

Abschätzung zur nichtresonanten Zweiphotonen–Ionisation der K–Elektronen mittelschwerer Atome ($Z=25, \dots, 34$)

Peter Koval¹ und Stephan Fritzsche²

Fachbereich Physik, Universität Kassel.

¹ kovalp@mail.ru

² s.fritzsche@physik.uni-kassel.de

1 Vorbetrachtungen. Möglichkeiten einer experimentellen Realisierung

Die Photoionisation von Atomen, Molekülen und Festkörpern gehört zu den meist studierten Prozessen der modernen Physik. Dabei können bei schwachen Lichtquellen bekanntlich nur dann freie Elektronen nachgewiesen werden, wenn die Energie der einzelnen Photonen größer ist als die Bindungsenergie E_B der Elektronen (*licht–elektrischer Effekt*). Die Intensität der Strahlung beeinflusst (in schwachen Lichtfeldern) hingegen nur die Zahl der emittierten Elektronen, jedoch nicht die *Ionisationsschwelle*, unterhalb derer keine freien Elektronen vorkommen. Allgemein treten in Atomen und Festkörpern mehrere Ionisationsschwellen auf, die den unterschiedlichen Elektronenschalen („Bändern“) zugeordnet werden. Sie führen zu der bekannten Kantenstruktur in der Elektronenausbeute, die seit langer Zeit gezielt bei Materialuntersuchungen und der Strukturanalyse von Festkörpern verwendet wird.

Mehrphotonen–Ionisationsprozesse werden dagegen gewöhnlich erst bei deutlich stärkeren Lichtquellen beobachtet, wie sie inzwischen aufgrund der Entwicklung der Laser in vielfältiger Form zur Verfügung stehen. In solchen intensiven Lichtfeldern werden einzelne Elektronen auch bei Photonenenergien emittiert, die (weit) kleiner sind als die Bindungsenergien ($E_p \ll E_B$), wobei in hinreichend starken Feldern schließlich selbst im Kontinuum noch ein oder mehrere Photonen absorbiert werden können (*ATI – above–threshold–ionization*). Allerdings sind solche nichtlinearen Prozesse bisher vor allem mit Infrarot– und sichtbaren Lasern detailliert untersucht worden. Analoge Ionisationsprozesse im extremen UV (EUV) oder gar im Röntgenbereich sind hingegen weit weniger gut verstanden, da bei solchen kurzen Wellenlängen in der Vergangenheit kaum genügend starke Lichtquellen verfügbar waren. Ein möglicher experimenteller Nachweis einer Zweiphotonen–Ionisation im Röntgenbereich könnte inzwischen allerdings mit Hilfe (inkohärenter) Röntgenstrahlung gelingen, wie sie beim Beschuß kleiner Materialproben mit starken optischen Lasern erzeugt wird. Gegenwärtig werden solche Experimente besonders in der Gruppe von Professor Sauerbrey in Jena geplant und aufgebaut. Die nachfolgende Abschätzung zu den Querschnitten einer Zweiphotonen–Ionisation im Röntgenbereich soll diese Experimente theoretisch unterstützen.

Allgemein werden Mehrphotonen–Ionisationsprozesse in der Literatur mit Hilfe von Übergangsraten (in sec^{-1}) oder n –Photonen Ionisationsquerschnitten charakterisiert, die durch die Relation

$$\frac{dW}{dt} = \sum_{n=1}^{\infty} \sigma_n F^n \quad (1)$$

miteinander verknüpft sind, wobei F den Photonenfluß (in Photonen/ cm^2 s) und σ_n den n –Photonen Wirkungsquerschnitt bezeichnen. Daneben finden sich in früheren Arbeiten (insbesondere zur Zweiphotonen–Ionisation des H–Atoms) aber auch 'gewichtete' Querschnitte (in cm^4/W), die auf die Intensität des einfallenden Lichtes bezogen werden. Für die Zweiphotonen–Ionisation können diese Größen mit Hilfe der Formel

$$\frac{\sigma}{I} [\text{in } \text{cm}^4 \text{W}^{-1}] = \frac{\sigma [\text{in } \text{cm}^4 \text{sec}]}{E_p [\text{in } \text{W sec}]} \quad (2)$$

einfach ineinander umgerechnet werden. Bei der Darstellung der nachfolgenden (Test-) Rechnungen und Ergebnisse werden diese Größen wahlweise verwendet und diskutiert.

Konkrete Falluntersuchungen zur K-Schalen Ionisation mittelschwerer Atome wurden von uns im Bereich $22 \leq Z \leq 34$ durchgeführt. Als Photonenenergien für eine mögliche Zweiphotonen-Ionisation wurden dazu geeignete $K_{\alpha,\beta}$ Röntgenlinien von Elementen mit einer entsprechenden kleineren Kernladung verwendet, die zu einer 'nichtresonanten' Anregung just oberhalb der Ionisationsschwelle (der Zweiphotonen-Ionisation) beitragen.

2 Theoretische Grundlagen

2.1 Zeitabhängige Störungstheorie

In der Standardtheorie zur Wechselwirkung von (Mehrelektronen-) Atomen mit Licht wird das Strahlungsfeld allgemein als klassische (monochromatische) Welle aufgefaßt, während die Atome quantenmechanisch beschrieben werden müssen. Dabei kann selbst weiche Röntgenstrahlung — aus atomarer Sicht — in guter Näherung als ein homogenes, elektromagnetisches Feld aufgefaßt und (für moderate Feldstärken) in ihrem Einfluß auf die Elektronenbewegung im Atom mit Hilfe der zeitabhängigen Störungstheorie beschrieben werden. Der Ausgangspunkt unserer nachfolgenden Betrachtungen ist folglich die zeitabhängige (nichtrelativistische) Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = (\hat{H}_0 + \hat{H}'(t)) \psi . \quad (3)$$

Zur Lösung dieser Gleichung entwickeln wir die Wellenfunktion

$$\psi(t) = \sum_k a_k(t) \psi_k \quad (4)$$

nach den Wellenfunktionen ψ_k des freien Atoms, d.h. den Lösungen der ungestörten Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial \psi_k}{\partial t} = \hat{H}_0 \psi_k . \quad (5)$$

Einsetzen von (4) in Gl. (3) liefert

$$i\hbar \sum_k (\dot{a}_k \psi_k + a_k \dot{\psi}_k) = \sum_k a_k (\hat{H}_0 + \hat{H}') \psi_k , \quad (6)$$

woraus für die zeitabhängigen Koeffizienten das Gleichungssystem

$$i\hbar \dot{a}_m = \sum_k H'_{mk} \exp(i(E_m - E_k)t/\hbar) a_k, \quad \text{für } m = 1, 2, 3, \dots \quad (7)$$

mit

$$H'_{mk} = \int \psi_m^* \hat{H}' \psi_k dV$$

folgt. Wir können die Funktionen $a_k(t)$ ferner in eine Reihe

$$a_k(t) = a_k^{(0)}(t) + a_k^{(1)}(t) + a_k^{(2)}(t) + \dots ,$$

entwickeln, wobei $a_k^{(0)}(0) = \delta_{mk}$ gilt, wenn wir annehmen, daß die Störung zur Zeit $t = 0$ einsetzt. Eine Lösung erhalten wir für die Koeffizienten $a_m(t)$ in 1. Ordnung, indem wir in Gl. (7) rechts die Koeffizienten in 0. Ordnung eingesetzt

$$i\hbar \dot{a}_m^{(1)}(t) = \sum_k H'_{mk} \exp(i(E_m - E_k)t/\hbar) a_k^{(0)} = H'_{mn} \exp(i(E_m - E_n)t/\hbar). \quad (8)$$

und formell von $0 \dots t$ integrieren

$$a_m^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' H'_{mn} \exp(i(E_m - E_k)t/\hbar). \quad (9)$$

Ganz analog können auch die Koeffizienten in 2. Ordnung

$$a_m^{(2)}(t) = -\frac{i}{\hbar} \sum_k \int_0^t dt' H'_{mk} \exp(i(E_m - E_k)t/\hbar) a_k^{(1)}(t') \quad (10)$$

hergeleitet werden.

