

С. С. ЛИПОВЕЦКИЙ, А. В. ПАВЛИЧЕНКОВ, А. Н. ПОЛЮДОВ,  
В. С. СЕНАШЕНКО

## ВОЗБУЖДЕНИЕ АВТОИОНИЗАЦИОННЫХ $1P^{(-)}$ -СОСТОЯНИЙ АТОМА ГЕЛИЯ БЫСТРЫМИ ЭЛЕКТРОНАМИ

Детально исследуется чувствительность обобщенных сил осциллятора, дифференциальных и полных сечений возбуждения электронами автоионизационных  $1P^{(-)}$ -состояний гелия к виду атомных волновых функций. Особое внимание уделяется изучению эффектов корреляций между электронами в основном состоянии и смешивания конфигураций в возбужденных состояниях. Все расчеты неупругого рассеяния электронов выполнены в борновском приближении.

Столкновения быстрых электронов с атомами гелия, в результате которых изменяется состояние двух атомных электронов, широко исследуются теоретически и экспериментально. Наиболее простыми для теоретического изучения являются автоионизационные  $1P^{(-)}$ -состояния. Впервые полные и дифференциальные сечения возбуждения этих состояний были вычислены Месси и Муром [1]. Известно, что одночастичное приближение для волновых функций [2], использованных в [1], очень грубо отражает структуру автоионизационных состояний. Несмотря на это, до последнего времени в литературе [3] используются данные Месси и Мура относящиеся не только к низшему, но и к более высоким  $1P^{(-)}$ -состояниям.

В настоящее время в связи с расширением программы экспериментального исследования автоионизационных состояний гелия [4, 5] требуется более глубокое теоретическое изучение их свойств. Так, в работе [6] были единым образом рассмотрены основные характеристики низших автоионизационных  $1P^{(-)}$ -состояний гелия, относящиеся как к первой стадии процесса — их возбуждению электронами, так и ко второй — распаду. В настоящей работе детально исследуется чувствительность обобщенных сил осцилляторов (в широкой области значений передаваемого импульса), а следовательно, дифференциальных и полных сечений возбуждения автоионизационных состояний электронами к виду используемых волновых функций атома гелия. Подобное рассмотрение одноэлектронных переходов в гелие уже проводилось (см., например, [7—9]).

Все расчеты выполнены нами в борновском приближении. Поправка второго порядка теории возмущений в данном случае мала и быстро убывает с увеличением энергии падающего электрона [10].

## Общие формулы и обозначения

Обобщенная сила осциллятора вычисляется по формуле

$$f_{on}(Q) = \frac{2E_{on}}{Q^2} |\varepsilon_{on}(\vec{Q})|^2, \quad (1)$$

где  $E_{on}$  — энергия возбуждения автоионизационного состояния,  $\vec{Q}$  — передаваемый импульс. В пределе  $Q \rightarrow 0$   $f_{on}(Q)$  совпадает с оптической силой осциллятора

$$(f_{on})_{opt} = \lim_{Q \rightarrow 0} f_{on}(Q). \quad (2)$$

Матричный элемент  $\varepsilon_{on}(\vec{Q})$  имеет вид

$$\varepsilon_{on}(\vec{Q}) = \int \psi_n^*(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \sum_{i=1}^2 e^{i\vec{Q}\vec{r}_i} \psi_0(\vec{r}_1, \vec{r}_2) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2, \quad (3)$$

где  $\psi_0(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$  и  $\psi_n(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$  — волновые функции основного и автоионизационного состояний атома гелия.

Дифференциальное сечение возбуждения атома равно

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{2a_0^2}{E_{on}} \frac{f_{on}(Q)}{Q^2} \left[ 1 - \frac{E_{on}}{E} \right]^{1/2}, \quad (4)$$

где  $E$  — энергия налетающего электрона.

