

**МЕТОДИЧЕСКИЕ ЗАМЕТКИ**

**Атомная физика: вычисления на компьютере  
и теоретический анализ**

Е.Г. Друкарев

*Показано, что теоретический анализ, предшествующий численному расчету, помогает определить энергию основного состояния атома гелия, а также дает возможность избежать качественных ошибок при вычислении характеристик двойной фотоионизации.*

PACS numbers: 31.15.-p, 31.50.Bc, 32.80.Fb

**Содержание**

1. Введение (877).
2. Вычисление энергии основного состояния атома гелия (879).
3. Асимптотика двойной фотоионизации:  $\omega^{-7/2}$  или  $\omega^{-5/2}$ ? (880).  
3.1. Асимптотика однократной ионизации. 3.2. Асимптотика двойной фотоионизации. Кажущееся противоречие. 3.3. Разрешение противоречия. 3.4. Уравнение Липпмана – Швингера.
4. Форма спектра двойной фотоионизации: U или W? (883).  
4.1. Механизмы процесса. 4.2. Вычисления в дипольном приближении. 4.3. Объяснение результатов, полученных в дипольном приближении. 4.4. Эволюция формы спектра. 4.5. Свойства приближенных функций, необходимые для описания двойной фотоионизации.
5. Заключение (886).

Список литературы (887).

**1. Введение**

Многие из публикуемых сегодня статей о взаимодействии фотонов с атомами или молекулами имеют одинаковую структуру. В качестве первого шага выписывается наиболее общая формула, известная из квантовой механики. На следующем этапе в эту формулу подставляется как можно более точная волновая функция связанной системы. Такая функция либо бывает получена в этой же статье, либо заимствуется из предыдущих публикаций. Так как энергии связи связанных систем измеряются с большой точностью, то волновые функции проходят тест на воспроизведение этой величины. Наиболее точной функцией считается та, которая точнее других воспроизвела значение энергии связи. После этого прово-

Е.Г. Друкарев. Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова РАН,  
188300 Гатчина, Ленинградская обл., Орлова роща,  
Российская Федерация  
Тел. (813) 714-60-96  
E-mail: drukarev@thd.pnpi.spb.ru

Статья поступила 16 марта 2007 г.

дятся компьютерные вычисления. Иногда делается попытка учесть взаимодействия в конечном состоянии, для чего обычно используются комбинации кулоновских функций.

Лет двадцать назад такой подход был в какой-то мере оправдан. Вычисляются, как правило, те характеристики, которые могут быть измерены. В экспериментах энергии, передаваемые мишенью, были обычно сравнимы с энергиями связи. Таким образом, в задачах не возникал малый параметр, и общие формулы, даваемые квантовой механикой, не допускали дальнейшего преобразования. Единственным масштабом расстояний оказывался размер связанной системы. Дальнейшие исследования в этой области представляли собой борьбу за увеличение точности. Физика процессов в непосредственной близости от порога, где можно было выделить малый параметр, составляла одно из исключений.

В конце 80-х годов, когда стали доступны новые синхротронные источники фотонов, ситуация изменилась. Начали проводить эксперименты, в которых с атомами взаимодействовали фотоны с энергиями до 10 кэВ. Для легких атомов такие энергии значительно превосходят энергии связи даже 1s-электронов. В результате в теоретических задачах появился малый параметр.

Общий подход к атомной физике высоких энергий может базироваться на идеях Бете [1], более современное изложение которых содержится в [2, 3]. Сформулированный для электрон-атомного рассеяния подход [1] можно распространить на любой процесс взаимодействия частиц высоких энергий со связанными системами. Термин "высокие энергии" означает, что энергии значительно превосходят энергию связи. Сечения таких процессов выражаются через определенные параметры связанной системы. Взаимодействия между быстрыми и медленными компонентами системы могут быть учтены с помощью теории возмущений. Каждый акт передачи момента, значительно превосходящего характерный момент связанной системы, приводит к появлению параметрически малого фактора. В области, кинематически разрешенной для процесса на свободном электроне, которую называют *поверхностью Бете*, ядру передается

импульс  $q$  порядка момента связанного электрона  $\eta$ . Процессы вне поверхности Бете требуют передачи ядру большого момента ( $q \gg \eta$ ). Поэтому процессы вне поверхности сильно подавлены.

Таким образом, амплитуды процессов атомной физики высоких энергий зависят от параметра

$$\kappa = \frac{\eta}{q}. \quad (1)$$

На поверхности Бете  $\kappa \sim 1$ , в то время как вне этой поверхности  $\kappa \ll 1$ . Характерный импульс связи может быть определен как  $\eta = (2mI)^{1/2}$ , где  $I > 0$  обозначает энергию связи. Используя систему единиц с  $\hbar = c = 1$ , получаем для основного состояния водородоподобного атома

$$\eta = m\alpha Z. \quad (2)$$

Здесь  $m$  — масса покоя электрона,  $\alpha = 1/137$ ,  $Z$  — заряд ядра.

Описание быстрого электрона с помощью теории возмущений, являющееся еще одним пунктом теории Бете, иногда приводит к недоразумениям. В главе "Теория возмущений" учебников по квантовой механике часто рассматриваются лишь короткодействующие силы. Дело в том, что для случая кулоновского поля каждый член, возникающий при итерации уравнения Липпмана — Швингера, содержит инфракрасно расходящиеся вклады. В этом смысле ряд расходится, и возможность описания быстрых электронов плоскими волнами выглядит необоснованной. Тем не менее выход из положения был найден давно. Еще Далитц [4] предположил, что расходящиеся вклады в амплитудах взаимодействия электрона с ядром образуют множитель  $\exp(i\Phi)$ , где  $\Phi$  вещественна. Этот множитель сокращается с комплексно-сопряженным при вычислении сечения. Строгое доказательство этого утверждения дано Горшковым [5]. Таким образом, представляя электростатическое взаимодействие электрона с ядром в виде  $V(r) = -\alpha Z \exp(-\lambda r)/r$  с  $\lambda \rightarrow 0$ , можно вполне обоснованно написать уравнение Липпмана — Швингера и решать его с применением теории возмущений. Члены, зависящие от  $\lambda$ , при этом сократятся в сечении.

Параметр теории возмущений нерелятивистского электрона сплошного спектра с асимптотическим импульсом  $p$ , движущегося в поле ядра с зарядом  $Z$ , записывается как [6]

$$\xi_Z = \frac{m\alpha Z}{p}. \quad (3)$$

Условие  $\xi_Z \ll 1$  означает, что относительный вклад взаимодействия с ядром в волновую функцию электрона значительно меньше единицы. Так как для различных членов разложения волновой функции по степеням  $\xi_Z$  могут быть существенно различные расстояния, нужно следить за тем, чтобы все члены, дающие вклад в данный порядок разложения амплитуды по степеням, были учтены.

Тем не менее часто возникают большие расхождения между результатами вычислений с использованием плоских волн и функций кулоновского поля ядра даже при очень больших энергиях. Иногда это приводит к утверждению, что "приближение плоских волн никогда не

работает". На самом деле это связано с тем [7], что взаимодействие электрона с ядром содержит два параметра, зависящих от момента электрона  $p$ . Наряду с параметром  $\xi_Z^2$ , в ряд по которому разлагается волновая функция на расстояниях от ядра порядка  $\eta^{-1}$ , есть параметр  $\pi\xi_Z$ , возникающий при взаимодействиях на малых расстояниях  $\sim p^{-1}$ . Зависимость от параметра  $\pi\xi_Z$ , во всяком случае, возникает в нормировочном множителе нерелятивистской кулоновской функции. Дополнительные вклады порядка  $\pi\xi_Z$  появляются в процессах, требующих передачи ядру большого импульса, например в фотоэффекте. К счастью, все вклады, зависящие от  $\pi\xi_Z$ , факторизуются, и соответствующий множитель может быть вычислен. Таким образом, теория возмущений для отношения сечений имеет более широкую область применения, чем для самих сечений [8]. Полагая

$$\pi\xi_Z \sim 1, \quad \xi_Z^2 \ll 1, \quad (4)$$

можно проводить разложение по степеням  $\xi_Z^2$ .

Попытки учесть взаимодействие в конечном состоянии частиц сплошного спектра со связанными электронами также наталкивались на трудности, обусловленные дальнодействием. В работе [9] был предложен подход, позволяющий учесть взаимодействие в низшем порядке по параметру

$$\xi^2 = \frac{(m\alpha)^2}{p_r^2}, \quad (5)$$

где  $p_r$  — момент относительного движения электрона конечного состояния и связанного электрона (формула (5) приведена для случая  $e-e$ -взаимодействия). Вычисления требуют учета амплитуд первого и второго порядка. На промежуточных этапах появляются инфракрасные расходимости, имеющие то же происхождение, что и в случае взаимодействия электрона с ядром, которые сокращаются в окончательном выражении для сечения.

