электронным ударом атома гелия в электромагнитном поле лазера. Рассматривались случаи, когда конечный ион оставался либо в основном состоянии, либо в первом возбужденном. Исследовался вопрос чувствительности дифференци-

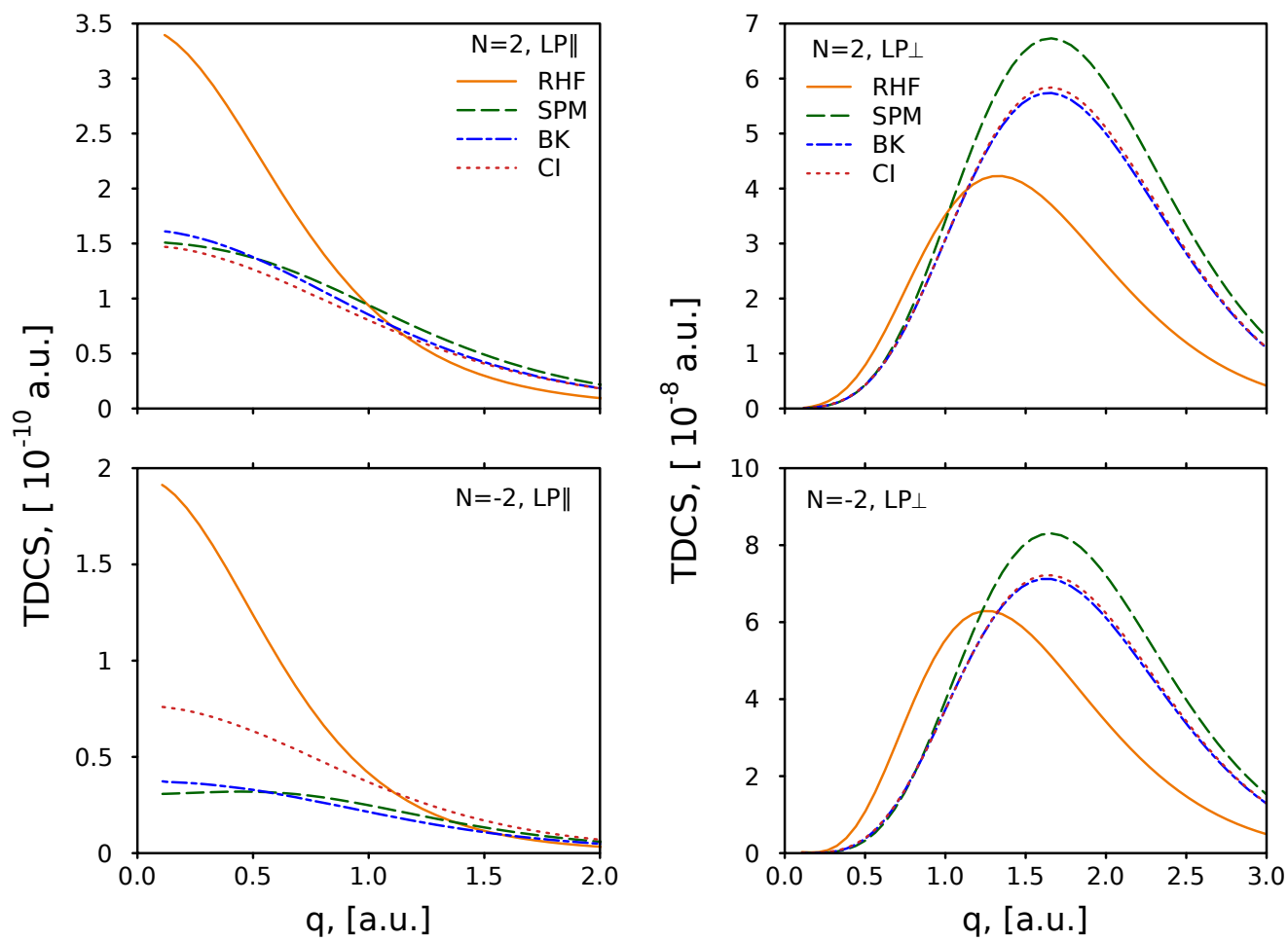


Рис. 2.6. То же, что на рис 2.5, но при $N = \pm 2$.

ального сечения к модели основного состояния атома гелия. Для реально достижимых экспериментальных параметров поля было показано, что когда ион остается в основном состоянии, сечение слабо зависит от используемой модели атома. Напротив, если ион оказывается в возбужденном состоянии, результаты сильно зависят от модели начального состояния атома гелия. Более того, тогда как в бесполовом случае импульсные профили точных сильнооокоррелированных функций практически неразличимы, в присутствии поля они могут заметно отличаться при $N \neq 0$. Полученные результаты показывают, что метод ЭИС в лазерном поле имеет высокий потенциал не только для изучения модифицированных полем атомных и молекулярных состояний, но и для изучения корреляций в многоэлектронных системах.

Глава 3

$(e, 3e)$ ЭИС атома гелия в лазерном поле

Теоретический анализ, выполненный в предыдущей главе, показал, что в присутствии лазерного поля чувствительность метода ЭИС к электрон-электронным корреляциям в атоме He существенно возрастает, если конечный ион He^+ остается в возбужденном состоянии. Настоящая глава развивает эту идею — в ней рассматривается случай, когда один из электронов конечного иона оказывается в состоянии континуума. В литературе этот случай принято называть $(e, 3e)$ ЭИС [60]. Кроме того, в данной главе будет также рассмотрен случай так называемого метода $(e, 3 - 1e)$ ЭИС [17, 18, 60] в присутствии лазерного поля.

3.1. Общие определения и основные приближения

Рассмотрим $(e, 3e)$ процесс, изображенный на рис. 3.1: быстрый налетающий электрон с энергией и импульсом (E_0, \mathbf{p}_0) рассеивается на атоме гелия. После столкновения в континууме оказываются три электрона — рассеянный (E_s, \mathbf{p}_s) и два выбитых (E_e, \mathbf{p}_e) , (E_c, \mathbf{p}_c) , — а также ион He^{2+} . Кинематика процесса такова, что энергии E_0 , E_s и E_e сравнительно велики (несколько кэВ), а энергия E_c на несколько порядков ниже (несколько эВ). По этой причине электрон с энергией E_c будет обозначаться как медленный. Значение импульса

$$\mathbf{q} = \mathbf{p}_s + \mathbf{p}_e - \mathbf{p}_0$$

предполагается достаточно малым для выполнения условия квазиупругого столкновения ЭИС [61], т.е. q варьируется в окрестности порога Бете $\mathbf{q} = 0$ и не превышает нескольких атомных единиц. В этом случае \mathbf{q} можно интерпретировать как импульс, который был у электрона мишени до столкновения с падающим

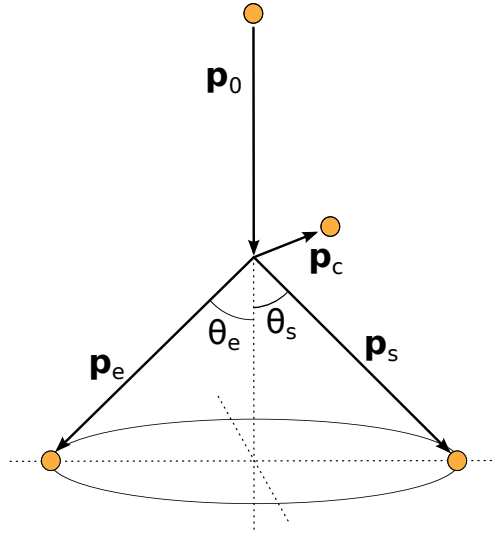


Рис. 3.1. Схематическое изображение $(e, 3e)$ процесса. Энергии быстрых электронов с импульсами \mathbf{p}_0 , \mathbf{p}_e и \mathbf{p}_s — несколько кэВ, медленного электрона с импульсом \mathbf{p}_c — несколько эВ. Кинематика симметричная, т.е. энергии и углы вылета рассеянного и быстрого выбитого электронов одинаковы: $E_s = E_e$, $\theta_s = \theta_e = 45^\circ$. Сечения изучаются как функции направления вылета медленного электрона \mathbf{p}_c .

электроном. Из закона сохранения импульса следует, что

$$\mathbf{q} = -(\mathbf{p}_c + \mathbf{k}_{ion}),$$

где \mathbf{k}_{ion} — импульс иона-остатка He^{2+} .

Как и ранее, процесс столкновения рассматривается в присутствии лазерного поля (1.6), которое адиабатически включается и выключается при $t \rightarrow \mp\infty$ соответственно. Оно линейно поляризовано, с длиной волны много большей как мишени, так и области столкновения, что позволяет применить дипольное приближение. Амплитуда электрической компоненты F_0 мала по сравнению с внутриатомным полем.

S -матрица рассматриваемого процесса записывается в виде

$$S_{fi} = -i \int_{-\infty}^{\infty} dt \langle \chi_{\mathbf{p}_s}(\mathbf{r}_0, t) \Psi_f(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) | V | \chi_{\mathbf{p}_0}(\mathbf{r}_0, t) \Psi_i(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) \rangle, \quad (3.1)$$

где $V = v_{01} + v_{02} + v_0$ — потенциал взаимодействия налетающего электрона с

мишенью, складывающийся из парных электрон-электронных взаимодействий v_{01} и v_{02} и электрон-ядерного взаимодействия v_0 . В рассматриваемой кинематике применимо бинарное приближение. Это означает, что заметный вклад в сечение дает только электрон-электронное взаимодействие (v_{01} или v_{02}). Из-за большой величины импульса p_e , v_0 не дает существенного вклада, даже если начальное и конечное состояния гелия Ψ_i и Ψ_f неортогональны.

S -матрица (3.1) инвариантна относительно калибровочных преобразований. Однако эта инвариантность может быть нарушена при использовании приближенных методов учета влияния поля, таких как нестационарная теория возмущений. Как и в предыдущих главах будем использовать калибровку длины, которая в отличие от калибровки скорости приводит к более точным результатам (см. [62] и раздел 1.3).

Состояния быстрых налетающего и двух вылетающих электронов описываются волковскими функциями (1.9). Влияние поля на основное состояние гелия учитывается в первом порядке теории возмущений (см. раздел 2.1). Используя контактное приближение в котором энергии возбужденных состояний гелия заменяются на некую среднюю энергию $\omega_{cl} \sim |\mathcal{E}_{He}|$ [53], соответствующее выражение в низкочастотном пределе $\omega \ll \omega_{cl}$ можно записать в виде

$$\Psi_i(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) = e^{-i\mathcal{E}_{He}t} \left[1 - \frac{\mathbf{F}_0 \cdot (\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)}{\omega_{cl}} \cos \omega t \right] \Phi_i(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2), \quad (3.2)$$

где Φ_i и \mathcal{E}_{He} — невозмущенная волновая функция и энергия основного состояния гелия. Поскольку мы рассматриваем режим, в котором $F_0/\omega_{cl} \sim 10^{-3}$ а.е. (см. следующий раздел), поправки первого порядка в (3.2) дают пренебрежимо малый вклад и в дальнейшем не учитываются.

Конечное состояние иона гелия строится как симметризованное произведение состояний медленного и быстрого ионизованных электронов

$$\Psi_f(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\chi_{\mathbf{p}_e}(\mathbf{r}_1, t)\xi_{\mathbf{p}_c}(\mathbf{r}_2, t) + \chi_{\mathbf{p}_e}(\mathbf{r}_2, t)\xi_{\mathbf{p}_c}(\mathbf{r}_1, t)]. \quad (3.3)$$

Состояние быстрого электрона описывается волковской функцией, медленного

$$\xi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) = \varphi_{\mathbf{p}}^C(\mathbf{r})\chi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) \exp(-i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}). \quad (3.4)$$

Последняя представляет собой произведение сходящейся кулоновской волны в поле ядра гелия $Z = 2$ [47]

$$\varphi_{\mathbf{p}}^C(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}) \exp\left(\frac{\pi Z}{2p}\right) \Gamma\left(1 + i\frac{Z}{p}\right) {}_1F_1\left(-i\frac{Z}{p}; 1; -i(pr + \mathbf{p} \cdot \mathbf{r})\right), \quad (3.5)$$

и фазового фактора $\chi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) \exp(-i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r})$, взятого из волковской функции и отвечающего за учет влияния лазерного поля. Следует заметить, что использование кулон-волковской функции вместо волковской позволяет более точно учесть динамику в режиме $F_0 \rightarrow 0$. Рассматриваемые параметры поля ($F_0 \approx 4 \cdot 10^{-3}$ а.е. и $\omega \approx 0.06$ а.е.) удовлетворяют критерию применимости кулон-волковской волны, установленному в работе [63].

Используя начальное и конечное состояния гелия в виде (3.2) и (3.3), S -матрицу (3.1) можно представить в виде суммы процессов с различным числом поглощенных ($N < 0$) или испущенных ($N > 0$) фотонов N (см. приложение Б):

$$S = -\frac{4\pi i}{|\mathbf{p}_0 - \mathbf{p}_s|^2} \sum_{N=-\infty}^{\infty} 2\pi\delta(E_T + N\omega)\mathcal{F}_N(\mathbf{q}, \mathbf{p}_c), \quad (3.6)$$

$$E_T = E_e + E_s + E_c - E_0 - \mathcal{E}_{He} + 2U_p, \quad (3.7)$$

где $U_p = F_0^2/4\omega^2$ — пондеромоторный потенциал. Выражение для N -фотонного импульсного профиля \mathcal{F}_N имеет вид

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_N(\mathbf{q}, \mathbf{p}_c) = & \sqrt{2} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\phi}{2\pi} \int d^3r_1 \int d^3r_2 \exp(-iN\phi) \exp(-4i\beta \sin\phi \cos\phi) \\ & \times \exp(i\alpha_{\mathbf{q}+\mathbf{p}_c} \cos\phi) \exp\left[i\frac{\mathbf{F}_0 \cdot (\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)}{\omega} \sin\phi\right] \exp(-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_1) \\ & \times \varphi_{\mathbf{p}_c}^{C*}(\mathbf{r}_2)\Phi_i(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2), \end{aligned} \quad (3.8)$$

где $\beta = F_0^2/8\omega^3$.

Дифференциальное сечение обсуждаемого ($e, 3e$) процесса может быть записано в виде

$$\frac{d\sigma}{dE_s dE_e dE_c d\Omega_s d\Omega_e d\Omega_c} = \sum_{N=-\infty}^{\infty} d^5\sigma_N \delta(E_T + N\omega), \quad (3.9)$$

где N -фотонное дифференциальное сечение (5DCS) дается выражением

$$d^5\sigma_N = \frac{p_s p_e p_c}{(2\pi)^6 p_0} \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{ee} |\mathcal{F}_N(\mathbf{q}, \mathbf{p}_c)|^2, \quad (3.10)$$

Здесь $(d\sigma/d\Omega)_{ee}$ — моттовское сечение электрон-электронного рассеяния.

В случае ($e, 3 - 1e$) процесса медленный ионизованный электрон не детектируется, поэтому сечение (3.9) необходимо проинтегрировать по его энергии и углу вылета. Это приводит к выражению (4DCS)

$$\frac{d^4\sigma}{dE_s dE_e d\Omega_s d\Omega_e} = \sum_{N=-\infty}^{\infty} \frac{p_s p_e p_{c,N}}{(2\pi)^6 p_0} \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{ee} \int d\Omega_c |\mathcal{F}_N(\mathbf{q}, \mathbf{p}_{c,N})|^2, \quad (3.11)$$

где $p_{c,N} = \sqrt{2(E_0 + \mathcal{E}_{He} - E_s - E_e - 2U_p - N\omega)}$. В выражении (3.11) сумма по N ограничена условием $N \leq (E_0 + \mathcal{E}_{He} - E_s - E_e - 2U_p)/\omega$.

3.2. Угловые распределения медленного электрона

В данном разделе представлены результаты расчетов углового распределения медленного испущенного электрона для разных значений числа фотонов N (3.10). Рассматривается симметричная кинематика, в которой $E_s = E_e = E$ и $\theta_s = \theta_e = 45^\circ$ (см. рис. 3.1). Энергия налетающего электрона $E_0 = 6 \text{ keV} - \mathcal{E}_{He}$ ($\mathcal{E}_{He} = -2.90356 \text{ а.е.}$). В ($e, 3e$) случае мы рассматриваем угловое распределение медленного ионизованного электрона с энергией $E_c = 5 \text{ эВ}$. Импульсы остальных электронов фиксированы и лежат в плоскости рассеяния, которая определяется векторами \mathbf{p}_0 и \mathbf{p}_s . В этой геометрии импульс \mathbf{q} также лежит в плоскости рассеяния и противоположен импульсу налетающего электрона \mathbf{p}_0 ,

при этом его величина есть $q \approx 0.15$ а.е. При выбранных значениях кинематических переменных эффекты высших порядков в рассеянии (см. [64, 65]) не должны играть никакой роли (см. [18, 37]).

Рассматриваются две ориентации электрического поля (сравни с рис. 1.2). В одном случае поле лежит в плоскости рассеяния и сонаправлено с импульсом \mathbf{p}_0 (LP \parallel геометрия), во втором – перпендикулярно этой плоскости (LP \perp). Параметры поля выбраны такими же, как и в предыдущей главе: частота $\omega = 1.55$ эВ и интенсивность $I = 5 \cdot 10^{11}$ Вт/см². Соответствующая амплитуда электрического поля $F_0 \approx 4 \cdot 10^{-3}$ а.е. При таком значении поля возмущенное начальное состояние атома (3.2) несущественно отличается от невозмущенного. С другой стороны, как обсуждалось в разделе 1.3, влиянием поля на электроны в континууме нельзя пренебречь даже при кэВ’ных энергиях этих электронов.

В расчетах использовались три из четырех моделей начального состояния атома гелия, описанных в предыдущей главе, а именно: Рутана-Хартри-Фока (RHF, (2.10)), Сильвермана-Платаса-Мэтсена (SPM, (2.11)) и Бонама-Коля (БК, (2.12)). Они отличаются способом учета межэлектронных корреляций, при этом RHF является наименее коррелированной, а БК – наиболее.

Результаты расчетов углового распределения медленного электрона ($e, 3e$) процесса в LP \parallel и LP \perp геометриях при $N = 0$ представлены на рис. 3.2. Для сравнения также показаны сечения в бесполовом случае. В отсутствие поля угловые распределения, отвечающие различным волновым функциям гелия, изотропны и практически неотличимы друг от друга. Из этого можно заключить, что в бесполовом случае сечения нечувствительны к модели электрон-электронных корреляций в атоме гелия. Такая же картина наблюдается и в присутствии поля при $N = 0$. Более того, результаты в LP \parallel и LP \perp геометриях практически одинаковы и близки к бесполовому случаю.