Die Übergangswahrscheinlichkeit für einen Übergang aus dem Anfangszustand ψ_i in den Endzustand ψ_f auf Grund des zeitlichen Störoperators $\hat{H}'(t)$ ist dann

$$W_{fi} = |a_f(t)|^2 = |a_f^{(0)}(t) + a_f^{(1)}(t) + a_f^{(2)}(t) + \dots|^2.$$

Allgemein wird die Wahrscheinlichkeit W_{fi} für eine (Einfach-) Ionisation der Atome nun mit Hilfe einer Übergangsrate $T(\omega, I)$ charakterisiert, die sich als Limes der zeitabhängigen Übergangswahrscheinlichkeit

$$T_{fi}(\omega, I) = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{W_{fi}}{t} \quad (11)$$

Diese Übergangsrate hängt sowohl von der Frequenz als auch der Intensität des einfallendes Lichtes ab. Aus einer Reihenentwicklung von $T(\omega, I)$ nach Potenzen der Intensität der Strahlung [1, 2, 3]

$$T_{fi}(\omega, I) = \sigma_1 I^1 + \sigma_2 I^2 + \dots, \quad (12)$$

lassen sich so schließlich die 'n-Photonen Absorptionsquerschnitte' σ_N herleiten, die in der Literatur zur Charakterisierung von Mehrphotonen-Ionisationsprozessen verwendet werden.

2.2 Verwendung eines effektiven Einelektronenmodells

Die störungstheoretische Herleitung der Ionisationsquerschnitte, wie sie im vorausgehenden Abschnitt 2.1 kurz skizziert wurde, baut allgemein auf einem (vollständigen) Satz *ungestörter Lösungen* zu H_0 auf. Für Mehrelektronenatome stehen solche Lösungen natürlich nur näherungsweise zur Verfügung. Zudem haben diese Lösungen oftmals eine so große mathematische Komplexität, daß sie für einfache „Abschätzungen physikalischer Effekte“ eher ungeeignet sind. Im Folgenden werden wir daher auf ein effektives Einteilchenbild zurückgreifen, das Mehrteilcheneffekte zunächst vernachlässigt.

In einem solchen Einteilchenbild (Modell unabhängiger Teilchen) wird bei der Ionisation stets nur das *aktive* Elektron, das durch das Strahlungsfeld tatsächlich auch ins Kontinuum angehoben wird, in der theoretischen Beschreibung berücksichtigt. Der Einfluß der anderen $N-1$ Elektronen hingegen wird mit Hilfe eines *effektiven* Potentials genähert. Die bekannteste Methode, die solche effektiven Potenziale sehr effizient verwendet, ist das Hartree-Fock Verfahren, das sowohl die Abschirmung der Kernladung durch die verbleibende Elektronenhülle als auch die Austauschwechselwirkung der Elektronen oftmals recht gut erfaßt. Eine noch einfachere Näherung verwendet dagegen *wasserstoff-ähnliche* Lösungen, die zu einer geeigneten, effektiven Kernladung Z_{eff} bestimmt werden. Eine solche Näherung mit nichtrelativistischen, wasserstoff-ähnlichen Wellenfunktionen liegt auch der vorliegenden Abschätzung zugrunde.

Für wasserstoff-ähnliche Ionen können die Zweiphotonen-Ionisationsquerschnitte mit verschiedenen Methoden berechnet werden. Für eine Ionisation aus dem $1s$ -Grundzustand freier Ionen ist dieser Querschnitt für linear und zirkular polarisiertes Licht gegeben durch [1, 2]

$$\sigma_2^L = 2\pi \frac{\alpha c}{a_0} \frac{E_p^2}{F_0^2} \frac{1}{9} \left[(R_{010}^2)^2 + \frac{4}{5} (R_{012}^2)^2 \right], \quad (13)$$

$$\sigma_2^C = 2\pi \frac{\alpha c}{a_0} \frac{E_p^2}{F_0^2} \frac{2}{15} (R_{012}^2)^2, \quad (14)$$

wobei α die Feinstrukturkonstante, a_0 der Bohrsche Radius (in cm) und c die Lichtgeschwindigkeit (in cm/sec) bezeichnen. In diesen Ausdrücken sind ferner $F_0 = 3.22 \cdot 10^{34} \text{cm}^{-2} \text{sec}^{-1}$ eine Konstante und E_p die Energie der einfallenden Photonen (die hier in atomaren Einheiten einzusetzen ist). Dies führt für die Zweiphotonen-Ionisationsquerschnitte σ_2 zu den üblichen Einheiten $\text{cm}^4 \cdot \text{s}$.

Die im Ausdruck (13) auftretenden Matrixelemente R_{010}^2 und R_{012}^2 können in verschiedener Form dargestellt werden. Sie beschreiben die Ionisation eines K-Elektrons (mit Bahndrehimpuls $l_i = 0$), das störungstheoretisch über einen Zwischenzustand mit Drehimpuls $l_\nu = 1$ in einen Kontinuumszustand mit Drehimpulsen $l_f = 0$ oder $l_f = 2$ angehoben wird. Die hierbei auftretenden Drehimpulse für die Zwischen- und Endzustände können dabei unmittelbar aus der Dipolnäherung ($\Delta l = 1$) abgelesen werden, die das Auftreten weiterer Drehimpulskombinationen sofort ausschließt.

Im folgenden sollen für die Matrixelemente $R_{l_i, l_\nu, l_f}^2(E_p)$ zwei Darstellungen näher diskutiert werden. Dabei werden einmal eine *direkte Summation* über das vollständige Einteilchenspektrum und zum anderen die Kenntnis der Greens-Funktion zu Gl. (18) ausgenutzt.

Direkte Summation: Eine explizite Darstellung dieser Matrixelemente zweiter Ordnung ist gegeben durch:

$$R_{l_i, l_\nu, l_f}^2 = \sum_{\nu \neq i} \frac{\int P_{E_f l_f}^* r P_{\nu l_\nu} dr \cdot \int P_{\nu l_\nu}^* r P_{i l_i} dr}{E_i - E_\nu + E_p}, \quad (15)$$

wobei E_i die Energie des Grundzustandes, E_p die Photonenenergie und $E_f = E_i + 2E_p$ ist. Die $P_{nl}(r)/r$ sind die bekannten Radialfunktion zu den H-ähnlichen Ionen.