Так как эксперименты с фотонами высоких энергий долгое время были недоступны, эти идеи нечасто применялись в теоретических работах. Последовательно этот подход, насколько мне известно, использовали только В.Г. Горшков и его сотрудники [10] и только для случая водородоподобных атомов.

Таким образом, для высокогенеретических процессов с участием связанных электронов могут быть важны расстояния порядка  $\eta^{-1}$  и порядка  $p^{-1} \ll \eta^{-1}$ . Поэтому недостаточно, а может оказаться и не очень важным то, что волновая функция правильно воспроизводит энергию связи. Если процесс кинематически запрещен для свободных электронов, то более важно поведение волновой функции на малых расстояниях между электроном и ядром или между электронами. При этом можно использовать теорию возмущений по параметру  $\kappa^2$ . При описании конечного состояния можно использовать теорию возмущений по параметрам  $\kappa^2$ ,  $\xi_Z^2$  и  $\xi^2$ , заботясь о том, чтобы все вклады данного порядка были учтены.

Мне представляется, что история изучения двойной фотоионизации гелия хорошо иллюстрирует то, как применение этих принципов позволяет получить результаты, а также то, как пренебрежение ими приводит к качественным ошибкам. Но начнем со статической задачи о вычислении энергии связи атома гелия.

## 2. Вычисление энергии основного состояния атома гелия

Энергия связи основного состояния атома гелия измерена с высокой точностью. Погрешность составляла  $10^{-6}$  в конце 50-х годов [2], сегодня она равна  $2 \times 10^{-7}$  [11]. Это стимулировало поиски как можно более точных решений волнового уравнения для гелия. Основные усилия были сосредоточены на решении нерелятивистского уравнения (уравнения Шрёдингера) в поле силового центра.

Метод Хартри–Фока (ХФ), развитый в начале 30-х годов, позволяет найти энергию основного состояния с точностью 1,5 %, в то время как экспериментальное значение определено с несравненно большей точностью. Причина этой неудачи понятна. Волновая функция в методе ХФ представляет собой комбинацию одночастичных функций и не зависит от относительного расстояния между электронами  $r_{12}$  и поэтому не воспроизводит картину их движения относительно друг друга.

Одновременно с методом ХФ развивался другой подход, в котором постулировалась аналитическая зависимость приближенной волновой функции  $\psi_a(r_1, r_2, r_{12})$  от расстояний  $r_1, r_2$  между электронами и ядром и от межэлектронного расстояния  $r_{12}$ . Функции  $\psi_a$  зависят от нескольких параметров, которые определяются условием минимизации среднего значения гамильтонiana атома гелия

$$E = \langle \psi_a | H | \psi_a \rangle. \quad (6)$$

Простейшим примером является произведение водородоподобных функций с некоторым "эффективным зарядом ядра"  $Z_{\text{eff}}$ , играющим роль вариационного параметра. В этом случае

$$\psi_a(r_1, r_2) = \psi_H(r_1) \psi_H(r_2), \quad (7)$$

с известными выражениями  $\psi_H(r) = \exp(-ar)$ ,  $a = m\alpha Z_{\text{eff}}$  для водородоподобных функций основного состояния  $\psi_H$ . (Здесь использована нормировка  $\psi(0) = 1$ .) Известное решение  $Z_{\text{eff}} = 27/16$  [6] воспроизводит значение энергии с погрешностью 2 %.

С самого начала существования квантовой механики использовались приближенные функции вида

$$\psi_a(r_1, r_2, r_{12}) = \exp[-a(r_1 + r_2)] P(r_1, r_2, r_{12}), \quad (8)$$

где параметр  $a$  и коэффициенты полинома

$$P(r_1, r_2, r_{12}) = \sum c_{ijk} r_1^i r_2^j r_{12}^k \quad (9)$$

являются вариационными параметрами. В первых вычислениях, относящихся к концу 20-х годов, волновые функции (8) содержали три параметра. Спустя 30 лет использовались и функции, зависящие от более чем 200 параметров. Кроме того, в функции  $P(r_1, r_2, r_{12})$  помимо полиномиальных вкладов (9) вводилась зависимость от отношений

$$\frac{r_{12}}{r_1 + r_2} \quad \text{и} \quad \frac{(r_1 - r_2)^2}{r_{12}^2}.$$

Этот подход позволил получить постепенно уточняемую величину, интерпретируемую как энергия связи (при этом точность ее определения достигает нескольких

единиц на  $10^{-10}$ ), воспроизводящую и экспериментальное значение. Вычисления с точностью, превосходящей  $10^{-4}$ , требуют учета релятивистских поправок, конечной массы и размера ядра и т.д.

Однако еще в 1935 г. Барлетт и др. [12] заметили, что функции (8), в которых  $P$  являются полиномами, не могут удовлетворять уравнению Шрёдингера. Такие решения не могут существовать, так как не воспроизводят предельный случай тройного слияния  $r_1 = r_2 = r_{12} = 0$ . Впоследствии Фок показал [13], что включение логарифмических членов

$$P(r_1, r_2, r_{12}) = \sum c_{ijk} r_1^i r_2^j r_{12}^k [\ln(r_1^2 + r_2^2)]^n \quad (10)$$

дает правильное поведение в этой точке, и нашел алгоритм построения соответствующего разложения. Обычно такие функции задаются в гиперсферических переменных.

Включение логарифмических членов мало влияет на точность вычисления энергии, однако значительно ускоряет сходимость вариационных вычислений. При этом учет логарифмов позволяет уменьшить количество параметров, необходимое для достижения заданной точности. Например, вычисление с точностью  $10^{-9}$  с использованием функций (9) требует введения 1078 параметров, в то время как та же точность может быть достигнута с помощью функций вида (10), содержащих 52 параметра [15]. Кроме того, как заметили Миерс и др. [16], для некоторых функций (9) вариационная процедура выбирает значения параметров таким образом, что функция  $P$  может быть представлена в виде (10) с меньшим количеством параметров.

Поведение решения уравнения Шрёдингера  $\Psi(r_1, r_2, r_{12})$  в точках слияния двух частиц  $r_1 = 0$ ,  $r_2 = 0$  и  $r_{12} = 0$  определяются условиями Като [17]. В точке слияния электрона с ядром

$$r_0 \frac{\partial \Psi(r_1, r_2, r_{12})}{\partial r_1} = -Z\Psi(0, r_2, r_{12}), \quad (11)$$

и аналогичное соотношение возникает при  $r_2 = 0$ . В точке слияния двух электронов

$$r_0 \frac{\partial \Psi(r_1, r_1, r_{12})}{\partial r_{12}} = \frac{1}{2} \Psi(r_1, r_1, 0), \quad (12)$$

где  $r_0 = 1/m\alpha$  — боровский радиус. Уравнения (11) и (12) можно рассматривать как условие сокращения сингулярных членов в уравнении Шрёдингера.

Для иллюстрации рассмотрим одноэлектронную волновую функцию основного состояния в эффективном поле  $U(r)$ , которое аппроксимирует взаимодействие электрона с ядром и электронным облаком. Уравнение Шрёдингера для этого случая имеет вид

$$-\frac{1}{2m} \left[ \psi''(r) + \frac{2}{r} \psi'(r) \right] + U(r) \psi(r) = E\psi(r). \quad (13)$$

При  $r \rightarrow 0$  поле  $U(r)$  определяется взаимодействием с ядром, т.е.  $U(r \rightarrow 0) = -\alpha Z/r$ . Поэтому при  $r \rightarrow 0$  можно написать

$$-\frac{1}{2m} \psi''(r) + \lim_{r \rightarrow 0} \left( -\frac{1}{m} \frac{\psi'(r)}{r} - \frac{\alpha Z \psi(r)}{r} \right) = E\psi(r). \quad (14)$$

Так как обе части уравнения (14) должны быть регулярны, выражение в скобках в левой части должно

иметь конечное значение. Поэтому

$$r_0 \frac{\partial \psi(r)}{\partial r} = -Z\psi(0) \quad (15)$$

при  $r \rightarrow 0$ . Такой же анализ уравнения Шрёдингера для атома гелия приводит к уравнениям (11) и (12). Интересно, что эти соотношения, которые могли быть замечены сразу после того, как в 1926 г. было написано уравнение Шрёдингера, были найдены только 30 лет спустя.