Полное сечение возбуждения атома гелия определяется по формуле

$$\sigma(E) = \frac{4\pi a_0^2}{EE_{on}} \int_{Q_{min}}^{Q_{max}} f_{on}(Q) \frac{dQ}{Q}, \quad (5)$$

где  $Q_{min}$  и  $Q_{max}$  определяются из законов сохранения.

**Волновые функции.** В проведенных расчетах были использованы четыре приближенные функции основного состояния.

1. Простейшая вариационная функция основного состояния атома гелия [11]:

$$\psi_0(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \varphi_0(\alpha, \vec{r}_1) \varphi_0(\alpha, \vec{r}_2), \quad (6)$$

где

$$\varphi_0(\alpha, \vec{r}) = \frac{\alpha^{3/2}}{\pi^{1/2}} e^{-\alpha r}, \quad \alpha = 1,6875.$$

2. Аналитическая аппроксимация функции Хартри—Фока [12]

$$\psi_0(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \chi(\mu, \vec{r}_1) \chi(\mu, \vec{r}_2), \quad (7)$$

где  $\chi(\mu, \vec{r}) = N [e^{-\mu r} + c e^{-2\mu r}]$ ,  $N = 0,837$ ,  $\mu = 1,456$ ,  $c = 0,6$ .

3.  $\psi_0(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = N [\varphi_0(\beta, \vec{r}_1) \varphi_0(\gamma, \vec{r}_2) + \varphi_0(\gamma, \vec{r}_1) \varphi_0(\beta, \vec{r}_2)]$ , (8)

где  $\beta = 2,183$ ,  $\gamma = 1,189$ ,  $N = 0,574$ .

4.  $\psi_0(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \sum_{a,b,c} \chi_{abc} r_1^a r_2^b r_{12}^c e^{-\alpha(r_1 + r_2)}$ . (9)

Две последние функции построены с учетом корреляций между электронами в атоме [13, 14]: функция (8) учитывает радиальные, (9) — радиальные и угловые корреляции.

Волновые функции автоионизационных состояний получены диагонализационным методом [15] с учетом смешивания конфигураций

$$\psi_n(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \sum_{n=1}^N C_n \chi_n(\vec{r}_1, \vec{r}_2), \quad (10)$$

где  $\chi_n(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$  — симметризованное произведение водородоподобных одноэлектронных волновых функций в заряде  $Z=2$ . Размерность базиса в (10) полагалась равной 1; 4; 7; 10. При этом последовательно включались следующие одночастичные конфигурации:  $2s2p$ ;  $2s3p$ ,  $2p3s$ ,  $2p3d$ ;  $2s4p$ ,  $2p4s$ ,  $2p4d$ ;  $2s5p$ ,  $2p5s$ ,  $2p5d$ . Кроме того, для нижайшего автоионизационного состояния ( $2s2p$ ) использовалась простейшая вариационная функция с эффективными зарядами  $Z_{2s}=2$ ,  $Z_{2p}=1,58$ .

### Результаты расчетов и обсуждение

Рассмотрим обобщенные силы, дифференциальные и полные сечения возбуждения трех низших автоионизационных состояний гелия с энергиями возбуждения [15] 60, 35; 62, 79; и 63, 71 эв. В общепринятой классификации [16] это состояния:  $2s2p$ ,  $(23)^-$ ,  $(23)^+$ . Будем нумеровать их в порядке возрастания энергии 1, 2, 3.

**Оптические силы осцилляторов.** В табл. 1 приведены значения оптических сил осцилляторов (2) переходов из основного состояния гелия на три низших автоионизационных  $1P^{(-)}$  уровня, вычисленные с различными волновыми функциями. Полученные значения сравниваются с расчетными [17, 18] и экспериментальными данными [19].