Darstellung mit Greens-Funktionen: Ein alternativer Zugang zur Berechnung der Zweiphotonen-Ionisationsquerschnitte verwendet die bekannte Greens-Funktion zur zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung, um die Matrixelemente R_{010}^2 und R_{012}^2 berechnen zu können

$$R_{l_i, l_\nu, l_f}^2 = \int_0^\infty \int_0^\infty P_{f l_f}^*(r_2) r_2^2 g_l(r_1, r_2; E_i + E_p) r_1^2 P_{i l_i}(r_1) dr_1 dr_2. \quad (16)$$

Ein Vergleich der beiden Darstellungen zeigt unmittelbar, daß die Greens-Funktion formell die Relation

$$g_l(r_1, r_2; E) = \sum_\nu \frac{P_{\nu l}(r_1) \cdot P_{\nu l}^*(r_2)}{r_1 r_2 (E - E_\nu)} \quad (17)$$

erfüllt. Diese Funktion genügt darüberhinaus der Differentialgleichung [4, 5]

$$\left\{ \frac{d^2}{dr_1^2} + \frac{2}{r_1} \frac{d}{dr_1} + 2E + \frac{2Z}{r_1} - \frac{l(l+1)}{r_1^2} \right\} g_l(r_1, r_2; E) = \frac{2\delta(r_1 - r_2)}{r_1 r_2}, \quad (18)$$

deren Lösung für $E < 0$ allgemein als Produkt aus einer regulären und irregulären Lösung der entsprechenden homogenen Gleichung dargestellt werden kann

$$g_l(r_1, r_2; E) = -\frac{1}{x r_1 r_2} \frac{\Gamma(l+1-\tau)}{\Gamma(2l+2)} M_{\tau, l+\frac{1}{2}}(2xr_<) W_{\tau, l+\frac{1}{2}}(2xr_>), \quad (19)$$

wobei $W(z)$ und $M(z)$ die bekannten Whittaker-Funktionen bezeichnen und $x = \sqrt{-2E}$, $\tau = \frac{Z}{\sqrt{-2E}}$, $r_< = \min(r_1, r_2)$ bzw. $r_> = \max(r_1, r_2)$.

3 Implementation der Theorie

Zur Berechnung der Zweiphotonen-Ionisationsquerschnitte für (effektive) wasserstoff-ähnliche Ionen wurden die Formeln (13) und (14) als Teil des DIRAC-Programmes, das in unserer Gruppe entwickelt wird, implementiert und getestet. Dieses computeralgebraische Programm zu den Eigenschaften und dem Verhalten der H-ähnlichen Ionen stellt [im Rahmen von MAPLE V] sowohl die Radialfunktionen als auch die (radialen) Greens-Funktionen bereit. Da die Radialintegrale allgemein jedoch nicht analytisch ausgewertet werden können (insbesondere wenn sie Kontinuumsfunktionen enthalten), mußte von uns eine numerische Integration realisiert werden.

Dazu wurden zwei Prozeduren entwickelt, die eine beliebige, nichtsinguläre Funktion in ein oder zwei Dimensionen mit Hilfe eines Gauß-Legendre Verfahrens vorgegebener Ordnung integriert

$$\int_a^b \int_c^d F(x, y) dx dy \approx \frac{b-a}{2} \frac{d-c}{2} \sum_{i,j=1}^{I,J} \omega_i^I \omega_j^J F(X_i, Y_j), \quad (20)$$

wobei sich die Stützstellen aus

$$X_i = \frac{b-a}{2} x_i^I + \frac{b+a}{2}, \quad Y_j = \frac{d-c}{2} x_j^J + \frac{d+c}{2}$$

ergeben. Die Stützstellen x_k^N und Gewichte w_k^N einer solchen Gauß-Legendre Integration können zu einer gegebenen Ordnung N mittels der MAPLE-Prozedur ORTHOPOLY[P] gewonnen werden.

4 Test der Implementation

Da bisher nur sehr wenige Kenntnisse über eine Mehrphotonen-Ionisation im Röntgenbereich vorliegen, ist es umso wichtiger, geeignete Testfälle zu konstruieren. Diese sollen helfen, das Vertrauen in die hier zugrundegelegte Methode und ihre korrekte Implementation zu stärken. Unser Ziel ist es dabei, bisherige Resultate zur Zwei- und Mehrphotonen Ionisation zu bestätigen oder evtl. auftretende Abweichungen zu verstehen. Erst eine Reihe gezielter Test wird es uns i.a. ermöglichen, in den genannten Fallstudien eine (mehr oder minder) zuverlässige Abschätzung zu geben.

Im Folgenden werden kurz einige verschiedene Tests beschrieben, die unterschiedliche Aspekte unserer Implementation prüfen sollen.

4.1 Test der Greens-Funktion

Die radiale Greens-Funktion (19) kann alternativ auch anhand einer bekannten Integraldarstellung [5] gewonnen werden:

$$g_l(r_1, r_2; E) = -\frac{2}{\sqrt{r_1 r_2}} \int_0^\infty dt \exp(-(r_1 + r_2)x \cosh t) \cdot I_{2l+1}(2x\sqrt{r_1 r_2} \sinh t) \coth^{2\tau}(t/2), \quad (21)$$

worin $x = \sqrt{-2E}$, $\tau = \frac{Z}{\sqrt{-2E}}$ und $I_L(x)$ eine Bessel-Funktion der erste Art bezeichnen.

Zum Test der Implementation der Formel (19) wurden dazu die Funktionswerte für mehrere (zehn) Sätze von Argumenten berechnet und mit der obigen Integralform verglichen. Dabei zeigte sich allgemein eine gute Übereinstimmung in allen Funktionswerten von etwa 4–5 Ziffern.

Zum Test der Integraldarstellung (21) wurde dieses Integral ferner durch eine (endliche) Gauß-Legendre Integrationssumme approximiert und in die rechte Seite der Differentialgleichung (18) eingesetzt. Diese so erhaltene Summe ist von den beiden Parametern r_1 und r_2 abhängig und kann mit MAPLE einfach differenziert werden. Damit konnte die Identität der beiden Seiten von Gleichung (18) näherungsweise nachgewiesen werden, wobei das Integral über eine der beiden Radialkoordinaten (r_2) zusätzlich die korrekte Normierung der Greens-Funktion bestätigte. Solche Testrechnungen wurden für $Z = 1$ und $Z = 5$ jeweils zum Bahndrehimpuls $l = 1$ durchgeführt.

4.2 Test der Integrationsroutinen und der Wahl der Integrationsgrenzen

Das Programm zur Doppelintegration wurde zunächst anhand einiger einfacher Beispiele überprüft, zu denen die zugehörigen Integrale sofort bekannt sind. Um ferner die korrekte Wahl der Integrationsgrenzen zu prüfen, ist in Abb. 1 der Integrand $F(r_1, r_2)$ des Radialintegrals $R_{012}^2(E_p)$ aus (16) dargestellt. Dieses Bild zeigt, daß die Integration über die Variable r_1 , d.h. über die gebundene Elektronendichte des Anfangszustandes ψ_i , deutlich einfacher durchzuführen ist als über r_2 , die Elektronenkoordinate des freien Elektrons. Es ist somit allgemein erforderlich, ein etwas unterschiedliches Netz in den beiden Richtungen anzuwenden.