Правильное поведение приближенной волновой функции вблизи двухчастичной точки слияния оказывается важнее, чем вблизи трехчастичной точки, так как последняя проявляется в меньшем фазовом объеме. В работе [16] анализировалась простейшая приближенная функция, удовлетворяющая обоим условиям Като,

$$\psi_a(r_1, r_2, r_{12}) = \exp [-a(r_1 + r_2) + br_{12}] \quad (16)$$

с  $a = m\alpha Z$ ,  $b = m\alpha/2$ . Эта функция, не содержащая подгночных параметров, воспроизводит энергию связи с той же точностью, что и функция (7), содержащая вариационный параметр  $Z_{\text{eff}}$ . Функция (16), тем не менее, не обладает правильным поведением в точке трехчастичного слияния  $r_1 = r_2 = r_{12} = 0$ . Простейшая функция с правильным поведением в этой точке также приводится в [16].

Если для приближенной функции выбрана разумная форма, то вариационная процедура выбирает значения параметров, при которых соотношения Като выполняются с хорошей точностью, как, например, для функции

$$\psi_a(r_1, r_2, r_{12}) = \exp [-a(r_1 + r_2) + br_{12}] \sum c_{ijk} r_1^i r_2^j r_{12}^k \quad (17)$$

( $i+j+k \leq N$ ), проанализированной Тенгом и Шейкшафтом [18]. Даже в случае четырех параметров ( $N=1$ ) относительные ошибки в равенствах (11) и (12) для функции (17) составили 6 и 25 % соответственно. При большем числе параметров условия Като выполняются с большей точностью. Для достижения заданной точности функции вида (17) требуют значительно меньшего количества параметров, чем функции (8), (9). Так, функция (17) с 14 параметрами воспроизводит энергию связи с погрешностью  $3 \times 10^{-5}$ . Для достижения такой точности в классе функций (8), (9) требуется 210 параметров.

В современных вычислениях, наряду со средним значением гамильтониана (6), исследуется локальная энергия

$$E(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{H\psi_a}{\psi_a}, \quad (18)$$

дающая более детальную информацию о связи приближенной функции  $\psi_a$  с истинным решением уравнения Шрёдингера  $\Psi$ . Другой подход состоит в прямом решении уравнения Шрёдингера. В одном из методов в этом подходе (см. [19], где излагаются также и другие методы) приближенная волновая функция представляется в виде произведения корреляционного фактора, определяющего поведение в сингулярных точках слияния, и гладкой функции, разложенной по гиперсферическим гармоникам. Детальное описание этих методов выходит за рамки настоящей статьи.

В этом разделе было показано, что учет правильной аналитической структуры в приближенных волновых функциях улучшает результаты вычислений энергии связи, но это еще важнее в динамических задачах, которые рассмотрены в следующих разделах.

### 3. Асимптотика двойной фотоионизации: $\omega^{-7/2}$ или $\omega^{-5/2}$ ?

Двойная фотоионизация гелия изучается с конца 50-х годов как простейшая динамическая задача трех тел с электромагнитным взаимодействием. Огромное количество экспериментальных данных позволяет теоретикам проверять свои подходы.

Механизм, определяющий высокоенергетическую нерелятивистскую асимптотику сечения двойной фотоионизации  $\sigma^{2+}(\omega)$  ( $\omega$  — энергия фотона), найден в работе Кабира и Соллптера [20]. При энергиях  $\omega$ , значительно превосходящих энергию связи  $I$ , процесс можно рассматривать как однократную ионизацию, сопровождающуюся изменением состояния второго электрона из-за изменения гамильтониана системы. При этом вторичный электрон получает, в основном, энергию  $\varepsilon_2 \sim I$ . Таким образом, зависимости амплитуды и сечения процесса от  $\omega$  такие же, как в случае однократной ионизации, и асимптотика отношения сечений  $\sigma^{2+}(\omega)/\sigma^+(\omega)$  от энергии не зависит.

Это напоминает ионизацию атомов при  $\beta$ -распаде. Последняя, как показал Фейнберг [21], происходит (при достаточно больших энергиях), в основном, за счет изменения заряда ядра и вызываемого этим перераспределением по конечным состояниям атома (встряска). Однако аналогия не является полной. Изменение заряда ядра приводит к изменению эффективного поля, которое чувствуют атомные электроны. Как показали Байрон и Яшен [22], попытки объяснить выбивание в континуум второго электрона внезапным изменением самосогласованного поля занижают асимптотику в 3 раза. Таким образом, в двойной ионизации важны корреляции, не учитываемые эффективным полем. Поэтому в вычислениях используются приближенные функции вида (8) или (17), в которых такие корреляции эффективно учитываются.

Несмотря на простоту механизма, предложенного в [20], вычисления асимптотики сечения привели к парадоксу, на разрешение которого ушло несколько лет. Напомним вначале, как вычисляются асимптотики амплитуд однократной и двойной ионизаций.

#### 3.1. Асимптотика однократной ионизации

Здесь будем описывать электроны одночастичными волновыми функциями. Общее выражение для амплитуды ионизации можно представить в виде [23]

$$F^+ = (4\pi\alpha)^{1/2} \int d^3r \psi_{p_1}^*(r) \gamma \exp[i(kr)] \psi(r), \quad (19)$$

где  $\psi_{p_1}$  — волновая функция сплошного спектра с асимптотическим моментом  $p_1$ ,  $\psi$  описывает связанный электрон (ограничиваясь случаем 1s-электрона), а  $\gamma$  — оператор взаимодействия фотона с электроном. Начнем со случая, когда он задан в "градиентной форме"

$$\gamma = -i \frac{(e\mathbf{V}_r)}{m}, \quad (20)$$

где  $\mathbf{e}$  — вектор поляризации фотона. Правая часть равенства (19) может быть выражена через фурье-образы волновых функций  $\psi_F$

$$F^+ = (4\pi\alpha)^{1/2} \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \psi_{Fp_1}^*(\mathbf{q}) \frac{(\mathbf{e}\mathbf{q})}{m} \psi_F(\mathbf{q} - \mathbf{k}). \quad (21)$$

Процесс сопровождается передачей импульса иону отдачи. Отметим, что энергия электрона  $\epsilon = p_1^2/2m$ , в то время как энергия связи может быть записана как  $I = \eta^2/2m$ . Поэтому условие  $\omega \gg I$  приводит к неравенству  $p_1 \gg \eta$ , т.е. импульс вылетающего электрона значительно больше импульса связи. Кроме того,  $k = \omega$ , и при нерелятивистских энергиях вылетающего электрона  $p_1 \gg k$ . Таким образом, при асимптотических энергиях  $\omega \gg I$  ион отдачи получает импульс  $Q \gg \eta$ .

Прежде всего опишем электрон сплошного спектра плоской волной

$$\psi_{Fp_1}(\mathbf{q}) = \psi_{Fp_1}^{(0)}(\mathbf{q}) = (2\pi)^3 \delta(\mathbf{p}_1 - \mathbf{q}). \quad (22)$$

В этом случае весь момент  $Q$  передается иону электроном начального состояния. Соответствующий вклад в амплитуду составляет

$$F_0^+ = (4\pi\alpha)^{1/2} \frac{(\mathbf{e}\mathbf{p}_1)}{m} \psi_F(p_1). \quad (23)$$

Для водородоподобных функций асимптотика

$$\psi_{HF}(p_1) = \frac{8\pi^{1/2} \eta^{5/2}}{p_1^4} + O(p_1^{-6}).$$

Можно ожидать, что асимптотика  $\psi_F(p_1) \sim p_1^{-4}$  сохранится и при учете межэлектронного взаимодействия, так как условие  $p_1 \gg \eta$  соответствует расстояниям от ядра  $p_1^{-1}$ , много меньшим, чем размер атома  $\eta^{-1}$ , и взаимодействие с ядром доминирует. Асимптотика волновой функции может быть вычислена без дополнительных приближений. Так как функция s-состояния не зависит от направления вектора  $r$ , можно преобразовать

$$\begin{aligned} \psi_F(p) &= \int d^3r \psi(r) \exp[-i(\mathbf{pr})] = \\ &= -\frac{4\pi}{p^2} \int dr r \psi(r) \cos pr = \\ &= \dots -\frac{8\pi\psi'(0)}{p^4} + O(p^{-6}). \end{aligned} \quad (24)$$

Последнее равенство получается, если проинтегрировать по частям два раза.

