

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

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук

Дубна – 2015

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики Объединенного института ядерных исследований.

Научные руководители:

доктор физико–математических наук,  
профессор

*Виницкий Сергей Ильич*

доктор физико–математических наук

*Чулуунбаатар Очбадрах*

Официальные оппоненты:

доктор физико–математических наук,  
профессор

*Шаблов Владимир Леонидович,*

*Обнинский институт атомной энергетики – филиал  
Национального ядерного университета «МИФИ»*

кандидат физико–математических наук

*Грызлова Елена Владимировна,*

*Научно-исследовательский институт ядерной физики  
имени Д.В.Скобелева Московского государственного  
университета имени М. В. Ломоносова*

Ведущая организация:

*Тихоокеанский государственный университет*

Защита состоится \_\_\_\_ июня 2015 г. в \_\_\_\_ часов на заседании диссертационного совета Д720.001.01 при Объединенном институте ядерных исследований (Лаборатория теоретической физики) по адресу: 141980, г. Дубна, Московской области, ул. Жолио-Кюри, д. 6.

С диссертацией можно ознакомиться в научной библиотеке и на сайте Объединенного института ядерных исследований.

Автореферат разослан «\_\_\_\_\_» \_\_\_\_\_ 2015 г.

Ученый секретарь диссертационного совета

доктор физико–математических наук

*Арбузов Андрей Борисович*

## Общая характеристика работы

**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  $90^\circ$  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 или  $(e, 3 - 1e)$  ЭИС, если энергия и угол вылета медленного электрона не измеряются). 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 [1–3], а также в монографии [4].

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 присутствии лазерного поля с параметром Келдыша  $\gamma \gg 1$  [5], поставленные в режиме малой передачи импульса [6]. В настоящее время ведется подготовка экспериментов в кинематическом режиме большой передачи импульса и энергии, отвечающему методу ЭИС [7]. В этой связи развитие теории ЭИС в электромагнитном поле становится особенно актуальным.

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 [8], где был рассмотрен простейший случай атомарной мишени – атом водорода. Влияние электромагнитного поля на быстрые падающий, рассеянный и выбитый электроны учитывалось с помощью волковских функций, которые при “выключении” поля переходят в плоские волны. Однако, проблема того, как волковские функции 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) [9, 10], продемонстрировали необходимость аккуратного теоретического описания электрон-электронных корреляций для анализа и интерпретации экспериментальных данных. Поскольку в настоящее время в Университете Тохоку создана установка, в которой ЭИС спектрометр совмещен

с лазерной системой [7], возникает необходимость разработки теории в том числе  $(e, 3e)$  и  $(e, 3 - 1e)$  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 (т.н.  $(\gamma, 2e)$  ионизация). В литературе детально описаны  $(\gamma, 2e)$  процессы на атомарных мишенях – благородных газах, особенно гелии, однако более сложные объекты исследованы гораздо хуже. Хотя 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 межъядерной 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 [11], 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  $N^+(^3P)$  ионов. Этот факт будет использован для постановки планируемого эксперимента по двукратной фотоионизации с определением направления межъядерной 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 по-

требностями 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 волковские функции.

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 угловых распределений 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 сильно зависит от 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 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), ТОГУ (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 начального и конечных быстрых (с энергией кэВ и выше) электронов континуума в методе ЭИС; сформулировано условие, при котором необходимо использовать приближение волковских функций вместо традиционного приближения плоских волн в методе ЭИС.
- Показано, что, когда конечный ион остается в возбужденном состоянии, чувствительность измеряемых в ЭИС дифференциальных сечений к модели электрон-электронных корреляций в мишени (атоме гелия) усиливается по сравнению со случаем отсутствия поля. Для возбужденного иона проявляются различия даже между сильнокоррелированными пробными функциями мишени, которые не наблюдаются в отсутствие поля.
- В присутствии лазерного поля угловое распределение медленного электрона ( $e, 3e$ ) процесса на атоме гелия оказывается сильно зависящим от модели электрон-электронных корреляций в мишени в отличие от случая отсутствия поля.
- Показано, что дифференциальные сечения метода ( $e, 3 - 1e$ ) ЭИС в низкочастотном малоинтенсивном электромагнитном поле практически совпадают с дифференциальными сечениями 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 [A1, A2, A3, A4, A5] и 4 в сборниках трудов конференций [A6, A7, A8, A9].

**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

**Во введении** показана актуальность проблемы, сформулированы цели и задачи диссертации, схематично изложено ее содержание.

**Глава 1** посвящена изложению основ теории ЭИС атомов в электромагнитном поле как задачи нескольких заряженных частиц. 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 [A1, A6, A7].

**В разделе 1.1** описана общая теория ЭИС в отсутствие электромагнитного поля. Приведены основные формулы и выражения для расчета амплитуды ЭИС процессов, даны оценки их применимости. Введены основные обозначения, используемые в работе.

