

# SECCIONES EFICACES DIFERENCIALES EN DOBLE IONIZACIÓN POR EFECTO COMPTON

M. A. Kornberg

Instituto de Astronomía y Física del Espacio (IAFE)  
Casilla de Correo 67, Sucursal 28 - (1428) Buenos Aires - Argentina  
e-mail: mariano@iafe.uba.ar

En este trabajo presentamos secciones eficaces diferenciales en el ángulo del fotón dispersado para el proceso de doble ionización por efecto Compton. Empleamos en los cálculos dos formas alternativas del operador  $A^2$ , denominadas de longitud y velocidad. Estas dos formas dan resultados similares para el caso de alta energía transferida. Comparamos los resultados con los obtenidos empleando la aproximación impulsiva y la teoría de perturbaciones. Se presenta un cálculo exacto para el perfil Compton de doble ionización.

In this work we present cross sections differential in the angle of the scattered photon for the process of double ionization by Compton scattering. We employ in our calculations two alternative forms of the  $A^2$  operator, called the length and the velocity forms. These two forms give similar results for the case of high energy transferred. We compare these results with those obtained using the impulse approximation and the many-body perturbation theory. We present an exact calculation for the double ionization Compton profile.

## I. INTRODUCCIÓN

El estudio de la doble ionización del helio por scattering Compton ha sido objeto de diversos trabajos en los últimos años, y han habido desarrollos tanto en el terreno experimental<sup>(1-5)</sup> como teórico<sup>(6-10)</sup>. Un primer punto de partida para este estudio estuvo relacionado a cual proceso estaban considerando los experimentos de alta energía que median el cociente de doble a simple ionización por impacto de fotones<sup>(11)</sup>. En un rango de energías en donde el scattering Compton y fotoionización son significantes, este cociente está dado por  $R = (\sigma_c^{2+} + \sigma_f^{2+}) / (\sigma_c^+ + \sigma_f^+)$ , donde  $\sigma_c^{2+}$  y  $\sigma_c^+$  son las secciones eficaces de doble y simple ionización por efecto Compton, y  $\sigma_f^{2+}$  y  $\sigma_f^+$  son las correspondientes a fotoionización. La técnica experimental denominada *recoil ion momentum spectroscopy* (RIMS) ha sido empleada para separar las contribuciones procedentes de fotoionización y de efecto Compton<sup>(1)</sup>. El scattering Compton domina por sobre fotoionización para energías mayores que 6 keV. Para energías más bajas, donde fotoionización es aún la contribución dominante al cociente  $R$ , el efecto del scattering Compton ha sido estudiado usando *time of flight spectroscopy* (TOFS)<sup>(5)</sup>.

La importancia de los efectos de correlación en la ionización de dos electrones por impacto de fotones es medida en forma adecuada por el cociente  $R$ . Mientras que el límite asintótico para fotoabsorción se acepta actualmente en<sup>(12)</sup>  $R_f = 1.67\%$ , existe aún cierta controversia sobre el correspondiente valor para scattering Compton. Empleando la aproximación impulsiva (IA) y funciones de onda altamente correlacionadas se obtiene un cociente cercano a<sup>(6-7)</sup> 0.8%. Recientemente, una medición empleando RIMS a la energía de fotón de 58 keV encontró<sup>(2)</sup>  $R_c = 0.84\%$ ; mientras que otro experimento empleando TOFS a 57 keV dio<sup>(4)</sup> 1.25% para este cociente.

En este trabajo presentamos distribuciones angulares del fotón dispersado empleando dos formas alternativas del operador  $A^2$ , y las comparamos con cálculos previos. Mostramos que el pico Compton de doble ionización se encuentra a la misma energía que en el caso de ionización simple. Mediciones del pico Compton de doble ionización aún no se han realizado, pero en este contexto la técnica experimental RIMS se adapta adecuadamente para su estudio. En el caso de fotoabsorción, ha sido empleada con éxito para la medición de distribuciones en energía y ángulo<sup>(13)</sup>.