Чтобы убедиться, что равенство (24) действительно описывает асимптотику амплитуды (19), посмотрим, что дает учет взаимодействия вылетающего из атома электрона с ионом. Первая поправка теории возмущений для взаимодействия с ядром  $V^C(r) = -\alpha Z/r$  записывается в виде

$$\psi_n^{(1)} = \sum \frac{V_{nm}^C \psi_m^{(0)}}{\epsilon_n - \epsilon_m}, \quad (25)$$

где суммирование проводится по состояниям  $m$ , отличным от состояния  $n$ ,  $\epsilon_{m,n}$  — невозмущенные значения энергии,  $\psi_m^{(0)}$  заданы формулой (22). Непосредственные

вычисления дают поправку к волновой функции (22)

$$\psi_{Fp_1}^{(1)}(\mathbf{q}) = -\frac{8\pi\alpha Z m}{(\mathbf{p}_1 - \mathbf{q})^2 (p_1^2 - q^2)} \quad (26)$$

и к амплитуде

$$F_1^+ = -(4\pi\alpha)^{1/2} \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \frac{(\mathbf{e}\mathbf{q})}{m} \frac{8\pi\alpha Z m}{(\mathbf{p}_1 - \mathbf{q})^2 (p_1^2 - q^2)} \psi_F(q). \quad (27)$$

В амплитуде  $F_1^+$  большой импульс может быть передан ядру электроном как в начальном, так и в конечном состояниях. В первом случае  $q \gg \eta$ , а интеграл определяется областью  $|p_1 - q| \sim \eta \ll p_1, q$ . Во втором случае основной вклад дает область  $q \sim \eta$ , т.е. электрон взаимодействует с фотоном на расстояниях порядка размера атомной оболочки, а затем подходит к ядру на малые расстояния порядка  $p_1^{-1}$ , передавая большой импульс ( $Q \gg \eta$ ). Непосредственное вычисление интеграла в правой части формулы (27) с использованием (24) показывает, что амплитуда  $F_1^+$  действительно содержит фактор  $\xi_Z$ , который отсутствует в случае  $F_0^+$ . Таким же способом показывается, что взаимодействие вылетающего электрона с электронной оболочкой убывает, по крайней мере, как  $p_1^{-1}$ , при этом большой импульс  $Q$  передается ядру в основном электроном в начальном состоянии. Таким образом, асимптотика амплитуды действительно описывается вкладом  $F_0^+$  (23), в котором  $\psi_F(p_1)$  определяется формулой (24).

Большой численный коэффициент в ведущей поправке порядка  $p_1^{-1}$  возникает, в частности, от нормировочного множителя волновой функции  $\psi_{p_1}(r) = \psi_{p_1}^{(0)}(r) + \psi_{p_1}^{(1)}(r)$ . Вычисляя

$$\psi_{p_1}(0) = \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} [\psi_{Fp_1}^{(0)}(q) + \psi_{Fp_1}^{(1)}(q)],$$

получим

$$\psi_{p_1}(0) = 1 + \xi_Z J, \quad (28)$$

где

$$J = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty \frac{dx}{x} \ln \frac{1+x}{|1-x|} = \frac{\pi}{2}. \quad (29)$$

Следовательно,  $\psi_{p_1}^{(0)}(0) = 1 + \pi\xi_Z/2$ . Множитель  $\pi$  можно рассматривать как результат интегрирования (29) в комплексной плоскости со скачком  $-i\ln(-1) = \pi$ . Нормировочный множитель не является единственным источником вкладов порядка  $\pi\xi_Z$ . В случае фотоионизации все вклады, зависящие от  $\pi\xi_Z$ , факторизуются [7, 8]. В некоторых процессах все такие вклады сокращаются и зависимость от  $\pi\xi_Z$  исчезает [24].

Таким образом, нерелятивистская асимптотика фотoeffекта может быть записана как

$$\sigma^+(\omega) = C_1(\pi\xi_Z) \omega^{-7/2}. \quad (30)$$

При этом истинная асимптотика, в которой можно положить  $C_1(\pi\xi_Z) = C_1(0)$ , достигается только для самых легких атомов. В других случаях релятивистские эффекты становятся существенными прежде, чем возможно разложение по степеням  $\pi\xi_Z$ .

### 3.2. Асимптотика двойной фотоионизации.

#### Кажущееся противоречие

Запишем общее выражение для амплитуды двойной фотоионизации как

$$F^{2+} = \langle \Psi_f | \gamma | \Psi_i \rangle, \quad (31)$$

где  $\Psi_i$  и  $\Psi_f$  — точные волновые функции начального и конечного состояний, а

$$\gamma = \gamma_1 + \gamma_2; \quad \gamma_j = -i \frac{(e \nabla_j)}{m} \quad (32)$$

описывает взаимодействие фотона с двухэлектронной системой. Асимптотика амплитуды, как было показано в [20], определяется взаимодействием в начальном состоянии с передачей малой энергии вторичному электрону и импульса

$$\mathbf{Q} = \mathbf{k} - \mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2 \quad (33)$$

ядру.

Чтобы вычислить асимптотику сечения, достаточно описать конечное состояние произведением одноэлектронных функций, пренебрегая всеми взаимодействиями быстрого электрона, т.е.  $\psi_f(r_1, r_2) = \psi_{p_1}^{(0)}(r_1) \psi_{p_2}^C(r_2)$ , где плоская волна  $\psi_{p_1}^{(0)}$  определяется формулой (22), а  $\psi_{p_2}^C$  — волновая функция сплошного спектра в кулоновском поле ядра. Так как  $p_1 \gg p_2$ , можно положить  $\gamma = \gamma_1$ .

Анализ, аналогичный проделанному в разделе 3.1, дает

$$F^{2+} = (4\pi\alpha)^{1/2} \frac{(ep_1)}{m} \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \psi_{p_2}^{C*}(\mathbf{q}) \Psi_F(p_1, \mathbf{q}). \quad (34)$$

Интеграл насыщается малыми  $q \sim \eta \ll p_1$ . Преобразование, аналогичное формуле (24), дает  $\Psi_F(p_1, q) \sim p_1^{-4}$  при  $p_1 \gg \eta$ . Таким образом, при  $\varepsilon_2 \sim I$ ,  $p_2 \sim \eta$  зависимость амплитуды  $F_2^+$  от  $p_1$  такая же, как и амплитуды  $F_0^+$  (23). Энергетическое распределение резко спадает с ростом  $\varepsilon_2$ , и интеграл по  $\varepsilon_2$ , сходящийся на  $\varepsilon_2 \sim I$ , не зависит от энергии фотона. Следовательно, асимптотическая зависимость сечений  $\sigma^{2+}$  и  $\sigma^+$  одинакова. Отдельно можно показать, что и зависимость от параметра  $\pi\xi_Z$  однаакова. Однако сейчас для нас важно, что

$$\sigma^{2+}(\omega) = C_2 \omega^{-7/2}. \quad (35)$$

В работе [22] сечение двойной ионизации вычислялось с использованием вариационной волновой функции вида (8) для описания основного состояния, а асимптотика находилась как ведущий член разложения по степеням  $\xi_Z$ . При этом для операторов  $\gamma$  использовалась как "форма градиентов" (20), так и "форма длины"

$$\gamma = \gamma_1 + \gamma_2; \quad \gamma_j = \omega_{fi}(\mathbf{er}_j), \quad (36)$$

где  $\omega_{fi}$  — разница энергий конечного и начального состояний атомной системы, в нашем случае  $\omega_{fi} = \omega$ . Матричные элементы операторов (32) и (36) между точными решениями уравнения Шрёдингера одинаковы. Расхождения, возникающие при применении приближенных функций, неоднократно обсуждались в литературе. Но на этот раз результаты получились качественно разные. Вычисления с использованием формы (36) дали

$$\sigma^{2+}(\omega) = C_2^L \omega^{-5/2}. \quad (37)$$

Это можно объяснить следующим образом. При  $p_2 \ll p_1$  важна область расстояний  $r_1 \ll r_2$ , поэтому можно положить  $\gamma = \gamma_2$ . В отличие от случая однократной фотоионизации быстрый электрон не приобретает орбитального момента. Электрон, непосредственно взаимодействующий с фотоном, уносит лишь малую энергию  $\varepsilon_2 \sim I$ , а почти вся энергия  $\varepsilon_1 \sim \omega$  достается вторичному электрону. Такая картина выглядит физически нереальной. Тем не менее, описывая в формуле для амплитуды в "форме длины"

$$F^{2+} = (4\pi\alpha)^{1/2} \omega \int \frac{d^3q_1 d^3q_2}{(2\pi)^6} \times \\ \times \psi_{p_1}^{C*}(\mathbf{q}_1) \psi_{p_2}^{C*}(\mathbf{q}_2) (\mathbf{eq}_2) \Psi_F(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) \quad (38)$$

быстрый электрон плоской волной, получим, что ее зависимость от импульса быстрого электрона  $p_1 \sim (2m\omega)^{1/2}$  определяется множителем

$$\omega \Psi_F(p_1, \mathbf{q}_2) \sim \frac{\omega}{p_1^4}, \quad (39)$$

который содержит дополнительный по сравнению с правой частью формулы (23) фактор  $\omega^{1/2}$ . Это и приводит к поведению сечения, описываемому формулой (37). В работе [22] данный результат остается справедливым и при учете взаимодействия быстрого электрона с ядром.