В основе метода ЭИС лежит процесс квазиупругого 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). Матричный элемент  $S$ -матрицы, отвечающий такому процессу, с хорошей точностью описывается в рамках борновского приближения плоских волн:

$$S_{fi} = 2\pi i \langle \varphi_{\mathbf{p}_s} \varphi_{\mathbf{p}_e} \Psi_f | v_{ee} | \varphi_{\mathbf{p}_0} \Psi_i \rangle \delta(E_s + E_e + \mathcal{E}_f - E_0 - \mathcal{E}_i), \quad (1)$$

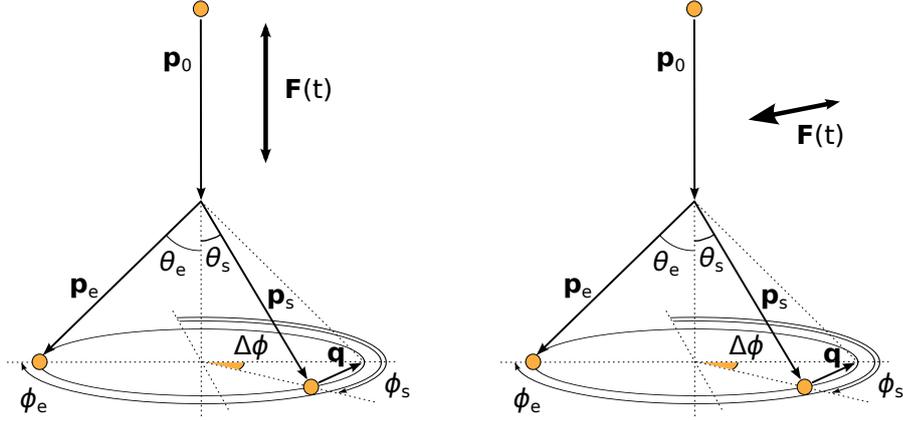


Рис. 1. Геометрия ЭИС эксперимента в электромагнитном поле. Рассматриваются две ориентации электрической компоненты поля  $\mathbf{F}(t)$ : в одном случае она лежит в плоскости рассеяния и коллинеарна импульсу налетающего электрона (LP $\parallel$ , левый рисунок), в другом – перпендикулярна плоскости рассеяния (LP $\perp$ , правый рисунок).

где  $v_{ee}$  – кулоновское взаимодействие между налетающим и выбиваемым электроном,  $\varphi_{\mathbf{p}_0}$ ,  $\varphi_{\mathbf{p}_s}$ ,  $\varphi_{\mathbf{p}_e}$  – плосковолновые состояния налетающего, рассеянного и выбитого электронов с энергиями и импульсами  $(E_0, \mathbf{p}_0)$ ,  $(E_s, \mathbf{p}_s)$  и  $(E_e, \mathbf{p}_e)$  соответственно, а  $\Psi_i$  и  $\Psi_f$  – состояния мишени и конечного иона с энергиями  $\mathcal{E}_i$  и  $\mathcal{E}_f$ . В результате измеряемое дифференциальное сечение можно представить в факторизованном виде<sup>1</sup>

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

где  $(d\sigma/d\Omega)_{ee}$  – моттовское сечение  $ee$ -рассеяния, а величина  $|\mathcal{F}(\mathbf{q})|^2$ , называемая импульсным профилем, определяет вероятность обнаружить электрон в мишени с импульсом  $\mathbf{q} = \mathbf{p}_s + \mathbf{p}_e - \mathbf{p}_0$ , который равен по величине и противоположен по направлению импульсу иона-остатка. Область применимости приближения (1) была детально исследована на базе регуляризации плосковолнового борновского ряда в теории ионизации атомов электронным ударом (см. обзорную работу [2] и ссылки в ней).

**В разделе 1.2** рассматривается теория ЭИС в электромагнитном поле. Сформулированы базовые приближения для волновой функции быстрых конечных электронов в поле иона-остатка и электромагнитном поле. Обсуждаются условия применимости борновского приближения волковских функций. Показано, что в рамках выбранных приближений дифференциальное сечение рассеяния представимо в ви-

<sup>1</sup> Здесь и далее используются атомные единицы  $e = \hbar = m_e = 1$ .

де суммы сечений процессов с различным суммарным числом поглощенных или испущенных фотонов.

В качестве электромагнитного поля рассматривается линейно поляризованная плоская монохроматическая волна, электрическая компонента  $\mathbf{F}(t)$  и соответствующий векторный потенциал  $\mathbf{A}(t)$  которой имеют вид

$$\mathbf{F}(t) = \mathbf{F}_0 \cos \omega t, \quad \mathbf{A}(t) = -\frac{c}{\omega} \mathbf{F}_0 \sin \omega t, \quad (3)$$

где  $\mathbf{F}_0$  – амплитуда поля, а  $\omega$  – его частота. Пространственной зависимостью поля (3) 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 выше, в диссертационной работе исследуется случай лазерного поля с параметром Келдыша  $\gamma \gg 1$  [5]. Это означает, что эффект ионизации, производимый полем, обусловлен многофотонными процессами и, в силу слабости рассматриваемого поля, пренебрежимо мал на фоне ( $e, 2e$ ) ионизации.

Используя представление Фарри [12], матричный элемент (1) с учетом влияния внешнего поля (3) на начальные и конечные состояния сталкивающихся фрагментов можно представить в виде

$$S_{fi} = -i \int_{-\infty}^{\infty} dt \langle \chi_{\mathbf{p}_s}(t) \chi_{\mathbf{p}_e}(t) \Psi_f(t) | v_{ee} | \chi_{\mathbf{p}_0}(t) \Psi_i(t) \rangle. \quad (4)$$

Состояния падающего, рассеянного и выбитого электронов представляют собой т.н. нерелятивистские волковские функции, которые являются решениями уравнения Шредингера для электрона в поле монохроматической плоской волны [13]:

$$\chi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) = \exp \left\{ i \left[ \mathbf{p}\mathbf{r} - Et - \alpha_{\mathbf{p}} \cos \omega t - \zeta(t) + \frac{1}{c} \mathbf{A}(t)\mathbf{r} \right] \right\}, \quad (5)$$