Угловые распределения медленного электрона при $N = \pm 1, \pm 2$ показаны на рис. 3.3 и 3.4. В отличие от рис. 3.2, распределения при $N \neq 0$ существенно анизотропны. При этом результаты в LP \parallel и LP \perp геометриях сильно отличаются

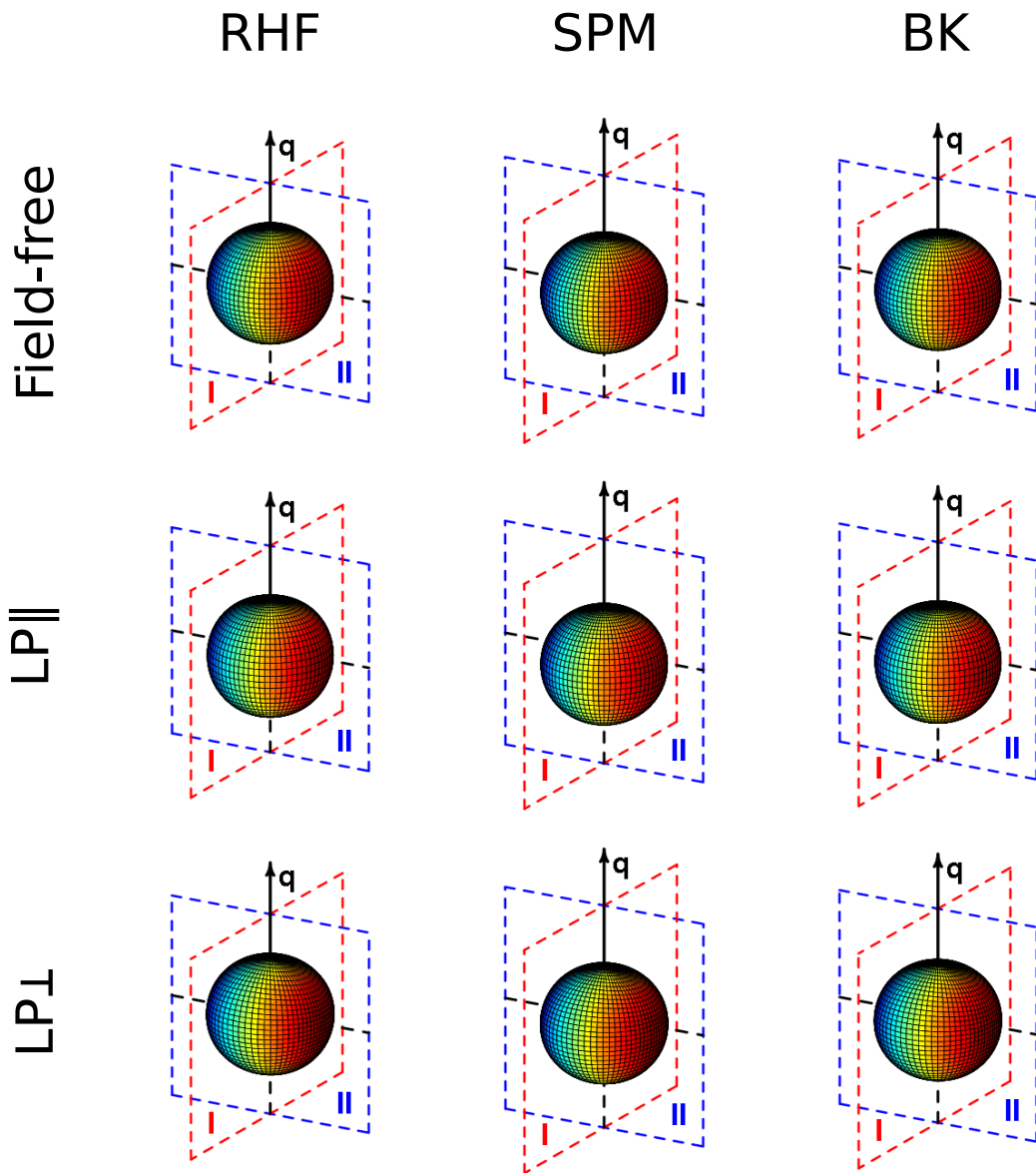


Рис. 3.2. Угловые распределения медленного электрона, вычисленные по формуле (3.10). Плоскость рассеяния (I) и перпендикулярная ей плоскость (II) обозначены красным и синим пунктиром соответственно. Пунктирная линия в плоскости II перпендикулярна оси \mathbf{q} и пересекает ее в начале координат. Угловые распределения в бесполовом случае (Field-free) приведены в верхнем ряду, результаты в присутствии поля при $N = 0$ – в центральном (LP \parallel геометрия) и нижнем (LP \perp геометрия) рядах. Столбцы отличаются используемой функцией основного состояния гелия: RHF (2.10) слева, SPM (2.11) в центре и BK (2.12) справа.

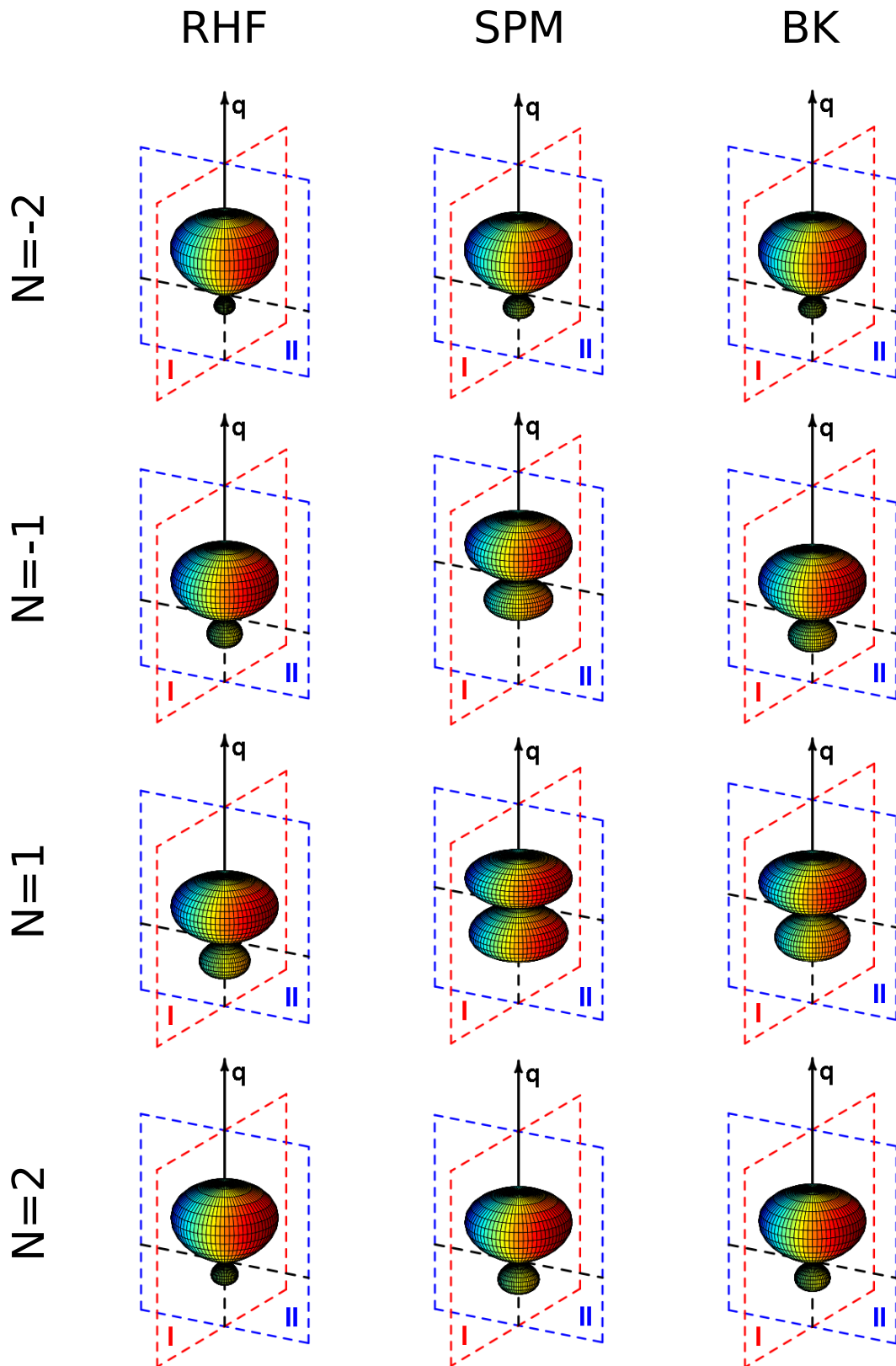


Рис. 3.3. Угловые распределения медленного электрона (3.10) в LP|| геометрии для $N = -2, -1, 1, 2$ (сверху вниз соответственно).

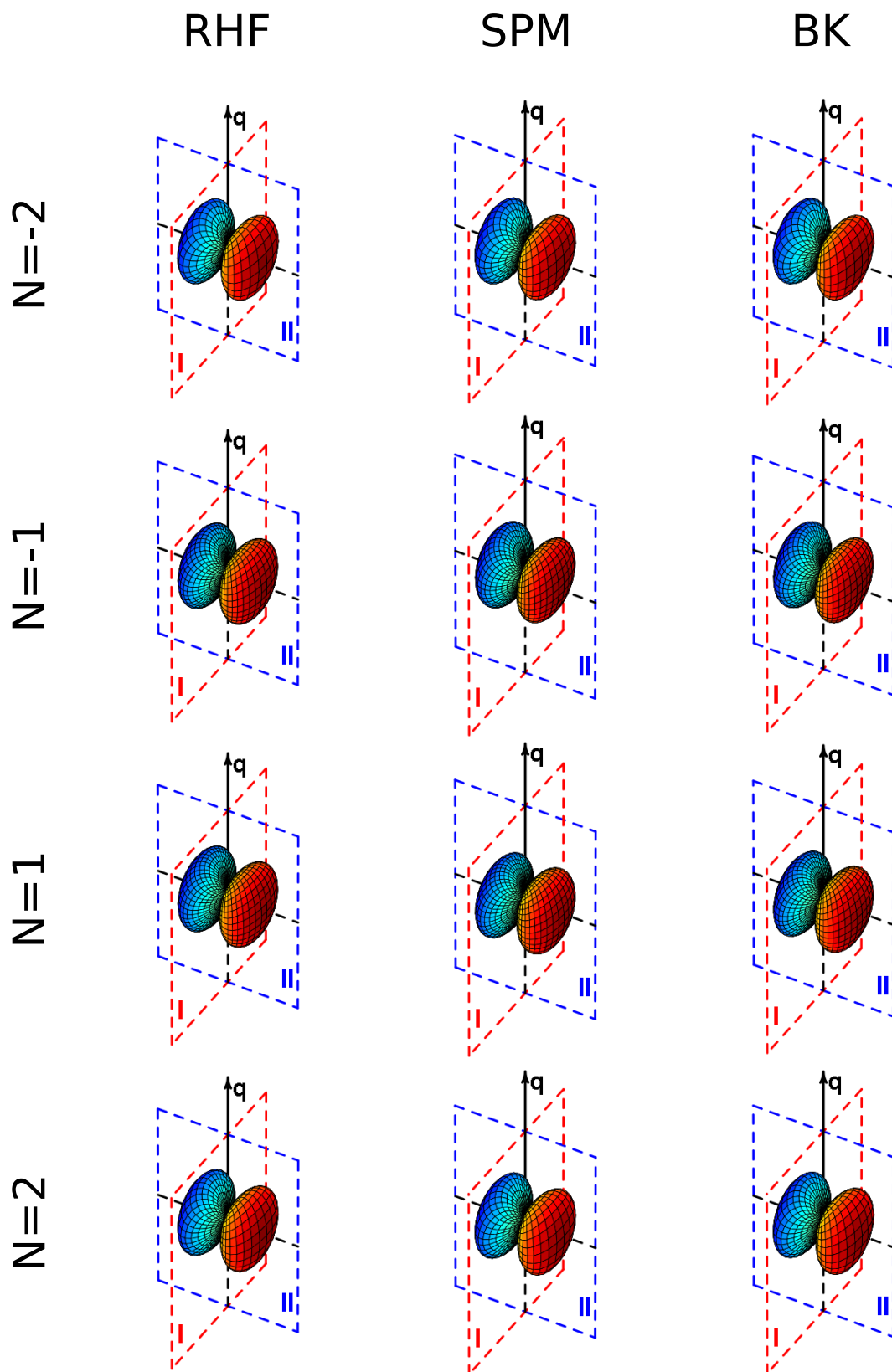


Рис. 3.4. То же, что и на рис. 3.3, но в $LP \perp$ геометрии.

по структуре. Угловое распределение в LP \parallel случае (рис. 3.3) обладает аксиальной симметрией вокруг направления импульса \mathbf{q} . В нем отчетливо видны два пика: бóльший в направлении \mathbf{q} и меньший в противоположном направлении (кроме случая $N = 1$ для SPM, где оба пика примерно одинаковы). В LP \perp геометрии (рис. 3.4) пики симметричны относительно плоскости рассеяния, в которой угловое распределение характеризуется минимальной интенсивностью. В этой геометрии медленный электрон испускается в основном перпендикулярно импульсу \mathbf{q} .

Происхождение максимумов и минимумов в угловых распределениях на рис. 3.3 и 3.4 можно качественно проследить, анализируя структуру амплитуды N -фотонного импульсного профиля \mathcal{F}_N (3.8), квадрат модуля которого определяет сечение. При рассматриваемых параметрах поля в выражении (3.8) значения $\beta \approx 0.01$ а.е и $F_0/\omega \approx 0.07$ а.е. В силу их малости ими можно пренебречь. Тогда приближенное выражение для \mathcal{F}_N будет иметь вид:

$$|\mathcal{F}_N(\mathbf{q}, \mathbf{p}_c)|^2 \approx |J_N(\alpha_{\mathbf{q}+\mathbf{p}_c})|^2 |\mathcal{F}(\mathbf{q}, \mathbf{p}_c)|^2, \quad (3.12)$$

где J_N — функция Бесселя целого порядка

$$J_N(x) = i^{-N} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\phi}{2\pi} e^{i(N\phi + x \cos \phi)}, \quad J_{-N}(x) = (-1)^N J_N(x), \quad (3.13)$$

а

$$\mathcal{F}(\mathbf{q}, \mathbf{p}_c) = \sqrt{2} \int d^3r_1 \int d^3r_2 \exp(-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_1) \varphi_{\mathbf{p}_c}^C(\mathbf{r}_2) \Phi_i(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \quad (3.14)$$

есть амплитуда импульсного профиля в отсутствие поля. В бесполевоом случае сечения изотропны. При этом они определяются квадратом модуля соответствующего импульсного профиля (3.14). Поэтому из (3.12) можно сделать вывод, что анизотропия при $N \neq 0$ связана в основном с функцией Бесселя $J_N(\alpha_{\mathbf{q}+\mathbf{p}_c})$. Минимумы сечения примерно совпадают с узлами этой функции, которые наблюдаются при $\alpha_{\mathbf{q}+\mathbf{p}_c} = 0$. Последнее условие выполняется, если вектор $\mathbf{q} + \mathbf{p}_c$

лежит в плоскости, перпендикулярной \mathbf{F}_0 . Например, в $LP \perp$ геометрии этому условию удовлетворяет плоскость рассеяния (см. плоскость I на рис. 3.4).

Что касается чувствительности сечений при $N \neq 0$ к различным моделям электрон-электронных корреляций в гелии, то на рис. 3.4 различия между RHF, SPM и ВК незначительны. Однако на рис. 3.3 разница заметна и особенно сильно проявляется в $N = \pm 1$ случае. Это означает, что оценка (3.12) является довольно грубой, поскольку в противном случае все три используемых волновых функции давали бы одинаковый результат (как в бесполовом случае). В частности, при выводе этого приближенного выражения из (3.8) мы пренебрегли отношением F_0/ω . Хотя оно мало по атомным масштабам, его наличие сказывается при $\alpha_{\mathbf{q}+\mathbf{p}_c} \rightarrow 0$. Таким образом, эффекты, связанные с лазерным полем, нельзя простым образом отделить от электрон-электронных корреляций, что и демонстрируют результаты на рис. 3.3

3.3. $(e, 3 - 1e)$ сечения

В $(e, 3 - 1e)$ случае сечение изучается как функция q (см. рис. 1.2). Результаты в бесполовом случае и в присутствии поля представлены на рис. 3.5. Различные модели волновой функции гелия предсказывают существенно разное поведение сечения, что согласуется с полученными ранее результатами [17, 18]. В частности наиболее сильное отличие как по форме, так и по амплитуде обычно наблюдается между коррелированными и некоррелированными функциями.