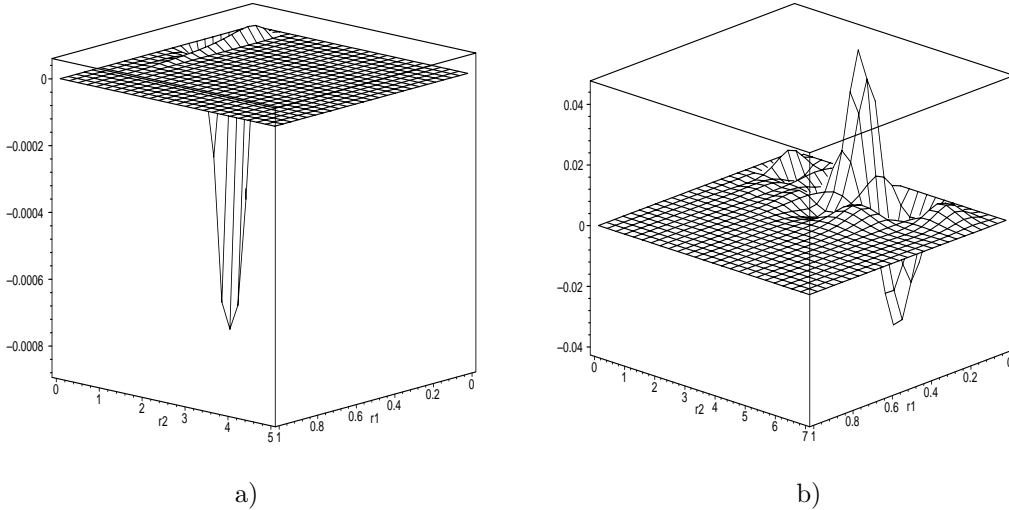


Abbildung 1: Integrand des Radialintegrals $R_{012}^2(E_p)$ aus (16) zur Kernladung $Z = 20$ bei zwei verschiedenen Photonenergien: a) $E_p = 1.05 \cdot Z^2/4$ a.u. (5% mehr als die Zweiphotonen-Ionisationsschwelle); b) $E_p = 1.95 \cdot Z^2/4$ a.u. (95% mehr als die Zweiphotonen-Ionisationsschwelle). Hierbei bezeichnet r_1 die Radialkoordinate zum gebundenen Anfangszustand und r_2 die Koordinate zum freien Endzustand.

Zur Berechnung der Ionisationsquerschnitte (13) und (14) mit Greens-Funktionen zu einem geeigneten (effektiven) Z wurde die *Obergrenze* der Integration über r_1 mittel der empirischen Skalierungsregel $b = 22/Z$ bestimmt. Für die entsprechende „freie Integration“ (über r_2) wurde eine Obergrenze von $d = (240 E_p - 30)/Z$ verwendet, wobei E_p darin in atomaren Einheiten zu nutzen ist.

Für die 2-dimensionale Gauß-Legendre Integration wurden verschiedene Ordnungen N getestet. Schließlich wurde für die gebundene Integration die Ordnung $I = 12$ und für die freie Integration die Ordnung $J = 96$ genutzt. Dabei wurde vor allem auf die Stabilität der Integration geachtet, wenn die Ordnung und/oder die Integrationsgrenzen bis zu einem Faktor 2 variiert wurden.

5 Vergleich mit der Literatur

Weitere Testrechnungen betreffen den Vergleich mit Zweiphotonen–Ionisationsraten, wie sie in der Literatur zu finden sind. Solche Rechnungen wurden in den 60er und 70er Jahren vor allem für Wasserstoff und Helium durchgeführt.

5.1 Zweiphotonen–Ionisation beim H–Atom

Zur Zweiphotonen–Ionisation von Wasserstoff sind in der Literatur gleich mehrere Arbeiten bekannt [6, 7, 8, 9]. Dabei werden die (Zweiphotonen–) Ionisationsraten σ/I gewöhnlich in $\text{cm}^4 \text{W}^{-1}$ angegeben [6, 7, 8]. Die verschiedenen Größen (und Einheiten) zur Charakterisierung der Mehrphotonen–Ionisationsquerschnitte wurden in Abschnitt 1 besprochen.

Laplanche et al. [7] zeigt einen Vergleich von Ionisationsquerschnitten, die seine und frühere Ergebnisse zusammenfaßt. Diese Ergebnisse sind nochmals in der Tabelle 1 und in Abb. 2 kurz zusammengefaßt und um unsere eigenen Rechnungen ergänzt worden. Diese Tabelle und das Bild zeigen, daß unsere Ergebnisse, die mit Hilfe der Greens–Funktionen Methode gewonnen wurden, für alle λ –Werte in guter Näherung mit den früheren Arbeiten [7, 8] zusammenfallen.

Lambropoulos und Madsen [9] haben darüberhinaus kürzlich ebenfalls eine Abschätzung zum Zweiphotonen–Ionisationsquerschnitt $\sigma_2(1775\text{\AA}) = 1 \cdot 10^{-50} \text{ cm}^4 \text{ sec}$ vorgelegt. Dieser Querschnitt kann unmittelbar mit unserem Ergebnis von $\sigma_2^L(1775\text{\AA}) = 1.242 \cdot 10^{-50} \text{ cm}^4 \text{ sec}$ bzw. $\sigma_2^L/I = 1.105 \cdot 10^{-32} \text{ cm}^4/\text{W}$ verglichen werden.

Tabelle 1: Tabelle 1: (Gewichtete) Zweiphotonen–Ionisationsquerschnitte σ/I (in $\text{cm}^4 \text{W}^{-1}$) für atomaren Wasserstoff im $1s$ Grundzustand

$\lambda, \text{\AA}$	Bebb und Gold (1966) [6]	Chan und Tang (1966) [16]	Gontier und Trachin (1971) [8]	Laplanche et al. (1976) [7]	Diese Arbeit
1020		6.752(-33)	5.522(-33)	7.080(-33)	7.098(-33)
1100	1.0(-33)	4.013(-34)	4.049(-34)	4.035(-34)	4.067(-34)
1200	6.6(-32)	6.303(-32)	5.803(-32)	6.417(-32)	6.408(-32)
1300	1.1(-32)	1.276(-32)	1.283(-32)	1.277(-32)	1.270(-32)
1400	7.0(-33)	8.450(-33)	8.453(-33)	8.470(-33)	8.442(-33)
1600	6.8(-33)	9.154(-33)	9.143(-33)	9.182(-33)	9.131(-33)
1700	8.4(-33)	1.025(-32)	1.023(-32)	1.028(-32)	1.024(-32)

5.2 Zweiphotonen–Ionisation von atomarem Helium

In der Gruppe von Lambropoulos [13, 14] wurden in den vergangenen Jahren auch die Wirkungsquerschnitte von atomarem Helium untersucht. Insbesondere geben diese Autoren in ihren Arbeiten die Zweiphotonen–Querschnitte für linear–polarisiertes Licht für Übergänge ins d –Kontinuum ($l = 2$) an

$$\sigma_2^L \approx 2\pi \frac{\alpha c}{a_0} \frac{E_p^2}{F_0^2} \frac{1}{9} \left[\frac{4}{5} (R_{012}^2)^2 \right].$$

Diese Näherung scheint gerechtfertigt, da der erste Term im Wirkungsquerschnitt (13) gewöhnlich vernachlässigbar ist. Solche Ionisationsquerschnitte können näherungsweise auch in unserem (effektiven) Eielektronen–Bild abgeschätzt werden, wenn dafür eine geeignete, effektive Ladung Z_{eff}