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

При отсутствии поля волковские функции переходят в плоские волны

$$\chi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) \rightarrow \exp[i(\mathbf{p}\mathbf{r} - Et)]. \quad (6)$$

Следуя теореме Флоке, начальные и конечные состояния мишени в поле (3) можно представить в виде

$$|\Psi_{i(f)}(t)\rangle = e^{-iE_{i(f)}t} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-in\omega t} |\psi_{i(f)}^{(n)}(E_{i(f)})\rangle, \quad (7)$$

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

Согласно (4), (5) и (7), полностью дифференциальное сечение обсуждаемой  $(e, 2e)$  реакции можно представить в виде суммы по процессам с различным числом поглощенных ( $N < 0$ ) или испущенных ( $N > 0$ ) фотонов:

$$\frac{d^4\sigma}{dE_s dE_e d\Omega_s d\Omega_e} = \sum_{N=-\infty}^{\infty} \frac{d^3\sigma_N}{dE_s d\Omega_s d\Omega_e} \delta(E_s + E_e + E_f - E_0 - E_i + U_p + N\omega), \quad (8)$$

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 (2),

$$\frac{d^3\sigma_N}{dE_s d\Omega_s d\Omega_e} = \frac{p_s p_e}{(2\pi)^3 p_0} \left( \frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{ee} |\mathcal{F}_N(\mathbf{q})|^2. \quad (9)$$

Здесь

$$\mathcal{F}_N(\mathbf{q}) = \frac{\omega}{2\pi} \int_{-\pi/\omega}^{\pi/\omega} dt e^{i(E_i - E_f - \frac{q^2}{2} - U_p - N\omega)t} \langle \chi_{\mathbf{q}}(t) \Psi_f(t) | \Psi_i(t) \rangle \quad (10)$$

– амплитуда так называемого  $N$ -фотонного импульсного профиля.

**Раздел 1.3** посвящен теоретическому анализу ЭИС одноэлектронного атома, который моделируется гармоническим потенциалом конечной высоты, в поле плоской монохроматической электромагнитной волны. Представлены результаты численных расчетов  $N$ -фотонных дифференциальных сечений (9) в геометриях, показанных на рис. 1. Проведено сравнение борновских приближений плоских волн и волковских функций.

**В разделе 1.4** приведены результаты расчетов  $N$ -фотонных дифференциальных сечений (9) для случая атома водорода с использованием борновских приближений как плоских волн (6), так и волковских функций (5). Сформулирован критерий, при котором наблюдается сходимость результатов в рамках этих двух приближений:  $\alpha_{\mathbf{q}} = |\mathbf{F}_0 \mathbf{q}|/\omega^2 \rightarrow 0$ .

**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<sup>+</sup> в лазерном поле. Выполнены аналитические и численные расчеты для  $N$ -фотонных дифференциальных сечений в случаях, когда ион He<sup>+</sup> 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 [A4, A8].

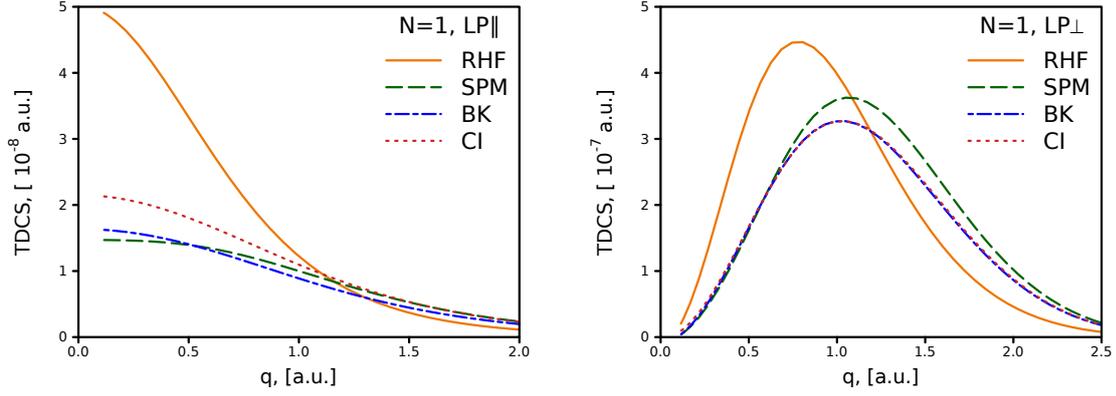


Рис. 2. Дифференциальные сечения ЭИС процесса в лазерном поле с интенсивностью  $I = 5 \cdot 10^{11}$  Вт/см<sup>2</sup> и частотой  $\omega = 1.55$  эВ для различных моделей основного состояния атома гелия в случае, когда в процессе реакции излучается один фотон, а ион гелия оказывается в возбужденном состоянии. Направления электрической компоненты лазерного поля соответствуют изображенным на рис. 1. В присутствии лазерного поля в LP|| геометрии появляется различие в сечениях между функцией Бонэма-Коля (БК) и построенной по принципу конфигурационного взаимодействия (CI) функцией Митроя, практически неразличимых при отсутствии поля.

В разделе 2.1 обсуждается нестационарная теория возмущений и обосновывается использование невозмущенных основных состояний атома He и иона He<sup>+</sup> для параметров электромагнитного поля, которые используются в расчетах, выполненных в следующем разделе. Сформулирован метод построения возмущенной волновой функции первого возбужденного уровня иона He<sup>+</sup>.