## II. TEORÍA

La teoría del scattering inelástico de un fotón por un átomo es bien conocida, y ha sido extensamente estudiada para el caso de transiciones de un electrón<sup>(14)</sup>. En este trabajo estudiamos el scattering de un fotón por un átomo de helio cuando ambos electrones son emitidos. En la aproximación  $A^2$ , la sección eficaz diferencial en el ángulo y la energía del fotón dispersado está dada por

$$\frac{d^2\sigma_c^{2+}}{d\omega_2 d\Omega_2} = \left( \frac{d\sigma}{d\Omega_2} \right)_{Th} \left( \frac{\omega_2}{\omega_1} \right) \frac{1}{k} J^{2+}(\mathbf{k}, \omega), \quad (1)$$

donde

$$J^{2+}(\mathbf{k}, \omega) = k \iint d\mathbf{p}_a d\mathbf{p}_b |T_c|^2 \delta(\epsilon_a + \epsilon_b - \epsilon_0 - \omega) \quad (2)$$

es el perfil Compton de doble ionización. En las ecs. (1-2) se ha empleado la siguiente notación:  $(d\sigma/d\Omega_2)_{Th}$  es la sección eficaz de Thompson;  $\omega(\mathbf{k})$  es la energía (momento) transferida al átomo;  $\omega_1(\omega_2)$  es la energía de fotón incidente (dispersado);  $\mathbf{k}_1(\mathbf{k}_2)$  es el momento del fotón incidente (dispersado);  $\epsilon_a$  y  $\epsilon_b$  son las energías de los electrones; y  $\epsilon_0$  es la energía del estado fundamental del helio. El elemento de matriz  $T_c$  es el correspondiente a la aproximación  $A^2$ , y puede ser calculado en las formas de longitud ( $L$ ) y velocidad ( $V$ )<sup>(6)</sup>.

El cálculo del perfil de la ec. (2) requiere el uso de las funciones de onda de los estados ligado y del doble continuo del átomo. Dentro de la aproximación impulsiva, el empleo de la función del doble continuo se remueve haciendo uso de una regla de suma, y en este caso la fórmula está dada por<sup>(7)</sup>

$$J_{IA}^{2+}(\mathbf{k}, \omega) = k \int d\mathbf{p}_a \delta\left(\omega - \frac{k^2}{2} - \mathbf{k} \cdot \mathbf{p}_a\right) \times \left( \int d\mathbf{p}_b |\tilde{\psi}_i(\mathbf{p}_a, \mathbf{p}_b)|^2 - \sum_B \left| \int d\mathbf{p}_b \tilde{\phi}_B^*(\mathbf{p}_b) \tilde{\psi}_i(\mathbf{p}_a, \mathbf{p}_b) \right|^2 \right), \quad (3)$$

donde ahora se requiere el conocimiento de la función del estado ligado en el espacio de Fourier, y donde el cálculo involucra una suma sobre todos los estados ligados de un solo electrón del átomo He<sup>+</sup>.

## II. RESULTADOS

El cálculo del perfil Compton de doble ionización puede ser realizado tomando una función del estado inicial descrita por dos cargas  $\alpha_1=2.18317$  y  $\alpha_2=1.18853$ . En este caso el perfil Compton depende de la única variable  $p_z=(k/2)-(\omega/k)$ , y la fórmula es en este caso:

$$J_{IA}^{2+(s)}(p_z) = J_1(p_z) + J_2(p_z) + J_3(p_z), \quad (4)$$

donde

$$J_j(p_z) = C_j \frac{8}{3} \frac{\alpha_j^2}{(\alpha_j^2 + p_z^2)^3} \quad (j=1,2), \quad (5)$$

$$J_3(p_z) = C_3 \frac{32 \alpha_1 \alpha_2}{(\alpha_1^2 - \alpha_2^2)^3} \left( \ln \left( \frac{p_z^2 + \alpha_2^2}{p_z^2 + \alpha_1^2} \right) + \frac{\alpha_1^2 - \alpha_2^2}{2(p_z^2 + \alpha_1^2)} + \frac{\alpha_1^2 - \alpha_2^2}{2(p_z^2 + \alpha_2^2)} \right). \quad (6)$$

Los valores de los coeficientes que aparecen en esta fórmula son  $C_1=2.56 \cdot 10^{-2}$ ,  $C_2=4.27 \cdot 10^{-4}$  y  $C_3=-3.21 \cdot 10^{-3}$ . Notamos que el máximo del perfil está en este caso en  $p_z=0$ , al igual que en el caso de ionización simple. En la Figura 1 mostramos un gráfico del perfil junto con sus contribuciones, las cuales tienen una simple interpretación física. Podemos escribir  $J_1=(C_1\pi/\alpha_1^3)J_{\alpha_1}^+$ , donde  $J_{\alpha_1}^+$  es el perfil Compton de simple ionización y  $(C_1\pi/\alpha_1^3)$  es la probabilidad que el segundo electrón sea ionizado por un proceso de shake-off. La misma interpretación se aplica a la contribución  $J_2$ . El término  $J_3$  es negativo, y por lo tanto sustrae la contribución proveniente de la emisión simultánea de ambos electrones ya que este es un proceso prohibido. El valor pico del perfil de la ec. (4) es 0.0013 a. u., mientras que para el caso de la simple ionización del He una estimación simple da 0.42 a. u.. El valor pico del perfil de doble ionización es, por lo tanto, dos órdenes de magnitud mayor que en el caso de ionización simple, en concordancia con la magnitud relativa de estos dos procesos según lo indica el cociente  $R_c$ .

