

АТОМНАЯ И ЯДЕРНАЯ ФИЗИКА

УДК 539.17.015

О МЕХАНИЗМАХ ДВОЙНОЙ ИОНИЗАЦИИ АТОМОВ БЫСТРЫМИ ЭЛЕКТРОНАМИ

Ю. В. Попов, И. В. Фарнакеев

(НИИЯФ)

Рассматриваются два кинематических случая двойной ионизации атома быстрым электроном ($E_0 \sim 5-10$ кэВ), позволяющие при теоретических расчетах редуцировать задачу к трехчастичной. Показано, что в случае малых переданных импульсов Q и переданных энергий $\Delta E \ll E_0$ форма и величина основного пика зависят от моделей как начальной, так и конечной волновой функции эжектированных электронов в поле ядра. Данное обстоятельство может привести к неоднозначной информации о структуре мишени, которая может быть получена из $(e, 3e)$ -экспериментов. Для этих целей предложена другая кинематика.

1. Теоретическое исследование двойной ионизации атома быстрым электроном (так называемой $(e, 3e)$ -процесс) было начато еще в середине 1960-х гг., хотя первые $(e, 3e)$ -эксперименты были проведены лишь в 1989 г. [1]. Рассматривались два основных механизма, приводящих к эжекции двух атомных электронов в результате столкновения атома с быстрым электроном. Первый механизм, названный механизмом «встряски» («shake-off mechanism»), был изучен в работах Джоашена (см., напр., [2]) и Твида [3]. Этот механизм предполагает обмен одним виртуальным фотоном между налетающим электроном и атомом-мишенью, в результате чего происходит выбивание атомного электрона. Второй электрон при этом переходит в континуум за счет мгновенного изменения электрического поля.

Второй механизм, названный двухступенчатым («two-step mechanism») и рассматривавшийся впервые в работе Карлсона и Краузе [4], предполагает эжекцию атомных электронов в результате их взаимодействия в конечном состоянии либо между собой, либо с рассеянным электроном.

В известной работе Смирнова, Неудачина и др. [5] было предложено изучать двухэлектронные корреляции в атоме, исследуя дифференциальное сечение $(e, 3e)$ -реакции. Было показано, что в случае достаточно больших энергий эжекции возникающая в дифференциальном сечении структура вокруг оси переданного импульса Q несет в себе информацию о корреляции электронов в покоящемся атоме. При этом, однако, эжектированные электроны рассматривались как свободные в конце реакции, т. е. описывались ортогонализированными к основному состоянию плоскими волнами.

Возникает вопрос: не появляются ли соответствующие структуры пиков там же или в другом месте, если учесть электронные корреляции в конечном состоянии? Этот вопрос тем более уместен, что проведенные недавно расчеты сечений реакции $\text{He}(e, 3e)\text{He}^{++}$ с модельной волновой функцией конечного состояния [6] указывают именно на это обстоятельство. Пики, возникающие от корреляторов как в начальном, так и в конечном состоянии, интерферируют друг с другом, чем и определяется окончательная структура дифференциального сечения в различных угловых областях. В свою очередь эта структура оказывается дважды модельно-зависимой (от моделей начальной и конечной

волновой функции), что в значительной степени может снизить ценность извлекаемой информации из $(e, 3e)$ -экспериментов.

Настоящая заметка посвящена изучению возможности раздельного исследования корреляторов в начальной и конечной волновых функциях мишени (для простоты мы рассматриваем атом He) на базе $(e, 3e)$ -экспериментов, а также выявлению соответствующей геометрии таких экспериментов, где эти корреляторы дают наиболее мощные пики в дифференциальном сечении.

2. Напомним кратко основные определения. Законы сохранения энергии и импульса имеют следующий вид:

$$E_0 + \varepsilon_0^{\text{He}} = E_a + E_b + E_c, \quad (1)$$

$$\mathbf{p}_0 = \mathbf{p}_a + \mathbf{p}_b + \mathbf{p}_c + \mathbf{q}. \quad (2)$$

Здесь (E_0, \mathbf{p}_0) , (E_a, \mathbf{p}_a) , (E_b, \mathbf{p}_b) и (E_c, \mathbf{p}_c) — соответственно энергии и импульсы падающего, рассеянного и двух эжектированных электронов, $\varepsilon_0^{\text{He}} = -79$ эВ — энергия связанного состояния атома гелия. Конечно, весьма условно можно говорить о рассеянном и эжектированных электронах, так как это тождественные частицы, да и сама задача, строго говоря, четырехчастичная. Однако в одном кинематическом случае, когда падающий и рассеянный электроны быстрые, а именно такая кинематика использовалась в экспериментах [1], задача может быть сведена к трехчастичной. Удобно ввести две величины: переданный импульс $\mathbf{Q} = \mathbf{p}_0 - \mathbf{p}_a$ и переданную энергию $\Delta E = E_0 - E_a$.