Из таблицы видно, что использование волновых функций вида (6) и (7), полученных в одноэлектронном приближении, дает сильно завышенные значения  $(f_{on})_{opt}$  уровней 1 и 3. Для получения  $(f_{on})_{opt}$  этих уровней, близких к экспериментальным значениям, достаточно учесть в волновой функции основного состояния радиальные корреляции. Уточнение волновой функции основного состояния введением угловых корреляций приводит к незначительным изменениям. Оптическая сила осциллятора второго уровня более чувствительна к корреляциям в основном состоянии. Учет радиальных корреляций в этом случае оказывается недостаточным. Однако  $(f_{on})_{opt}$  для этого уровня, полученная с функцией основного состояния (9), учитывающей наиболее полную корреляцию между электронами, близка к результатам расчетов с одночастичными функциями (6) и (7) основного состояния.

Для исследования чувствительности оптических сил осцилляторов к  $\psi_n(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$  расчеты были выполнены в базисах  $10 \times 10$ ,  $7 \times 7$ ,  $4 \times 4$ . Полученные значения для низших уровней оказываются достаточно устойчивыми к размерности базиса. Отметим, что одночастичная функция  $\psi_n(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$  с  $Z_1=Z_2=2$  приводит к неудовлетворительным результатам даже для первого уровня, тогда как введение эффективных зарядов заметно улучшает оптическую силу осциллятора.

Как видим, расчет  $(f_{on})_{opt}$  переходов в автоионизационные состояния требует учета корреляций между электронами как в основном, так и в возбужденном состоянии, в отличие от одноэлектронных переходов, для которых силы осциллятора получаются близкими к эксперименту с волновыми функциями одночастичного приближения.

**Обобщенные силы осцилляторов.** Результаты расчетов обобщенных сил осциллятора в зависимости от передаваемого импульса для трех низших автоионизационных  $1P^{(-)}$ -состояний гелия представлены на рис. 1, 2 и 3. По сравнению с  $(f_{on})_{opt}$  обобщенные силы в зависимости от передаваемого импульса являются более строгим критерием пригодности приближенных волновых функций, используемых в расчетах. Из рис. 1 и 3 видно, что обобщенные силы (+) состояний плавно уменьшаются с увеличением  $Q$  для всех используемых в расчетах функций основного состояния. Обобщенные силы этих уровней, вычисленные с функциями (8) и (9), близки во всей области значений передаваемого импульса, а функция Хартри — Фока дает сильно завышенные значения  $f_{on}(Q)$  в области  $Q^2 < 1$  и более быстрое убывание обобщенных сил с увеличением передаваемого импульса.

Таблица 1

Оптические силы осцилляторов автоионизационных  $1P^{(-)}$ -состояний гелия

| Волновые функции     |  | 2s 2p                   | (23)–                   | (23)+                   |
|----------------------|--|-------------------------|-------------------------|-------------------------|
| $\Psi_0$             | $\Psi_n$                               | $f_{01}(0) \times 10^2$ | $f_{02}(0) \times 10^4$ | $f_{03}(0) \times 10^3$ |
| (8)                  | 7×7                                    | 0,688                   | 3,68                    | 1,25                    |
|                      | 4×4                                    | 0,668                   | —                       | —                       |
|                      | 1×1                                    | 1,28                    | —                       | —                       |
|                      | ( $Z_{2s} = Z_{2p} = 2$ )<br>1×1       | 0,713                   | —                       | —                       |
| (9)                  | ( $Z_{2s} = 2, Z_{2p} = 1,58$ )<br>7×7 | 0,731                   | 0,355                   | 1,19                    |
|                      | 4×4                                    | 0,704                   | —                       | —                       |
| (6)                  |  | 1,06                    | 0,210                   | 1,68                    |
| (7)                  | 10×10                                  | 3,03                    | 0,580                   | 4,15                    |
| (8)                  |  | 0,694                   | 3,60                    | 1,16                    |
| (9)                  |  | 0,742                   | 0,354                   | 1,10                    |
| Эксперимент [19]     |  | 0,53                    | —                       | 0,4                     |
| Вебс [17]            |  | 0,57                    | —                       | —                       |
| Берк, Мак-Викар [18] |  | 0,506                   | 0,206                   | 0,776                   |

В левой колонке указаны номера формул для функций основного состояния и размерности базисов для функций автоионизационных состояний.