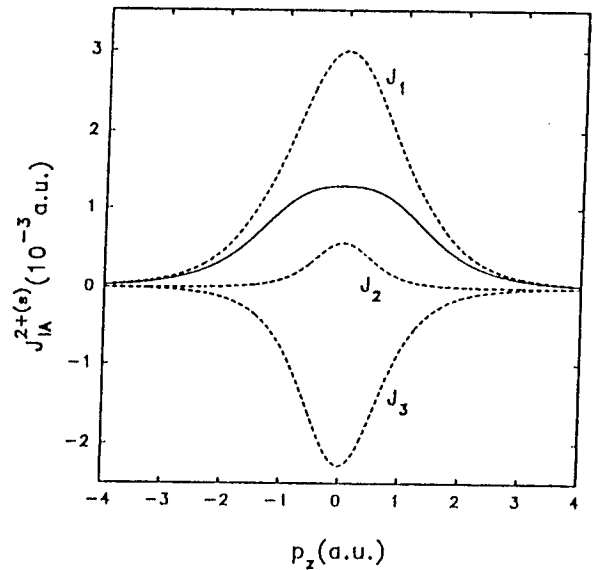


Figura 1. El perfil Compton de doble ionización (ec. (4)), y sus tres contribuciones, como función de  $p_z$ .

En la Figura 2 mostramos las distribuciones angulares del fotón final a la energía de 12 keV. Los cálculos han sido realizados empleando la función de onda inicial de dos parámetros arriba mencionada. Los resultados IA se obtuvieron integrando la sección eficaz (ec. (1)) usando el perfil Compton de la ec.(4). Los cálculos en las formas de longitud (L) y velocidad (V) se realizaron usando una función del doble continuo sin correlación. Incluimos también en la Figura 2 los resultados obtenidos a la misma energía haciendo uso de la teoría de perturbaciones de muchos cuerpos<sup>(9)</sup> (*many body perturbation theory, MBPT*). En primer

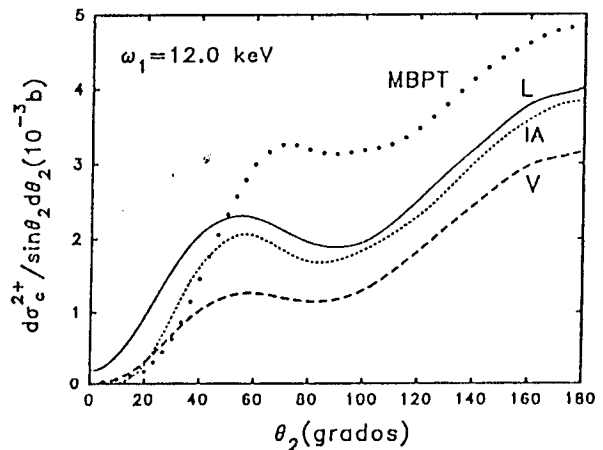


Figura 2. Distribución angular del fotón dispersado a la energía de fotón de 12 keV. Los cálculos presentados se realizaron empleando una función del estado inicial de dos parámetros y una función del doble continuo sin correlación, empleando las formas de longitud (L) y velocidad (V). En la aproximación impulsiva (IA) se emplea la misma función de onda del estado inicial (ver texto). Los cálculos MBPT son de ref. 9 (multiplicados por 1/3).

término destacamos que, al igual que en el caso de simple ionización, la probabilidad máxima para la emisión del fotón dispersado es en la dirección hacia atrás ( $\theta_2 = 180^\circ$ ). Notamos que los cálculos en la forma  $V$  reproducen mejor los resultados de la IA a ángulos hacia adelante ( $\theta_2 = 0^\circ$ ), mientras que los cálculos en la forma  $L$  predicen mejor el valor de la sección eficaz en la dirección hacia atrás. Los resultados MBPT predicen un ángulo diferente para el segundo máximo; mientras que los cálculos IA y empleando los gauges  $L$  y  $V$  predicen un valor cercano a los  $50^\circ$ , los resultados MBPT predicen un ángulo algo mayor.