В двух случаях задачу можно свести к трехчастичной. Если $\Delta E \ll \ll E_0, E_a$, то можно ограничиться диаграммой рассеяния (рис. 1; крестики на волнистых линиях электронов обозначают, что электроны находятся в поле ядра, т. е. описываются искаженными волнами), где падающий электрон обменивается лишь одним виртуальным фотоном с мишенью. Такое приближение называется первым борновским (FBA).

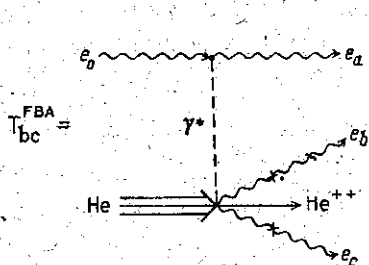


Рис. 1

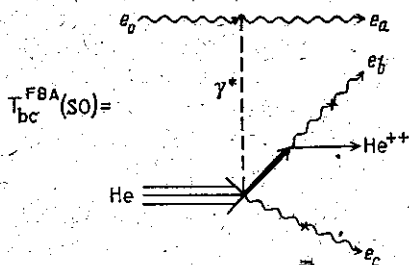


Рис. 2

Матричный элемент T_{bc}^{FBA} в аналитическом виде записывается как

$$T_{bc}^{\text{FBA}} = \frac{4\pi}{Q} M(\mathbf{p}_b, \mathbf{p}_c; \mathbf{Q}), \quad (3)$$

где

$$M(\mathbf{p}_b, \mathbf{p}_c; \mathbf{Q}) = \frac{1}{Q} \iint d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \Phi^{-*}(\mathbf{p}_b, \mathbf{p}_c, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \times \\ \times [\exp(i\mathbf{Q}\mathbf{r}_1) + \exp(i\mathbf{Q}\mathbf{r}_2) - 2] \Phi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2). \quad (4)$$

Функции $|\Phi^{-*}\rangle$ и $|\Phi_0\rangle$ являются решением одного и того же уравнения Шрёдингера (в атомных единицах)

$$\left[\frac{1}{2} \nabla_{r_1}^2 + \frac{1}{2} \nabla_{r_2}^2 + E + \frac{2}{r_1} + \frac{2}{r_2} - \frac{1}{|r_1 - r_2|} \right] \Phi = 0 \quad (5)$$

в случае $E = E_b + E_c$ (континуум) и $E = \epsilon_0^{\text{He}}$ (связанное состояние). Эти функции, очевидно, ортогональны, однако мы оставили двойку в формуле (4), имея в виду возможные нарушения этой ортогональности при замене точных решений уравнения (5) моделями, что по крайней мере сохранит свойство конечности матричного элемента M при $Q=0$.

Дифференциальное сечение может быть представлено в виде

$$d^6\sigma = \frac{p_a p_b p_c}{(2\pi)^6 p_0} \left| \frac{T_{bc}^{\text{FBA}}}{2\pi} \right|^2 dE_b dE_c d\Omega_a d\Omega_b d\Omega_c. \quad (6)$$

В рассматриваемой модели импульс Q , как правило, невелик и в принципе формально может быть приравнен нулю, что соответствует $(\gamma, 2e)$ -рассеянию. Поэтому такая кинематика позволяет с единых позиций рассматривать двукратную ионизацию как фотоном, так и электронным ударом.

3. Допустим, что мы «выключили» потенциал $|r_1 - r_2|^{-1}$ в уравнении (6) при вычислении функции Φ^- . Тогда

$$\Phi^- = \frac{1}{\sqrt{2}} [\Psi^-(p_b, r_1) \Psi^-(p_c, r_2) + \Psi^-(p_c, r_1) \Psi^-(p_b, r_2)], \quad (7)$$

где $\Psi^-(p, r)$ — водородоподобные функции свободного электрона в поле ядра с зарядом $Z=2$.