В разделе 2.2 проведены численные расчеты  $N$ -фотонных дифференциальных сечений в случаях, когда ион гелия остается как в основном, так и первом возбужденном состоянии. В расчетах использованы четыре модели невозмущенной волновой функции гелия, которые по-разному описывают характер электрон-электронных корреляций в атоме.

- Функция Рутана-Хартри-Фока (RHF [14]), представляет собой произведение одночастичных функций:

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

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

Энергия связи  $\mathcal{E}_{He} = -2.86168$  а.е.

- Функция Сильвермана-Платаса-Мэтсена (SPM [15]) – комбинация  $s$ - и  $p$ -орбиталей:

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

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

- Функция Бонама-Коля (БК [16]) содержит члены вида  $r_{12}e^{-ar_1-br_2-\lambda r_{12}}$ :

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

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

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

- Функция Митроя (CI [17]), построенная по принципу конфигурационного взаимодействия. В ней используется 21 слэттеровская орбиталь ( $9s, 5p, 3d, 3f, 1g$ ):

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

Энергия  $\mathcal{E}_{He} = -2.90315$  а.е.

Показано (см. рис. 2), что в случае, когда ион гелия остается в первом возбужденном состоянии, наблюдается существенная разница даже между результатами, отвечающими аккуратным сильнокоррелированным волновым функциям (БК и CI), в то время как в бесполовом случае эта разница отсутствует.

**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 [A5, A9].

**В разделе 3.1** приведено общее выражение для амплитуды  $(e, 3e)$  ЭИС процесса на атомной мишени в электромагнитном поле в рамках борновского приближения по электрон-электронному взаимодействию. Состояния быстрых налетающего

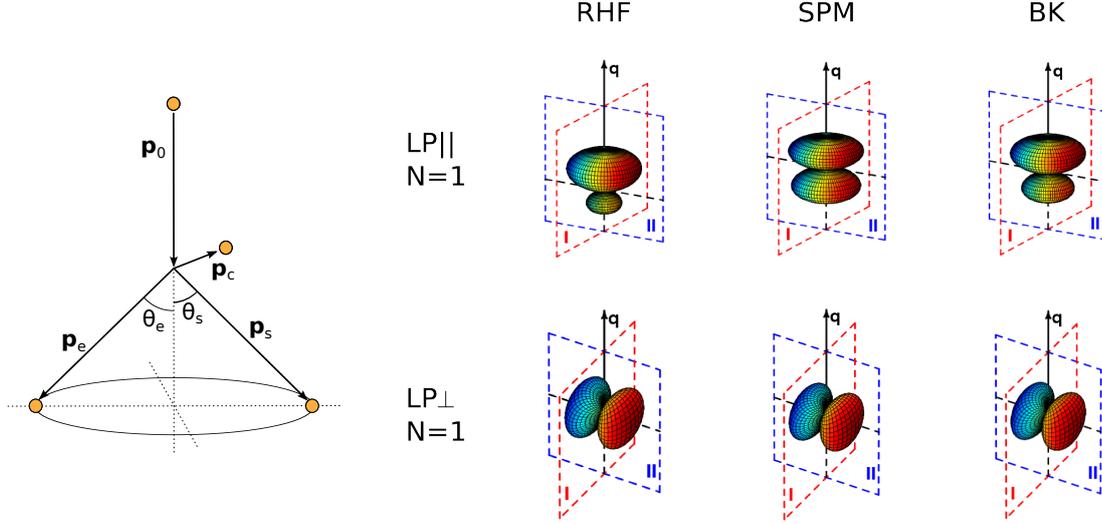


Рис. 3. Угловые распределения медленного испущенного электрона в  $(e, 3e)$  ЭИС реакции в лазерном поле на атоме гелия, отвечающие суммарному числу фотонов  $N = 1$ , в симметричной кинематике ( $E_s = E_e$ ,  $\theta_s = \theta_e = 45^\circ$ ), когда импульсы быстрых начального и конечных электронов лежат в одной плоскости. В LP $\parallel$  геометрии проявляются различия в сечении между моделями основного состояния атома.

и двух вылетающих электронов описываются волковскими функциями, а состояния медленного электрона – кулон-волковской волной:

$$\xi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) = \varphi_{\mathbf{p}}^C(\mathbf{r})\chi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) \exp(-i\mathbf{p}\mathbf{r}), \quad (11)$$

где  $\varphi_{\mathbf{p}}^C(\mathbf{r})$  – сходящаяся кулоновская волна в поле ядра гелия с зарядом  $Z = 2$ . Рассматриваемые параметры поля ( $F_0 \approx 4 \times 10^{-3}$  и  $\omega \approx 0.06$ ) удовлетворяют критерию применимости кулон-волковской волны, установленному в работе [18].

**В разделе 3.2** представлены результаты расчетов углового распределения медленного испущенного электрона для разных значений числа фотонов  $N$ , когда импульсы быстрых электронов лежат в одной плоскости, а направление электрической компоненты линейно поляризованного лазерного поля либо перпендикулярно этой плоскости, либо коллинеарно начальному импульсу (см. рис. 3). Расчеты выполнены с тремя различными моделями волновых функций гелия, по-разному описывающими характер электрон-электронных корреляций в атоме (использованы те же модели, что и в Главе 2 – RHF, SPM и BK). Показано, что при  $N \neq 0$  и когда поле коллинеарно начальному импульсу, угловые распределения, отвечающие разным волновым функциям гелия, сильно отличаются друг от друга, в то время как в отсутствие поля и при  $N = 0$  эти угловые распределения практически неразличимы.