Таблица 2

Обобщенные силы осцилляторов автоионизационных  $1P^{(-)}$ -состояний гелия

| Передаваемый импульс<br>$Q^2$ [а. е.] | 2s2p                | (23)–               | (23)+               |
|---------------------------------------|---------------------|---------------------|---------------------|
|                                       | $f_{01} \cdot 10^2$ | $f_{02} \cdot 10^4$ | $f_{03} \cdot 10^3$ |
| 0                                     | 0,7417              | 0,3544              | 1,0989              |
| 0,01                                  | 0,7368              | 0,3593              | 1,0939              |
| 0,1                                   | 0,6937              | 0,4012              | 1,0491              |
| 0,2                                   | 0,6500              | 0,4425              | 1,0009              |
| 0,4                                   | 0,5734              | 0,5085              | 0,9105              |
| 0,6                                   | 0,5090              | 0,5542              | 0,8284              |
| 0,8                                   | 0,4541              | 0,5826              | 0,7544              |
| 1,0                                   | 0,4070              | 0,5967              | 0,6878              |
| 1,2                                   | 0,3662              | 0,5996              | 0,6281              |
| 1,4                                   | 0,3307              | 0,5939              | 0,5745              |
| 1,6                                   | 0,2996              | 0,5815              | 0,5263              |
| 1,8                                   | 0,2722              | 0,5643              | 0,4829              |
| 2,0                                   | 0,2480              | 0,5438              | 0,4437              |
| 2,5                                   | 0,1983              | 0,4844              | 0,3615              |
| 3,0                                   | 0,1606              | 0,4222              | 0,2969              |
| 3,5                                   | 0,1313              | 0,3630              | 0,2457              |
| 4,0                                   | 0,1082              | 0,3096              | 0,2046              |
| 4,5                                   | 0,0899              | 0,2629              | 0,1714              |
| 5,0                                   | 0,0752              | 0,2228              | 0,1444              |
| 5,5                                   | 0,0633              | 0,1886              | 0,1222              |
| 6,0                                   | 0,0535              | 0,1598              | 0,1039              |
| 7,0                                   | 0,0388              | 0,1151              | 0,0761              |
| 8,0                                   | 0,0286              | 0,0837              | 0,0566              |
| 9,0                                   | 0,0214              | 0,0614              | 0,0426              |
| 10,0                                  | 0,0163              | 0,0456              | 0,0325              |

Зависимость обобщенной силы (23)– состояния от  $Q$  оказывается более сложной. Для этого уровня в области изменения  $1 \leq Q^2 \leq 3$  наблюдается плавный рост в  $f_{on}(Q)$ , вычисленной с функцией основного состояния (9). В обобщенных силах, полученных с функциями (6) и (7) при  $0,01 \leq Q^2 \leq 1$ , наблюдается глубокий минимум. Функция (8) дает плавную зависимость обобщенной силы от  $Q$ , но ее значения оказываются завышенными. Все это показывает, что переходы в (23)-состояние представляют большой интерес для теоретического изучения. Немонотонности такого типа для одноэлектронных переходов изучались ранее теоретически и экспериментально [20]. Появление их связывается с особенностями поведения одночастичных матричных элементов (3).

В случае состояний двухэлектронного возбуждения картина усложняется еще и тем, что оказываются важными корреляции между элект-