Если эжектированные электроны в свою очередь достаточно быстрые, то функцию $\Psi^-(p, r)$ можно представить в эйкональной форме $\Psi^-(p, r) = \exp(i\mathbf{p}\mathbf{r}) \zeta^-(\mathbf{p}\mathbf{r})$, где структурная функция ζ более гладким образом зависит от импульса, чем экспонента. Подставляя формулу (7) в (4), легко увидеть, что матричный элемент в этом случае будет иметь максимумы при $Q=p_b$ или $Q=p_c$, согласно общим правилам вычисления интегралов, содержащих быстросциллирующие функции, а форма максимумов будет так или иначе связана с формой функции Φ_0 . Собственно, это и утверждалось в работе [5].

Изложенная здесь математическая модель на физическом языке соответствует реализации механизма «встряски», когда переход в континуум происходит без их прямого взаимодействия в конце реакции, а лишь за счет изменения эффективного заряда поля в начальном состоянии. Чем больше разница в величинах импульсов переданного и эжектированных электронов, тем менее выражен пик вокруг оси Q , несущий информацию о структуре функции $\Phi_0(r_1, r_2)$. Механизм «встряски» изображен диаграммой (рис. 2).

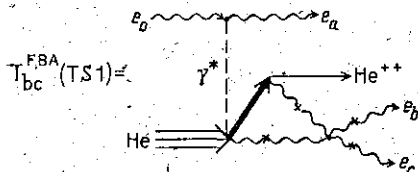


Рис. 3

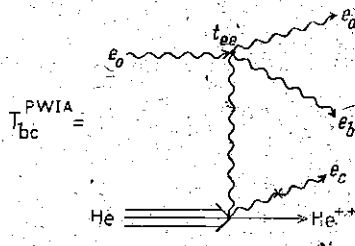


Рис. 4

В свою очередь двухступенчатый механизм $(e, 3e)$ -реакции может быть на диаграммном языке представлен в виде, приведенном на рис. 3.

Этот механизм допускает определенное перераспределение энергии и импульсов эжектированных электронов, образовавшихся в результате «встряски», вследствие их дальнейшего взаимодействия в конечном состоянии. При этом возникают кинематические случаи, когда при сравнительно больших импульсах p_b и p_c импульс отдачи $q = Q - p_b - p_c$ мал. Это легко увидеть из формулы (4), если перейти от координат (r_1, r_2) к координатам (R, ρ) , где $R = (1/2)(r_1 + r_2)$, $\rho = (r_1 - r_2)$.

Допустим, что энергии E_b и E_c равны и много больше ϵ_0^{He} . Тогда $E_b = E_c \cong \Delta E / 2 \ll E_0 \cong E_a^*$. В современных экспериментальных установках реализована следующая схема расположения детекторов: детекторы рассеянного и одного из эжектированных электронов фиксированы в одной плоскости под определенными углами, а детектор второго эжектированного электрона вращается в той же плоскости, так что сечение (6) есть функция угла (θ_c) .

При такой кинематике оценки, приведенные в работе [7], показывают, что при $Q \ll p_b, p_c$ функция $T_{bc}^{\text{FBA}}(SO)$ действительно имеет максимум вокруг оси Q (т. е. когда $p_c \parallel Q$), и его величина пропорциональна $(\Delta E)^{-9/2}$. В свою очередь функция $T_{bc}^{\text{FBA}}(TS1)$ имеет максимум вокруг оси $(Q - p_b)$, и его величина пропорциональна $(\Delta E)^{-2}$.

Таким образом, следует ожидать, что дифференциальное сечение $(d^5\sigma)$ в рассматриваемом приближении как функция угла θ_c при больших энергиях E_b и E_c имеет мощно выраженный пик вокруг оси $(Q - p_b)$, достигающий своего максимально возможного значения при $q = 0$. Здесь доминирует диаграмма, изображенная на рис. 3, поэтому в пике $d^5\sigma \cong (\Delta E)^{-3}$. На структуру этого пика влияют, однако, как форма начальной, так и форма конечной волновой функции, что делает его «дважды модельно-зависимым» и в значительной степени снижает ценность извлекаемой информации о корреляциях электронов.