Результаты для 4DCS в присутствии поля практически не отличаются от бесполовых. Это можно объяснить в духе правила сумм Кролла-Ватсона, которое изначально было сформулировано для процессов рассеяния электронов на атоме в лазерном поле [66]. Используя приближенное выражение (3.12), выражение (3.11) для 4DCS можно представить в виде:

$$\frac{d^4\sigma}{dE_s dE_e d\Omega_s d\Omega_e} \approx \int d\Omega_c \sum_{N=-\infty}^{\infty} |J_N(\alpha_{\mathbf{q}+\mathbf{p}_{c,N}})|^2 d^5\sigma_{\text{FF}}(\mathbf{q}, \mathbf{p}_{c,N}), \quad (3.15)$$

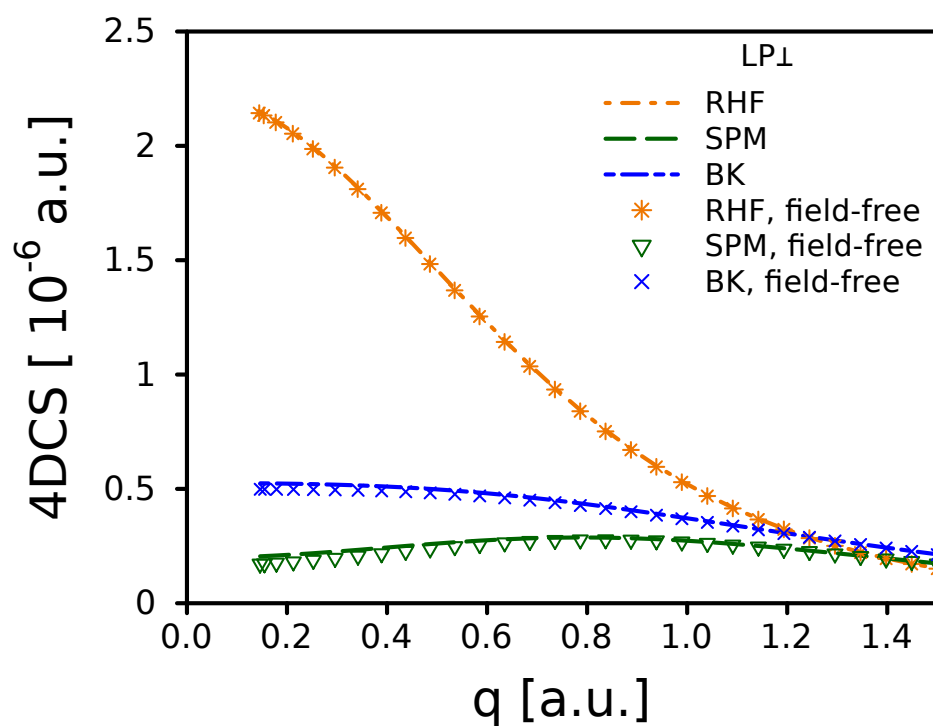
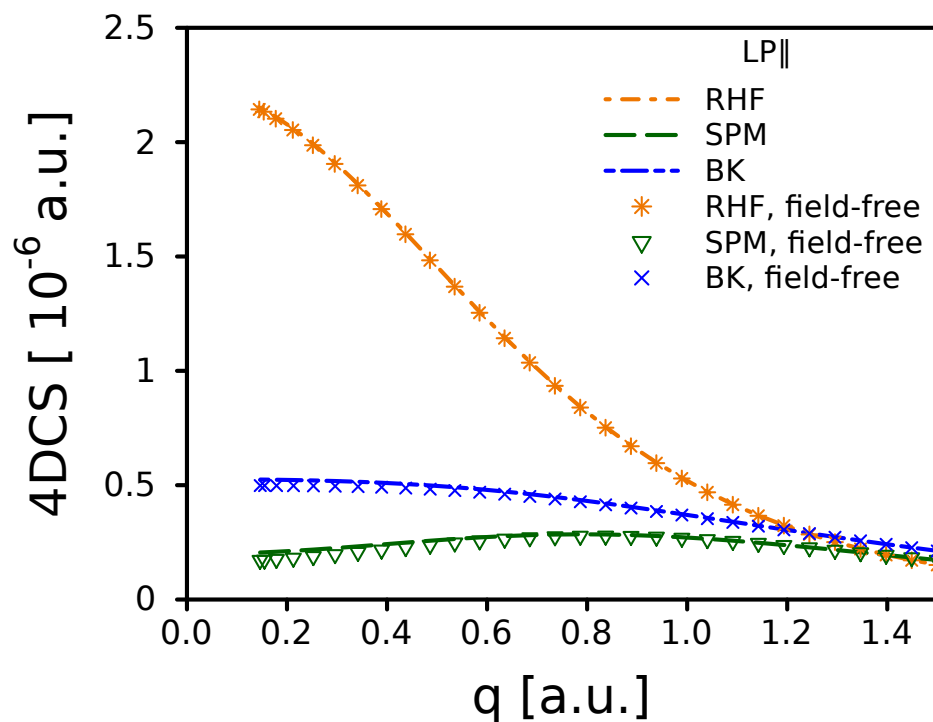


Рис. 3.5. Дифференциальные сечения $(e, 3 - 1e)$ ЭИС процесса в присутствии лазерного поля для различных моделей основного состояния атома гелия в геометриях, изображенных на рис. 1.2. Для всех моделей результаты в присутствии поля практически совпадают с бесполевым случаем.

где $d^5\sigma_{\text{FF}}(\mathbf{q}, \mathbf{p}_{c,N})$ — 5DCS в бесполовом случае, когда импульс медленного электрона равен $\mathbf{p}_{c,N}$. Из рис. 3.6 видно, что при выбранных параметрах поля только незначительная часть слагаемых дает существенный вклад в сумму (3.15): на нем представлены результаты суммирования нескольких первых слагаемых для SPM функции. Только процессы с $|N| \leq 2$ дают заметно отличный от нуля вклад в сечение, поэтому пренебрегая изменением $p_{c,N}$ в пределах $|N| \leq 2$, т.е. полагая $p_{c,N} \approx p_c$ и используя соотношение

$$\sum_{N=-\infty}^{\infty} |J_N(x)|^2 = 1,$$

из выражения (3.15) мы получаем бесполовой результат.

3.4. Основные выводы

В данной главе были выполнен теоретический анализ $(e, 3e)$ процессов на атоме гелия в присутствии линейно поляризованного лазерного поля в кинематическом режиме ЭИС. Для рассматривавшихся параметров поля — низкой частоты и малой интенсивности (по атомным масштабам) — была сформулирована модель $(e, 3e)$ рассеяния. В ней амплитуда перехода считается в первом борновском приближении. Состояния быстрых электронов в континууме описываются волковскими функциями, а медленного — кулон-волковской функцией. Для различных моделей основного состояния атома гелия были проведены численные расчеты сечений 5DCS и 4DCS в симметричной некопланарной геометрии. Изучалась чувствительность сечений к электрон-электронным корреляциям в гелии. Рассматривались две ориентации электрической компоненты лазерного поля: когда оно лежит в плоскости рассеяния и коллинеарно импульсу начального электрона (LP \parallel), и когда оно перпендикулярно этой плоскости (LP \perp). Было показано, что в $(e, 3e)$ случае угловое распределение медленного электрона сильно зависит от модели начального состояния атома гелия, если $N \neq 0$ и реализуется LP \parallel геометрия. Если же $N = 0$ или используется LP \perp

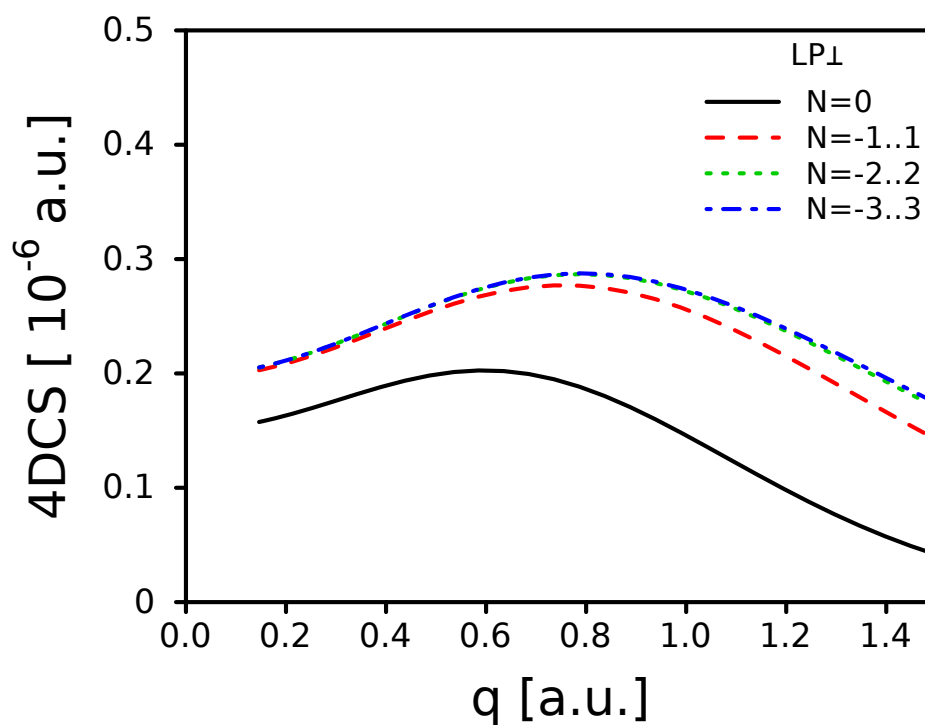
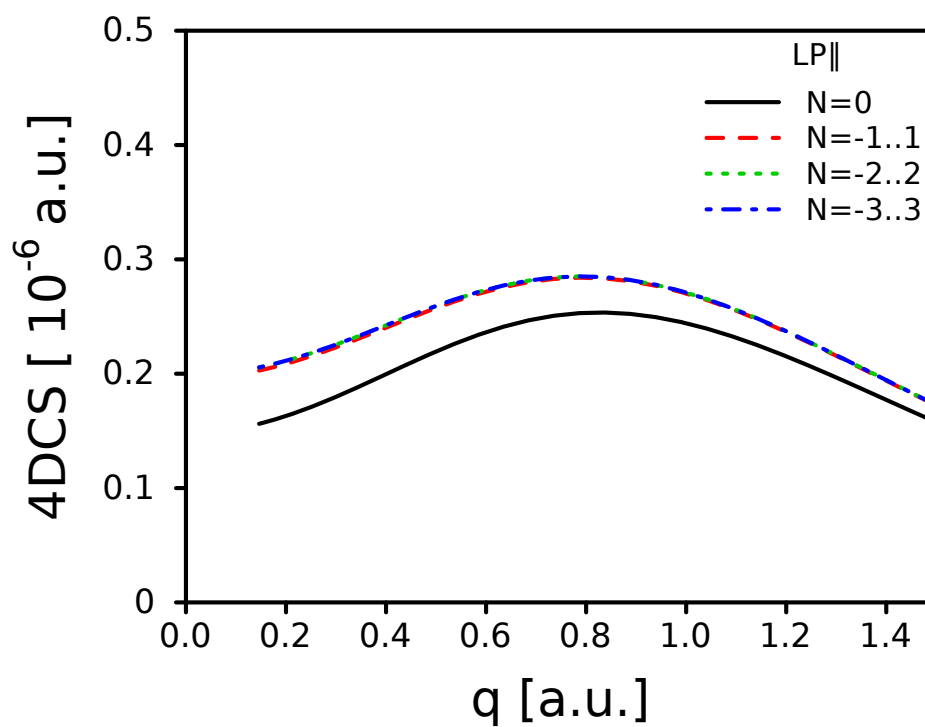


Рис. 3.6. Сечения 4DCS в присутствии лазерного поля в LP \parallel (сверху) и LP \perp (снизу) геометриях для SPM функции (2.11). Представлены результаты суммирования по различному числу N поглощенных или испущенных фотонов.

геометрия, угловые распределения не проявляют заметной чувствительности к выбранной волновой функции.

Хорошо известно, что за счет изучения углового распределения медленно-го электрона, $(e, 3e)$ метод позволяет получить более богатую информацию о межэлектронных корреляциях, которая фактически недоступна $(e, 2e)$ и $(e, 3-1e)$ методам. Важным результатом является то, что присутствие лазерного поля, даже если его эффект на мишень пренебрежимо мал, усиливает чувствительность $(e, 3e)$ ЭИС к межэлектронным корреляциям в мишени.

Двукратная фотоионизация легких молекул

В предыдущих главах рассматривались $(e, 2e)$ и $(e, 3e)$ процессы на атомах в переменном электромагнитном поле, в которых ионизация обусловлена взаимодействием падающей частицы (электрона) с мишенью (атомом), в то время как эффект ионизации, производимый полем, пренебрежимо мал. Данная глава посвящена ситуации, когда само электромагнитное поле выступает в роли падающих частиц — фотонов. При этом будут рассмотрены процессы двукратной фотоионизации (т.н. $(\gamma, 2e)$ процессы) на молекулярных мишенях, в которых молекула, поглощая фотон, испускает два электрона с импульсами \mathbf{k}_1 и \mathbf{k}_2 (см. рис. 4.1). Рассмотрение будет ограничено двухатомными молекулами, для которых можно определить направление межъядерной оси $\boldsymbol{\rho}$.

4.1. Амплитуда и сечение $(\gamma, 2e)$ процесса

Сечение двукратной фотоионизации молекулярной мишени в дипольном приближении можно вычислить по формуле

$$\sigma^{(4)}(\boldsymbol{\rho}) = \frac{d^4\sigma}{d\Omega_\rho d\Omega_1 d\Omega_2 d(k_1^2/2)} = \frac{4\pi^2}{\omega} \alpha k_1 k_2 |T_{fi}|^2, \quad (4.1)$$

где $d\Omega_1$, $d\Omega_2$ и $d\Omega_\rho$ — телесные углы направлений векторов \mathbf{k}_1 , \mathbf{k}_2 и $\boldsymbol{\rho}$, α — постоянная тонкой структуры, а ω — частота фотона. Если начальная ориентация молекулы неизвестна, необходимо проинтегрировать сечение по всем возможным направлениям межъядерной оси

$$\sigma^{(3)} = \frac{1}{4\pi} \int d\Omega_\rho \sigma^{(4)}(\boldsymbol{\rho}). \quad (4.2)$$

Амплитуда перехода дается выражением

$$T_{fi} = \int d\mathbf{r}_1 \int d\mathbf{r}_2 \bar{\chi}_f(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) V \varphi_i(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2), \quad V = \epsilon (\nabla_{r_1} + \nabla_{r_2}), \quad (4.3)$$

в котором функция $\varphi_i(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ описывает начальное состояние мишени-молекулы, а конечное состояние $\chi_f(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ моделируется как симметризованная функция двух ионизованных электронов

$$\chi_f(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{\phi_f(\mathbf{k}_1, \mathbf{r}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{r}_2) + \phi_f(\mathbf{k}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{k}_2, \mathbf{r}_1)}{\sqrt{2}}, \quad (4.4)$$

каждый из которых испытывает влияние поля молекулярного иона и другого электрона. В соответствии с этим, функция $\phi_f(\mathbf{k}_i, \mathbf{r}_i, \mathbf{k}_j, \mathbf{r}_j)$, описывающая два электрона в континууме, строится как произведение состояний электронов в поле молекулярного иона $t(\mathbf{k}_i, \mathbf{r}_i)$ и фактора, учитывающего корреляцию между ними:

$$\phi_f(\mathbf{k}_1, \mathbf{r}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{r}_2) = v(k_{12}) {}_1F_1(\imath\alpha_{12}, 1, -\imath(k_{12}r_{12} + \mathbf{k}_{12}\mathbf{r}_{12})) t(\mathbf{k}_1, \mathbf{r}_1) t(\mathbf{k}_2, \mathbf{r}_2). \quad (4.5)$$

В последнем выражении $v(k_{12})$ — фактор Гамова

$$v(k_{12}) = \exp\left(-\frac{\pi\alpha_{12}}{2}\right) \Gamma(1 - \imath\alpha_{12}), \quad \alpha_{12} = \frac{1}{2k_{12}}, \quad \mathbf{k}_{12} = \frac{1}{2}(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2).$$

Волновая функция фотоэлектрона в поле молекулярного иона описывается т.н. двухцентровой кулоновской функцией (ТСС)

$$t(\mathbf{k}_i, \mathbf{r}_j) = \exp(-\pi\alpha_i) |\Gamma(1 - \imath\alpha_i)|^2 \frac{\exp(\imath\mathbf{k}_i\mathbf{r}_j)}{(2\pi)^{3/2}} \times \quad (4.6)$$

$${}_1F_1(\imath\alpha_i, 1, -\imath(k_i r_{ja} + \mathbf{k}_i\mathbf{r}_{ja})) {}_1F_1(\imath\alpha_i, 1, -\imath(k_i r_{jb} + \mathbf{k}_i\mathbf{r}_{jb})),$$

$$\alpha_i = -\frac{Z_i}{k_i}, \quad \mathbf{r}_{ja} = \mathbf{r}_j + \boldsymbol{\rho}/2, \quad \mathbf{r}_{jb} = \mathbf{r}_j - \boldsymbol{\rho}/2, \quad i, j = 1, 2,$$

и $Z_i = 1$. Подобное описание впервые было предложено в работе [67] по аналогии с известной ЗС моделью [68]. Заметим также, что в выражении (4.3) мы используем только калибровку скорости, поскольку считается, что в рассматриваемой нами области энергий (см. разделы 4.2 и 4.3) она является наиболее предпочтительной [69].

Используя симметрию начального и конечного состояний, приведенное выражение для амплитуды перехода (4.3) можно свести к следующему шестимер-

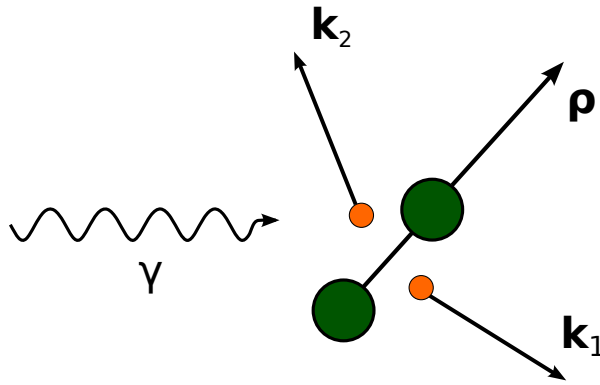


Рис. 4.1. Схема $(\gamma, 2e)$ процесса: двухатомная молекула с направлением межъядерной оси ρ поглощает γ -квант и испускает два электрона с импульсами \mathbf{k}_1 и \mathbf{k}_2 .

ному интегралу

$$T_{fi} = \sqrt{2} \int d\mathbf{r}_1 \int d\mathbf{r}_2 \phi_f^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) V \phi_i(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2). \quad (4.7)$$

Пространственные координаты волновых функций задаются в молекулярной системе координат, начало которой находится в центре масс молекулы, а ось z направлена вдоль межъядерной оси. Для расчета амплитуды перехода (4.7) были разработаны эффективные алгоритмы и программы вычисления с заданной точностью шестикратных интегралов от произведения волновой функции начального состояния двухатомной молекулы, дипольного момента и двух коррелированных двухцентровых кулоновских функций непрерывного спектра конечного состояния двух выбитых электронов.

4.2. Двукратная фотоионизация молекулы водорода

Важным вопросом теории двукратной фотоионизации молекул является связь между электрон-электронными корреляциями в начальном состоянии мишени и угловым распределением конечных ионизованных электронов. Наиболее подходящей для изучения этого вопроса мишенью является молекула водорода, поскольку она представляет собой простейшую молекулярную систему, для которой возможен процесс двукратной фотоионизации. Кроме того, для ее основного состояния известно достаточно много приближенных выражений. По-

этому в данном разделе проведены расчеты дифференциального сечения $(\gamma, 2e)$ процесса на молекуле водорода с различными моделями ее основного состояния $^1\Sigma_g$.

В расчетах использованы три модели волновой функции водорода. Наиболее простой является модель Гайтлера-Лондона [70], которая строится из водородоподобных $1s$ -функций

$$\begin{aligned}\varphi_i(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= N(\rho)[a_1b_2 + a_2b_1], \\ a_i &= \sqrt{\frac{\lambda^3}{\pi}}e^{-\lambda r_{ia}}, \quad b_i = \sqrt{\frac{\lambda^3}{\pi}}e^{-\lambda r_{ib}}, \\ N(\rho) &= \frac{1}{\sqrt{2(1+S^2)}}, \quad S = \frac{e^{-\lambda\rho}}{3} [\rho^2\lambda^2 + 3\rho\lambda + 3], \quad \lambda = 1.\end{aligned}\tag{4.8}$$

Ее энергия основного состояния $\mathcal{E}_{H_2} = -1.115$ а.е. при равновесном значении межъядерного расстояния $\rho = 1.56$ а.е. Поскольку расчеты с ней также проводились в [71], сравнение с ними дает возможность удостовериться в корректности используемого нами метода.