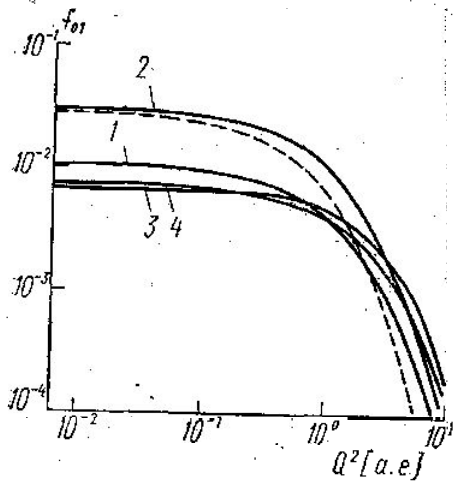


Рис. 1. Обобщенные силы осциллятора автоионизационного  $(2s\ 2p)^1P$  состояния атома гелия. Цифры на кривых — номера функций основного состояния согласно формулам (6—9). Пунктиром показана обобщенная сила осциллятора  $(1s^2)^1S \rightarrow (1s2p)^1P$ -перехода [7], уменьшенная в 10 раз

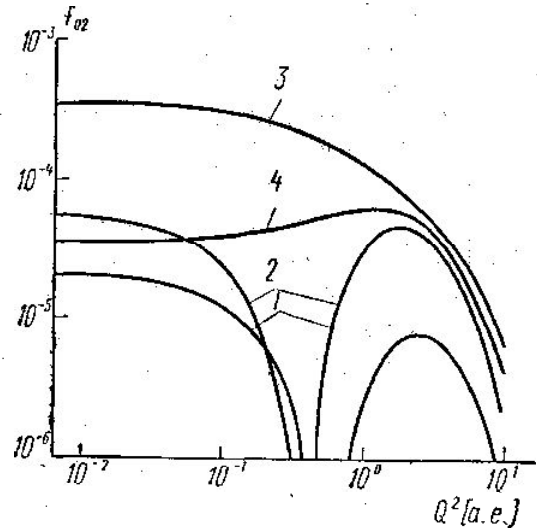


Рис. 2. Обобщенные силы осциллятора автоионизационного (23) + состояния атома гелия. Обозначения те же, что на рис. 1

ронами в основном и взаимодействие конфигураций в автоионизационном состоянии.

Вебс [17] провел расчет неупругого рассеяния электронов на гелие для состояния  $(2s2p)^1P^{(-)}$  и пришел к выводу, что функция Хартри — Фока основного состояния непригодна для таких расчетов. Наши вычисления подтверждают этот вывод и для более высоких  $^1P^{(-)}$  автоионизационных состояний гелия. Понимая это, результаты показывают, что для расчета обобщенных сил осцилляторов необходимо учитывать корреляции между электронами в волновых функциях основного и возбужденного состояний. На рис. 1 для сравнения (пунктиром) показана обобщенная сила  $(1s^2)^1S \rightarrow (1s2p)^1P$  одноэлектронного перехода [7]. Видно, что ее значения более чем на порядок превышают  $f_{on}(Q)$  перехода в состояние  $(2s2p)^1P^{(-)}$ , а скорость убывания с ростом  $Q$  оказывается больше.

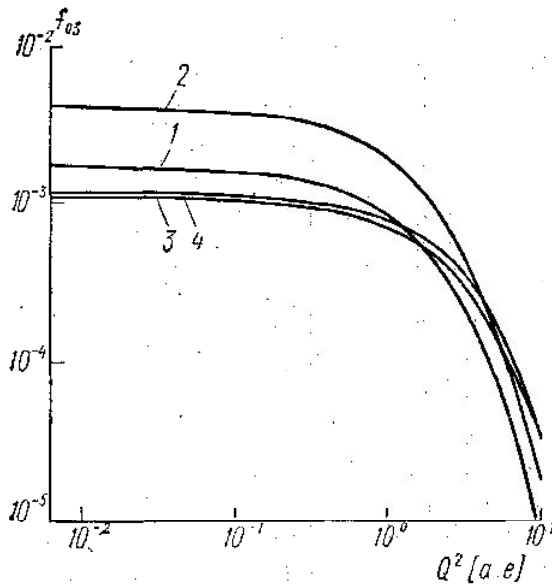


Рис. 3. Обобщенные силы осциллятора автоионизационного (23) + состояния атома гелия. Обозначения те же, что на рис. 1

Обобщенные силы осцилляторов автоионизационных  $^1P^{(-)}$  состояний являются основной структурной характеристикой ряда матричных элементов, которые могут быть использованы для различных задач. Поэтому наиболее точные

структурной характеристикой ряда матричных элементов, которые могут быть использованы для различных задач. Поэтому наиболее точные

значения  $f_{on}(Q)$  для трех низших  $^1P(-)$ -состояний, полученные в настоящей работе, приведены в табл. 2.

