

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

[1] Магдич Л. Н., Молчанов В. Я. Акустооптические устройства и их применение. М.: Сов. радио, 1978. [2] Парыгин В. Н., Чирков Л. Е. Квантовая электроника, 1975, 2, № 2, с. 318. [3] Maudan D. IEEE J. Quant. Electron., 6, N 1, p. 15. [4] Балакшиев В. И., Волошинов В. Б., Парыгин В. Н. Радиотехника и электроника, 1971, 13, № 11, с. 2226.

Поступила в редакцию
27.03.80

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3. ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ, 1982, Т. 23, № 1.

УДК 535.212+537.56

ЭНЕРГИИ ВОЗБУЖДЕНИЯ И ШИРИНЫ $^{1,3}P^{(-)}$ АВТОИОНИЗАЦИОННЫХ СОСТОЯНИЙ ДВУХЭЛЕКТРОННЫХ СИСТЕМ, СХОДЯЩИХСЯ К $n=3$ ПОРОГУ

А. Ваге (Сенегал), П. Б. Иванов, В. С. Сенашенко
(НИИЯФ)

Введение. Спектроскопические исследования атомных резонансов стали уже систематическими и охватывают большое число автоионизационных состояний (АС) атомов и ионов [1—3]. Особый интерес представляют АС, сходящиеся к порогу $n=3$ водородоподобного иона [2, 3]. Такие состояния распадаются не только на основное, но и возбужденные состояния остаточного иона. Возникает задача теоретического описания взаимодействия резонанса с несколькими непрерывными спектрами. Рассмотрение $(3s3p)^1P^{(-)}$ резонанса в гелии в диагонализационном приближении [4] показало, что энергия возбуждения и полная ширина автоионизационного уровня (АУ), взаимодействующего с несколькими непрерывными спектрами, получается практически с той же точностью, как и в одноканальном случае [5]. В настоящей работе приводятся более полные результаты диагонализационных расчетов энергий возбуждения и ширин $^{1}P^{(-)}$ и $^{3}P^{(-)}$ АС, сходящихся к $n=3$ порогу водородоподобного иона, выполненные для двухэлектронных систем с $Z \leq 6$.

Основные формулы. Представленные ниже количественные результаты получены путем диагонализации гамильтониана двухэлектронной системы

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \frac{1}{r_{12}} = -\frac{1}{2} \nabla_1^2 - \frac{1}{2} \nabla_2^2 - \frac{Z}{r_1} - \frac{Z}{r_2} + \frac{1}{r_{12}} \quad (1)$$

на базе собственных функций $\Phi_\mu(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ оператора \hat{H}_0 . Функции $\Phi_\mu(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ имеют вид симметричных для синглетных и антисимметричных для триплетных состояний линейных комбинаций кулоновских функций в поле заряда Z . Полная волновая функция АС представляется в виде

$$\Psi_\lambda = \sum_{\mu} C_{\mu}^{\lambda} \Phi_{\mu}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2), \quad (2)$$

где коэффициенты C_{μ}^{λ} и определяют волновые функции АС.

Ширины резонансов вычислялись по известной формуле

$$\Gamma_{\lambda} = \sum_{\alpha} \Gamma_{\alpha}^{\lambda} = 2\pi \sum_{\alpha} \left| \langle \Phi_{E_{\alpha}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \left| \frac{1}{r_{12}} \right| \Psi_{\lambda}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \right|^2, \quad (3)$$

где $\Phi_{E_\alpha}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ — волновая функция открытого канала, когда один из электронов находится в основном или возбужденном состоянии иона-остатка, а другой — в непрерывном спектре с энергией E_α . Для описания состояний непрерывного спектра использовалась кулоновская функция с зарядом $(Z-1)$. Парциальные ширины Γ_α^λ соответствуют распаду АС с образованием остаточного иона в различных возбужденных состояниях. Так, в случае распада автоионизационных $1,3P^{(-)}$ состояний $\Gamma_\alpha^\lambda \equiv \Gamma_1$ при $\alpha = 1skp$ определяет вероятность образования ионов в основном состоянии, тогда как $\Gamma_\alpha^\lambda = \Gamma_2$ при $\alpha = 2skp, 2pks$ и $2pkd$ — суммарную вероятность образования водородоподобных ионов в возбужденном состоянии с главным квантовым числом $n=2$. Отношение парциальных ширин $\frac{\Gamma_1^\lambda}{\Gamma_1^\lambda + \Gamma_2^\lambda} = \omega_\lambda$ соответствует выходу остаточных ионов в основном состоянии.