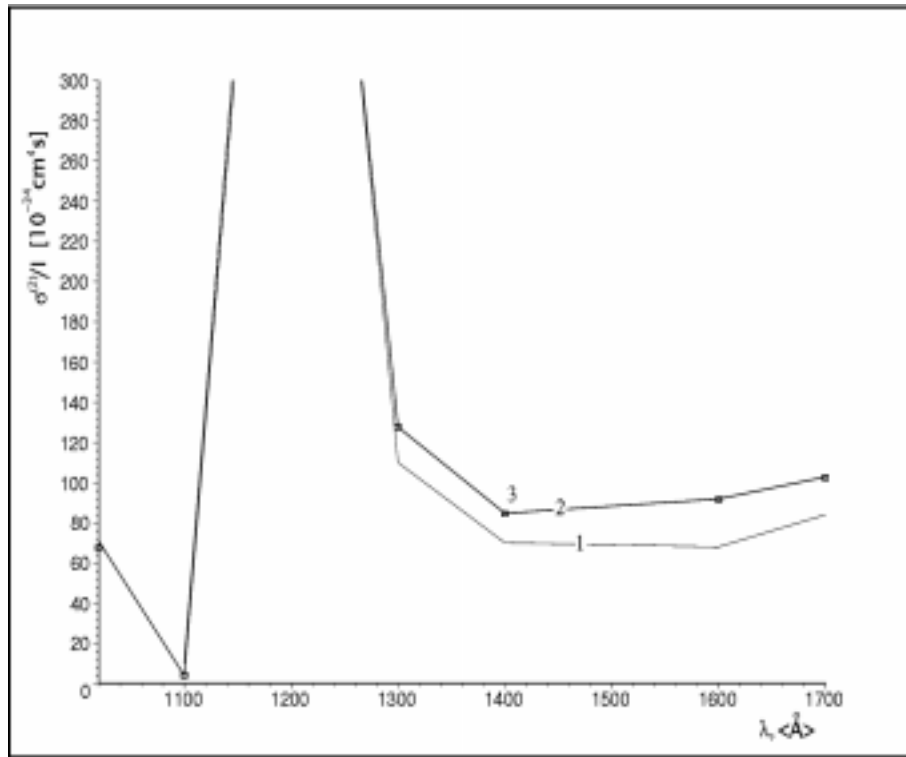


Abbildung 2: Zweiphotonen-Ionisationsquerschnitte σ/I (in $\text{cm}^4 \text{W}^{-1}$) für atomaren Wasserstoff im $1s$ Grundzustand. **1)** Bebb und Gold [6]; **2)** Laplanche et al. [7] und diese Arbeit (überlagert); **3)** Chan und Tang [16] (Einzelpunkte).

gewählt wird. In unseren Vergleichsrechnungen bestimmten wir die effektive Ladung

$$Z_{He} \approx 1.44.$$

so, daß die Maxima bei $E_p = 21.5$ eV übereinstimmen. Bild 3 zeigt, daß mit dieser Näherung vor allem im nichtresonanten Gebiet $E_p = 14 \dots 19$ eV recht gut übereinstimmenden Wirkungsquerschnitte erhalten werden.

5.3 Zweiphotonen–Ionisation von Neon

Zur Zweiphotonen–Ionisation der K –Schale bei atomarem und ionisierten Neon wurden kürzlich Rechnungen von Novikov und Hopersky [20] vorgelegt. In diesen Untersuchungen wurde ein Vielteilchenmodell zugrundegelegt, um auch die Resonanzstrukturen beschreiben zu können. Allerdings sind mehrere wichtige Details dieser Rechnungen weder verständlich noch nachvollziehbar, so daß wohl nur die Wirkungsquerschnitte im nichtresonanten Gebiet mit (späteren) Experimenten vergleichbar sein werden. — Bild 4 zeigt einen Vergleich unserer Abschätzung zur K –Schalen Ionisation für zwei verschiedene Ladungszustände mit den Arbeiten von Novikov und Hopersky [20], wobei die effektiven Ladungen anhand der K –Schalen Bindungsenergien bestimmt wurden

$$Z_{\text{eff}}^{Ne^0} \approx \sqrt{2 \cdot 868.44 \text{ eV} / 27.2116} = 7.99 \quad \text{und} \quad Z_{\text{eff}}^{Ne^{6+}} \approx \sqrt{2 \cdot 1099.18 \text{ eV} / 27.2116} = 8.99.$$

6 Abhängigkeit der Ionisationsquerschnitte von der Kernladung

Für wasserstoff–ähnliche Ionen gilt für die Zweiphotonenquerschnitte in der nichtrelativistischen Theorie eine einfache Skalierung mit Z

$$\sigma_2(Z, E_p) = \frac{\sigma(1, E_p/Z^2)}{Z^6} \tag{22}$$

bzw. für die 'gewichteten' Querschnitte

$$\frac{\sigma_2(Z, E_p)}{I} = Z^{-8} \frac{\sigma(1, E_p/Z^2)}{I}. \tag{23}$$

Diese einfache Skalierung wurde mit der in Abschnitt 2.2 besprochenen Methode der Greens–Funktionen numerisch überprüft; diese Skalierung kann verwendet werden, um die Zweiphotonen–Ionisationsquerschnitte auch für schwerere Ionen abzuschätzen.

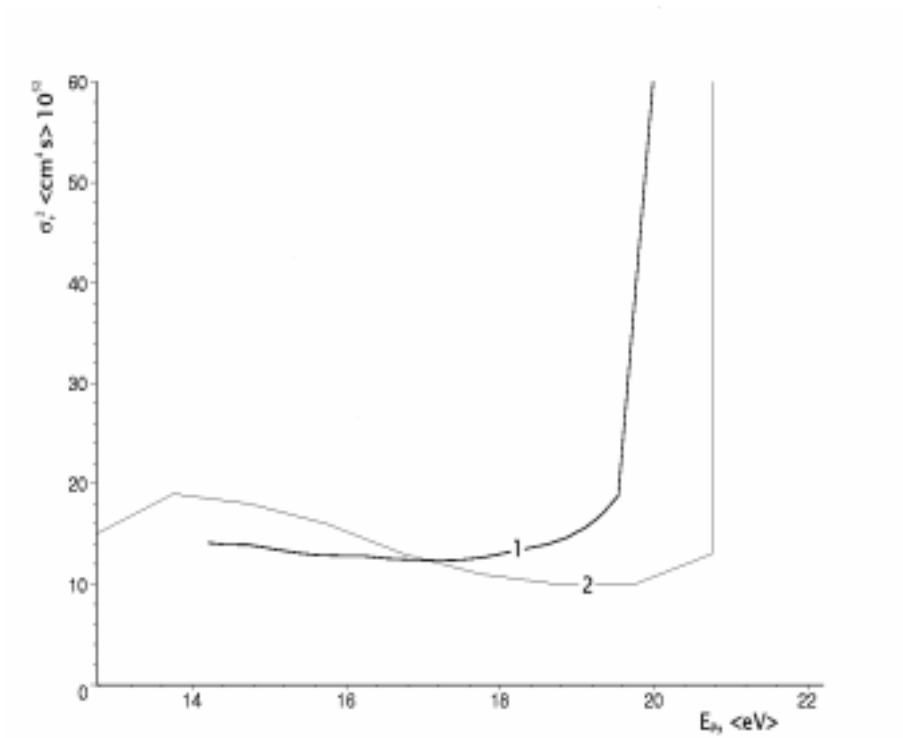
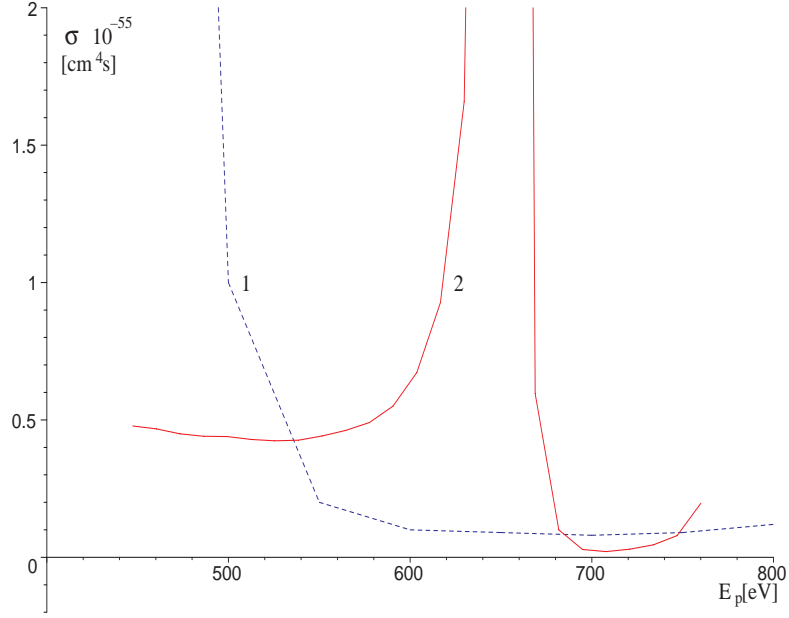
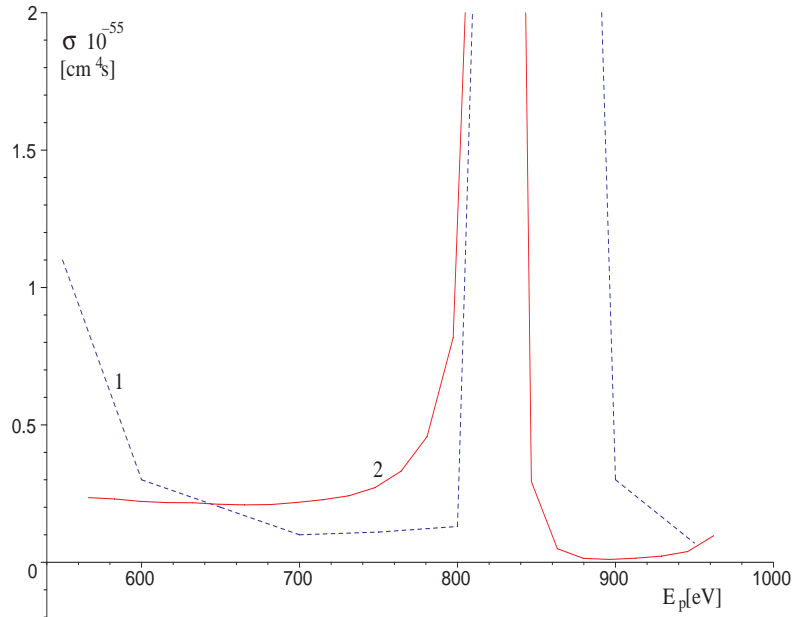