Авторы [22] предположили, что противоречие возникло из-за использования приближенных функций основного состояния и вклад  $\omega^{-5/2}$  в сечение должен был бы равняться нулю при использовании точных функций. Эта догадка была доказана спустя несколько лет в работе Аберга [25].

### 3.3. Разрешение противоречия

Результаты работы [25] можно изложить следующим образом. Большой импульс  $Q \approx p_1 \gg \eta$  может быть передан ядру электроном как начального, так и конечного состояний. В отличие от "градиентной формы" при использовании "формы длины" оба случая дают параметрически одинаковые вклады. Таким образом, волновую функцию быстрого электрона можно записать как сумму плоской волны и первой кулоновской поправки, а амплитуду — как  $F_L^{2+} = F_{L0}^{2+} + F_{L1}^{2+}$ , т.е.

$$F_{Lk}^{2+} = (4\pi\alpha)^{1/2} \int \frac{d^3q_2}{(2\pi)^3} \psi_{Fp_2}^*(\mathbf{q}_2) (\mathbf{eq}_2) A_k(\mathbf{q}_2), \quad (40)$$

где

$$A_k(\mathbf{q}_2) = \omega \int \frac{d^3q_1}{(2\pi)^3} \psi_{Fp_1}^{(k)*}(\mathbf{q}_1) \Psi_F(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2), \quad k = 0, 1. \quad (41)$$

Для вклада плоских волн сразу получаем

$$A_0(q_2) = \omega \Psi_F(p_1, q_2) \quad (42)$$

с большим импульсом  $p_1 \gg \eta$ , передаваемым ядру электроном начального состояния. В то время как  $A_0$  определяется большими  $q_1 = p_1 \gg \eta$ , интеграл, соответствующий  $A_1$ , насыщается малыми импульсами  $q_1 \sim \eta$ . Это

видно из формулы (26), явно выражающей поправку к волновой функции. Импульсом  $q_1$  можно пренебречь всюду, кроме волновой функции  $\Psi_F(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2)$ . В результате имеем

$$\begin{aligned} A_1(\mathbf{q}_2) &= -\omega \frac{8\pi\eta}{p_1^4} \int \frac{d^3 q_1}{(2\pi)^3} \Psi_F(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) = \\ &= -\omega \frac{8\pi\eta}{p_1^4} \Psi_{PF}(0, q_2). \end{aligned} \quad (43)$$

Здесь введено частичное преобразование Фурье

$$\Psi_{PF}(\mathbf{r}, \mathbf{q}_2) = \int d^3 r_2 \Psi(\mathbf{r}, \mathbf{r}_2) \exp[-i(\mathbf{q}_2 \mathbf{r}_2)]. \quad (44)$$

Преобразование, аналогичное формуле (24), дает

$$A_0(\mathbf{q}_2) = -\frac{8\pi\omega}{p_1^4} \Psi'_{PF}(0, \mathbf{q}_2). \quad (45)$$

Таким образом, амплитуды  $F_{L0}^{2+}$  и  $F_{L1}^{2+}$  действительно одного порядка. Это не противоречит тому обстоятельству, что в любой точке  $r$  функция  $\psi^{(1)}(r)$  в  $\xi_Z$  раз меньше, чем  $\psi^{(0)}(r)$ . Дело в том, что амплитуды  $A_0(q_2)$  и  $A_1(q_2)$ , которые могут быть записаны как

$$A_k(\mathbf{q}_2) = \omega \int d^3 r_1 \psi_{p_1}^{(k)*}(\mathbf{r}_1) \Psi_{PF}(\mathbf{r}_1, \mathbf{q}_2), \quad (46)$$

образуются разными областями расстояний  $r_1$ . В то время как  $A_0$  определяется областью  $r_1 \sim p_1^{-1}$ , значительно большие  $r \sim \eta^{-1}$  дают основной вклад в  $A_1$ .

Каждый из вкладов  $A_{0,1}$ , рассмотренный по отдельности, дает вклад в сечение, убывающий как  $\omega^{-5/2}$ . Однако используя формулы (43) и (45), имеем  $A_0(q_2) + A_1(q_2) = 0$  при любом  $q_2$ , и, следовательно,

$$F_{L0}^{2+} + F_{L1}^{2+} = 0. \quad (47)$$

Таким образом, сокращение вкладов порядка  $\omega^{-5/2}$  произошло благодаря условию Като (11). В вычислениях, проведенных в [22], использовалась приближенная волновая функция, не удовлетворявшая условию (11). Это и привело к неверной асимптотике при вычислениях в "форме длины".

### 3.4. Уравнение Липпмана – Швингера

В этом разделе будет показано, что уравнение Липпмана – Швингера является удобным инструментом для асимптотического анализа. Общая форма этого уравнения для двухэлектронной системы в поле ядра

$$\Psi = \Psi^{(0)} + G^\epsilon V \Psi. \quad (48)$$

Здесь  $V$  обозначает взаимодействия в системе,  $\epsilon$  — значение собственной энергии соответствующего уравнения Шрёдингера,  $\Psi^{(0)}$  и  $G^\epsilon$  — решение уравнения Шрёдингера и функция Грина при  $V = 0$  (свободное движение). Техника диаграмм Фейнмана в нерелятивистском случае может рассматриваться как графическая иллюстрация уравнения Липпмана – Швингера.

Чтобы упростить обозначения, запишем это уравнение для одночастичной волновой функции  $\psi$  в некотором

эффективном поле  $U(r)$ :

$$\psi = \psi^{(0)} + G^\epsilon U \psi. \quad (49)$$

Теперь  $G^\epsilon$  — свободная одночастичная функция Грина. В импульсном представлении

$$\langle \mathbf{p} | G^\epsilon | \mathbf{f} \rangle = \frac{\delta(\mathbf{p} - \mathbf{f})}{\epsilon - p^2/2m + i\nu}, \quad \nu \rightarrow 0. \quad (50)$$

Для связанных электронов  $\psi^{(0)} = 0$ , и

$$\Psi_F(\mathbf{p}) = \frac{2m}{2m\epsilon - p^2} \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} \langle \mathbf{p} | U | \mathbf{q} \rangle \Psi_F(\mathbf{q}), \quad (51)$$

где  $\epsilon$  — одночастичная энергия связи. На асимптотике  $p^2 \gg 2m|\epsilon|$ . Интеграл в правой части формулы (51) сходится на импульсах  $q \sim \eta$ . Таким образом, уравнение (51) выражает волновую функцию связанного состояния при больших импульсах через ту же волновую функцию, что и при импульсах порядка импульса связи.

Для  $s$ -состояний можно положить  $\langle \mathbf{p} | U | \mathbf{q} \rangle = \langle \mathbf{p} | U | 0 \rangle$ . Так как большие  $p$  соответствуют малым расстояниям  $r$ , для асимптотики важны только взаимодействия с ядром. Поэтому

$$\langle p | U | 0 \rangle = -\frac{4\pi\alpha Z}{p^2}$$

и

$$\Psi_F(p) = \frac{8\pi\alpha Z \psi(0)}{p^4} + O(p^{-6}). \quad (52)$$

Используя условие Като (15), получим, что выражение (52) совпадает с (24). Таким же способом может быть найдена асимптотика волновой функции атома гелия:

$$\Psi_F(p, q_2) = \frac{8\pi\alpha Z \Psi_{PF}(0, q_2)}{p^4} + O(p^{-6}), \quad (53)$$

где функция  $\Psi_{PF}$  определена формулой (44).

Вычисление амплитуды двойной фотоионизации в "форме длины" с использованием (53) дает

$$A_0(\mathbf{q}_2) = \frac{8\pi\alpha\eta}{p_1^4} \Psi_{PF}(0, \mathbf{q}_2)$$

вместо формулы (45). Две записи эквивалентны в силу условия Като (11). Однако в подходе, основанном на уравнении Липпмана – Швингера, автоматически сокращаются вклады порядка  $\omega^{-5/2}$ , даже без учета соотношения Като.

## 4. Форма спектра двойной фотоионизации: $U$ или $W$ ?

### 4.1. Механизмы процесса

Прогресс техники эксперимента в конце 80-х годов сделал возможными измерения энергетического распределения электронов двойной фотоионизации гелия.

Измерения при низких энергиях фотонов проведены, вскоре ожидаются результаты для больших энергий.