Для иллюстрации поведения дифференциальных сечений возбуждения в зависимости от угла рассеяния при различных энергиях падающего электрона приведены значения  $\frac{d\sigma}{d\Omega}$  (формула (4)) для автоионизационного  $(2s2p)^1P$ -состояния гелия, вычисленные с различными

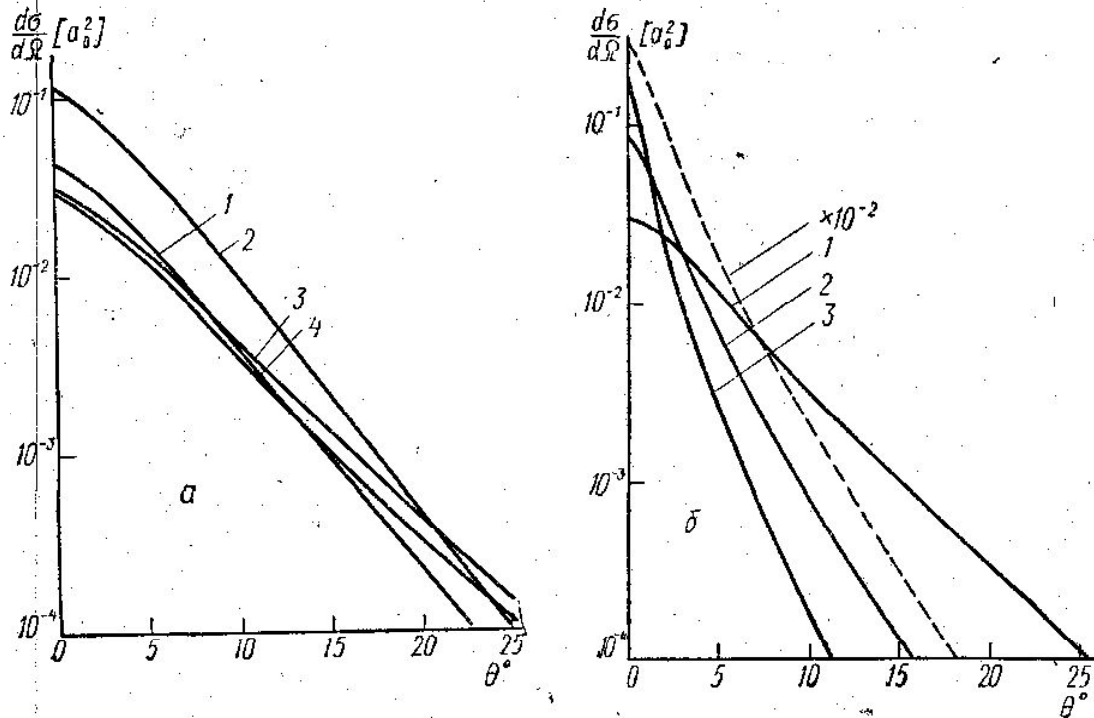


Рис. 4. Дифференциальные сечения возбуждения автоионизационного  $(2s2p)^1P$  состояния атома гелия. а —  $E=400$  эв (обозначения те же, что на рис. 1). б: 1 —  $E=400$  эв, 2 —  $E=1000$  эв, 3 —  $E=2000$  эв. Пунктиром показано дифференциальное сечение возбуждения  $(1s2p)^1P$  состояния [21] гелия, уменьшенное в 100 раз

функциями основного состояния при энергии падающего электрона 400 эв (рис. 4, а). На рис. 4, б для этого же уровня показаны дифференциальные сечения возбуждения при различных энергиях падающего электрона, вычисленные с функцией основного состояния (9); там же для сравнения показано (пунктиром) поведение  $\frac{d\sigma}{d\Omega}$  для одноэлектронного перехода в  $(1s2p)^1P$ -состояние [21], при  $E=400$  эв.