Еще одна модель – функция Мюллера-Эйринга [72], в которой используются т.н. частично локализованные орбитали

$$\begin{aligned}\varphi_i(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= N(\rho)[\phi(1)\psi(2) + \psi(1)\phi(2)] \\ \phi(j) &= x_a(j) + \epsilon x_b(j), \quad \psi(j) = \epsilon x_a(j) + x_b(j), \\ x_a(j) &= \exp(-\beta\xi_j - \gamma\eta_j), \quad x_b(j) = \exp(-\beta\xi_j + \gamma\eta_j), \\ \xi_j &= \frac{r_{ja} + r_{jb}}{\rho}, \quad \eta_j = \frac{r_{ja} - r_{jb}}{\rho}.\end{aligned}\tag{4.9}$$

Энергия связи $\mathcal{E}_{H_2} = -1.149$ а.е., межъядерное расстояние $\rho = 1.4$ а.е.

Наконец, функция Турбинера-Гевары [73], дает наилучшее значение энергии из рассматриваемых моделей: $\mathcal{E}_{H_2} = -1.1744196$ а.е. при $\rho = 1.4$ а.е. Она явно содержит электрон-электронный коррелятор r_{12} и строится путем варьи-

рования 14 параметров:

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = A_1\psi_1 + A_2\psi_2 + A_3\psi_3, \quad (4.10)$$

$$\psi_1 = (1 + \hat{P}_{12})(1 + \hat{P}_{ab}) \exp(-\alpha_1 r_{1a} - \alpha_2 r_{1b} - \alpha_3 r_{2a} - \alpha_4 r_{2b} - \gamma_1 r_{12}),$$

$$\psi_2 = (1 + \hat{P}_{12}) \exp(-\alpha_5 r_{1a} - \alpha_6 r_{1b} - \alpha_6 r_{2a} - \alpha_5 r_{2b} - \gamma_2 r_{12}),$$

$$\psi_3 = (1 + \hat{P}_{12}) \exp(-\alpha_7 r_{1a} - \alpha_7 r_{1b} - \alpha_8 r_{2a} - \alpha_8 r_{2b} - \gamma_3 r_{12}).$$

Операторы \hat{P}_{12} и \hat{P}_{ab} переставляют местами электроны ($1 \leftrightarrow 2$) и ядра ($a \leftrightarrow b$) соответственно. Как будет показано далее, сильнокоррелированная функция Турбинера-Гевары дает лучшее совпадение с экспериментальными данными, чем слабокоррелированные модели Гайтлера-Лондона и Мюллера-Эйринга.

На рис. 4.2 рассматривается ситуация, в которой вектор поляризации фотона $\boldsymbol{\epsilon}$, направление межъядерной оси $\boldsymbol{\rho}$ и направление вылета одного из электронов \mathbf{k}_1 лежат в одной плоскости, а второй электрон вылетает перпендикулярно им. На левом графике, где $\boldsymbol{\epsilon}$ и $\boldsymbol{\rho}$ коллинеарны, все три функции предсказывают одинаковую форму сечения, хотя ожидаемая интенсивность в модели Гайтлера-Лондона примерно в полтора раза меньше. На правом графике рис. 4.2, где $\boldsymbol{\epsilon} \perp \boldsymbol{\rho}$, в случае Гайтлера-Лондона в распределении появляются четыре пика, которые подавлены в модели Мюллера-Эйринга и полностью отсутствуют для функции Турбинера-Гевары.

На рис. 4.3 положения максимумов пиков, характеризующие наиболее вероятные направления вылета электрона \mathbf{k}_2 , различаются. Наконец, на рис. 4.4 различия между тремя моделями проявляются наиболее явно — наблюдаются отличия не только по интенсивности, но и по форме сечений.

На рис. 4.5 представлено сечение, усредненное по направлению межъядерной оси молекулы (4.2). Энергии конечных электронов $E_1 = E_2 = 12.5$ эВ. Проведено сравнение с экспериментальными результатами, извлеченными из [74]. Использована функция Турбинера-Гевары, которая точнее остальных моделей учитывает корреляции в начальном состоянии мишени-молекулы. Направление поляризации фотона $\boldsymbol{\epsilon}$ и импульсы ионизованных электронов \mathbf{k}_1 и \mathbf{k}_2 лежат в

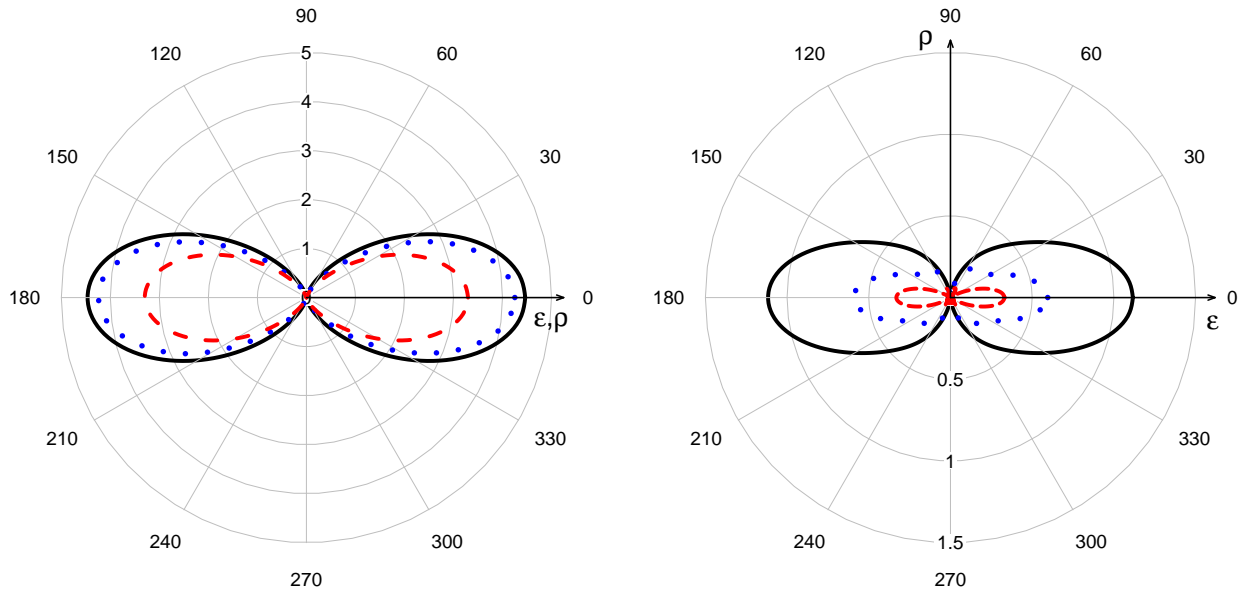


Рис. 4.2. Дифференциальное сечение (4.1) двукратной фотоионизации молекулы водорода H_2 в полярных координатах (в атомных единицах, увеличенное в 10^5 раз). Вектор поляризации γ -кванта ϵ и направление межъядерной оси ρ лежат в одной плоскости; направление вылета одного из электронов также лежит в этой плоскости и задается полярным углом на графике, второго — перпендикулярно этой плоскости. Энергии электронов одинаковы и равны $E_1 = E_2 = 10$ эВ. Слева: вектора ϵ и ρ коллинеарны (ср. с [71] рис. 8a); справа: вектор ϵ перпендикулярен ρ (ср. с [71] рис. 8d). Сплошная линия — результаты расчетов с функцией Турбинера-Гевары (4.10), точечная — с функцией Мюллера-Эйринга (4.9), пунктир — с функцией Гайтлера-Лондона (4.2).

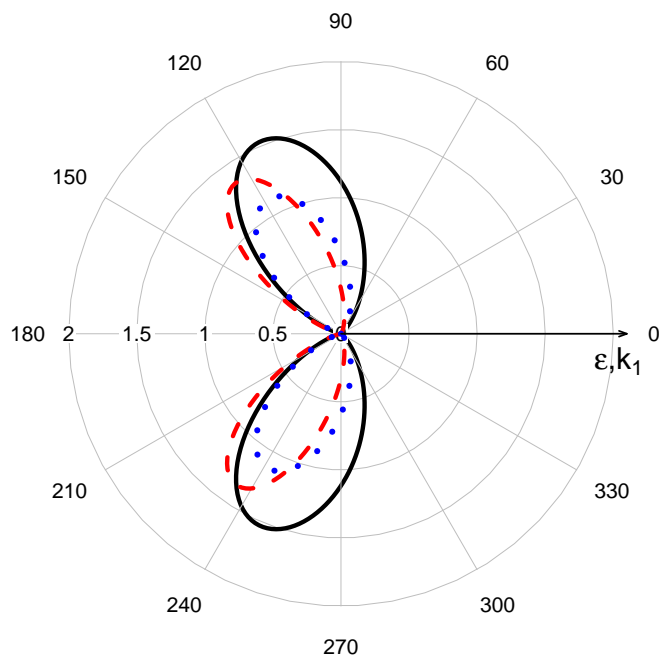


Рис. 4.3. То же, что на рис. 4.2, но при $\epsilon \uparrow \uparrow \mathbf{k}_1$; \mathbf{k}_2 лежит в одной плоскости с ϵ и \mathbf{k}_1 , межъядерная ось ρ перпендикулярна им. (ср. [71] рис. 10а).

плоскости рисунка. Угол вылета одного из электронов фиксирован и составляет $\theta_1 = 10^\circ$ по отношению к направлению поляризации фотона, угол вылета второго электрона варьируется. Экспериментальные результаты нормированы таким образом, чтобы совпадать с теоретическими в точке около 250° . Видно, что теоретические расчеты хорошо воспроизводят экспериментальные данные. Расчеты с функцией Гайтлера-Лондона, проведенные в [74], предсказывают более узкий и менее интенсивный пик в направлении 120° и кроме того небольшие пики в направлении 60 и 330 градусов, которые не наблюдаются экспериментально.

Таким образом, был рассмотрен процесс двукратной фотоионизации молекулы водорода для описания начального состояния которой использовалось три модели, по разному учитывающих электрон-электронные корреляции. Конечное состояние двух медленных ионизованных электронов в поле кулоновского потенциала молекулярного иона строилось с помощью ТСС-функций. Сравнение результатов, предсказываемых различными моделями, еще раз подтвержда-

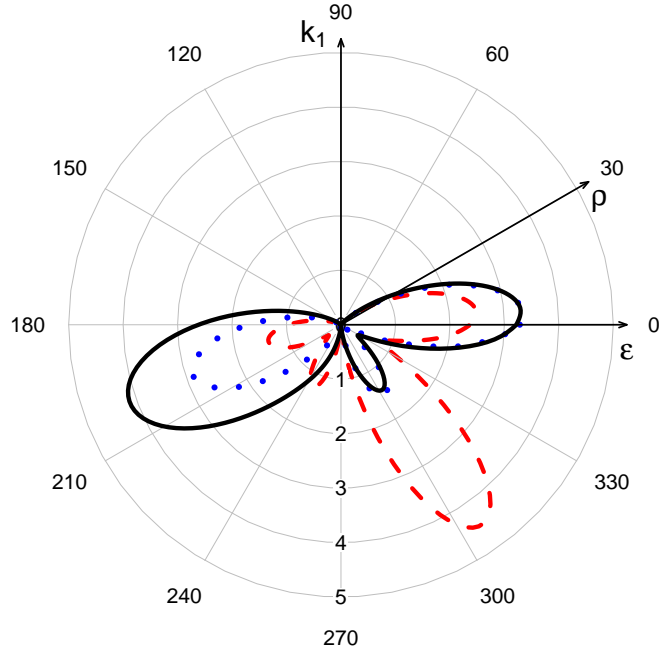


Рис. 4.4. То же, что на рис. 4.2, но при $\mathbf{k}_1 \perp \boldsymbol{\epsilon}$; $\boldsymbol{\rho}$ лежит в одной плоскости с $\boldsymbol{\epsilon}$ (ср. [71], рис. 11b).

ет важность учета электрон-электронных корреляций в начальном состоянии мишени для корректного описания процессов двукратной фотоионизации, что отмечалось в ранних работах по этой тематике [75].

4.3. Двукратная фотоионизация молекулы азота

Изучение процессов двукратной ионизации молекул азота представляет интерес для астрофизики и физики плазмы в силу высокой распространенности этого газа.

Сечение определяется выражением (4.1), где амплитуда перехода вычисляется согласно (4.7) как

$$T_{fi} = \sqrt{2} \int d\mathbf{r}_1 \int d\mathbf{r}_2 \phi_f^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) V \varphi_i(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2).$$

Состояние электронов в континууме $\phi_f(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ как и в случае водорода описывается коррелированным произведением двух двуцентровых кулоновских функций (4.5). Построение начального состояния молекулы азота $\varphi_i(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ несколько

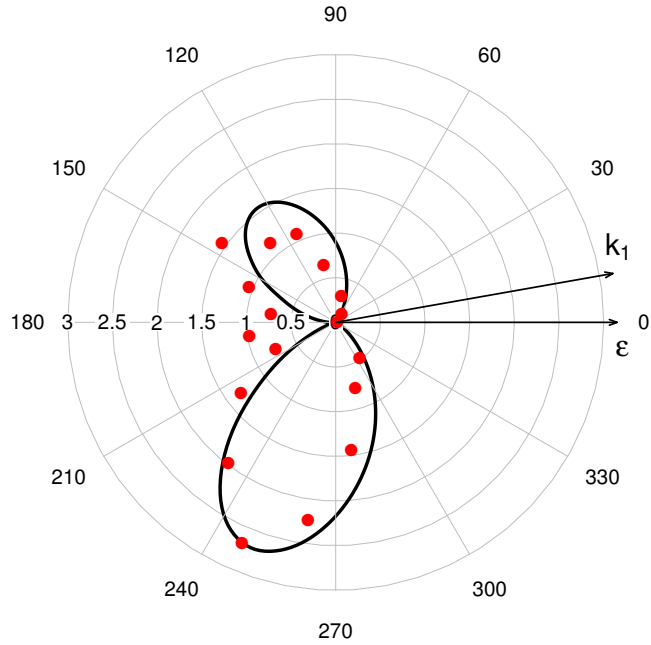


Рис. 4.5. Усредненное по направлениям межъядерной оси дифференциальное сечение двукратной фотоионизации молекулы водорода (4.2). Направление поляризации электромагнитного поля ϵ и импульсы фотоэлектронов \mathbf{k}_1 и \mathbf{k}_2 лежат в одной плоскости. Угол вылета одного из электронов фиксирован $\theta_1 = 10^\circ$, а второго варьируется. Экспериментальные данные [74] показаны точками, сплошная линия — теоретический расчет сечения с использованием модели Турбинера-Гевары в качестве начального состояния молекулы водорода.

сложнее, чем в случае водорода. Электронная конфигурация азота может быть записана в виде [76]

$$1\sigma_g^2 1\sigma_u^2 2\sigma_g^2 2\sigma_u^2 3\sigma_g^2 1\pi_u^4. \quad (4.11)$$

Для построения σ_g^- , σ_u^- и π_u^- -молекулярных орбиталей используется слэтеровский базис, который включает в себя $1s$, $1s'$, $2s$, $2s'$, $2p$, $2p'$, а также $3d$ -орбитали

[76]:

$$\begin{aligned}
\psi_i^g &= c_{i1} \frac{1s_a + 1s_b}{\sqrt{2}} + c_{i2} \frac{1s'_a + 1s'_b}{\sqrt{2}} + c_{i3} \frac{2s_a + 2s_b}{\sqrt{2}} + c_{i4} \frac{2s'_a + 2s'_b}{\sqrt{2}} \\
&+ c_{i5} \frac{2p_{z_a} - 2p_{z_b}}{\sqrt{2}} + c_{i6} \frac{2p'_{z_a} - 2p'_{z_b}}{\sqrt{2}} + c_{i7} \frac{3d_{zz_a} + 3d_{zz_b}}{\sqrt{2}}, \quad i = 1, 3, 5, \\
\psi_i^u &= c_{i1} \frac{1s_a - 1s_b}{\sqrt{2}} + c_{i2} \frac{1s'_a - 1s'_b}{\sqrt{2}} + c_{i3} \frac{2s_a - 2s_b}{\sqrt{2}} + c_{i4} \frac{2s'_a - 2s'_b}{\sqrt{2}} \\
&+ c_{i5} \frac{2p_{z_a} + 2p_{z_b}}{\sqrt{2}} + c_{i6} \frac{2p'_{z_a} + 2p'_{z_b}}{\sqrt{2}} + c_{i7} \frac{3d_{zz_a} - 3d_{zz_b}}{\sqrt{2}}, \quad i = 2, 4, \\
\phi_i^x &= c_{i8} \frac{2p_{x_a} + 2p_{x_b}}{\sqrt{2}} + c_{i9} \frac{2p'_{x_a} + 2p'_{x_b}}{\sqrt{2}} + c_{i10} \frac{3d_{xz_a} - 3d_{xz_b}}{\sqrt{2}}, \quad i = 6, \\
\phi_i^y &= c_{i8} \frac{2p_{y_a} + 2p_{y_b}}{\sqrt{2}} + c_{i9} \frac{2p'_{y_a} + 2p'_{y_b}}{\sqrt{2}} + c_{i10} \frac{3d_{yz_a} - 3d_{yz_b}}{\sqrt{2}}, \quad i = 6.
\end{aligned} \tag{4.12}$$

Слэтеровские орбитали задаются выражениями:

$$\begin{aligned}
1s &= \sqrt{\frac{\xi_1^3}{\pi}} \exp(-\xi_1 r), \quad 1s' = \sqrt{\frac{\xi_2^3}{\pi}} \exp(-\xi_2 r), \\
2s &= \sqrt{\frac{\xi_3^5}{3\pi}} r \exp(-\xi_3 r), \quad 2s' = \sqrt{\frac{\xi_4^5}{3\pi}} r \exp(-\xi_4 r), \\
2p_z &= \sqrt{\frac{\xi_5^5}{\pi}} z \exp(-\xi_5 r), \quad 2p'_z = \sqrt{\frac{\xi_6^5}{\pi}} z \exp(-\xi_6 r), \\
3d_{zz} &= \sqrt{\frac{\xi_7^7}{18\pi}} (2z^2 - x^2 - y^2) \exp(-\xi_7 r), \\
2p_x &= \sqrt{\frac{\xi_8^5}{\pi}} x \exp(-\xi_8 r), \quad 2p'_x = \sqrt{\frac{\xi_9^5}{\pi}} x \exp(-\xi_9 r), \\
2p_y &= \sqrt{\frac{\xi_8^5}{\pi}} y \exp(-\xi_8 r), \quad 2p'_y = \sqrt{\frac{\xi_9^5}{\pi}} y \exp(-\xi_9 r), \\
3d_{xz} &= \sqrt{\frac{2\xi_{10}^7}{3\pi}} x z \exp(-\xi_{10} r), \quad 3d_{yz} = \sqrt{\frac{2\xi_{10}^7}{3\pi}} y z \exp(-\xi_{10} r).
\end{aligned} \tag{4.13}$$

Оптимизированные орбитальные экспоненты ξ_j , $j = 1 - 10$ [76] и соответствующие весовые коэффициенты c_{ij} молекулярных орбиталей были получены с помощью кода STOP [77]. Их значения приведены в таблице 4.1. Расчеты проводились с относительной точностью 10^{-5} для межъядерного расстояния $\rho = 2.0675$ а.е. Сравнение полученных орбитальных и полных энергий со значениями, приводимыми в литературе [76, 78, 79], дано в таблице 4.2.