4. При сравнительно больших E_b и E_c пики вокруг Q и $(Q - p_b)$ могут быть достаточно хорошо разрешимы по углу, но пик вокруг оси Q , несущий однозначную информацию о корреляциях в начальном состоянии Φ_0 , оказывается столь малым по абсолютной величине, что практически не может быть измерен современными методами. Выход возможно найти, если сделать переданный импульс Q большим. При этом, однако, следует отказаться от модели однофотонного обмена и кинематики, изображенной на рис. 1. Рассмотрим диаграмму (рис. 4), описывающую так называемое плосковолновое импульсное приближение. Допустим, что энергии E_a и E_b приблизительно равны и много больше E_c . Эта кинематика аналогична бинарной кинематике $(e, 2e)$ -процесса с той лишь разницей, что в конце не образуется иона-остатка He^+ в основном (возбужденном) состоянии, а образуется система $(\text{He}^{++} + e_c)$. Здесь опять же возможна ситуация, когда q близок к нулю, что дает максимально возможную величину пика в сечении. Само дифференциальное сечение при больших E_a и E_b запишется в виде

$$d^5\sigma = \frac{8fN}{(2\pi)^6} \frac{p_a p_b p_c}{p_0 Q^4} \left| \int d\mathbf{r} \exp(-i(\mathbf{p}_0 - \mathbf{p}_a - \mathbf{p}_b) \cdot \mathbf{r}) \chi(\mathbf{p}_c, \mathbf{r}) \right|^2. \quad (8)$$

В формуле (8)

$$\chi(\mathbf{p}_c, \mathbf{r}) = \int d\mathbf{r}' \psi^{-*}(\mathbf{p}_c, \mathbf{r}') \Phi_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}'), \quad (9)$$

$$f = \frac{2\pi x}{\exp(2\pi x) - 1}, \quad x = |\mathbf{p}_b - \mathbf{p}_c|^{-1},$$

$$N = [1 + y^4 - y^2 \cos(2x \ln y)], \quad y = |\mathbf{p}_0 - \mathbf{p}_a| / |\mathbf{p}_0 - \mathbf{p}_b|.$$

Очевидно, функция $\chi(p_c, \gamma)$ равна нулю, если «выключить» потенциал $|r_1 - r_2|^{-1}$ в уравнении (5) при расчете начальной функции Φ_0 . Величина сечения в пике, т. е. при $Q = p_b$, имеет порядок $d^5\sigma \approx (\Delta E)^{-3/2}$, что даже больше, чем в предыдущем кинематическом случае.

Поправки к формуле (8) следует искать на пути построения трехчастичной волновой функции конечного состояния в эйкональном приближении. Общая схема, изложенная в работе [8], заключается в оценке искажения траекторий электронов e_a и e_b за счет их взаимодействия между собой и с полем медленно распадающейся системы ($He^{++} + e_c$), которую здесь можно рассматривать как точечный источник кулоновского поля с зарядом $Z=1$. В этом случае для угловых поправок получаются простые аналитические выражения.

5. Из всего вышеизложенного следует, что при большой передаче энергии ΔE в дифференциальном сечении $(e, 3e)$ -реакции наиболее мощные пики возникают при условиях, когда импульс иона остатка q близок или равен нулю, аналогично случаю однократной ионизации. Пожалуй, впервые эта мысль была высказана в работе [5], когда авторы выдвигали идею иерархии импульсов. При этом реализуется классическое рассеяние (если в формулах (1) и (2) положить $q=0$ и пренебречь в выражении для ΔE энергией e_0^{He} , то иона-остатка как бы нет), и этот вывод очевиден.

Поскольку переданная энергия $\Delta E = E_b + E_c - e_0^{He}$, то возможны два кинематических случая: $E_b \approx E_c$ и $E_b \gg E_c$, соответствующие одной и той же передаче энергии. В первом случае пик при $q \approx 0$ несет в себе информацию о модели как начального, так и конечного состояния, т. е. форма «дважды модельно-зависима». Это означает, что даже при высоких энергиях компонент нельзя однозначно связывать величину и форму пика с особенностями модели волновой функции мишени.