В разделе 3.3 выполнены расчеты дифференциальных сечений ( $e, 3 - 1e$ ) ЭИС процесса на атоме гелия в геометриях, показанных на рис 1. Установлено, что дифференциальные сечения для разных волновых функций гелия слабо отличаются от бесполевого случая (см. рис. 4). Показано, что это объясняется в рамках правила сумм, аналогичного известному правилу сумм Кролла-Ватсона [19], которое впервые было предложено для процессов электронного рассеяния на атомах в электромагнитном поле.

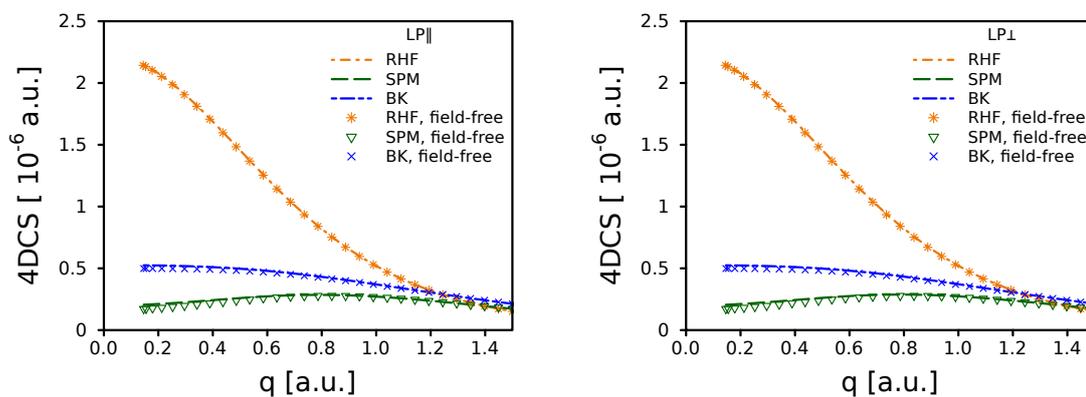


Рис. 4. Дифференциальные сечения ( $e, 3 - 1e$ ) ЭИС процесса в присутствии лазерного поля для различных моделей основного состояния атома гелия в геометриях, изображенных на рис. 1. Для всех моделей результаты в присутствии поля практически совпадают с бесполевым случаем.

**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 молекулярной мишени 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 [A2, A3].

В разделе 4.1 приведено общее выражение для амплитуды ( $\gamma, 2e$ ) процесса на молекулярной мишени в случае, когда состояние двух ионизованных электронов описывается симметризованной коррелированной двухцентральной кулоновской функцией.

В дипольном приближении сечение для фиксированного направления меж-

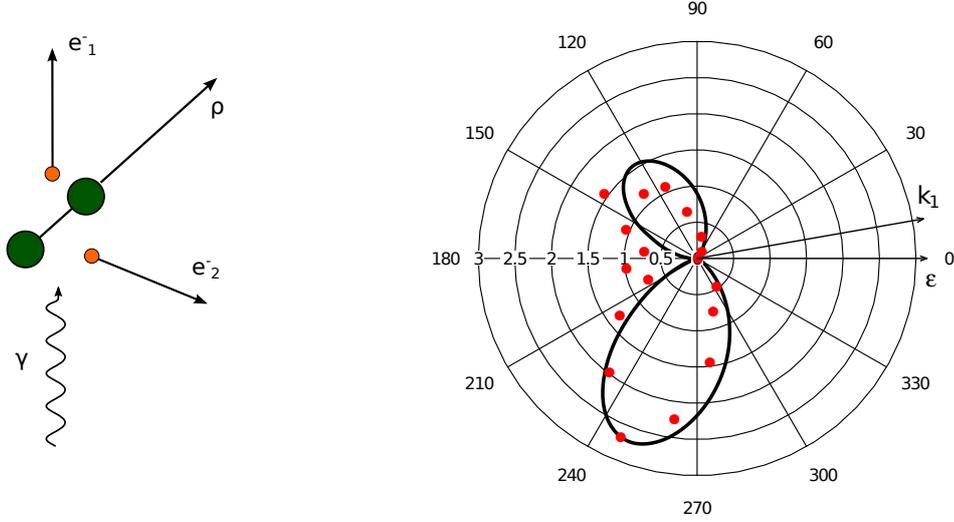


Рис. 5. Слева показана схема  $(\gamma, 2e)$  процесса: двухатомная молекула с направлением межъядерной оси  $\rho$  поглощает фотон и испускает два электрона  $e_1^-$  и  $e_2^-$ . Справа представлено усредненное по направлениям межъядерной оси дифференциальное сечение двукратной фотоионизации молекулы водорода. Направление поляризации электромагнитного поля  $\epsilon$  и импульсы фотоэлектронов  $\mathbf{k}_1$  и  $\mathbf{k}_2$  лежат в одной плоскости. Угол вылета одного из электронов фиксирован, а второго варьируется. Экспериментальные данные [20] показаны точками, сплошная линия – теоретический расчет сечения для модели Турбинера-Гевары начального состояния молекулы водорода.