Таблица 4.1. Орбитальные экспоненты и коэффициенты молекулярных орбиталей N₂.

			$1\sigma_g$	$1\sigma_u$	$2\sigma_g$	$2\sigma_u$	$3\sigma_g$	$1\pi_u$
ξ_1	6.21292	c_{i1}	0.85887	0.85912	-0.30267	-0.25463	0.07139	
ξ_2	9.36827	c_{i2}	0.14754	0.14773	0.02656	0.01870	0.00063	
ξ_3	1.46786	c_{i3}	-0.00037	-0.00605	0.08323	0.43095	-0.39926	
ξ_4	2.24642	c_{i4}	0.00323	0.00365	0.60423	0.65787	-0.23694	
ξ_5	1.52853	c_{i5}	-0.00017	-0.00403	0.23954	-0.27566	0.63748	
ξ_6	3.33678	c_{i6}	0.00241	0.00268	0.15870	-0.13960	0.28782	
ξ_7	1.93500	c_{i7}	0.00084	-0.00020	0.09560	0.00593	0.08390	
ξ_8	1.52853	c_{i8}						0.65087
ξ_9	3.33678	c_{i9}						0.25109
ξ_{10}	2.43700	c_{i10}						0.07359

Таблица 4.2. Энергии молекулярных орбиталей и полная энергия N₂ (в атомных единицах).

	STOP	[76]	[78]	[79]
$1\sigma_g$	-15.69586	-15.69623	-15.68195	-15.72188
$1\sigma_u$	-15.69225	-15.69262	-15.67833	-15.71978
$2\sigma_g$	-1.48670	-1.48569	-1.47360	-1.45270
$2\sigma_u$	-0.78760	-0.78581	-0.77960	-0.73059
$3\sigma_g$	-0.64773	-0.64278	-0.64278	-0.54458
$1\pi_u$	-0.62138	-0.62261	-0.61554	-0.57973
Полная энергия	-108.97854	-108.97143	-108.99280	-108.82300

В качестве начального состояния молекулы выбиралась волновая функция, описывающая два валентных электрона на $3\sigma_g$ -орбитали:

$$\varphi_i(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = 3\sigma_g(\mathbf{r}_1)3\sigma_g(\mathbf{r}_2).$$

Рассматривается случай, когда в конечном состоянии ион оказывается либо в $1\Sigma_g^+$, либо в $3\Pi_u$ конфигурации. При этом предполагается, что в процессе ионизации межъядерное расстояние не изменяется, т.е. расстояние между ядрами иона такое же, как и в нейтральной молекуле.

Усредненное по направлениям межъядерной оси (4.2) дифференциальное сечение двукратной фотоионизации $3\sigma_g$ орбитали молекулы азота N_2 с переходом иона в $1\Sigma_g^+$ состояние представлено на рис. 4.6 сверху. Энергии ионизованных электронов одинаковы и равны $E_1 = E_2 = 10$ эВ. Вектора \mathbf{k}_1 , \mathbf{k}_2 и $\boldsymbol{\epsilon}$ лежат в одной плоскости. Для сравнения сечения также были посчитаны в рамках параметрической модели, изначально сформулированной для благородных газов [80]. В ней в кинематике с равным распределением энергии между ионизованными электронами сечение представляется в виде

$$\frac{d^3\sigma}{d\Omega_1 d\Omega_2 dE_1} \propto |a_g(E_1, E_2, \theta_{12})(\cos\theta_1 + \cos\theta_2)|^2, \quad (4.14)$$

где θ_{12} — угол между двумя фотоэлектронами. Зависимость a_g от θ_{12} и E включает в себя всю физическую информацию о динамике процесса, т.е. об эффектах взаимодействия электронов с ионом и друг с другом. Амплитуда a_g обычно представляется с помощью гауссовой функции

$$|a_g| = A \exp[-2 \ln 2 (\theta_{12} - 180)^2 / \Gamma^2] \equiv AG(\theta_{12}, \Gamma), \quad (4.15)$$

где Γ — корреляционная ширина. В [81] на примере гелия было показано, что такое приближение хорошо работает, если превышение энергии гамма-кванта над порогом ионизации составляет не более 80 эВ. Значения параметров A и Γ

были получены с помощью минимизации функционала

$$F(A, \Gamma) = \frac{1}{37^2} \sum_{i,j=1}^{37} \left(\sigma^{(3)}(\theta_1^i, \theta_2^j) - f(\theta_1^i, \theta_2^j) \right)^2 \xrightarrow{A, \Gamma} \min,$$

$$\theta_1^i = 10^\circ(i - 1), \quad \theta_2^j = 10^\circ(j - 1),$$

где $\sigma^{(3)}(\theta_1^i, \theta_2^j)$ — сечение, посчитанное по формуле (4.2). Найденные оптимальные значения параметров равны

$$A = A(E) = 1.2945 \times 10^{-3}, \quad \Gamma = \Gamma(E) = 1.7346 = 99.4^\circ,$$

$$F(a, \Gamma) = 1.0029 \times 10^{-1}.$$

Выражения (4.2) и (4.14) не изменяются при перестановке электронов. Это приводит к появлению симметрии относительно диагонали $\theta_1 = \theta_2$ на обоих графиках рис. 4.6. Диагональ $\theta_1 + \theta_2 = 2\pi$ также является осью симметрии из-за особенностей выбранной кинематики. Наконец, еще две оси симметрии определяются прямыми $\theta_1 = \theta_2 \pm \pi$, что следует из выражения (4.3) и свойств ТСС (4.6).

На рис. 4.7 лучше видно различие между параметрической моделью (4.14) и ТСС-моделью (4.2), которая предсказывает явные отклонения угловых распределений от гауссовой формы. На верхнем графике $\theta_1 = 180^\circ$, т.е. электрон с импульсом \mathbf{k}_1 испускается в направлении поляризации фотона ϵ . Как и ожидалось, в этом случае ионизация менее эффективна, чем когда \mathbf{k}_1 перпендикулярен ϵ (нижний левый график). Наконец, внизу справа показан случай, когда значение сечения наибольшее, что достигается при $\theta_1 = 60^\circ$. Предсказываемые отклонения от гауссовой параметризации очень похожи по форме на наблюдавшиеся в эксперименте по двукратной фотоионизации молекулы D_2 с такой же энергией ионизованных электронов (см. рис. 3 в [82]).

Данные расчеты были использованы при подготовке экспериментов в работе [3], где проводилось измерение сечений двукратной фотоионизации молекул азота в случае, когда конечный ион N_2^+ остается либо в $^1\Sigma_g$, либо в $^3\Pi_u$ состоянии. На рис. 4.8 приведено сравнение теоретических и экспериментальных

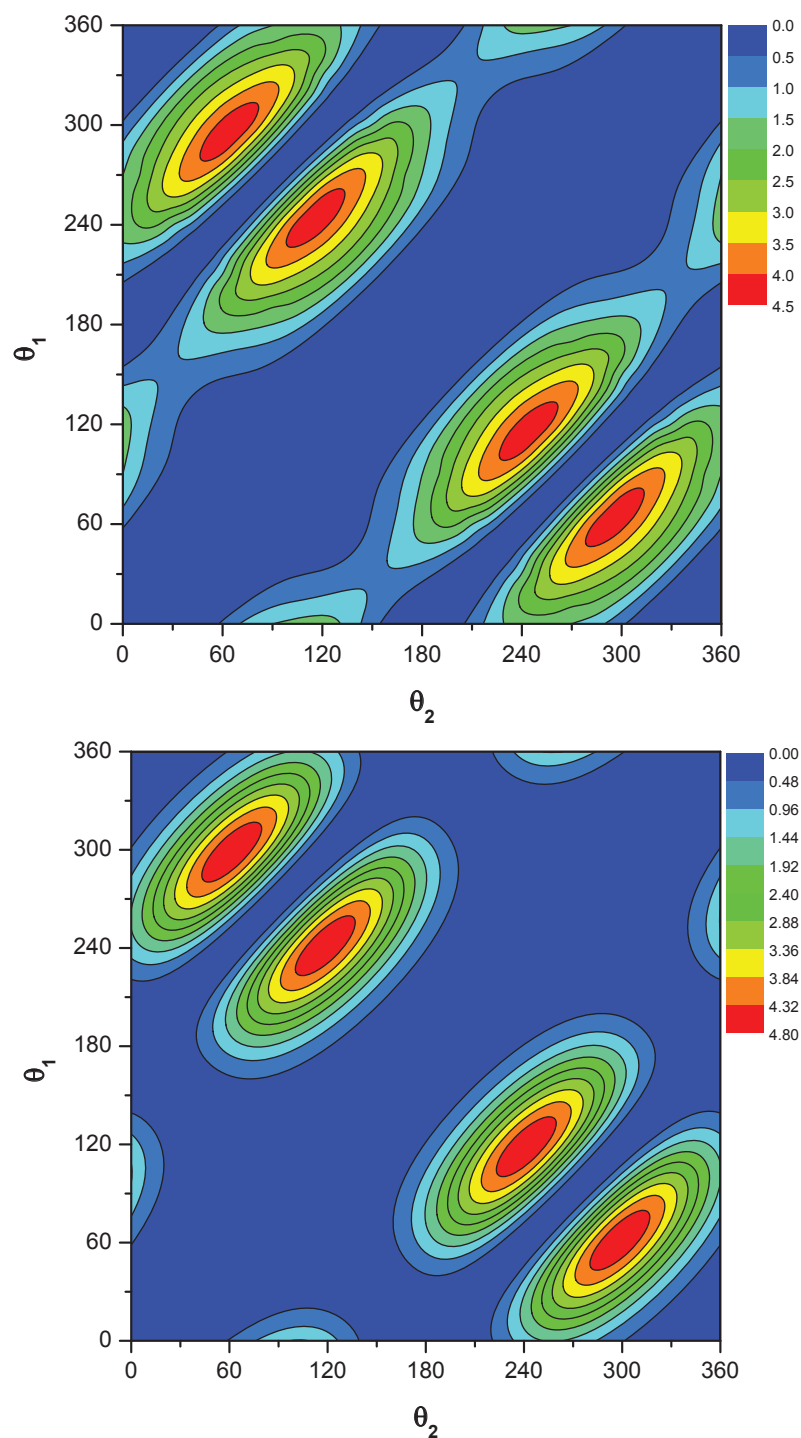


Рис. 4.6. Усредненное по направлениям молекулярной межъядерной оси дифференциальное сечение двукратной фотоионизации молекулы азота (увеличенное в 10^4 раз) в зависимости от углов вылета фотоэлектронов θ_1 и θ_2 в случае, когда ион N_2^{2+} оказывается в $^1\Sigma_g$ состоянии. Энергии фотоэлектронов $E_1 = E_2 = 10$ эВ, направления их вылета и вектор поляризации γ -кванта лежат в одной плоскости. Угол вылета отсчитывается от направления поляризации γ -кванта ϵ . Сверху — расчеты по формуле (4.2), снизу — по параметрической формуле (4.14).

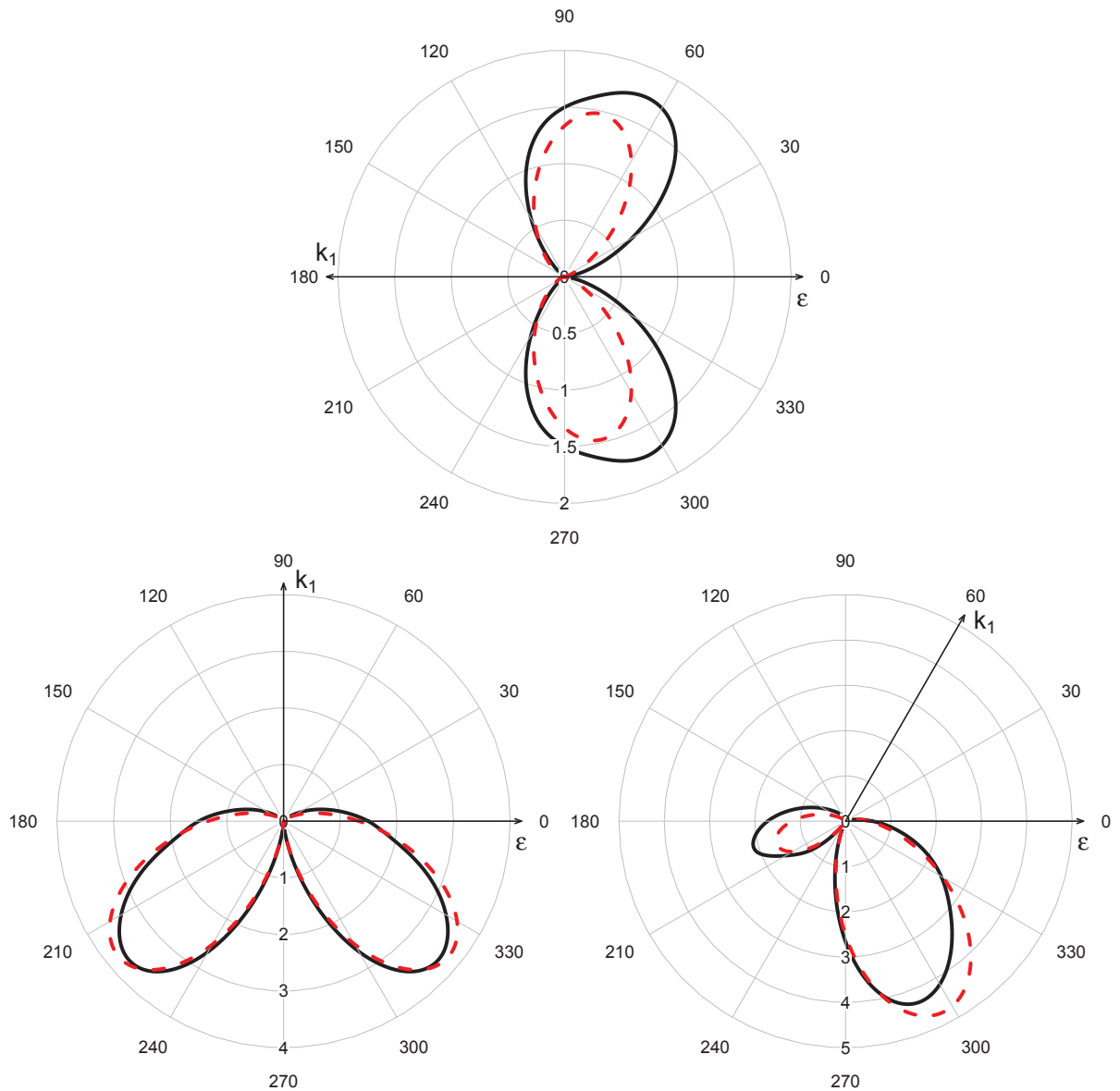


Рис. 4.7. То же, что на рис. 4.6, но при фиксированных значениях угла вылета одного из электронов θ_1 . На верхнем графике $\theta_1 = 180^\circ$, на нижнем левом – $\theta_1 = 90^\circ$, на нижнем правом – $\theta_1 = 60^\circ$. Сплошная линия – расчеты по формуле (4.2), пунктир – по параметрической формуле (4.14).

результатов. Экспериментальные данные были нормированы на теоретические при $\theta_1 = 0^\circ$ для обоих состояний. В случаях $\theta_1 = 30^\circ$ и $\theta_1 = 60^\circ$ множители для приведения относительных экспериментальных данных к абсолютным теоретическим обозначены на графиках.

В целом, для формы сечений достигается хорошее согласие между теорией и экспериментом, хотя и наблюдаются некоторые отклонения. Так, при $\theta_1 = 0^\circ$

и $\theta_2 \approx 180^\circ$, экспериментальные интенсивности больше теоретических для обоих конечных состояний ионов. При $\theta_1 = 0^\circ$ теория предсказывает меньший угол между двумя пиками, чем эксперимент. В том же случае уширение пика для ${}^3\Pi_u$ состояния подтверждается экспериментально. Для ${}^3\Pi_u$ при $\theta_1 = 60^\circ$ теория предсказывает меньшую интенсивность для пика в области $\theta_2 = 220^\circ$. Как следует из указанных на графиках масштабных множителей, теория завышает интенсивность в области от $\theta_2 = 0^\circ$ до 60° градусов. Единственным исключением является ${}^3\Pi_u$ состояние при $\theta_1 = 30^\circ$, где теория дает заниженное значение по сравнению с экспериментом.

Сечения, посчитанные по формуле (4.14), были нормированы на максимум TDCS отдельно для каждого графика на рис. 4.8. Предсказываемая форма сечения согласуется с экспериментальным сечением N_2 , за исключением областей близких к $\theta_{12} = 180^\circ$ и $\theta_1 = 30^\circ$ в области меньшего пика. Расчеты с ТСС предсказывают более широкие пики для основного состояния иона N_2^{2+} и более интенсивный вторичный пик в области $\theta_1 = 30^\circ$. Общее сходство измеренных и вычисленных сечений по отношению к параметрическим атомарным (4.14) может объясняться используемой кинематикой, в которой длина волны Де Бройля электрона с энергией 10.5 эВ составляет примерно 7 а.е., что значительно больше межъядерного расстояния молекулы N_2 (~ 2 а.е.). При таких условиях фотоэлектроны воспринимают молекулу как атом.

Таким образом, расчеты двукратной фотоионизации молекулы азота в кинематике с симметричным распределением энергии между фотоэлектронами в рамках модели коррелированных двухцентровых кулоновских функций (4.5) и параметрической модели (4.14) позволяют воспроизвести основные закономерности экспериментально наблюдаемых дифференциальных сечений. При этом предсказания ТСС модели (4.5) точнее, что делает ее более подходящей для анализа и интерпретации экспериментальных данных.