**Полные сечения.** Результаты расчетов полных сечений возбуждения автоионизационных  $^1P(-)$ -состояний в зависимости от энергии падающего электрона приведены на рис. 5. Для  $(2s2p)^1P$ -состояния показаны также результаты расчетов Мессе и Мура [1] и Вебса [17]. Мессе и Мур использовали вариационную волновую функцию основного состояния с двумя параметрами и простые однокомпонентные волновые функции автоионизационных состояний. Отметим, что достигнутое за последние годы понимание структуры автоионизационных состояний гелия показывает, что для описания автоионизационных состояний необходимо учитывать взаимодействие конфигураций. Поэтому волновые функции, используемые в работе [1], дают разумные результаты только для низшего состояния. Вебс рассмотрел возбуждение быстрыми электронами  $(2s2p)^1P$ -состояния. Наиболее точные результаты были полу-

чены с вариационной функцией основного состояния, учитывающей корреляции между электронами [22] и четырехкомпонентной функцией возбужденного состояния, полученной с учетом взаимодействия конфигураций. Наши результаты для низшего состояния близки к расчетам Вебса. Из рис. 5 видно, что уточнение волновых функций основного и возбужденного состояний для высоких энергии падающего электрона приводит к уменьшению полного сечения возбуждения.

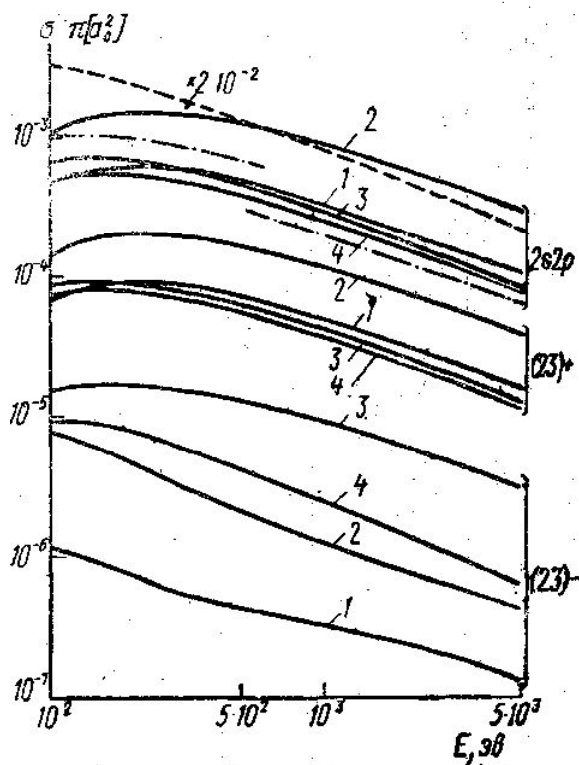


Рис. 5. Полные сечения возбуждения трех низших автоионизационных  $1P$ -состояний гелия. Обозначения те же, что на рис. 1. Пунктиром показано полное сечение возбуждения  $(1s2p)1P$ -состояния гелия, уменьшенное в 50 раз. Штрих-пунктирные кривые — результаты других расчетов (малые энергии по [1], большие — по [17])

Отличие наших результатов с функцией (8) от расчетов Месси и Мура связано с уточнением функций основного и автоионизационного состояний. На этом же рисунке для сравнения пунктиром показано поведение полного сечения возбуждения для одноэлектронного перехода в  $(1s2p)1P$ -состояние [7]. Видно, что сечение возбуждения низшего автоионизационного  $1P(-)$ -состояния меньше сечения возбуждения одноэлектронного перехода примерно в 50 раз и более медленно спадает с ростом энергии.