Abbildung 3: Vergleich der Zweiphotonen-Ionisationsquerschnitte für atomares Helium, **1)** Diese Arbeit mit $Z_{\text{eff}} = 1.44$; **2)** Saenz und Lambropoulos [13]. Die effektive Ladung zur Berechnung der Greens-Funktion wurde so gewählt, daß die beiden Maxima bei $E_p \approx 21.5$ eV übereinstimmen.



a) Abschätzung zur K -Schalen Ionisation für neutrales Neon mit effektiver Kernladung $Z_{\text{eff}} = 7.99$.



b) Abschätzung zur K -Schalen Ionisation für Be-ähnliches Neon mit effektiver Kernladung $Z_{\text{eff}} = 8.99$.

Abbildung 4: Vergleich der K -Schalen Ionisationsquerschnitte mit Daten aus der Literatur: **1)** Novikov und Hopersky [20]; **2)** diese Arbeit.

7 Fallbeispiel: Zweiphotonen–Ionisation der K–Schale bei mittelschweren Elementen

Die folgenden Abschätzungen beruhen auf einer Reihe von Näherungen, die wir hier nochmals kurz zusammenfassen wollen:

- Verwendung eines nichtrelativistischen Ansatzes zu den Wellen– und Greens–Funktionen, da auch bei mittelschweren Atomen die ($1s$ –) Bindungsenergien noch immer (sehr) klein sind gegenüber der Elektronenrestenergie mc^2 .
- Annahme eines (relativ) schwachen Photonenfeldes, das eine störungstheoretische Beschreibung in Dipolnäherung erlaubt.
- Verwendung einer effektive Kernladungen Z_{eff} , die anhand der K–Schalen Bindungsenergien der neutralen Atome abgeschätzt wird.

Mit Hilfe der obigen Skalierung der Wirkungsquerschnitte als Funktion der Kernladung (23) können die Querschnitte σ_2^L für beliebige Ladungen Z_{eff} leicht abgeschätzt werden. Wir nutzen diese Skalierungen, um die Querschnitte für Wasserstoff auf mittlere Kernladungen zu übertragen. Als Photonenlinien wurden dabei die $K_{\alpha,\beta}$ Linien der Elemente Kalium . . . Zink ($Z = 19 \dots 30$) verwendet, die dem Handbuch von Zschornack [11] entnommen wurden. Mit Hilfe der K–Schalen Bindungsenergien dieser Elemente wurden ferner auch die effektiven Ladungen

$$Z = \sqrt{2E_{\text{KBind}}}.$$

Diese effektiven Ladungen sowie die Ergebnisse unserer Rechnungen sind in die Tabelle 2 zusammengestellt; Teile dieser Tabelle sind zudem auch in den Abb. 5 und 6 dargestellt. Dieser Tabelle zeigen, daß bei mittleren Z die Wirkungsquerschnitte im nichtresonanten Bereich jeweils zwischen $5 \cdot 10^{-59} \dots 10^{-57} \text{ cm}^4\text{s}$ liegen.

Obwohl die Wirkungsquerschnitt bei Vergrößerung der effektiven Ladung Z_{eff} offensichtlich kleiner werden, sind sie im nichtresonanten Gebiet (und relativ nahe der Schwellen) nur schwach von den Photonenfrequenzen abhängig. Weit oberhalb der Schwellen fallen die Querschnitte wie erwartet deutlich ab.

8 Ergebnisse und Schlußfolgerungen

Unsere Berechnungen zur Zweiphotonen–Ionisation im Röntgenbereich liefern eine erste Abschätzung zu den Ionisationsquerschnitten bzw. Ionisationsraten, die sich einfach ineinander umrechnen lassen. Die größte Unsicherheit bei diesen Berechnungen entstammt dabei aus der Verwendung eines *effektiven Einteilchen–Bildes*, bei denen die neutralen Targetatome mit Hilfe wasserstoff–ähnlicher Wellenfunktionen zur einer geeignet gewählten effektiven Kernladung beschrieben werden. Ferner wurde konsequenterweise durchweg die Dipolnäherung verwendet, die im weichen und mittleren Röntgenbereich allgemein noch sehr gut erfüllt ist ($Z \ll 1/\alpha$; Ref. [18]).

Für den mittleren Z –Bereich ($Z=22, \dots, 34$) läßt unsere Abschätzung für die K–Schalen Ionisationsquerschnitte Werte im Bereich von

$$\sigma_2^L = 3 \cdot 10^{-59} \dots 10^{-57} \text{ cm}^4\text{s}$$

bzw.

$$\sigma_2^L/I = 6 \cdot 10^{-44} \dots 2 \cdot 10^{-42} \text{ cm}^4\text{W}^{-1}$$

erwarten. Diese Querschnitte sind deutlich kleine als bei einer entsprechenden Ionisation von Elektronen aus äußeren Schalen. Sie nehmen zudem weiter ab, wenn die (effektive) Kernladung (hin zu schwereren Atomen) größer wird. — Wir hoffen dennoch, das diese (relativ kleinen) Querschnitte ausreichen, um eine Zweiphotonen–Ionisation auch im Röntgenbereich bald nachweisen zu können. (Viel Erfolg !)