4.4. Основные выводы

В данной главе проведен расчет процессов двукратной фотоионизации двухатомных молекул водорода и азота и выполнен теоретический анализ угловых спектров двух медленных испущенных электронов. Показана необходимость учета электрон-электронных корреляций в пробной волновой функции начального, а также конечного состояния молекулы для интерпретации полных экспериментальных дифференциальных сечений двукратной фотоионизации. В рамках ТСС модели (4.5) получено хорошее согласие с результатами соответствующих недавних экспериментов. Разработаны эффективные алгоритмы и программы вычисления амплитуды перехода (4.7) — шестикратных интегралов от произведения волновой функции начального состояния двухатомной молекулы, дипольного момента и двух коррелированных двухцентровых кулоновских функций непрерывного спектра конечного состояния двух выбитых электронов, — которые также применимы для исследования других реакций со схожей кинематикой.

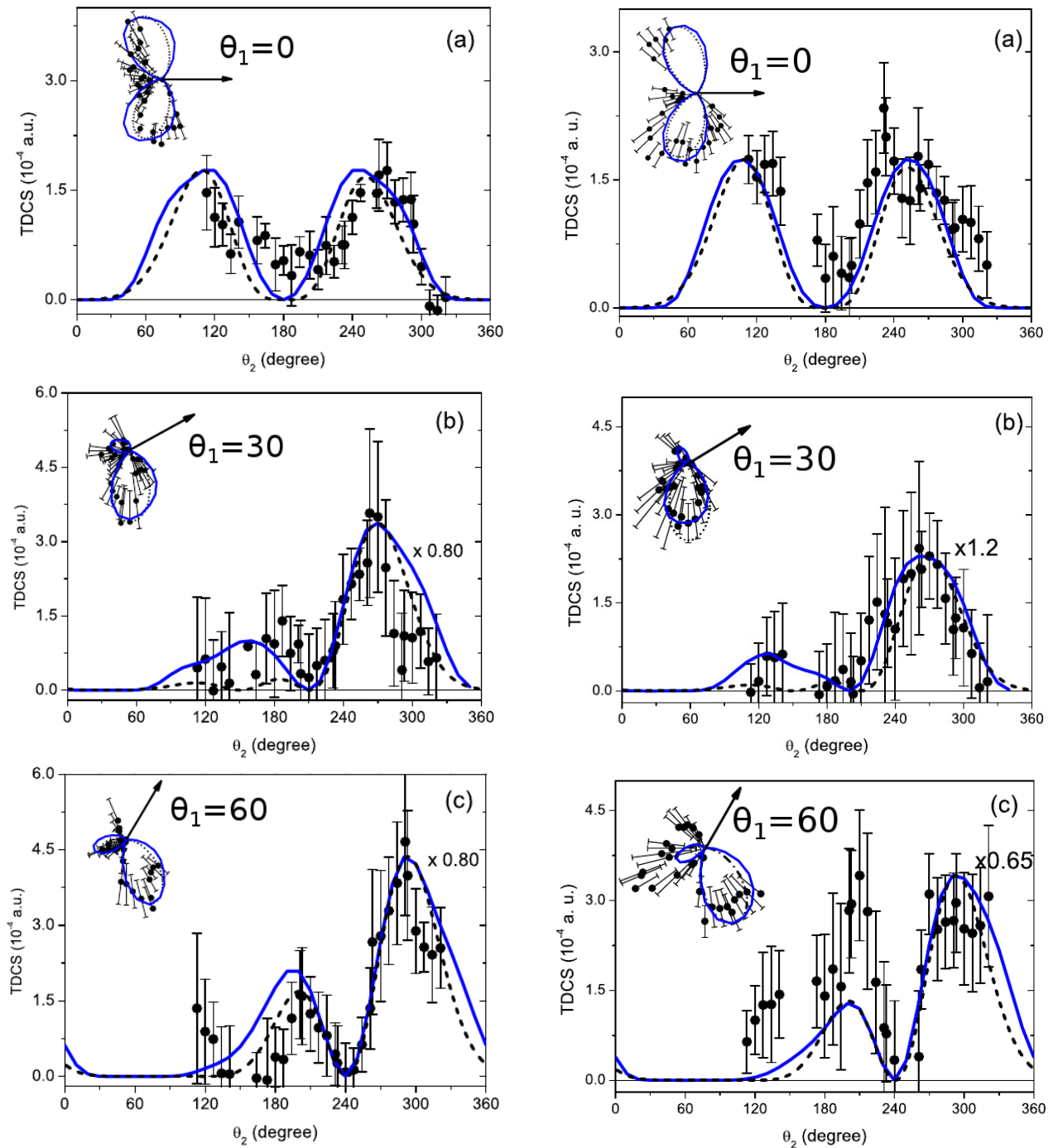


Рис. 4.8. Дифференциальное сечение $(\gamma, 2e)$ процесса на молекуле азота, усредненное по направлению межъядерной оси молекулы, в случаях, когда ион N_2^{2+} оказывается либо в $^1\Sigma_g$, либо в $^3\Pi_u$ состоянии (левый и правый столбцы соответственно). Угол вылета одного из электронов относительно направления поляризации гамма-кванта фиксирован (0, 30 и 60 градусов в верхнем, среднем и нижнем рядах), угол второго — меняется. Сплошная линия — результаты расчетов в рамках модели двухцентровых кулоновских функций (4.2), пунктир — параметризация гауссовой моделью (4.14), точки — экспериментальные данные [3].

Заключение

Приведем основные результаты диссертации.

- Показано, что даже низкочастотное и малоинтенсивное по атомным масштабам электромагнитное поле может существенно модифицировать состояния быстрых электронов (с энергией кэВ и выше) в методе ЭИС; сформулировано условие, при котором необходимо использовать приближение Гордона-Волкова вместо традиционного использования базиса плоских волн в методе ЭИС.
- Показано, что, когда конечный ион остается в возбужденном состоянии, чувствительность сечения к модели электрон-электронных корреляций в гелии усиливается по сравнению со случаем отсутствия поля. Для возбужденного иона проявляются различия даже между сильнокоррелированными пробными функциями атома, которые не наблюдаются в отсутствие поля.
- В присутствии лазерного поля угловое распределение медленного электрона ($e, 3e$) процесса оказывается сильно зависящим от модели электрон-электронных корреляций в атоме гелия в отличие от случая отсутствия поля.
- Показано, что дифференциальные сечения метода ($e, 3 - 1e$) ЭИС в низкочастотном малоинтенсивном электромагнитном поле практически совпадает с дифференциальным сечением в отсутствие поля.
- Показано, что электронные корреляции в модели основного состояния двухатомных молекул проявляются в угловом распределении испущенных электронов в процессе двукратной фотоионизации.
- В рамках модели коррелированных двухцентровых кулоновских функций для двухэлектронных состояний континуума получено хорошее согласие

с результатами недавних экспериментов по двукратной фотоионизации молекул водорода и азота.

Приложение А

Возмущенное $n = 2$ состояние иона He^+ в лазерном поле

В данном приложении описана процедура построения возмущенного состояния иона He^+ в лазерном поле (2.4).

Рассмотрим уравнение Шредингера для системы с гамильтонианом H_0 в присутствии возмущения $H_1(t)$

$$i\frac{\partial\psi}{\partial t} = (H_0 + H_1(t))\psi(t). \quad (\text{A.1})$$

Его решение можно искать в виде разложения по собственным состояниям $|n, i\rangle$ невозмущенного гамильтониана

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n \sum_i a_{n,i}(t)e^{-i\varepsilon_n t} |n, i\rangle, \quad (\text{A.2})$$

где индекс n нумерует состояния с разными энергиями, а i — вырожденные состояния. Будем считать, что в начальный момент времени система находилась в одном из вырожденных состояний с индексом k : $|k, i'\rangle$. Тогда можно ожидать, что основной вклад в возмущенное состояние будут давать вырожденные с начальным состоянием функции

$$|\psi(t)\rangle \approx \sum_i a_{k,i}(t)e^{-i\varepsilon_k t} |k, i\rangle. \quad (\text{A.3})$$

Подстановка этого разложения в уравнение Шредингера приводит к системе дифференциальных уравнений

$$i\frac{da_{k,j}(t)}{dt} = \sum_i \langle k, j|H_1(t)|k, i\rangle a_{k,i}(t). \quad (\text{A.4})$$

Рассмотрим в качестве возмущения электрическую компоненту линейно поляризованного лазерного поля (1.6). Выберем направление поля вдоль оси x . Тогда

в калибровке длины

$$H_1(t) = F_0 x \cos \omega t. \quad (\text{A.5})$$

Ограничимся рассмотрением невозмущенного начального состояния $n = 2$ водородоподобного иона с зарядом Z

$$|k, i\rangle = \{\phi_{2s}; \phi_{2p_0}; \phi_{2p_{\pm 1}}\}. \quad (\text{A.6})$$

Система уравнений (A.4) принимает вид

$$i \frac{da_{2s}(t)}{dt} = F_0 \cos \omega t \frac{3}{Z\sqrt{2}} [a_{2p_1} - a_{2p_{-1}}], \quad (\text{A.7})$$

$$i \frac{da_{2p_0}(t)}{dt} = 0, \quad (\text{A.8})$$

$$i \frac{da_{2p_1}(t)}{dt} = F_0 \cos \omega t \frac{3}{Z\sqrt{2}} a_{2s}, \quad (\text{A.9})$$

$$i \frac{da_{2p_{-1}}(t)}{dt} = -F_0 \cos \omega t \frac{3}{Z\sqrt{2}} a_{2s}. \quad (\text{A.10})$$

Обозначая $a_{2p} \equiv a_{2p_1} - a_{2p_{-1}}$, $A = i \frac{3F_0}{\sqrt{2}Z}$, можно записать

$$\frac{da_{2s}(t)}{dt} = A a_{2p}(t) \cos \omega t, \quad (\text{A.11})$$

$$\frac{da_{2p}(t)}{dt} = 2A a_{2s}(t) \cos \omega t. \quad (\text{A.12})$$

Решением данной системы являются функции

$$a_{2p}(t) = iC_1 \sinh \left(\frac{\sqrt{2}A}{\omega} \sin(\omega t) \right) + C_2 \cosh \left(\frac{\sqrt{2}A}{\omega} \sin(\omega t) \right), \quad (\text{A.13})$$

$$a_{2s}(t) = i \frac{1}{\sqrt{2}} C_1 \cosh \left(\frac{\sqrt{2}A}{\omega} \sin(\omega t) \right) + \frac{1}{\sqrt{2}} C_2 \sinh \left(\frac{\sqrt{2}A}{\omega} \sin(\omega t) \right). \quad (\text{A.14})$$

Отсюда

$$a_{2p_1}(t) = \frac{1}{2} \left[iC_1 \sinh \left(\frac{\sqrt{2}A}{\omega} \sin(\omega t) \right) + C_2 \cosh \left(\frac{\sqrt{2}A}{\omega} \sin(\omega t) \right) \right] - \frac{C_2}{2} + C_3, \quad (\text{A.15})$$

$$a_{2p_{-1}}(t) = \frac{-1}{2} \left[iC_1 \sinh \left(\frac{\sqrt{2}A}{\omega} \sin(\omega t) \right) + C_2 \cosh \left(\frac{\sqrt{2}A}{\omega} \sin(\omega t) \right) \right] - \frac{C_2}{2} + C_3. \quad (\text{A.16})$$

Если начальное состояние — $2s$:

$$C_1 = -i\sqrt{2}, \quad C_2 = C_3 = 0, \quad (\text{A.17})$$

$$\begin{aligned} \psi_{2s}(\mathbf{r}, t) = e^{-i\mathcal{E}_{n=2t}} & \left[\cosh \left(\frac{\sqrt{2}A}{\omega} \sin(\omega t) \right) \phi_{2s}(\mathbf{r}) \right. \\ & \left. + \frac{1}{\sqrt{2}} \sinh \left(\frac{\sqrt{2}A}{\omega} \sin(\omega t) \right) [\phi_{2p_1}(\mathbf{r}, t) - \phi_{2p_{-1}}(\mathbf{r}, t)] \right] \end{aligned} \quad (\text{A.18})$$

Если начальное состояние — $2p_0$:

$$C_1 = C_2 = C_3 = 0, \quad (\text{A.19})$$

$$\psi_{2p_0}(\mathbf{r}, t) = e^{-i\mathcal{E}_{n=2t}} \phi_{2p_0}(\mathbf{r}). \quad (\text{A.20})$$

Если начальное состояние — $2p_1$:

$$C_1 = 0, \quad C_2 = C_3 = 1, \quad (\text{A.21})$$

$$\begin{aligned} \psi_{2p_1}(\mathbf{r}, t) = e^{-i\mathcal{E}_{n=2t}} & \left[\frac{1}{\sqrt{2}} \sinh \left(\frac{\sqrt{2}A}{\omega} \sin(\omega t) \right) \phi_{2s}(\mathbf{r}) \right. \\ & \left. + \frac{1}{2} \cosh \left(\frac{\sqrt{2}A}{\omega} \sin(\omega t) \right) [\phi_{2p_1}(\mathbf{r}, t) - \phi_{2p_{-1}}(\mathbf{r}, t)] + \frac{1}{2} [\phi_{2p_1}(\mathbf{r}, t) + \phi_{2p_{-1}}(\mathbf{r}, t)] \right]. \end{aligned} \quad (\text{A.22})$$

Если начальное состояние — $2p_{-1}$:

$$C_1 = C_3 = 0, \quad C_2 = -1, \quad (\text{A.23})$$

$$\begin{aligned} \psi_{2p_{-1}}(\mathbf{r}, t) = e^{-i\mathcal{E}_{n=2}t} & \left[\frac{-1}{\sqrt{2}} \sinh \left(\frac{\sqrt{2}A}{\omega} \sin(\omega t) \right) \phi_{2s}(\mathbf{r}) \right. \\ & \left. - \frac{1}{2} \cosh \left(\frac{\sqrt{2}A}{\omega} \sin(\omega t) \right) [\phi_{2p_1}(\mathbf{r}, t) - \phi_{2p_{-1}}(\mathbf{r}, t)] + \frac{1}{2} [\phi_{2p_1}(\mathbf{r}, t) + \phi_{2p_{-1}}(\mathbf{r}, t)] \right]. \end{aligned} \quad (\text{A.24})$$

Приложение Б

Вычисление S -матрицы для $(e, 3e)$ ЭИС атома гелия в лазерном поле

Рассмотрим S -матрицу (3.1) для $(e, 3e)$ ЭИС атома гелия в лазерном поле. Т.к. она симметрична относительно перестановки $r_1 \leftrightarrow r_2$, то в вычислениях достаточно ограничиться рассмотрением только одного слагаемого, удвоив конечный результат:

$$\begin{aligned}
 S_{fi} = & -2i \int_{-\infty}^{\infty} dt \int d\mathbf{r}_0 \int d\mathbf{r}_1 \int d\mathbf{r}_2 e^{-i \left[\mathbf{p}_s \mathbf{r}_0 - \alpha_{ps} \cos(\omega t) - E_s t - \zeta(t) + \frac{1}{c} \mathbf{A}(t) \cdot \mathbf{r}_0 \right]} \\
 & \times A^* \left[e^{-i \left[\mathbf{p}_e \mathbf{r}_1 - \alpha_{pe} \cos(\omega t) - E_e t - \zeta(t) + \frac{1}{c} \mathbf{A}(t) \cdot \mathbf{r}_1 \right]} \right. \\
 & \quad \left. \times e^{i \mathbf{p}_c \mathbf{r}_2} e^{-i \left[\mathbf{p}_c \mathbf{r}_2 - \alpha_{pc} \cos(\omega t) - E_c t - \zeta(t) + \frac{1}{c} \mathbf{A}(t) \cdot \mathbf{r}_2 \right]} \varphi_{\mathbf{p}_c}^{C*}(\mathbf{r}_2) \right] \\
 & \times \left(\frac{1}{r_{01}} + \frac{1}{r_{02}} \right) e^{i \left[\mathbf{p}_0 \mathbf{r}_0 - \alpha_{p0} \cos(\omega t) - E_0 t - \zeta(t) + \frac{1}{c} \mathbf{A}(t) \cdot \mathbf{r}_0 \right]} \\
 & \times e^{-i \mathcal{E}_{He} t} \left(1 - \frac{F_0 \cos(\omega t)}{\omega_{cl}} \sum_{j=1}^2 x_j \right) \Phi_{He}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2).
 \end{aligned} \tag{Б.1}$$

После преобразований

$$\begin{aligned}
 S_{fi} = & -2i \int_{-\infty}^{\infty} dt \int d\mathbf{r}_0 \int d\mathbf{r}_1 \int d\mathbf{r}_2 e^{-i \left[\mathbf{p}_s \mathbf{r}_0 + \mathbf{p}_e \mathbf{r}_1 - \mathbf{p}_0 \mathbf{r}_0 \right]} e^{i (\alpha_{ps} + \alpha_{pe} + \alpha_{pc} - \alpha_{p0}) \cos(\omega t)} \\
 & \times e^{-i [E_0 + \mathcal{E}_{He} - E_e - E_s - E_c] t} e^{2i \zeta(t)} e^{\frac{-i}{c} \mathbf{A}(t) \mathbf{r}_1} e^{\frac{-i}{c} \mathbf{A}(t) \mathbf{r}_2} \\
 & \times A^* \left(\frac{1}{r_{01}} + \frac{1}{r_{02}} \right) \varphi_{\mathbf{p}_c}^{C*}(\mathbf{r}_2) \left(1 - \frac{F_0 \cos(\omega t)}{\omega_{cl}} \sum_{j=1}^2 x_j \right) \Phi_{He}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2).
 \end{aligned} \tag{Б.2}$$

С учетом

$$\zeta(t) = \frac{1}{2c^2} \int_{-\infty}^t A_0^2 \sin^2 \omega t' dt' = \frac{A_0^2}{4c^2} t - \frac{\sin 2\omega t}{2\omega} \frac{A_0^2}{4c^2} = U_p t - \beta \sin 2\omega t, \quad (\text{Б.3})$$

$$U_p = \frac{A_0^2}{4c^2} = \frac{F_0^2}{4\omega^2}, \quad \beta = \frac{A_0^2}{4c^2 2\omega} = \frac{F_0^2}{8\omega^3}, \quad (\text{Б.4})$$

а также

$$e^{\frac{-i}{c} \mathbf{A}(t) \mathbf{r}} = e^{\frac{-i}{c} \mathbf{A}_0 \mathbf{r} \sin \omega t} = e^{i \frac{\mathbf{F}_0 \mathbf{r}}{\omega} \sin \omega t} = \sum_{L=-\infty}^{+\infty} J_L \left(\frac{\mathbf{F}_0 \mathbf{r}}{\omega} \right) e^{iL\omega t}, \quad (\text{Б.5})$$