Как показано в работе [6], существенное влияние на ширины узких автоионизационных резонансов в атоме гелия, взаимодействующих с несколькими непрерывными спектрами, оказывает связь различных непрерывных спектров между собой. В этом случае волновая функция $\Phi_{E_\alpha}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ определяется иначе. Если связь открытых каналов учесть в первом порядке теории возмущений, то волновую функцию $\Phi_{E_\alpha}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ в формуле (3) необходимо заменить волновой функцией $\tilde{\Phi}_{E_\alpha}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$, которая определяется следующим образом:

$$\tilde{\Phi}_{E_\alpha}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \Phi_{E_\alpha}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) + \sum_{\beta=1}^N \int_0^\infty \frac{V_{\alpha\beta}(E_\alpha, E')}{E_\beta - E'} \Phi_{E_\beta}(E') dE', \quad (4)$$

где $V_{\alpha\beta}$ — матричный элемент оператора взаимодействия электронов, а интегральная добавка к волновой функции $\Phi_{E_\alpha}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ и включает связь открытых каналов между собой. Подставляя волновую функцию (4) в формулу для ширины (3), видим, что возникающая добавка к ширине имеет порядок малости $1/Z$. Таким образом, с ростом заряда иона Z влияние взаимодействия непрерывных спектров между собой уменьшается, а ширины АС, вычисленные по формуле (3), становятся точнее.

Результаты расчетов и их обсуждение. Расчеты энергий возбуждения и ширин $1,3P^{(-)}$ АС выполнены на базе состояний $\Phi_\mu(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$, включающем 12 конфигураций: $3s3p, 3p3d, 3s4p, 3p4d, 3p4s, 3d4p, 3d4f, 3s5p, 3p5s, 3d5f$ и $3d5p$. Для атомов гелия были проведены также расчеты с учетом состояний внешнего электрона с главным квантовым числом $n=6$ и 7. Результаты расчетов представлены в табл. 1—3. Наиболее полное сравнение полученных результатов с расчетами других авторов и экспериментальными данными можно провести для атомов гелия. Как видно из табл. 1, полученные нами энергии возбуждения низших АС, сходящихся к порогу $n=3$, хорошо согласуются с экспериментом [2, 3] и другими расчетами [7—13]. Из структуры волновых функций видно, что, как и в случае АС, сходящихся к порогу $n=2$ [4], взаимодействие между электронами приводит к сильному смешиванию конфигураций, которое характерно для почти вырожденных состояний одночастичного приближения. При этом АС уже не могут быть классифицированы на основе одноконфигурационного приближения. Ширина низшего $1P^{(-)}$ АУ атома гелия близка к экспериментальной величине.

Энергия возбуждения и ширина $1P^{(-)}$ и $3P^{(-)}$ автоионизационных состояний атома гелия

Термы	Номер состояния и (\pm) классификация	Энергия возбуждения E (эВ) и ширина Γ (эВ)										
		настоящий расчет		расчеты других авторов							эксперимент	
		размерность матрицы энергии		[7]	[12]	[13]	[8]	[11]	[9]	[10]	[2]	[3]
		12×12	22×22									
$1P^{(-)}$	1(+)	69,91 0,149	69,88 0,150	69,88 —	69,90 0,151	69,87 0,191	69,87 —	69,92 0,204	69,85 —	69,69 —	69,92±0,03 0,132±0,014	69,90±0,04
	2(-)	71,22 0,00059	71,21 0,00055	71,23 —	71,23 —	— —	71,23 —	— —	— —	— —	— —	— —
	3(-)	71,46 0,067	71,44 0,068	71,32 —	71,46 0,068	71,31 0,038	71,32 —	— —	— —	71,31 —	— —	— —
$3P^{(-)}$	1(+)	69,44 0,100	69,44 0,098	69,44 —	69,46 0,098	69,48 0,08	69,46 —	69,49 0,116	— —	69,44 —	— —	— —
	2(-)	70,62 0,049	70,61 0,049	70,56 —	70,64 0,049	70,59 0,03	70,58 —	— —	— —	70,55 —	— —	— —
	3(+)	71,41 0,0047	71,41 0,023	71,39 —	71,43 0,023	— —	71,39 —	— —	— —	— —	— —	— —