Эволюция формы спектра была проанализирована еще раньше, в середине 70-х годов [26]. Максимальные значения распределения  $d\sigma^{2+}/d\varepsilon_2$  достигаются при  $\varepsilon_2 \sim I$ ,  $\varepsilon \sim \omega$  (предполагается, что  $\varepsilon_2 \leq \varepsilon_1$ ), т.е. на краях спектра. Этот механизм [20] обсуждался в разделе 3. При удалении от краев, т.е. при  $\varepsilon_{1,2} \sim \omega$ , основным механизмом становится фотоионизация с последующим рассеянием выбитого электрона на оставшемся связанном [27, 28]. Этот механизм рассеяния в конечном состоянии (РКС) доминирует при всех  $\omega \gg I$ , но только до некоторого расстояния от центра спектра. При близких значениях энергий  $|\varepsilon_1 - \varepsilon_2| \ll \omega$  РКС конкурирует с квазисвободным механизмом (КСМ), в котором электроны покидают ядро, передав ему лишь малый импульс  $Q \sim \eta$ . При достаточно больших энергиях фотонов  $\omega$  вблизи центра преобладает КСМ.

Чтобы пояснить природу КСМ, напомним, что каждый акт обмена большим импульсом приводит к подавлению амплитуды. В РКС-механизме большой импульс передается дважды: при однократной ионизации — между связанным электроном и ядром и между электронами — при  $e-e$ -рассеянии. Однако возможен и один такой обмен. Электрон, непосредственно взаимодействующий с фотоном, может передать большой импульс второму электрону и без участия ядра. В отличие от однократной фотоионизации, процесс может идти и на свободных электронах. Поверхность Бете определяется условием  $Q = 0$ , т.е.

$$\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 = \mathbf{k}, \quad (54)$$

что требует

$$\delta = \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}{\omega} \leq \sqrt{\frac{\omega}{\omega + m}} \ll 1. \quad (55)$$

В этом обзоре не рассматривается случай очень больших энергий  $\omega \sim m$  (напомним, что  $m \approx 511$  кэВ), требующий релятивистского описания электронов. Такая задача решалась в [29]. Поэтому в формуле (55) полагаем  $\omega \ll m$ , и  $\delta \ll 1$ .

Следуя анализу, проведенному в разделе 1, находим, что в КСМ существенны малые  $Q \sim \eta$ . Пренебрегая импульсом  $Q \ll p_i$  в волновых функциях электронов конечного состояния, можно выразить амплитуду КСМ  $F_{QF}$  (quasifree) через амплитуду процесса на свободных электронах  $F_{fr}$  (free):

$$F_{QF}(\mathbf{p}, \mathbf{Q}) = D(Q^2) F_{fr}(\omega, \delta), \quad (56)$$

где  $p = (p_1 - p_2)/2 \approx p_1 \approx -p_2$ . Фактор  $D(Q^2)$  содержит параметры начального состояния. Его явный вид приведен ниже, в формуле (70), а сейчас сосредоточимся на втором множителе в правой части формулы (56), т.е. на амплитуде свободного процесса. Амплитуда поглощения фотона системой из двух свободных электронов может быть записана как

$$F_{fr}(\omega, \delta) = (\mathbf{e}\mathbf{p}_1)f(\omega, \delta) + (\mathbf{e}\mathbf{p}_2)f(\omega, -\delta). \quad (57)$$

Явный вид функции  $f(\omega, \delta)$  пока не важен. Заметим сразу, что для описания процесса нельзя ограничиться низшим приближением по степеням  $k/p_i$ . Действитель-

но, в этом случае  $p_1 = -p_2$  и электроны не могут унести единичный момент количества движения, передаваемый фотоном. Из формулы (57) это получается, если ограничиться низшим членом разложения по степеням  $\delta$ :

$$F_{fr}(\omega, 0) = (\mathbf{e}, \mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2)f(\omega, 0) = (\mathbf{e}\mathbf{k})f(\omega, 0) = 0, \quad (58)$$

и ведущий неисчезающий вклад

$$F_{fr}(\omega, \delta) = 2(\mathbf{e}\mathbf{p})\delta f'(\omega, 0). \quad (59)$$

Здесь  $f'$  — производная по  $\delta$ . Для свободного процесса

$$\delta = \frac{(\mathbf{p}\mathbf{k})}{m\omega}. \quad (60)$$

Таким образом, КСМ требует выхода за рамки дипольного приближения, которое соответствовало бы нулевому члену разложения по степеням  $k/p_i$ . К сожалению, это обстоятельство не было подчеркнуто ни в [26], ни в более подробной статье [28].

Итак, вблизи центра спектра вклад в энергетическое распределение дают рассеяние в конечном состоянии с минимумом в самом центре и квазисвободный механизм, имеющий пик в центре (вклад "встряски" заведомо меньше). Относительная роль КСМ растет с энергией, и при  $\omega > 1,2$  кэВ [30] пик в центре становится заметным, U-форма спектра сменяется W-формой. Напомним, что соответствующий расчет требует выхода за рамки дипольного приближения.

#### 4.2. Вычисления в дипольном приближении

Между тем, был опубликован ряд результатов вычисления спектров двойной фотоионизации при больших энергиях. Они основаны на непосредственном вычислении амплитуд. Согласно приведенному выше анализу эти спектры должны были бы иметь минимумы в центре. Однако в [31] U-форма получалась только в пренебрежении взаимодействием в конечном состоянии (ВКС) вылетающих электронов. Учет ВКС приводил к W-форме. Авторы [32] получили противоположный результат. При  $\omega = 2,8$  кэВ низкий пик без учета ВКС сменился U-формой при его учете. В серии статей [33, 34] вычисления без учета ВКС давали максимум в центре.

#### 4.3. Объяснение результатов, полученных в дипольном приближении

Объяснение этих результатов дано Суричем и др. [35] (см. также [36]). Введя переменные  $\mathbf{R} = (\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)/2$  и  $\mathbf{p} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$  и обозначив  $\tilde{\Psi}(\mathbf{R}, \mathbf{p}) = \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ , выпишем амплитуду в пренебрежении всеми взаимодействиями в конечном состоянии:

$$F^{(0)} = (4\pi\alpha)^{1/2} \int d^3 R d^3 p \exp[i(\mathbf{Q}\mathbf{R}) - i(\mathbf{p} - \mathbf{k}, \mathbf{p})] \times \\ \times \gamma \tilde{\Psi}(\mathbf{R}, \mathbf{p}). \quad (61)$$

Согласно анализу, проведенному в разделе 3, асимптотика  $F^{(0)}(p_i, Q) \sim 1/p^4 Q^4$  при  $p, Q \gg \eta$ . Однако в КСМ понадобится асимптотика при  $p \gg \eta$ ,  $Q \sim \eta$ , так как эти значения  $Q$  определяют энергетическое распределение вблизи центра. Вычисления, аналогичные представленным в формуле (24), дают в дипольном приближении

$$F^{(0)} = -(4\pi\alpha)^{1/2} \frac{(eQ)}{m} \frac{8\pi\alpha}{p^4} \times \\ \times \int d^3 R \exp [i(QR)] r_0 \frac{\partial \tilde{\Psi}(R, \rho = 0)}{\partial \rho}. \quad (62)$$

При  $p \gg \eta$ ,  $Q \sim \eta$  производная от  $\tilde{\Psi}$  берется в точке  $\rho = 0$ . Энергетическая зависимость определяется множителем  $p^{-4}$ , при этом вблизи центра спектра  $p \approx (m\omega)^{1/2}$ .

Электроны могут обменяться большим импульсом и в конечном состоянии. Для учета этого механизма нужно построить волновую функцию конечного состояния, учитывающую межэлектронное взаимодействие. Это можно сделать с помощью формулы (25), где  $V^C$  должно быть заменено на взаимодействие электронов. Непосредственное вычисление дает

$$F^{(1)} = (4\pi\alpha)^{1/2} \frac{(eQ)}{m} \frac{4\pi\alpha}{p^4} \int d^3 R \exp [i(QR)] \tilde{\Psi}(R, \rho = 0) \quad (63)$$

при  $p \gg \eta$ ,  $Q \sim \eta$ . Каждая из амплитуд  $F^{(0,1)}$ , взятая по отдельности, значительно превосходит амплитуду РКС, которая требует больших импульсов  $Q \gg \eta$ . Таким образом, каждый из вкладов (62) и (63) привел бы к появлению пика в центре. Однако сумма

$$F^{(0)} + F^{(1)} = (4\pi\alpha)^{1/2} \frac{(eQ)}{m} \frac{4\pi\alpha}{p^4} \int d^3 R \exp [i(QR)] \times \\ \times \left( \tilde{\Psi}(R, \rho = 0) - 2r_0 \frac{\partial \tilde{\Psi}(R, \rho = 0)}{\partial \rho} \right) = 0, \quad (64)$$

так как выражение в скобках обращается в нуль в силу условия Като (12). Таким образом, в дипольном приближении вклад малых  $Q \sim \eta$  подавлен и при всех  $\varepsilon_{1,2} \sim \omega$  спектр определяется областью  $Q \gg \eta$ , где, в свою очередь, доминирует РКС. Спектр должен был бы иметь минимум в центре.