можно переписать

$$\begin{aligned} S_{fi} &= -2i \sum_{K=-\infty}^{+\infty} \sum_{L=-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dt \int d\mathbf{r}_0 \int d\mathbf{r}_1 \int d\mathbf{r}_2 e^{-i[\mathbf{p}_s \mathbf{r}_0 + \mathbf{p}_e \mathbf{r}_1 - \mathbf{p}_0 \mathbf{r}_0]} e^{i(\alpha_{p_s} + \alpha_{p_e} + \alpha_{p_c} - \alpha_{p_0}) \cos(\omega t)} \\ &\times e^{-i[E_0 + \mathcal{E}_{He} - E_e - E_s - E_c]t} e^{2iU_p t - 2i\beta \sin 2\omega t} J_K \left(\frac{\mathbf{F}_0 \mathbf{r}_1}{\omega} \right) e^{iK\omega t} J_L \left(\frac{\mathbf{F}_0 \mathbf{r}_2}{\omega} \right) e^{iL\omega t} \\ &\times A^* \left(\frac{1}{r_{01}} + \frac{1}{r_{02}} \right) \varphi_{\mathbf{p}_c}^{C*}(\mathbf{r}_2) \left(1 - \frac{F_0 \cos(\omega t)}{\omega_{cl}} \sum_{j=1}^2 x_j \right) \Phi_{He}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2). \end{aligned} \quad (\text{Б.6})$$

Далее

$$e^{i(\alpha_{p_s} + \alpha_{p_e} + \alpha_{p_c} - \alpha_{p_0}) \cos(\omega t)} = \sum_{k=-\infty}^{\infty} i^k J_k(\alpha_{p_s} + \alpha_{p_e} + \alpha_{p_c} - \alpha_{p_0}) e^{ik\omega t}, \quad (\text{Б.7})$$

$$e^{-2i\beta \sin 2\omega t} = \sum_{l=-\infty}^{\infty} J_l(2\beta) e^{-i \cdot 2l\omega t}. \quad (\text{Б.8})$$

Тогда

$$\begin{aligned} S_{fi} &= -2i \sum_{K=-\infty}^{+\infty} \sum_{L=-\infty}^{+\infty} \sum_{k=-\infty}^{+\infty} \sum_{l=-\infty}^{+\infty} i^k \int_{-\infty}^{\infty} dt \iiint d\mathbf{r}_0 d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \\ &\times e^{-i[\mathbf{p}_s \mathbf{r}_0 + \mathbf{p}_e \mathbf{r}_1 - \mathbf{p}_0 \mathbf{r}_0]} J_k(\alpha_{p_s} + \alpha_{p_e} + \alpha_{p_c} - \alpha_{p_0}) e^{ik\omega t} e^{-i[E_0 + \mathcal{E}_g^{He} - E_e - E_s - E_c]t} \\ &\times e^{2iU_p t} J_l(2\beta) e^{-i \cdot 2l\omega t} J_K \left(\frac{\mathbf{F}_0 \mathbf{r}_1}{\omega} \right) e^{iK\omega t} J_L \left(\frac{\mathbf{F}_0 \mathbf{r}_2}{\omega} \right) e^{iL\omega t} \\ &\times A^* \left(\frac{1}{r_{01}} + \frac{1}{r_{02}} \right) \varphi_{\mathbf{p}_c}^{C*}(\mathbf{r}_2) \left(1 - \frac{F_0}{\omega_{cl}} \frac{e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}}{2} \sum_{j=1}^2 x_j \right) \Phi_{He}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2). \end{aligned} \quad (\text{Б.9})$$

После интегрирования по t

$$\begin{aligned}
S_{fi} = & -2i \cdot 2\pi \sum_{K=-\infty}^{+\infty} \sum_{L=-\infty}^{+\infty} \sum_{k=-\infty}^{+\infty} \sum_{l=-\infty}^{+\infty} i^k \iiint d\mathbf{r}_0 d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \\
& \times e^{-i[\mathbf{p}_s \mathbf{r}_0 + \mathbf{p}_e \mathbf{r}_1 - \mathbf{p}_0 \mathbf{r}_0]} J_k(\alpha_{p_s} + \alpha_{p_e} + \alpha_{p_c} - \alpha_{p_0}) J_l(2\beta) J_K \left(\frac{\mathbf{F}_0 \mathbf{r}_1}{\omega} \right) J_L \left(\frac{\mathbf{F}_0 \mathbf{r}_2}{\omega} \right) \\
& \times A^* \left(\frac{1}{r_{01}} + \frac{1}{r_{02}} \right) \varphi_{\mathbf{p}_c}^{C*}(\mathbf{r}_2) \\
& \times \left(\delta(E_T + N'\omega) - \frac{F_0}{\omega_{cl}} \frac{\delta(E_T + (N' + 1)\omega) + \delta(E_T + (N' - 1)\omega)}{2} \sum_{j=1}^2 x_j \right) \\
& \times \Phi_{He}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2),
\end{aligned} \tag{B.10}$$

где

$$E^T = E_e + E_s + E_c - E_0 - \mathcal{E}_g^{He} + 2U_p, \tag{B.11}$$

$$N' = (K + L + k - 2l). \tag{B.12}$$

Если сдвинуть в двух слагаемых с δ -функциями индекс суммирования (индекс k), то

$$\begin{aligned}
S_{fi} = & -2i \cdot 2\pi \sum_{K=-\infty}^{+\infty} \sum_{L=-\infty}^{+\infty} \sum_{k=-\infty}^{+\infty} \sum_{l=-\infty}^{+\infty} i^k \iiint d\mathbf{r}_0 d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 e^{-i[\mathbf{p}_s \mathbf{r}_0 + \mathbf{p}_e \mathbf{r}_1 - \mathbf{p}_0 \mathbf{r}_0]} \\
& \times J_l(2\beta) J_K \left(\frac{\mathbf{F}_0 \mathbf{r}_1}{\omega} \right) J_L \left(\frac{\mathbf{F}_0 \mathbf{r}_2}{\omega} \right) \delta(E_T + N'\omega) \\
& \times \left(J_k(\alpha_{p_s} + \alpha_{p_e} + \alpha_{p_c} - \alpha_{p_0}) - \right. \\
& \quad \left. - \frac{F_0}{\omega_{cl}} \frac{-iJ_{k-1}(\alpha_{p_s} + \alpha_{p_e} + \alpha_{p_c} - \alpha_{p_0}) + iJ_{k+1}(\alpha_{p_s} + \alpha_{p_e} + \alpha_{p_c} - \alpha_{p_0})}{2} \sum_{j=1}^2 x_j \right) \\
& \times A^* \left(\frac{1}{r_{01}} + \frac{1}{r_{02}} \right) \varphi_{\mathbf{p}_c}^{C*}(\mathbf{r}_2) \Phi_{He}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2).
\end{aligned} \tag{B.13}$$

После интегрирования по \mathbf{r}_0

$$\int d^3r_0 e^{-i[\mathbf{p}_s \mathbf{r}_0 + \mathbf{p}_e \mathbf{r}_1 - \mathbf{p}_0 \mathbf{r}_0]} \frac{1}{r_{01}} = \frac{4\pi}{|\mathbf{p}_0 - \mathbf{p}_s|^2} e^{i(\mathbf{p}_0 - \mathbf{p}_s - \mathbf{p}_e) \mathbf{r}_1}, \quad (\text{B.14})$$

$$\int d^3r_0 e^{-i[\mathbf{p}_s \mathbf{r}_0 + \mathbf{p}_e \mathbf{r}_1 - \mathbf{p}_0 \mathbf{r}_0]} \frac{1}{r_{02}} = \frac{4\pi}{|\mathbf{p}_0 - \mathbf{p}_s|^2} e^{i[(\mathbf{p}_0 - \mathbf{p}_s) \mathbf{r}_2 - \mathbf{p}_e \mathbf{r}_1]}, \quad (\text{B.15})$$

S -матрицу можно переписать в виде

$$\begin{aligned} S_{fi} = & -2i \cdot 2\pi \cdot \frac{4\pi}{|\mathbf{p}_0 - \mathbf{p}_s|^2} \sum_{K=-\infty}^{+\infty} \sum_{L=-\infty}^{+\infty} \sum_{k=-\infty}^{+\infty} \sum_{l=-\infty}^{+\infty} i^k \iint d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \\ & \times J_l(2\beta) J_K \left(\frac{\mathbf{F}_0 \mathbf{r}_1}{\omega} \right) J_L \left(\frac{\mathbf{F}_0 \mathbf{r}_2}{\omega} \right) \delta(E_T + N'\omega) \\ & \times \left(J_k(\alpha_{p_s} + \alpha_{p_e} + \alpha_{p_c} - \alpha_{p_0}) + \right. \\ & \left. + \frac{iF_0}{\omega_{cl}} \frac{J_{k-1}(\alpha_{p_s} + \alpha_{p_e} + \alpha_{p_c} - \alpha_{p_0}) - J_{k+1}(\alpha_{p_s} + \alpha_{p_e} + \alpha_{p_c} - \alpha_{p_0})}{2} \sum_{j=1}^2 x_j \right) \\ & \times A^* \left(e^{-i(\mathbf{p}_s + \mathbf{p}_e - \mathbf{p}_0) \mathbf{r}_1} + e^{-i[(\mathbf{p}_s - \mathbf{p}_0) \mathbf{r}_2 + \mathbf{p}_e \mathbf{r}_1]} \right) \varphi_{\mathbf{p}_c}^{C*}(\mathbf{r}_2) \Phi_{He}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2). \end{aligned} \quad (\text{B.16})$$

После переобозначения $M = K + L$:

$$\begin{aligned} S_{fi} = & -2i \cdot 2\pi \cdot \frac{4\pi}{|\mathbf{p}_0 - \mathbf{p}_s|^2} \sum_{M=-\infty}^{+\infty} \sum_{L=-\infty}^{+\infty} \sum_{k=-\infty}^{+\infty} \sum_{l=-\infty}^{+\infty} i^k \iint d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \\ & \times J_l(2\beta) J_{M-L} \left(\frac{\mathbf{F}_0 \mathbf{r}_1}{\omega} \right) J_L \left(\frac{\mathbf{F}_0 \mathbf{r}_2}{\omega} \right) \delta(E_T + (M + k - 2l)\omega) \\ & \times \left(J_k(\alpha_{p_s} + \alpha_{p_e} + \alpha_{p_c} - \alpha_{p_0}) + \right. \\ & \left. + \frac{iF_0}{\omega_{cl}} \frac{J_{k-1}(\alpha_{p_s} + \alpha_{p_e} + \alpha_{p_c} - \alpha_{p_0}) - J_{k+1}(\alpha_{p_s} + \alpha_{p_e} + \alpha_{p_c} - \alpha_{p_0})}{2} \sum_{j=1}^2 x_j \right) \\ & \times A^* \left(e^{-i(\mathbf{p}_s + \mathbf{p}_e - \mathbf{p}_0) \mathbf{r}_1} + e^{-i[(\mathbf{p}_s - \mathbf{p}_0) \mathbf{r}_2 + \mathbf{p}_e \mathbf{r}_1]} \right) \varphi_{\mathbf{p}_c}^{C*}(\mathbf{r}_2) \Phi_{He}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2), \end{aligned} \quad (\text{B.17})$$

можно применить теорему сложения для функций Бесселя

$$\begin{aligned}
S_{fi} = & -2i \cdot 2\pi \cdot \frac{4\pi}{|\mathbf{p}_0 - \mathbf{p}_s|^2} \sum_{M=-\infty}^{+\infty} \sum_{k=-\infty}^{+\infty} \sum_{l=-\infty}^{+\infty} i^k \iint d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \\
& \times J_l(2\beta) J_M \left(\frac{\mathbf{F}_0(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)}{\omega} \right) \delta(E_T + (M + k - 2l)\omega) \\
& \times \left(J_k(\alpha_{p_s} + \alpha_{p_e} + \alpha_{p_c} - \alpha_{p_0}) + \right. \\
& \quad \left. + \frac{iF_0}{\omega_{cl}} \frac{J_{k-1}(\alpha_{p_s} + \alpha_{p_e} + \alpha_{p_c} - \alpha_{p_0}) - J_{k+1}(\alpha_{p_s} + \alpha_{p_e} + \alpha_{p_c} - \alpha_{p_0})}{2} \sum_{j=1}^2 x_j \right) \\
& \times A^* \left(e^{-i(\mathbf{p}_s + \mathbf{p}_e - \mathbf{p}_0)\mathbf{r}_1} + e^{-i[(\mathbf{p}_s - \mathbf{p}_0)\mathbf{r}_2 + \mathbf{p}_e\mathbf{r}_1]} \right) \varphi_{\mathbf{p}_c}^{C*}(\mathbf{r}_2) \Phi_{He}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2).
\end{aligned} \tag{B.18}$$

Замена $N = M + k - 2l$ позволяет привести S -матрицу к виду

$$\begin{aligned}
S_{fi} = & -2i \cdot 2\pi \cdot \frac{4\pi}{|\mathbf{p}_0 - \mathbf{p}_s|^2} \sum_{N=-\infty}^{+\infty} \sum_{M=-\infty}^{+\infty} \sum_{l=-\infty}^{+\infty} i^{N-M+2l} \iint d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \delta(E_T + N\omega) \\
& \times J_l(2\beta) J_M \left(\frac{\mathbf{F}_0(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)}{\omega} \right) \\
& \times \left(J_{N-M+2l}(\alpha_{p_s} + \alpha_{p_e} + \alpha_{p_c} - \alpha_{p_0}) + \frac{iF_0}{\omega_{cl}} \times \right. \\
& \quad \left. \frac{J_{N-M+2l-1}(\alpha_{p_s} + \alpha_{p_e} + \alpha_{p_c} - \alpha_{p_0}) - J_{N-M+2l+1}(\alpha_{p_s} + \alpha_{p_e} + \alpha_{p_c} - \alpha_{p_0})}{2} \sum_{j=1}^2 x_j \right) \\
& \times A^* \left(e^{-i(\mathbf{p}_s + \mathbf{p}_e - \mathbf{p}_0)\mathbf{r}_1} + e^{-i[(\mathbf{p}_s - \mathbf{p}_0)\mathbf{r}_2 + \mathbf{p}_e\mathbf{r}_1]} \right) \varphi_{\mathbf{p}_c}^{C*}(\mathbf{r}_2) \Phi_{He}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2).
\end{aligned} \tag{B.19}$$

Из последнего выражения можно выделить амплитуду рассеяния

$$S_{fi} = -\frac{4\pi i}{|\mathbf{p}_0 - \mathbf{p}_s|^2} \sum_{N=-\infty}^{\infty} 2\pi \delta(E_T + N\omega) \mathcal{F}_N(\mathbf{q}). \tag{B.20}$$

Если пренебречь слагаемым с экспонентой $e^{-i[(\mathbf{p}_s - \mathbf{p}_0)\mathbf{r}_2 + \mathbf{p}_e\mathbf{r}_1]}$ и учесть, что $\mathbf{q} =$

$\mathbf{p}_s + \mathbf{p}_e - \mathbf{p}_0$, ее можно записать в виде:

$$\begin{aligned}
\mathcal{F}_N &= 2A^* \cdot \sum_{M=-\infty}^{+\infty} \sum_{l=-\infty}^{+\infty} i^{N-M+2l} \iint d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \\
&\times J_l(2\beta) J_M \left(\frac{\mathbf{F}_0(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)}{\omega} \right) \\
&\times \left(J_{N-M+2l}(\alpha_{p_s} + \alpha_{p_e} + \alpha_{p_c} - \alpha_{p_0}) + \frac{iF_0}{\omega_{cl}} \times \right. \\
&\left. \frac{J_{N-M+2l-1}(\alpha_{p_s} + \alpha_{p_e} + \alpha_{p_c} - \alpha_{p_0}) - J_{N-M+2l+1}(\alpha_{p_s} + \alpha_{p_e} + \alpha_{p_c} - \alpha_{p_0})}{2} \sum_{j=1}^2 x_j \right) \\
&\times e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_1} \varphi_{\mathbf{p}_c}^{C*}(\mathbf{r}_2) \Phi_{He}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)
\end{aligned} \tag{Б.21}$$

При использовании интегрального представления для функций Бесселя

$$\begin{aligned}
\mathcal{F}_N &= 2A^* \cdot \sum_{M=-\infty}^{+\infty} \sum_{l=-\infty}^{+\infty} i^{N+2l} e^{-iM\pi/2} \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\xi \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\xi' \iint d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \\
&\times J_l(2\beta) e^{-i(M\xi - \frac{\mathbf{F}_0(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)}{\omega} \sin \xi)} e^{-i(N-M+2l)\xi'} e^{i(\alpha_{p_s} + \alpha_{p_e} + \alpha_{p_c} - \alpha_{p_0}) \sin \xi'} \\
&\times \left(1 + \frac{iF_0}{\omega_{cl}} \frac{e^{i\xi'} - e^{-i\xi'}}{2} (x_1 + x_2) \right) e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_1} \varphi_{\mathbf{p}_c}^{C*}(\mathbf{r}_2) \Phi_{He}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2),
\end{aligned} \tag{Б.22}$$

и представления дельта-функции в виде ряда Фурье

$$\delta(x - a) = \frac{1}{2\pi} \sum_{k=-\infty}^{\infty} e^{ik(x-a)}, \tag{Б.23}$$

можно записать

$$\begin{aligned}
\mathcal{F}_N &= 2A^* \cdot \sum_{l=-\infty}^{+\infty} i^{N+2l} \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\xi \int_{-\pi}^{\pi} d\xi' \iint d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \\
&\times \delta(\xi' - \xi - \pi/2) J_l(2\beta) e^{i\frac{\mathbf{F}_0(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)}{\omega} \sin \xi} e^{-i(N+2l)\xi'} e^{i(\alpha_{p_s} + \alpha_{p_e} + \alpha_{p_c} - \alpha_{p_0}) \sin \xi'} \\
&\times \left(1 - \frac{F_0}{\omega_{cl}} \sin \xi' (x_1 + x_2) \right) e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_1} \varphi_{\mathbf{p}_c}^{C*}(\mathbf{r}_2) \Phi_{He}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2).
\end{aligned} \tag{Б.24}$$

После интегрирования по ξ' :

$$\begin{aligned}
\mathcal{F}_N &= 2A^* \cdot \sum_{l=-\infty}^{+\infty} \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\xi \iint d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \\
&\times J_l(2\beta) e^{i \frac{\mathbf{F}_0(\mathbf{r}_1+\mathbf{r}_2)}{\omega} \sin \xi} e^{-i(N+2l)\xi} e^{i(\alpha_{p_s}+\alpha_{p_e}+\alpha_{p_c}-\alpha_{p_0}) \cos \xi} \\
&\times \left(1 - \frac{F_0}{\omega_{cl}} \cos \xi (x_1 + x_2) \right) e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_1} \varphi_{\mathbf{p}_c}^{C*}(\mathbf{r}_2) \Phi_{He}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2).
\end{aligned} \tag{Б.25}$$