Tabelle 2: Abhängigkeit der (nichtresonanten) Zweiphotonen-Ionisationsquerschnitte $\sigma_2^L(Z, E_p)$ [in $\text{cm}^4 \cdot \text{s}$] als Funktion der effektiven Ladung und der Photonenenergie. Die **fettgedruckten** Querschnitte betreffen eine nichtresonante Ionisation in der Nähe der Ionisationsschwelle

Energie der Photonen, E_p , (eV)	Atome								
	Mn, $Z_{\text{eff}} = 21.9$ $E_B = 6\,539.0$	Fe, $Z_{\text{eff}} = 22.9$ $E_B = 7\,114.0$	Co, $Z_{\text{eff}} = 23.8$ $E_B = 7\,709.0$	Ni, $Z_{\text{eff}} = 24.8$ $E_B = 8\,333.0$	Cu, $Z_{\text{eff}} = 25.7$ $E_B = 8\,979.0$	Zn, $Z_{\text{eff}} = 26.6$ $E_B = 9\,659.0$	Ga, $Z_{\text{eff}} = 27.6$ $E_B = 10\,367.0$	Ge, $Z_{\text{eff}} = 28.6$ $E_B = 11\,104.0$	As, $Z_{\text{eff}} = 29.5$ $E_B = 11\,867.0$
$K_{\alpha 1}(K)$ 3313.8	1.13(-58)	-	-	-	-	-	-	-	-
$K_{\beta 1}(K)$ 3589.6	1.05(-58)	8.73(-59)	-	-	-	-	-	-	-
$K_{\alpha 1}(Ca)$ 3691.7	1.04(-58)	8.61(-59)	-	-	-	-	-	-	-
$K_{\beta 1}(Ca)$ 4012.7	1.00(-58)	7.94(-59)	6.83(-59)	-	-	-	-	-	-
$K_{\alpha 1}(Sc)$ 4090.6	1.02(-58)	7.92(-59)	6.68(-59)	-	-	-	-	-	-
$K_{\beta 1}(Sc)$ 4460.5	1.35(-58)	7.75(-59)	6.24(-59)	5.18(-59)	-	-	-	-	-
$K_{\alpha 1}(Ti)$ 4510.8	1.50(-58)	7.89(-59)	6.17(-59)	5.09(-59)	4.38(-59)	-	-	-	-
$K_{\beta 1}(Ti)$ 4931.8	2.90(-57)	1.14(-58)	6.44(-59)	4.80(-59)	4.03(-59)	3.51(-59)	-	-	-
$K_{\alpha 1}(V)$ 4952.2	1.09(-57)	1.20(-58)	6.50(-59)	4.79(-59)	4.01(-59)	3.51(-59)	-	-	-
$K_{\alpha 1}(Cr)$ 5414.7	6.97(-60)	8.38(-58)	1.11(-58)	5.13(-59)	3.84(-59)	3.23(-59)	2.81(-59)	-	-
$K_{\beta 1}(V)$ 5427.3	7.36(-60)	5.47(-58)	1.15(-58)	5.15(-59)	3.83(-59)	3.23(-59)	2.81(-59)	-	-
$K_{\alpha 1}(Mn)$ 5898.8	4.66(-60)	4.89(-60)	1.73(-58)	9.12(-59)	4.26(-59)	3.11(-59)	2.58(-59)	2.22(-59)	-
$K_{\beta 1}(Cr)$ 5946.7	3.55(-60)	5.91(-60)	6.83(-59)	1.06(-58)	4.36(-59)	3.12(-59)	2.58(-59)	2.19(-59)	1.91(-59)
$K_{\alpha 1}(Fe)$ 6403.8	2.40(-55)	1.74(-59)	4.37(-60)	1.39(-58)	9.03(-59)	3.61(-59)	2.50(-59)	2.09(-59)	1.78(-59)
$K_{\beta 1}(Mn)$ 6490.5	7.39(-56)	2.56(-60)	6.01(-60)	3.19(-59)	1.30(-58)	3.83(-59)	2.53(-59)	2.05(-59)	1.76(-59)
$K_{\alpha 1}(Co)$ 6930.3	-	2.81(-56)	8.14(-60)	3.16(-60)	4.56(-59)	9.54(-59)	2.95(-59)	2.03(-59)	1.69(-59)
$K_{\beta 1}(Fe)$ 7058.0	-	4.16(-57)	2.89(-60)	4.88(-60)	8.68(-60)	2.16(-58)	3.28(-59)	2.09(-59)	1.68(-59)
$K_{\alpha 1}(Ni)$ 7478.2	-	-	4.42(-57)	5.16(-59)	2.85(-60)	1.82(-59)	8.21(-59)	2.44(-59)	1.71(-59)
$K_{\beta 1}(Co)$ 7649.4	-	-	2.09(-56)	1.99(-60)	5.03(-60)	3.05(-60)	2.99(-58)	2.85(-59)	1.79(-59)
$K_{\alpha 1}(Cu)$ 8047.8	-	-	-	2.07(-57)	1.78(-59)	2.58(-60)	1.51(-59)	7.16(-59)	2.17(-59)
$K_{\beta 1}(Ni)$ 8264.7	-	-	-	1.30(-52)	2.50(-60)	5.45(-60)	1.98(-60)	5.52(-58)	2.71(-59)
$K_{\alpha 1}(Zn)$ 8638.9	-	-	-	-	2.39(-58)	7.44(-60)	1.93(-60)	1.26(-59)	7.84(-59)