ядерной оси  $\rho$  вычисляется по формуле

$$\sigma^{(4)}(\rho) = \frac{d^4\sigma}{d\Omega_\rho d\Omega_1 d\Omega_2 d(k_1^2/2)} = \frac{4\pi^2}{\omega} \alpha k_1 k_2 |T_{fi}|^2, \quad (12)$$

где  $\alpha$  – параметр тонкой структуры, а амплитуда перехода дается выражением

$$T_{fi} = \int d\mathbf{r}_1 \int d\mathbf{r}_2 \bar{\chi}_f(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) V \varphi_i(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2), \quad V = \epsilon (\nabla_{r_1} + \nabla_{r_2}). \quad (13)$$

Здесь  $\varphi_i(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  описывает начальную волновую функцию молекулы, а конечное состояние  $\chi_f(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  моделируется как симметризованная коррелированная двухцентровая функция двух ионизированных электронов

$$\chi_f(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{\phi_f(\mathbf{k}_1, \mathbf{r}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{r}_2) + \phi_f(\mathbf{k}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{k}_2, \mathbf{r}_1)}{\sqrt{2}}, \quad (14)$$

$$\phi_f(\mathbf{k}_1, \mathbf{r}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{r}_2) = v(k_{12}) {}_1F_1(\imath\alpha_{12}, 1, -\imath(k_{12}r_{12} + \mathbf{k}_{12}\mathbf{r}_{12})) t(\mathbf{k}_1, \mathbf{r}_1) t(\mathbf{k}_2, \mathbf{r}_2), \quad (15)$$

где  $v(k_{12})$  – фактор Гамова

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

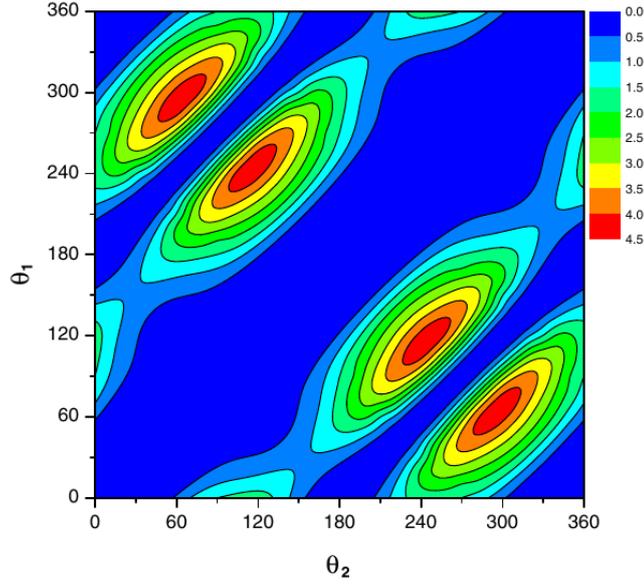


Рис. 6. Дифференциальное сечение двукратной фотоионизации молекулы азота (увеличенное в  $10^4$  раз) в зависимости от углов вылета фотоэлектронов  $\theta_1$  и  $\theta_2$ , усредненное по направлениям межъядерной молекулярной оси, когда ион  $\text{N}_2^{2+}$  оказывается в  $^1\Sigma_g$  состоянии. Энергии фотоэлектронов  $E_1 = E_2 = 10$  эВ, направления их вылета и вектор поляризации фотона лежат в одной плоскости.

Волновая функция фотоэлектрона описывается двухцентровой кулоновской функцией [21]

$$t(\mathbf{k}_i, \mathbf{r}_j) = \exp(-\pi\alpha_i) |\Gamma(1 - i\alpha_i)|^2 \frac{\exp(i\mathbf{k}_i \mathbf{r}_j)}{(2\pi)^{3/2}} \times \quad (16)$$

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

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

и  $Z_i = 1$ .

В разделе 4.2 представлены расчеты дифференциальных сечений двукратной фотоионизации молекулы водорода. Рассматриваются случаи произвольной и фиксированной ориентации межъядерной оси. Обсуждается зависимость сечений от модели электрон-электронных корреляций в начальном состоянии молекулы. Для случая произвольной ориентации межъядерной оси продемонстрировано хорошее совпадение предсказанных теоретических результатов с известными экспериментальными данными (см. рис. 5).

В расчетах использованы нижеприведенные модели волновой функции водорода.

- Функция Гайтлера-Лондона [22], которая строится из 1s-функций:

$$\varphi_i(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = N(\rho)[a_1 b_2 + a_2 b_1], \quad a_i = \sqrt{\frac{\lambda^3}{\pi}} e^{-\lambda r_{ia}}, \quad b_i = \sqrt{\frac{\lambda^3}{\pi}} e^{-\lambda r_{ib}},$$

где  $N(\rho)$  – нормировочный коэффициент. Энергия связи  $\mathcal{E} = -1.115$  а.е.

- Функция Мюллера-Эйринга [23], в которой используются т.н. частично локализованные орбитали:

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

Энергия связи  $\mathcal{E} = -1.149$  а.е.

- Функция Турбинера-Гевары [24], в которой варьируется 14 параметров, явно содержит электрон-электронный коррелятор  $r_{12}$ :

$$\begin{aligned} \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= A_1\psi_1 + A_2\psi_2 + A_3\psi_3, \\ \psi_1 &= (1 + \hat{P}_{12})(1 + \hat{P}_{ab}) \exp(-\alpha_1 r_{1a} - \alpha_2 r_{1b} - \alpha_3 r_{2a} - \alpha_4 r_{2b} - \gamma_1 r_{12}), \\ \psi_2 &= (1 + \hat{P}_{12}) \exp(-\alpha_5 r_{1a} - \alpha_6 r_{1b} - \alpha_6 r_{2a} - \alpha_5 r_{2b} - \gamma_2 r_{12}), \\ \psi_3 &= (1 + \hat{P}_{12}) \exp(-\alpha_7 r_{1a} - \alpha_7 r_{1b} - \alpha_8 r_{2a} - \alpha_8 r_{2b} - \gamma_3 r_{12}). \end{aligned}$$

Операторы  $\hat{P}_{12}$  и  $\hat{P}_{ab}$  переставляют местами соответственно электроны ( $1 \leftrightarrow 2$ ) и ядра ( $a \leftrightarrow b$ ). Энергия связи  $\mathcal{E} = -1.1744196$  а.е.