С учетом

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} J_n(2\beta) e^{in(-2\xi)} = e^{i2\beta \sin(-2\xi)} = e^{-4i\beta \sin \xi \cos \xi}, \tag{Б.26}$$

выражение для сечения можно переписать в виде

$$\begin{aligned}
\mathcal{F}_N &= 2A^* \cdot \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\xi \iint d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \\
&\times e^{-iN\xi} e^{i \frac{\mathbf{F}_0(\mathbf{r}_1+\mathbf{r}_2)}{\omega} \sin \xi} e^{i(\alpha_{p_s}+\alpha_{p_e}+\alpha_{p_c}-\alpha_{p_0}) \cos \xi} e^{-4i\beta \sin \xi \cos \xi} \\
&\times \left(1 - (x_1 + x_2) \frac{F_0}{\omega_{cl}} \cos \xi \right) e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_1} \varphi_{\mathbf{p}_c}^{C*}(\mathbf{r}_2) \Phi_{He}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2).
\end{aligned} \tag{Б.27}$$

Если пренебречь слагаемым с F_0/ω_{cl} и учесть, что $\mathbf{q} = \mathbf{p}_s + \mathbf{p}_e - \mathbf{p}_0$, $\alpha_{\mathbf{p}} = \mathbf{p}\mathbf{F}_0/\omega^2$, $A = 1/\sqrt{2}$, то окончательно можно записать (3.8)

$$\begin{aligned}
\mathcal{F}_N(\mathbf{q}, \mathbf{p}_c) &= \sqrt{2} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\xi}{2\pi} \int d\mathbf{r}_1 \int d\mathbf{r}_2 e^{-iN\xi} e^{-4i\beta \sin \xi \cos \xi} \\
&\times e^{i\alpha_{\mathbf{q}+\mathbf{p}_c} \cos \xi} e^{i \frac{\mathbf{F}_0 \cdot (\mathbf{r}_1+\mathbf{r}_2)}{\omega} \sin \xi} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_1} \\
&\times \varphi_{\mathbf{p}_c}^{C*}(\mathbf{r}_2) \Phi_{He}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2).
\end{aligned} \tag{Б.28}$$

Список публикаций по теме диссертации

1. Bulychev A. A., Kouzakov K. A., Popov Yu. V. The role of Volkov waves in laser-assisted electron momentum spectroscopy // Phys. Lett. A. 2012. Vol. 376, no. 4. P. 484 – 487.
2. Bulychev A. A., Chuluunbaatar O., Gusev A. A., Joulakian B. $(\gamma, 2e)$ photo-double ionization of N₂ molecules for equal energy sharing // Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics. 2013. Vol. 46, no. 18. P. 185203.
3. Bolognesi P., Joulakian B., Bulychev A. A. et al. Photo-double-ionization of the nitrogen molecule // Phys. Rev. A. 2014. — May. Vol. 89. P. 053405.
4. Bulychev A. A., Kouzakov K. A. Laser-assisted ionization-excitation of helium by electron impact at large momentum transfer // The European Physical Journal D. 2014. Vol. 68, no 11.
5. Bulychev A. A., Kouzakov K. A. Laser-assisted $(e, 3e)$ collisions in helium at high impact energy and large momentum transfer // Phys. Rev. A. 2015. — Feb. Vol. 91. P. 023413.
6. Kouzakov K. A., Bulychev A. A., Popov Y. V., Takahashi M. Laser-assisted electron-impact ionization of atoms at high impact energy and large momentum transfer // Journal of Physics: Conference Series. 2012. Vol. 388, no. 11. P. 112001.
7. Bulychev A. A., Kouzakov K. A., Popov Yu. V. Effects of Volkov functions in laser-assisted electron momentum spectroscopy // Proc. SPIE. 2013. Vol. 8699. P. 86991B–86991B–8.
8. Bulychev A. A., Kouzakov K. A., Popov Y. V. Theoretical study on laser-assisted electron momentum spectroscopy of helium // Journal of Physics: Conference Series. 2014. Vol. 488, no. 11. P. 112001.

9. Bulychev A. A., Kouzakov K. A., Vinitsky S. I. Laser-assisted single and double ionization of helium by electron impact // Proc. SPIE. 2015. Vol. 9448. P. 944829–944829–4.

Список литературы

10. Неудачин В. Г., Попов Ю. В., Смирнов Ю. Ф. Электронная импульсная спектроскопия атомов, молекул и тонких пленок // УФН. 1999. Т. 169. С. 1111–1139.
11. Шаблов В. Л., Виноцкий П. С., Попов Ю. В. и др. Борновский ряд в теории ионизации атома электронным ударом // ЭЧАЯ. 2010. Т. 41, № 2. С. 607–650.
12. Попов Ю. В., Чулуунбаатар О., Шаблов В. Л., Кузаков К. А. Процессы многократной ионизации с участием быстрых заряженных частиц // ЭЧАЯ. 2010. Т. 41, № 4. С. 1019–1076.
13. Weigold E., McCarthy I. Electron Momentum Spectroscopy. New York: Kluwer Academic/Plenum Publishers, 1999.
14. Höhr C., Dorn A., Najjari B. et al. Electron Impact Ionization in the Presence of a Laser Field: A Kinematically Complete ($n\gamma e, 2e$) Experiment // Phys. Rev. Lett. 2005. — Apr. Vol. 94. P. 153201.
15. Yamazaki M., Kasai Y., Oishi K. et al. Development of an ($e, 2e$) electron momentum spectroscopy apparatus using an ultrashort pulsed electron gun // Rev. Sci. Instrum. 2013. Vol. 84, no. 6. P. 063105.
16. Kouzakov K. A., Popov Yu. V., Takahashi M. Laser-assisted electron momentum spectroscopy // Phys. Rev. A. 2010. — Aug. Vol. 82. P. 023410.
17. Watanabe N., Khajuria Y., Takahashi M. et al. ($e, 2e$) and ($e, 3-1e$) studies on double processes of He at large momentum transfer // Phys. Rev. A. 2005. — Sep. Vol. 72. P. 032705.
18. Watanabe N., Kouzakov K. A., Popov Yu. V., Takahashi M. Electron-impact

- double ionization of He at large momentum transfer studied by second-order Born-approximation calculations // *Phys. Rev. A*. 2008. Vol. 77. P. 032725.
19. Bellm S., Lower J., Weigold E., Mueller D. W. Fully Differential Molecular-Frame Measurements for the Electron-Impact Dissociative Ionization of H₂ // *Phys. Rev. Lett.* 2010. — Jan. Vol. 104. P. 023202.
 20. Тейлор Д. Теория рассеяния. Квантовая теория нерелятивистских столкновений. Москва: Мир, 1975.
 21. Попов У. Investigation of a three-charged-particle break-up scattering amplitude // *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* 1981. Vol. 14. P. 2449–2457.
 22. Веселова А. М. Выделение двухчастичных кулоновских особенностей в системе трех заряженных частиц // *ТМФ*. 1970. Т. 3. С. 326–331.
 23. Веселова А. М. Интегральные уравнения для трех частиц с кулоновским дальним действием // *ТМФ*. 1978. Т. 35. С. 180–192.
 24. Меркурьев С. П., Фаддеев Л. Д. Квантовая теория рассеяния для систем нескольких частиц. Москва: Наука, 1985.
 25. Комаров В. В., Попова А. М., Шаблов В. Динамика систем нескольких квантовых частиц. Москва: Изд-во МГУ, 1996.
 26. Веселова А. М. Определение амплитуд рассеяния в задачах двух и трех заряженных частиц // *ТМФ*. 1972. Т. 13. С. 368–376.
 27. Zorbas J. Perturbation theory for three particle Coulomb scattering // *Int. J. Theor. Phys.* 1981. Vol. 20. P. 921–956.
 28. Weinberg S. Infrared photons and gravitons // *Phys. Rev.* 1965. Vol. 140. P. B516–B524.

29. Кулиш П. П., Фаддеев Л. Д. Асимптотические условия и инфракрасные расходимости в квантовой электродинамике // ТМФ. 1970. Т. 4. С. 153–170.
30. Latypov D. M., Mukhamedzhanov A. M. On the Coulomb singular kernel of Lippmann–Schwinger-type equation // J. Math. Phys. 1992. Vol. 33. P. 3105–3107.
31. Latypov D. M., Mukhamedzhanov A. M. Two theorems on the kernel of Faddeev equations for the scattering of three charged particles and some applications // J. Math. Phys. 1993. Vol. 34. P. 4554–4561.
32. Шаблов В. Л., Шитков Ю. Ю., Попов Ю. В. Метод резольвентных интегральных уравнений в задаче о рассеянии трех частиц с кулоновским взаимодействием // Фундаментальная и прикладная математика. 1996. Т. 2. С. 925–951.
33. Шаблов В. Л., Билык В. А., Попов Ю. В. Метод резольвентных интегральных уравнений в задаче о рассеянии трех частиц с кулоновским взаимодействием // Фундаментальная и прикладная математика. 1998. Т. 4. С. 1207–1224.
34. Shablov V. L., Bilyk V. A., Popov Y. V. The multichannel Coulomb scattering theory and its applications to $(e, 2e)$ reactions // J. Physique IV. 1999. Vol. 9. P. Pr6–59–Pr6–63.
35. Shablov V. L., Bilyk V. A., Popov Y. V. Status of the convergent close-coupling method within the framework of the rigorous Coulomb scattering theory // Phys. Rev. A. 2002. Vol. 65. P. 042719 [4 pages].
36. Виноцкий П. С., Кузаков К. А., Попов Ю. В., Каппелло К. Д. Исследование вклада эффектов высших порядков в процесс $(e, 2e)$ на атоме водорода // Вестник Московского университета. Серия 3. Физика. Астрономия. 2008. № 1. С. 28–32.

37. Watanabe N., Takahashi M., Udagawa Y. et al. Two-step mechanisms in ionization-excitation of He studied by binary $(e, 2e)$ experiments and second-Born-approximation calculations // Phys. Rev. A. 2007.— May. Vol. 75. P. 052701.
38. Furry W. H. On Bound States and Scattering in Positron Theory // Phys. Rev. 1951.— Jan. Vol. 81. P. 115–124.
39. Берестецкий В. Б., Лифшиц Е. М., Питаевский Л. П. Квантовая электродинамика. Москва: ФИЗМАТЛИТ, 2002. С. 720.
40. Wolkow D. M. Über eine Klasse von Lösungen der Diracschen Gleichung // Z. Phys. 1935. Vol. 94. P. 250–260.
41. Камкэ Э. Справочник по обыкновенным дифференциальным уравнениям. Москва: Наука, 1976. С. 576.
42. Joachain C. J., Kylstra N. J., Potvliege R. M. Atoms in Intense Laser Fields. Cambridge, UK: Cambridge University Press, 2011.
43. Делоне Н. Б., Крайнов В. П. Динамический штарковский сдвиг атомных уровней // УФН. 1999. Т. 169. С. 1111–1139.
44. Mulser P., Uryupin S., Sauerbrey R., Wellegehausen B. Ponderomotive potential and dynamical Stark shift in multiphoton ionization // Phys. Rev. A. 1993.— Dec. Vol. 48. P. 4547–4550.
45. Abramowitz M., Stegun I. Handbook of Mathematical Functions. New York: Dover Publishers, 1972.
46. Kobe D. H., Smirl A. L. Gauge invariant formulation of the interaction of electromagnetic radiation and matter // Am. J. Phys. 1978. Vol. 46, no. 6. P. 624–633.

47. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теоретическая физика: Учеб. пособ.: Для вузов. В 10 т. Т. III. Квантовая механика (нерелятивистская теория). Москва: ФИЗМАТЛИТ, 2002. С. 760.
48. Atkins P. W., Friedman R. S. *Molecular Quantum Mechanics*. 4 edition. New York: Oxford University Press, 2005.
49. Höhr C., Dorn A., Najjari B. et al. Laser-assisted electron-impact ionization of atoms // *J. Electron Spectrosc.* 2007. Vol. 161. P. 172–177.
50. Makhoute A., Khalil D., Maquet A. et al. Light polarization effects in laser-assisted (e,2e) collisions in helium // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 1999. Vol. 32, no. 13. P. 3255.
51. Ghosh Deb S., Sinha C. Multiphoton effects in laser-assisted ionization of a helium atom by electron impact // *Eur. Phys. J. D.* 2010. Vol. 60, no 2. P. 287–294.
52. Khalil D., Maquet A., Taïeb R. et al. Laser-assisted (e, 2e) collisions in helium // *Phys. Rev. A.* 1997. — Dec. Vol. 56. P. 4918–4928.
53. Li S.-M., Chen Z.-J., Wang Q.-Q., Zhou Z.-F. Laser influence on positron-antiproton radiative capture collision // *Eur. Phys. J. D.* 1999. Vol. 7, no 1. P. 39–44.
54. Voitkiv A. B., Ullrich J. Binary-encounter electron emission in fast atomic collisions in the presence of coherent electromagnetic radiation // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 2001. Vol. 34, no. 9. P. 1673.
55. Clementi E., Roetti C. Roothaan-Hartree-Fock atomic wavefunctions: Basis functions and their coefficients for ground and certain excited states of neutral and ionized atoms, $Z \leq 54$ // *At. Data Nucl. Data Tables.* 1974. Vol. 14, no. 3–4. P. 177 – 478.

56. Silverman J. N., Platas O., Matsen F. A. Simple Configuration-Interaction Wave Functions. I. Two-Electron Ions: A Numerical Study // J. Chem. Phys. 1960. Vol. 32, no. 5. P. 1402–1406.
57. Bonham R. A., Kohl D. A. Simple Correlated Wavefunctions for the Ground State of Heliumlike Atoms // J. Chem. Phys. 1966. Vol. 45, no. 7. P. 2471–2473.
58. Mitroy J., McCarthy I. E., Weigold E. A natural orbital analysis of the helium (e, 2e) spectrum // J. Phys. B: At. Mol. Phys. 1985. Vol. 18, no. 20. P. 4149.
59. Löwdin P.-O. Quantum Theory of Many-Particle Systems. I. Physical Interpretations by Means of Density Matrices, Natural Spin-Orbitals, and Convergence Problems in the Method of Configurational Interaction // Phys. Rev. 1955. — Mar. Vol. 97. P. 1474–1489.
60. Popov Yu. V., Cappello C. D., Kuzakov K. (e,3e) electronic momentum spectroscopy: perspectives and advantages // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 1996. Vol. 29, no. 23. P. 5901.
61. Neudachin V. G., Popov Yu. V., Smirnov Yu. F. Electron momentum spectroscopy of atoms, molecules, and thin films // Physics-Uspekhi. 1999. Vol. 42, no. 10. P. 1017.
62. Kobe D. H., Wen E. C. T. Gauge invariance in quantum mechanics: charged harmonic oscillator in an electromagnetic field // J. Phys. A: Math. Gen. 1982. Vol. 15, no. 3. P. 787.
63. Kornev A. S., Zon B. A. Testing of Coulomb-Volkov functions // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 2002. Vol. 35, no. 11. P. 2451.
64. Bellm S., Lower J., Bartschat K. Electron-Impact Ionization and Excitation of Helium to the $n = 1 - 4$ Ionic States // Phys. Rev. Lett. 2006. Vol. 96. P. 223201.

65. deHarak B. A., Bartschat K., Martin N. L. S. Out-of-Plane ($e, 2e$) Experiments on Helium $L = 0, 1, 2$ Autoionizing Levels // Phys. Rev. Lett. 2008. Vol. 100. P. 063201.
66. Krüger H., Jung Ch. Low-frequency approach to multiphoton free-free transitions induced by realistic laser pulses // Phys. Rev. A. 1978. — May. Vol. 17. P. 1706–1712.
67. Chuluunbaatar O., Gusev A. A., Joulakian B. B. The correlated two-centre double continuum and the double ionization of H 2 and N 2 by fast electron impact // Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics. 2012. Vol. 45, no. 1. P. 015205.
68. Maulbetsch F., Pont M., Briggs J. S., Shakeshaft R. Angular distributions for double photoionization of helium: a comparative study // Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics. 1995. Vol. 28, no. 10. P. L341.
69. Dalgarno A., Sadeghpour H. R. Double photoionization of atomic helium and its isoelectronic partners at x-ray energies // Phys. Rev. A. 1992. — Oct. Vol. 46. P. R3591–R3593.
70. Heitler W., London F. Wechselwirkung neutraler Atome und homöopolare Bindung nach der Quantenmechanik // Zeitschrift für Physik. 1927. Vol. 44, no 6-7. P. 455–472.
71. Walter M., Briggs J. Photo-double ionization of molecular hydrogen // Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics. 1999. Vol. 32, no. 11. P. 2487.
72. Mueller C. R., Eyring H. Semilocalized Orbitals. I. The Hydrogen Molecule // The Journal of Chemical Physics. 1951. Vol. 19, no. 12.

73. Turbiner A. V., Guevara N. L. A note about the ground state of the hydrogen molecule // ArXiv Physics e-prints. 2006. — jun. physics/0606120.
74. Kheifets A. S. Single-center model for double photoionization of the H₂ molecule // Phys. Rev. A. 2005. — Feb. Vol. 71. P. 022704.
75. Byron F. W., Joachain C. J. Importance of Correlation Effects in the Ionization of Helium by Electron Impact // Phys. Rev. Lett. 1966. — Jun. Vol. 16. P. 1139–1142.
76. Nesbet R. K. Electronic Structure of N₂, CO, and BF // The Journal of Chemical Physics. 1964. Vol. 40, no. 12.
77. Bouferguene A., Fares M., Hoggan P. E. STOP: A slater-type orbital package for molecular electronic structure determination // International Journal of Quantum Chemistry. 1996. Vol. 57, no. 4. P. 801–810.
78. Cade P. E., Sales K. D., Wahl A. C. Electronic Structure of Diatomic Molecules. III. A. Hartree–Fock Wavefunctions and Energy Quantities for N₂(X₁Σ_g⁺) and N₂⁺(X₂Σ_g⁺, A₂Π_u, B₂Σ_u⁺) Molecular Ions // The Journal of Chemical Physics. 1966. Vol. 44, no. 5.
79. Scherr C. W. An SCF LCAO MO Study of N₂ // The Journal of Chemical Physics. 1955. Vol. 23, no. 3.
80. Huetz A., Selles P., Waymel D., Mazeau J. Wannier theory for double photoionization of noble gases // Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics. 1991. Vol. 24, no. 8. P. 1917.
81. Kheifets A. S., Bray I. Symmetrized amplitudes of the helium-atom double photoionization // Phys. Rev. A. 2002. — Jan. Vol. 65. P. 022708.
82. Wightman J. P., Cvejanovic S., Reddish T. J. (γ, 2e) cross section measurements

of D₂ and He // Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics.
1998. Vol. 31, no. 8. P. 1753.