Теперь можно понять результаты [31–34]. Авторы [31] использовали волновую функцию начального состояния, слабо зависящую от  $\rho$ . Поэтому амплитуда (62) оказалась слишком мала, чтобы привести к пiku в центре. Включение ВКС дало ложный нескомпенсированный максимум. Напротив, авторы [32] использовали приближенную волновую функцию, удовлетворяющую условию (12). Поэтому они получили пик в отсутствие ВКС, который скомпенсировался после того, как ВКС было учтено. Ложный пик в центре, полученный в [33, 34], при пренебрежении ВКС имеет то же происхождение. Основной же недостаток расчетов [31–34] состоит в том, что в них авторы не вышли за рамки дипольного приближения, что является переупрощенным подходом в данном случае.

Гораздо проще этот результат может быть получен, если использовать уравнение Липпмана–Швингера (48). Амплитуда  $F^{(0)}$  выражается через асимптотику фурьеобраза волновой функции

$$F^{(0)} = -(4\pi\alpha)^{1/2} \frac{(eQ)}{m} \tilde{\Psi}_F(-Q, p), \quad (65)$$

которая, в свою очередь, удовлетворяет уравнению Липпмана–Швингера

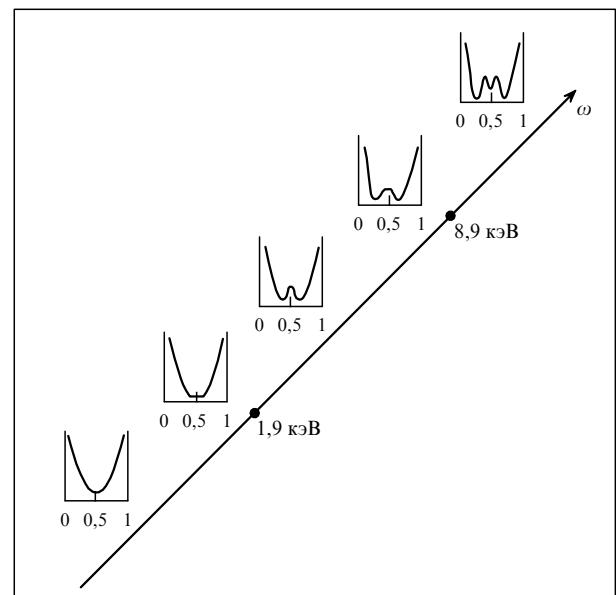
$$\tilde{\Psi}_F(-Q, p) = -\frac{4\pi m\alpha}{p^4} \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} \tilde{\Psi}_F(-Q, q) \quad (66)$$

при  $Q \sim \eta$ ,  $p \gg \eta$ . Интеграл в правой части (66) сходится на  $q \sim \eta$ . Таким образом, уравнение Липпмана–Швингера выражает функцию  $\tilde{\Psi}_F(Q \sim \eta, p \gg \eta)$  через функцию  $\tilde{\Psi}_F(Q \sim \eta, q \sim \eta)$ . Используя формулы (63) и (65), сразу получаем  $F^{(0)} + F^{(1)} = 0$  в соответствии с (64).

Заметим, что в нашем случае взаимодействие электронов между собой оказалось важнее их взаимодействий с ядром. Последние дают лишь уточняющие поправки, в то время как межэлектронные взаимодействия определяют механизм процесса. Разумеется, все эти результаты можно получить и стараясь с описания электронов континуума кулоновскими функциями, что было сделано в [35].

#### 4.4. Эволюция формы спектра

Эволюция формы спектра двойной фотоионизации атома гелия с изменением энергии фотона  $\omega$  впервые описана в [26, 28]. Не касаясь возможных изменений формы при малых  $\omega \sim I$ , отметим, что при энергиях порядка сотен эlectronвольт спектральная кривая имеет **U**-форму и процесс при больших  $\varepsilon_{1,2} \gg I$  определяется рассеянием в конечном состоянии [27]. При увеличении энергии фотона вблизи центра спектра с рассеянием в конечном состоянии конкурирует квазисвободный механизм, роль которого с энергией  $\omega$  увеличивается. При некоторой  $\omega = \omega_1$  это приводит к появлению пика в центре, и спектральная кривая приобретает **W**-форму. При еще большей энергии  $\omega = \omega_2$  центральный пик расщепляется на два, симметрично смещенных от центра, в то время как в центре возникает локальный минимум. Последнее изменение формы свя-



Эволюция формы спектра двойной фотоионизации гелия с изменением энергии фотона  $\omega$ . Нижний рисунок соответствует энергиям  $\omega < \omega_1$ , где выбивание двух быстрых электронов происходит из-за рассеяния в конечном состоянии. На следующем рисунке, соответствующем энергии  $\omega = \omega_1 = 1.9$  кэВ, вблизи центра становится заметным квазисвободный механизм. При  $\omega_1 < \omega < \omega_2$  (третий рисунок) в центре спектра возникает пик, обязанный своим появлением квазисвободному механизму. При  $\omega = \omega_2 = 8.9$  кэВ и  $\omega > \omega_2$  (следующие два рисунка) пик приобретает внутреннюю структуру, благодаря квадупольному характеру квазисвободного механизма.

зано с квадрупольным характером квазисвободного механизма. Сказанное иллюстрируется рисунком.

Характерные энергии  $\omega_{1,2}$  зависят от приближенных функций, используемых для описания начального состояния. В работе [30] атом гелия описывался приближенными функциями, основанными на подходе [19], упомянутом в конце раздела 2. Это дало  $\omega_1 = 1,9$  кэВ,  $\omega_2 = 8,9$  кэВ. Зависимость энергий  $\omega_{1,2}$  от заряда ядра  $Z$  для двухэлектронных ионов исследована в [28, 37].

#### 4.5. Свойства приближенных функций, необходимые для описания двойной фотоионизации

Большинство вычислений спектра двойной фотоионизации основано на общем формализме квантовой механики. Это означает использование формулы

$$d\sigma^{2+} = \frac{\pi}{\omega} |\bar{F}|^2 \delta(\varepsilon_1 + \varepsilon_2 - \omega - I^{2+}) \frac{d^3 p_1}{(2\pi)^3} \frac{d^3 p_2}{(2\pi)^3} \quad (67)$$

с амплитудой

$$F = \int d^3 r_1 d^3 r_2 \psi_{fa}^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \times \\ \times (\gamma_1 \exp[i(\mathbf{k}\mathbf{r}_1)] + \gamma_2 \exp[i(\mathbf{k}\mathbf{r}_2)]) \psi_a(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \quad (68)$$

и непосредственным вычислением интеграла. Неизбежно приходится использовать *приближенные* волновые функции  $\psi_{fa}$  и  $\psi_a$  для описания конечного и начального состояний. Чтобы воспроизвести основные физические механизмы процесса, приближенные волновые функции должны иметь определенные свойства точных решений уравнения Шрёдингера.

Как показано в разделе 3, в районе  $\varepsilon_2 \sim I$ ,  $\varepsilon_1 \sim \omega$  взаимодействие электронов в конечном состоянии существенной роли не играет, и конечное состояние можно аппроксимировать произведением одночастичных функций  $\psi_{fa}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi_{ap_1}(r_1)\psi_{ap_2}(r_2)$ . При этом медленный электрон нужно описывать кулоновской функцией ядра, в то время как в градиентной форме для оператора  $\gamma$  быстрый электрон можно описывать плоской волной [20]. Но описание начального состояния произведением одночастичных функций

$$\psi_a(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi_s(r_1)\psi_s(r_2) \quad (69)$$

приведет к количественно неправильным результатам [22]. Однако нет возможности выписать формулу, позволявшую бы в этом случае выбрать "хорошую" волновую функцию. При использовании оператора  $\gamma$  в форме длины следует быть более внимательным. Плоская волна для быстрого электрона уже не годится, следует учесть первую кулоновскую поправку. Кроме того, функция начального состояния должна удовлетворять условию Като (11).

В области  $\varepsilon_{1,2} \gg I$ , взаимодействие между электронами конечного состояния обязательно должно быть учтено в функции  $\psi_{fa}$ , так как именно данное взаимодействие является основным механизмом процесса в большой части этой области. Вдали от центра при этом специальных требований к функции начального состояния нет. Однако при описании центральной области спектра нужна функция начального состояния  $\psi_a$ , удовлетворяющая условию Като (12). В противном случае спектр приобретет ложный пик в дипольном приближе-

нии, последнему соответствует замена экспоненциальных множителей  $\exp[i(\mathbf{k}\mathbf{r}_j)]$  единицами в формуле (68).