Результаты расчетов автоионизационных  $1P(-)$ -состояний (рис. 5)

ствительным к выбору функции основного состояния оказывается сечение возбуждения (—) уровня. Сечения возбуждения (+) уровней, полученные с различными функциями основного состояния, оказываются близкими по величине, за исключением сечений, полученных с функцией

Хартри — Фока. Как показывают проведенные расчеты, величина сечений возбуждения  $1P(-)$ -состояний устойчива к изменению размерности базиса, в котором были получены функции автоионизационных состояний.

Следует отметить некоторые особенности расчетов полных сечений. Использование функции основного состояния с двумя параметрами (8) показывает, что хорошее совпадение  $(f_{on})_{\text{опт}}$  с экспериментом, полученное для (+) уровней (см. табл. 1), не является достаточным условием близости полных сечений возбуждения к экспериментальным значениям, поскольку существенным является поведение  $f_{on}(Q)$  в широкой области значений передаваемого импульса даже при высоких энергиях падающего электрона.

Существующие эксперименты не позволяют произвести количественного сравнения расчетов величин полных сечений, а также относительных вероятностей возбуждения автоионизационных состояний гелия. Наши расчеты находятся в качественном согласии с имеющимися экспериментальными данными [23, 24] для автоионизационных (+) состояний гелия.

Авторы благодарны проф. В. В. Балашову за постоянное внимание к работе и полезные обсуждения.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Massey H. S., Mohr C. B. O. Proc. Camb. Phil. Soc., 31, 604, 1935.
2. Vinti J. P. Phys. Rev., 42, 632, 1932.
3. Becker P. M., Dahler J. S. Phys. Rev. Lett., 10, 491, 1963; Phys. Rev., 136, 73, 1964.
4. Suzuki H. et. al. J. Phys. Soc., Japan, 28, 534, 1970.
5. Oda N. et. al. Phys. Rev. Lett., 24, 42, 1970.
6. Балашов В. В., Липовецкий С. С. и др. «Оптика и спектроскопия» (в печати), 1971.
7. Kennedy D. J., Kingston A. E. J. Phys., B1, 204, 1968.
8. Kim Y. K., Inokuti M. Phys. Rev., 181, 205, 1969.
9. Ожур В. И., Братцев В. Ф. «Оптика и спектроскопия», 19, 490, 1965.
10. Виноградов А. В. «Труды ФИАН», 51, 44, 1970.
11. Hylleraas E. Z. Phys., 54, 347, 1929.
12. Green L. G. et. al. Phys. Rev., 93, 757, 1964.
13. Eckart C. J. Chem. Phys., 29, No. 1, 1958.
14. Stewart A. L., Webb T. G. Proc. Phys., Soc., 82, 532, 1963.
15. Балашов В. В., Гришанова С. И. и др. «Оптика и спектроскопия», 28, 859, 1970; Phys. Lett., 27A, 101, 1968.
16. Cooper J. W., Fano V., Prats F. Phys. Rev. Lett., 10, 518, 1963.
17. Wiebes G. Physica, 48, 407, 1970.
18. Burke P. G., McVicar D. Proc. Phys. Soc., 84, 749, 1969.
19. Madden D. P., Codling K. Phys. Rev. Lett., 10, 516, 1963.
20. Kim Y. K. et. al. Phys. Rev. Lett., 21, 1146, 1968.
21. Мотт Н., Месси Г. Теория атомных столкновений. М., «Мир», 1969, стр. 437.
22. Byron F. W., Jachain C. J. Phys. Rev. Lett., 16, 1139, 1966.
23. Silverman S. M., Lassetre E. N. J. Chem. Phys., 40, 1265, 1964.
24. Simpson J. A. et. al. Phys. Rev., 139A, 1039, 1965.

Поступила в редакцию  
25.9 1970 г.

НИИЯФ