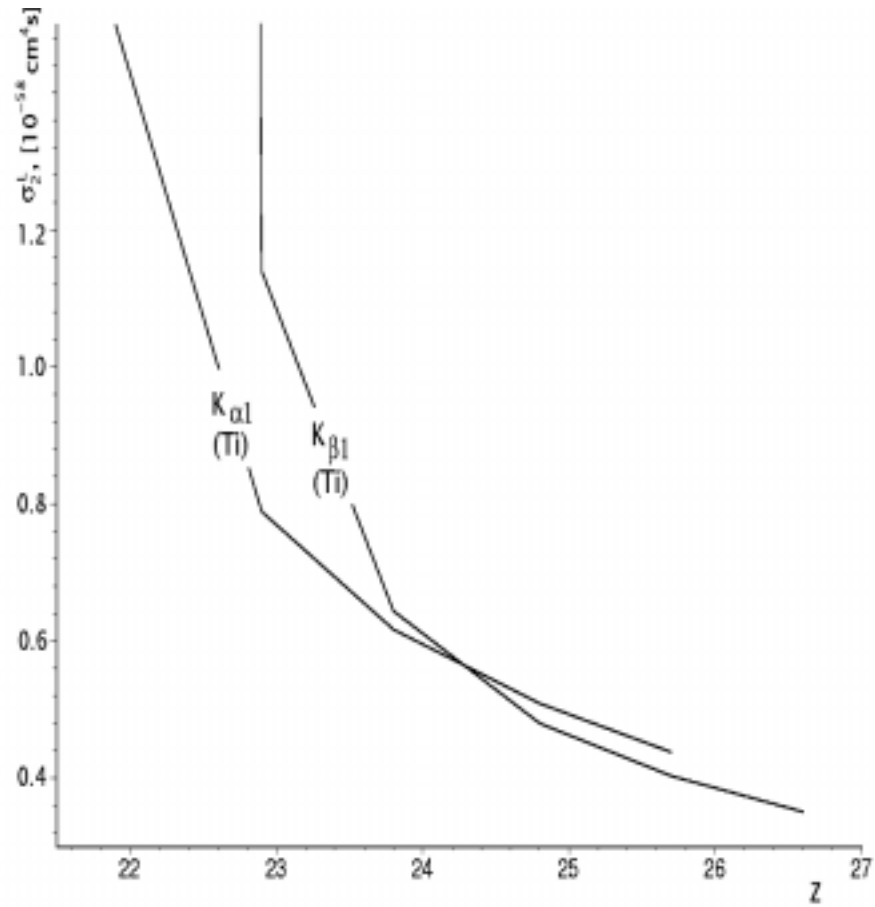
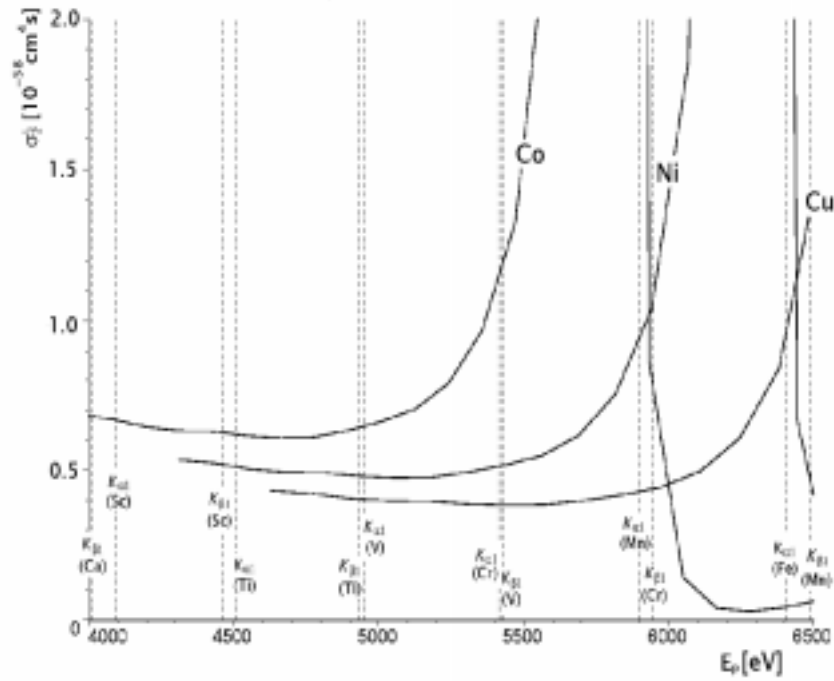
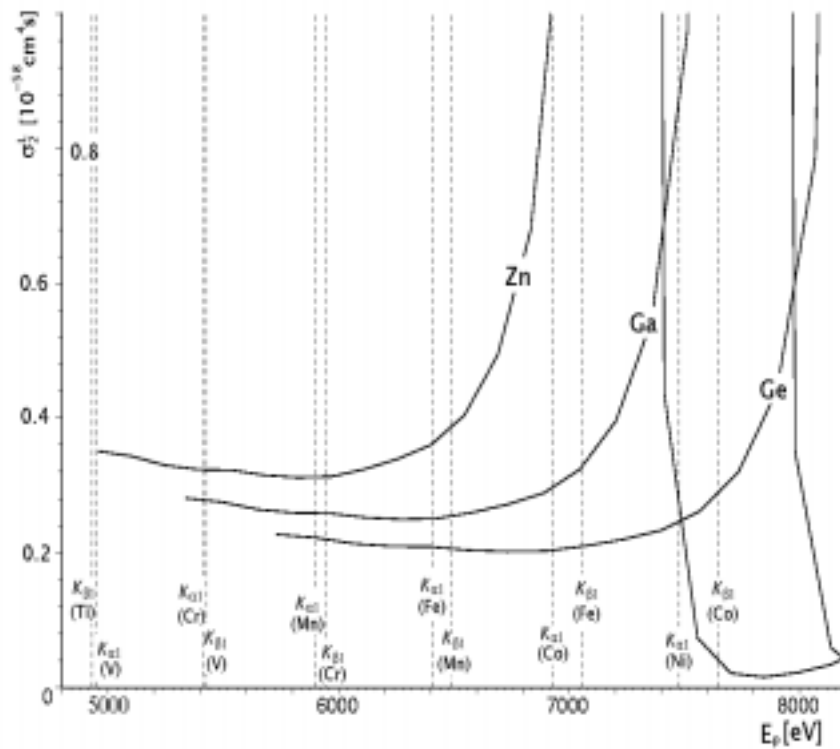


Abbildung 5: Abhängigkeit des Wirkungsquerschnittes $\sigma_2^L(Z, E_p)$ als Funktion der effektiven Ladung Z_{eff} . Wirkungsquerschnitte sind für die beiden $K_{\alpha,\beta}$ Linien von Titan dargestellt.



a) Für die Atome Co, Ni, Cu.



b) Für die Atome Zn, Ga, Ge.

Abbildung 6: Abhängigkeit des Wirkungsquerschnittes $\sigma_2^I(Z; E_p)$ von der Photonenenergie E_p für verschiedene Ladungen. In diesem Bild wurden auch einige der bekannten Röntgenlinien von Kalzium bis Cobalt eingezeichnet.

Literatur

- [1] E. J. McGuire, Phys. Rev. A **23** (1981) 186.
- [2] A L'Huillier und G. Wendin, J. Phys. B **20** (1987) L37.
- [3] N. L. Manakov, M. A. Preobragensky and L. P. Rapoport, *Proceedings of the Eleventh International Conference on Phenomena in Ionized Gases*, Prague, 1974.
- [4] P. Morse and H. Feshbach, *Methods of theoretical physics*, Bd. 1 (McGraw-Hill, Inc., New York, 1953) S. 821.
- [5] A. Maquet, V. Veniard, T. A. Marian, J. Phys. B **31** (1998) 3743.
- [6] H. Bebb and A. Gold, Phys. Rev. **143** (1966) 1.
- [7] G. Laplanche, et. al., J. Phys. B **9** (1976) 1263.
- [8] Y. Gontier und M. Trachin, Phys. Rev. A **4** (1971) 1896.
- [9] L. B. Madsen und P. Lambropoulos, Phys. Rev. **A59** (1999) 4574.
- [10] M. Abramowitz and I. A. Stegun, Eds., *Handbook of Mathematical Functions* (Dover, New York 1965).
- [11] G. Zschornack, *Atomdaten für die Röntgenspektroanalyse* (Verlag für Grundstoffindustrie, Leipzig 1989).
- [12] L. B. Madsen, L. A. A. Nikolopoulos und P. Lambropoulos, Eur. Phys. J. D **10** (2000) 67.
- [13] A. Saenz und P. Lambropoulos, J. Phys. B **32** (1999) 5629.
- [14] L. A. A. Nikolopoulos und P. Lambropoulos, J. Phys. B **34** (2001) 545.
- [15] Y. Gontier und M. Trachin, Phys. Rev. **172** (1968) 83.
- [16] F. T. Chan und C. L. Tang, Phys. Rev. **185** (1966) 42.
- [17] S. Klarsfeld, Nuovo Cimento Letters **1** (1969) 682; **2** 548.
- [18] J. J. Sakurai, *Modern Quantum Mechanics*, (Addison-Wesley Publ., New York, 1985).
- [19] W. Zernik, Phys. Rev. **135** (1964) 51.
- [20] S. A. Novikov, A. N. Hopersky, Two-photon excitation/ionization of 1s-shell of highly charged positive atomic ions (unpublished).