Таким образом, истинный W-пик возникает при выходе за рамки дипольного приближения. Технически это означает учет вторых членов в разложениях  $\exp[i(\mathbf{k}\mathbf{r}_j)] = 1 + i(\mathbf{k}\mathbf{r}_j) + \dots$ . Такой подход приводит к формуле (56) для амплитуды квазисвободного механизма с амплитудами  $F_{fr}(\omega, \delta)$ , определенными формулой (59) и

$$D(Q^2) = 2r_0 \int d^3 R \exp[i(\mathbf{Q}\mathbf{R})] \frac{\partial \tilde{\psi}_a(R, \rho = 0)}{\partial \rho}. \quad (70)$$

Производная  $\partial \tilde{\psi}_a(R, \rho = 0)/\partial \rho$  определяется соотношением Като [17]. Поэтому, даже выделив квадрупольные вклады, нужно использовать функцию  $\psi_a$ , удовлетворяющую этому условию [12]. Разумеется, любая приближенная функция  $\psi_a$  с ненулевым значением  $\partial \tilde{\psi}_a(R, \rho = 0)/\partial \rho$  приведет к появлению центрального пика, однако количественные результаты вызывают доверие, только если удовлетворяется условие (12).

Отметим, что комбинации произведений одночастичных функций не воспроизводят вклад квазисвободного механизма. Для таких функций

$$\tilde{\psi}_a(\mathbf{R}, \mathbf{p}) = \tilde{\psi}_s\left(\mathbf{R} + \frac{\mathbf{p}}{2}\right) \tilde{\psi}_s\left(\mathbf{R} - \frac{\mathbf{p}}{2}\right) \quad (71)$$

является четной функцией  $\rho$ , поэтому  $D(q^2) = 0$ , и не остается никакого следа квазисвободного механизма. В частности, это относится к волновым функциям в приближении Хартри–Фока.

Заметим, что простейшие функции, описывающие электроны в точках слияния двух частиц и удовлетворяющие условиям Като  $\psi_a(0, r, r) = \exp[-(Z - 1/2)r]$  и  $\psi_a(r, r, 0) = \exp[-2Zr]$  [38], воспроизводят значения  $\omega_1$  и  $\omega_2$  с точностью до нескольких процентов. Кроме того, первая из этих функций дает хороший результат при вычислении асимптотики однократной фотоионизации атома гелия. Это объясняет давно сделанное наблюдение, что фотоионизация K-оболочки фотонами больших энергий хорошо описывается водородоподобными функциями с эффективным зарядом  $Z_{eff} = Z - a$ , где  $a \approx 0,5$  [39].

## 5. Заключение

Из изложенного видно, что теоретический анализ, предшествующий компьютерным вычислениям, оказывается очень полезен. В статической задаче определения энергии связи основного состояния атома гелия такой анализ ускоряет сходимость процедуры и позволяет значительно уменьшить количество феноменологических параметров. Теоретический анализ дает возможность избежать "подводных камней" при вычислении асимптотики сечения двойной фотоионизации, а также найти истинную форму спектра.

Уравнение Липпмана–Швингера оказывается очень эффективным для изучения асимптотики. Это уравнение, так же как его графическая иллюстрация — диаграммы Фейнмана, могло бы стать полезным инструментом в исследованиях по атомной физике высоких энергий.

Автор благодарит А.И. Михайлова, Р. Пратта, Т. Сурича и особенно В.Г. Горшкова за ценные об-

суждения. Работа была частично поддержанна грантом РФФИ НШ-5788.2006.2.

## Список литературы

1. Bethe H A, in *Quantenmechanik der Ein- und Zwei-Elektronenprobleme* (Handbuch der Physik, Vol. 24, Tl. 1) (Berlin: Springer, 1933)
2. Bethe H A, Jackiw R W *Intermediate Quantum Mechanics* (Reading, Mass.: W.A. Benjamin, 1968)
3. Inokuti M *Rev. Mod. Phys.* **43** 297 (1971)
4. Dalitz R H *Proc. R. Soc. London Ser. A* **206** 509 (1951)
5. Горшков В Г *ЖЭТФ* **40** 1481 (1960)
6. Ландау Л Д, Лифшиц Е М *Квантовая механика: Нерелятивистская теория* (М.: Наука, 1974)
7. Gorshkov V G, Mikhailov A I, Polikanov V S *Nucl. Phys.* **55** 273 (1964)
8. Avdonina N B, Drukarev E G, Pratt R H *Phys. Rev. A* **65** 052705 (2002)
9. Drukarev E G, Strikman M I *Phys. Lett. B* **186** 1 (1987)
10. Горшков В Г, в сб. *Материалы VII Зимней школы ЛИЯФ по физике ядра и элементарных частиц (17–28 февр. 1972 г.)* Т. 2 (Л.: ЛИЯФ, 1972) с. 415
11. Eikema K S E et al. *Phys. Rev. Lett.* **71** 1690 (1993)
12. Bartlett J H (Jr.), Gibbons J J (Jr.), Dunn C G *Phys. Rev.* **47** 679 (1935)
13. Фок В А *Изв. АН СССР, сер. физ.* **18** 161 (1954)
14. Веселов М Г, Лабзовский Л Н *Теория атома. Строение электронных оболочек* (М.: Наука, 1986)
15. Ермолов А М *Вестн. ЛГУ, сер. физ.* **14** 46 (1958); **16** 19 (1961); Ермолов А М, Сочилин Г Б *ДАН СССР* **155** 1050 (1964); Sochilin G B *Int. J. Quant. Chem.* **3** 297 (1969)
16. Myers C R et al. *Phys. Rev. A* **44** 5537 (1991)
17. Kato T *Commun. Pure Appl. Math.* **10** 151 (1957)
18. Teng Z, Shakeshaft R *Phys. Rev. A* **47** R3487 (1993)
19. Haftel M I, Mandelzweig V B *Ann. Phys. (New York)* **189** 29 (1989)
20. Kabir P K, Salpeter E E *Phys. Rev.* **108** 1256 (1957)
21. Фейнберг Е Л *ДАН СССР* **23** 779 (1939); Feinberg E L *J. Phys. USSR* **4** 423 (1941); Migdal A B *J. Phys. USSR* **4** 449 (1941)
22. Byron F W (Jr.), Joachain C *J. Phys. Rev.* **164** 1 (1967)
23. Бете Г, Солпитеэр Э *Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами* (М.: Физматгиз, 1960)
24. Drukarev E G et al. *Phys. Rev. A* **75** 032717 (2007)
25. Aberg T *Phys. Rev. A* **2** 1726 (1970)
26. Amusia M Ya et al. *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **8** 1248 (1975)
27. Drukarev E G et al. *Phys. Lett. A* **46** 467 (1974)
28. Drukarev E G *Phys. Rev. A* **52** 3910 (1995)
29. Drukarev E G, Karpeshin F F *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **9** 399 (1976)
30. Liverts E Z et al. *Phys. Rev. A* **71** 012715 (2005)
31. Kornberg M A, Miraglia J E *Phys. Rev. A* **48** 3714 (1993)
32. Teng Z, Shakeshaft R *Phys. Rev. A* **49** 3597 (1994)
33. Kornberg M A, Miraglia J E *Phys. Rev. A* **60** R1743 (1999)
34. Kornberg M A, Miraglia J E *Eur. Phys. J. D* **12** 45 (2000)
35. Surić T, Drukarev E G, Pratt R H *Phys. Rev. A* **67** 022709 (2003)
36. Drukarev E G, Avdonina N B, Pratt R H *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **34** 1 (2001)
37. Amusia M Ya, Drukarev E G, Mandelzweig V B *Phys. Scripta* **72** C22 (2005)
38. Drukarev E G et al. *ЖЭТФ* **130** 796 (2006)
39. Altick P L *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **5** 1059 (1972)

## Atomic physics: computer calculations and theoretical analysis

### E.G. Drukarev

B.P. Konstantinov Petersburg Nuclear Physics Institute, Russian Academy of Sciences,  
Orlova Roshcha, 188300 Gatchina, Leningrad Region, Russian Federation  
Tel. (7-813) 714-60 96  
E-mail: drukarev@thd.pnpi.spb.ru

It is demonstrated how a theoretical analysis preceding numerical calculations helps to determine the ground state energy of the helium atom and enables one to avoid qualitative errors when calculating the characteristics of double photoionization.

PACS numbers: 31.15.-p, 31.50.Bc, 32.80.Fb

Bibliography — 39 references

Received 16 March 2007

*Uspekhi Fizicheskikh Nauk* **177** (8) 877–887 (2007)

*Physics—Uspekhi* **50** (8) (2007)