Показано, что сильнокоррелированная функция Турбинера-Гевары дает лучшее совпадение с экспериментальными данными, чем слабокоррелированные модели Гайтлера-Лондона и Мюллера-Эйринга.

**В разделе 4.3** обсуждаются расчеты дифференциальных сечений двукратной фотоионизации молекулы азота для случая произвольной ориентации межъядерной оси. Предсказаны оптимальные направления углов вылета ионизованных электронов, обсуждаются свойства симметрии дифференциального сечения рассеяния (см. рис. 6). Полученные результаты были использованы для интерпретации недавних экспериментов по двукратной фотоионизации молекул азота (см. рис. 7).

Электронная конфигурация молекулы азота может быть записана в виде  $1\sigma_g^2 1\sigma_u^2 2\sigma_g^2 2\sigma_u^2 3\sigma_g^2 1\pi_u^4$ . В качестве начального состояния молекулы выбиралась волновая функция, описывающая два валентных электрона на  $3\sigma_g$ -орбитали:

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

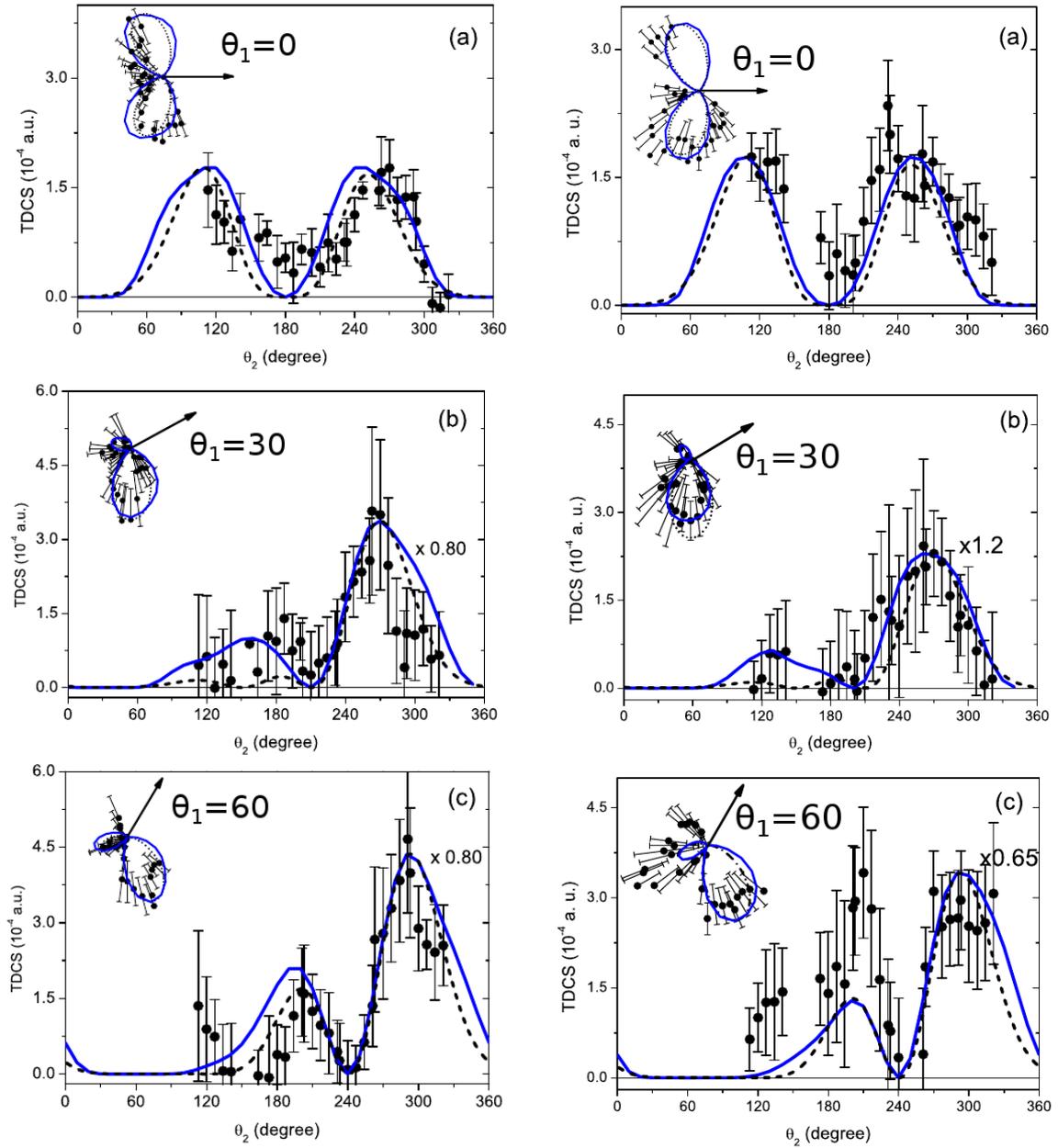


Рис. 7. Дифференциальное сечение  $(\gamma, 2e)$  процесса на молекуле азота, усредненное по направлению межъядерной оси молекулы, в случаях, когда ион  $N_2^{2+}$  оказывается либо в  $^1\Sigma_g$ , либо в  $^3\Pi_u$  состоянии (левый и правый столбцы соответственно). Угол вылета одного из электронов относительно направления поляризации фотона фиксирован (0, 30 и 60 градусов в верхнем, среднем и нижнем рядах соответственно), угол второго – меняется. Сплошная линия – результаты расчетов в рамках модели двухцентровых кулоновских функций, пунктир – параметризация гауссовой моделью [25], точки – экспериментальные данные [A3].