Si comparamos los resultados de la Figura 2 vemos que todos los cálculos predicen un decrecimiento de la sección eficaz en la dirección hacia adelante. Este decrecimiento se debe a un efecto de ligadura (*binding*), y contrasta con la sección eficaz de un electrón libre que se incrementa en la dirección hacia adelante. En simple ionización, el efecto de ligadura produce un decrecimiento en la sección eficaz hacia adelante, pero no necesariamente un valor nulo<sup>(14)</sup>. Mediciones de la sección eficaz en la dirección hacia adelante pueden dar cuenta de lo correcto de las predicciones que se obtienen usando ambas formas del operador  $A^2$ .

### III. CONCLUSIONES

Hemos presentado una fórmula sencilla (ec. (4)) para el perfil Compton de doble ionización, y hemos interpretado los términos que aparecen en esta fórmula.

Hemos presentado distribuciones angulares en el ángulo del fotón dispersado. Las formas de longitud y velocidad predicen distintos comportamientos en la dirección hacia adelante. La forma de velocidad coincide con la aproximación IA en predecir un valor nulo en la dirección hacia adelante, mientras que la forma de longitud da un valor finito en este caso. En este momento no se dispone de mediciones de distribuciones angulares, pero sí, como parecen indicar los resultados, el valor de la sección eficaz es nulo en la dirección hacia adelante, la forma de velocidad sería un gauge más adecuado para el estudio del scattering Compton cuando dos electrones son ionizados.

Este trabajo ha sido financiado por CONICET.

### Referencias

- 1 - L. Spielberger, O. Jagutzki, R. Dörmer, J. Ullrich, U. Meyer, V. Mergel, M. Unverzagt, M. Damrau, T. Vogt, I. Ali, Kh. Khayyat, D. Bahr, G. Schmidt, R. Frahm and H. Schmidt-Böcking, Phys. Rev. Lett. 74,(1995).
- 2 - L. Spielberger, O. Jagutzki, B. Krässig, U. Meyer, Kh. Khayyat, V. Mergel, Th. Tschentscher, Th. Buslaps, H. Bräuning, R. Dörmer, T. Vogt, Achler, J. Ullrich, D. S. Gemmell, and H. Schmidt-Böcking, Phys. Rev. Lett. 76, 4685 (1996).
- 3 - J. C. Levin, G. Bradley Armen and I. A. Sellin, Phys. Rev. Lett. 76, (1996).
- 4 - R. Wehlitz, R. Hentges, G. Prümper, A. Farhat, T. Buslaps, N. Berrah, C. Levin, I. A. Sellin and U. Becker, Phys. Rev. A 53, R3720.
- 5 - M. Sagurton, R. J. Bartlett, J. A. R. Samson, Z. H. He, and D. Morgan, Phys. Rev. A 52, 2829 (1995).
- 6 - M. A. Kornberg and J. E. Miraglia, Phys. Rev. A 53, R3709 (1996).
- 7 - T. Suric, K. Pisk, B. A. Logan and R. H. Pratt, Phys. Rev. Lett. 73, 790 (1994).
- 8 - L. Andersson and J. Burgdörfer, Phys. Rev. A 50, R2810 (1994).
- 9 - P. M. Bergstrom, Jr., K. Hino and J. H. Macek, Phys. Rev. A 51, 3044 (1995).
- 10 - M. Y. Amusia and A. I. Mikhailov, J. Phys. B 28, 1723 (1995).
- 11 - J. C. Levin, I. A. Sellin, B. M. Johnson, D. W. Lindle, R. D. Miller, N. Berrah, Y. Azuma, H. G. Berry, and D. -H. Lee, Phys. Rev. A 47, R16 (1993).
- 12 - M. A. Kornberg and J. E. Miraglia, Phys. Rev. A. 48, 3714 (1993).
- 13 - R. Dörmer, J. M. Feagin, C. L. Cocke, Bräuning, O. Jagutzki, M. Jung, P. Kanter, H. Khemliche, S. Kravis, V. Mergel, M. H. Prior, H. Schmidt-Böcking, L. Spielberger, J. Ullrich, M. Unverzagt, and T. Vogt, Phys. Rev. Lett. 77, 1024 (1996).
- 14 - P. M. Bergstrom, Jr., T. Suric, K. Pisk and R. H. Pratt, Phys. Rev. A 48, 1134 (1993).