Энергия возбуждения и ширина $1P^{(-)}$ и $3P^{(-)}$ автоионизационных состояний гелиеподобных ионов

Ионы	Термы	Номер состояния и (\pm) классификации	Энергия возбуждения E (эВ)			Ширина, Γ (эВ)	
			настоящий расчет	расчеты других авторов		настоящий расчет	расчеты других авторов [13]
				[13]	[12]		
Li^{+}	$1P$	1(+)	175,77	175,49	175,50	0,321	0,272
		2(-)	178,58	178,10	178,18	0,078	0,068
		3(-)	179,60		179,37	0,0018	
	$3P$	1(+)	175,01	174,78	174,76	0,153	0,090
		2(-)	176,96	176,65	176,66	0,059	0,036
		3(+)	179,93		179,69	0,0023	
Be^{2+}	$1P$	1(+)	329,55	329,50	—	0,412	0,324
		2(-)	333,69	333,35	—	0,088	0,086
		3(-)	337,20			0,0023	
	$3P$	1(+)	328,46	328,46		0,164	0,095
		2(-)	331,20	331,11		0,063	0,039
		3(+)	337,66			0,0038	
B^{3+}	$1P$	1(+)	531,97	531,92		0,457	0,356
		2(-)	537,47	537,05		0,096	0,098
		3(-)	544,76			0,0025	
	$3P$	1(+)	530,56	530,56		0,162	0,098
		2(-)	534,08	533,98		0,063	0,041
		3(+)	545,34			0,0046	
C^{4+}	$1P$	1(+)	782,79	782,73		0,481	0,381
		2(-)	789,65	789,15		0,103	0,106
		3(-)	807,65			0,0025	
	$3P$	1(+)	781,05	781,04		0,159	0,101
		2(-)	785,35	785,23		0,063	0,042
		3(+)	802,75			0,0050	

не [2] и диагонализационным расчетам [12], но отличается от вычисленной методом сильной связи каналов [9] и методом комплексного вращения [13].

В табл. 2 приведены результаты расчетов энергий возбуждения и ширин АС гелиеподобных ионов. Экспериментальные данные для АС ионов нам неизвестны, а возможность сравнения с другими расчетами имеется лишь для низших АУ. Наиболее полные расчеты выполнены методом комплексного вращения [13]. Энергии возбуждения АС, вычисленные в настоящей работе, близки как к результатам [13], так и к результатам диагонализационных расчетов, выполненных на базе большей размерности [12]. Ширины АС, полученные различными методами, в большинстве рассмотренных случаев отличаются весьма существенно, что свидетельствует о большой чувствительности распадных характеристик АУ к деталям электронной структуры рассматриваемых атомных систем.

Парциальные ширины $\Gamma_{\alpha}^{\lambda}$ (эВ) автоионизационных $1P^{(-)}$ и $3P^{(-)}$ состояний гелиеподобных ионов и выход водородоподобных ионов в основном состоянии