где  $3\sigma_g$  - функции включают в себя  $s$ -,  $p$ - и  $d$ -орбитали слэттеровского типа. В качестве состояний иона рассматривались  $^1\Sigma_g^+$  и  $^3\Pi_u$  конфигурации. В обоих случаях достигнуто совпадение теоретически предсказанных дифференциальных сечений с экспериментальными данными.

**В Заключение** сформулированы основные результаты диссертационной работы.

## Список публикаций по теме диссертации

- A1. 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.
- A2. Bulychev A. A., Chuluunbaatar O., Gusev A. A., Joulakian B.  $(\gamma, 2e)$  photo-double ionization of  $N_2$  molecules for equal energy sharing // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 2013. Vol. 46, no. 18. P. 185203 (9 pp.).
- A3. Bolognesi P., Joulakian B., Bulychev A. A. et al. Photo-double-ionization of the nitrogen molecule // *Phys. Rev. A*. 2014. Vol. 89. P. 053405 (5 pp.).
- A4. Bulychev A. A., Kouzakov K. A. Laser-assisted ionization-excitation of helium by electron impact at large momentum transfer // *Eur. Phys. J. D*. 2014. Vol. 68, no 11 (7 pp.).
- A5. 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. Vol. 91. P. 023413 (8 pp.).
- A6. 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 // *J. Phys.: Conf. Ser.* 2012. Vol. 388, no. 11. P. 112001 (1 p.).
- A7. 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 (8 pp.).
- A8. Bulychev A. A., Kouzakov K. A., Popov Y. V. Theoretical study on laser-assisted electron momentum spectroscopy of helium // *J. Phys.: Conf. Ser.* 2014. Vol. 488, no. 11. P. 112001 (1 p.).
- A9. Bulychev A. A., Kouzakov K. A., Vinitzky S. I. Laser-assisted single and double ionization of helium by electron impact // *Proc. SPIE*. 2015. Vol. 9448. P. 944829 (10 pp.).

## Список цитируемой литературы

1. Неудачин В. Г., Попов Ю. В., Смирнов Ю. Ф. Электронная импульсная спектроскопия атомов, молекул и тонких пленок // *УФН*. 1999. Т. 169. С. 1111–1139.

2. Шаблов В. Л., Веницкий П. С., Попов Ю. В. и др. Борновский ряд в теории ионизации атома электронным ударом // ЭЧАЯ. 2010. Т. 41, № 2. С. 607–650.
3. 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.
4. Weigold E., McCarthy I. *Electron Momentum Spectroscopy*. New York: Kluwer Academic/Plenum Publishers, 1999.
5. Keldysh L. V. Ionization in the field of a strong electromagnetic wave // Sov. Phys. JETP. 1965. Vol. 20, no. 5. P. 1307–1314.
6. 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. Vol. 94. P. 153201.
7. 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.
8. Kouzakov K. A., Popov Yu. V., Takahashi M. Laser-assisted electron momentum spectroscopy // Phys. Rev. A. 2010. Vol. 82. P. 023410.
9. 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. Vol. 72. P. 032705.
10. 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.
11. Bellm S., Lower J., Weigold E., Mueller D. W. Fully differential molecular-frame measurements for the electron-impact dissociative ionization of  $H_2$  // Phys. Rev. Lett. 2010. Vol. 104. P. 023202.
12. Furry W. H. On bound states and scattering in positron theory // Phys. Rev. 1951. Vol. 81. P. 115–124.
13. Wolkow D. M. Über eine Klasse von Lösungen der Diracschen Gleichung // Z. Phys. 1935. Vol. 94. P. 250–260.
14. 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.
15. 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.

16. 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.
17. 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.
18. 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.
19. Kroll N. M., Watson K. M. Charged-particle scattering in the presence of a strong electromagnetic wave // *Phys. Rev. A.* 1973. Vol. 8. P. 804–809.
20. Kheifets A. S. Single-center model for double photoionization of the  $H_2$  molecule // *Phys. Rev. A.* 2005. Vol. 71. P. 022704.
21. 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 // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 2012. Vol. 45, no. 1. P. 015205.
22. Heitler W., London F. Wechselwirkung neutraler Atome und homöopolare Bindung nach der Quantenmechanik // *Z. Phys.* 1927. Vol. 44, no 6-7. P. 455–472.
23. Mueller C. R., Eyring H. Semilocalized orbitals. I. The hydrogen molecule // *J. Chem. Phys.* 1951. Vol. 19, no. 12. P. 1495–1497.
24. Turbinger A. V., Guevara N. L. A note about the ground state of the hydrogen molecule // *ArXiv Physics e-prints.* 2006. physics/0606120.
25. Huetz A., Selles P., Waymel D., Mazeau J. Wannier theory for double photoionization of noble gases // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 1991. Vol. 24, no. 8. P. 1917.