С другой стороны, во втором случае можно из эксперимента извлекать однозначную информацию о корреляционной функции $\chi(p_c, \gamma)$ (9). Например, если функция $\Phi_0(\gamma, \gamma')$ не содержит угловых корреляций, то функция $(d^5\sigma)$ не зависит от угла θ_c при фиксированных углах θ_a и θ_b . При этом, однако, остается открытым вопрос, исчерпываются ли все поправки к диаграмме (рис. 4) учетом эйкональных поправок. Впрочем, этот же вопрос актуален и для $(e, 2e)$ -рассеяния, и сравнение в этом случае теории с большим массивом экспериментальных данных дает вполне утвердительный ответ.

Основной вывод, который следует из настоящей заметки, заключается в том, что для $(e, 3e)$ -процессов существует специфическая кинематика, аналогичная случаю симметричной кинематики в $(e, 2e)$ -рассеянии, которая позволяет получать богатую информацию об электронных корреляциях в атомах мишени, однако этот кинематический случай в силу больших значений переданного импульса Q не может быть распространен на реакции $(\gamma, 2e)$, где формально $Q=0$.

В заключение авторы выражают благодарность В. Г. Неудачину за полезные обсуждения и замечания. Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Lahmam-Bennani A., Dupre C., Duguet A. // Phys. Rev. Lett. 1989. 63. P. 1582.
- [2] Byron Jr. F. W., Joachain C. J. // Phys. Rev. 1967. A1. P. 164.
- [3] Tweed R. J. // J. Phys. B. 1973. 6. P. 392.
- [4] Carison T. A., Krause M. O. // Phys. Rev. 1965. 140. P. 1057.
- [5] Smirnov Yu. F., Pavlichenkov A. V., Levin V. G., Neudatchin V. G. // J. Phys. B. 1978. 11. P. 3587.

- [6] Joulakian B., Dal Carrello C., Brauner M. // J. Phys. B. 1992. 25. P. 2863.
 [7] Попов Ю. В., Dal Carrello C., Joulakian B., Kuzmina N. M. // J. Phys. B. 1994. 27. P. 1599.
 [8] Попов Ю. В., Авалди Л., Камиллони Р., Стефани Дж. // ЖЭТФ. 1986. 90. С. 1191.

Поступила в редакцию
26.01.94

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3, ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ. 1995. Т. 36, № 1

РАДИОФИЗИКА

УДК 537.86

ОЦЕНОЧНО-КОРРЕЛЯЦИОННО-КОМПЕНСАЦИОННЫЙ АЛГОРИТМ ОБНАРУЖЕНИЯ СИГНАЛА В ЭКСПЕРИМЕНТАХ С ПРОБНЫМИ ТЕЛАМИ

А. В. Гусев

(ГАИШ)

Определена пороговая чувствительность в экспериментах с пробными телами при конечном интервале наблюдения, когда коррелированная помеха на выходе электромеханического преобразователя представляет собой нестационарный двумерный нормальный марковский процесс.

1. Необходимость обнаружения слабых воздействий на пробный механический осциллятор возникает во многих фундаментальных физических экспериментах [1—3]. Амплитуда порогового сигнала в подобных экспериментах определяется следующей формулой:

$$F_0 \approx 2K\sigma[(1+\Gamma)/(\omega_0\tau Q)]^{1/2},$$

где K , ω_0 и Q — жесткость, резонансная частота и добротность осциллятора; σ^2 — дисперсия тепловых шумов; τ — длительность внешнего воздействия; Γ — коэффициент шума [4] электромеханического преобразователя (ЭМП):

$$\Gamma = \frac{(S/N)_i}{(S/N)_o} - 1. \quad (1)$$

В (1) $(S/N)_i$ и $(S/N)_o$ — отношения сигнал/шум на входе и выходе ЭМП. При расчете коэффициента шума Γ широкополосного ЭМП с одиночным высокодобротным контуром на входе обычно ограничиваются простейшей ситуацией, когда интервал наблюдения неограничен, а результирующая помеха на выходе системы представляет собой стационарный процесс [2—4].

Цель данной работы — расчет коэффициента шума Γ_T широкополосного ЭМП с одиночным контуром на входе при конечном интервале наблюдения $0 \leq t \leq T$. Для решения поставленной задачи используется известный в теории [5, 6] оценочно-корреляционно-компенсационный алгоритм обнаружения детерминированного сигнала, принимаемого на фоне коррелированной и в общем случае нестационарной гауссовской помехи и нормального белого шума.

2. При обобщенном анализе чувствительности ЭМП целесообразно отнести такую систему к классу линейных четырехполосников с постоянными параметрами [7]; для ЭМП типа модулятор—демодулятор