Термы	Автоионизационные состояния	$\Gamma_1^{\lambda}, \Gamma_2^{\lambda}, \omega_{\lambda} \cdot 100\%$	He		Li^{+}	Be^{2+}	B^{3+}	C^{4+}
			настоящий расчет	[12]				
$1P^{(-)}$	1(+)	Γ_1^1	$0,886 \cdot 10^{-3}$	$0,899 \cdot 10^{-3}$	$0,193 \cdot 10^{-2}$	$0,267 \cdot 10^{-2}$	$0,318 \cdot 10^{-2}$	$0,354 \cdot 10^{-2}$
		Γ_1^2	0,149		0,320	0,409	0,453	0,478
		ω_1	0,59		0,60	0,65	0,70	0,74
	2(-)	Γ_1^2	$0,154 \cdot 10^{-5}$		$0,830 \cdot 10^{-3}$	$0,126 \cdot 10^{-2}$	$0,156 \cdot 10^{-2}$	$0,177 \cdot 10^{-2}$
		Γ_2^2	$0,588 \cdot 10^{-3}$		$0,776 \cdot 10^{-1}$	$0,865 \cdot 10^{-1}$	$0,943 \cdot 10^{-1}$	0,101
		ω_2	0,26		1,06	1,44	1,63	1,72
	3(-)	Γ_1^3	$0,266 \cdot 10^{-3}$	$0,276 \cdot 10^{-3}$	$0,205 \cdot 10^{-5}$	$0,217 \cdot 10^{-5}$	$0,218 \cdot 10^{-5}$	$0,216 \cdot 10^{-5}$
		Γ_2^3	$0,667 \cdot 10^{-1}$		$0,177 \cdot 10^{-2}$	$0,231 \cdot 10^{-2}$	$0,247 \cdot 10^{-2}$	$0,251 \cdot 10^{-2}$
		ω_3	0,40		0,12	0,09	0,088	0,086
$3P^{(-)}$	1(+)	Γ_1^1	$0,107 \cdot 10^{-2}$	$0,101 \cdot 10^{-2}$	$0,952 \cdot 10^{-3}$	$0,863 \cdot 10^{-3}$	$0,797 \cdot 10^{-3}$	$0,749 \cdot 10^{-3}$
		Γ_2^1	$0,988 \cdot 10^{-1}$		0,152	0,163	0,162	0,158
		ω_1	1,07		0,63	0,53	0,49	0,47
	2(-)	Γ_1^2	$0,273 \cdot 10^{-4}$	$0,245 \cdot 10^{-4}$	$0,247 \cdot 10^{-4}$	$0,177 \cdot 10^{-4}$	$0,128 \cdot 10^{-4}$	$0,965 \cdot 10^{-5}$
		Γ_2^2	$0,489 \cdot 10^{-1}$		$0,587 \cdot 10^{-1}$	$0,632 \cdot 10^{-1}$	$0,634 \cdot 10^{-1}$	$0,627 \cdot 10^{-1}$
		ω_2	0,056		0,04	0,03	0,02	0,015
	3(+)	Γ_1^3	$0,864 \cdot 10^{-4}$		$0,443 \cdot 10^{-4}$	$0,228 \cdot 10^{-5}$	$0,142 \cdot 10^{-5}$	$0,960 \cdot 10^{-6}$
		Γ_2^3	$0,459 \cdot 10^{-2}$		$0,229 \cdot 10^{-2}$	$0,377 \cdot 10^{-2}$	$0,456 \cdot 10^{-2}$	$0,498 \cdot 10^{-2}$
		ω_3	1,88		0,19	0,07	0,03	0,02

Наряду с полной шириной АС, сходящихся к порогу $n=3$, представляют интерес парциальные ширины, соответствующие распаду АУ с образованием остаточного иона в различных возбужденных состояниях. Результаты расчетов парциальных ширин и их отношения, определяющие выход ионов в основном состоянии, представлены в табл. 3. Ранее парциальные ширины низших $^1P^{(-)}$ и $^3P^{(-)}$ АС гелия, соответствующие переходам в основное состояние ионов He^+ , вычислялись в работе [12]. Их значения, как видно из табл. 3, хорошо согласуются с нашими расчетами.

Следует отметить, однако, что расчеты Γ_a , выполненные для $^1S^{(+)}$ АС атома гелия, показали, что включение связи открытых каналов заметно меняет парциальные автоионизационные ширины [6]. Аналогичная ситуация может, по-видимому, иметь место и в случае $^1P^{(-)}$ и $^3P^{(-)}$ АС, сходящихся к порогу $n=3$. Но, как уже отмечалось выше, с ростом Z влияние связи открытых каналов на распад характеристики АУ, взаимодействующих с несколькими непрерывными спектрами, должно уменьшаться.

Анализ результатов, полученных в настоящей работе, позволяет сделать вывод о том, что для всех рассмотренных уровней выход водородоподобных ионов в возбужденных состояниях значительно больше, чем в основном состоянии. При этом с увеличением Z вероятность образования возбужденных ионов в результате распада $^1P^{(-)}$ и $^3P^{(-)}$ АС, сходящихся к $n=3$ порогу, медленно возрастает.

В заключение авторы благодарят проф. В. В. Балашова за полезное обсуждение полученных результатов, а Е. Ю. Черкашина — за помощь в проведении расчетов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Bruch R., Paul G., Andrä J., Lipsky L. Phys. Rev. 1975, 12A, p. 1808.
 [2] Dhez P., Ederer D. L. J. Phys., 1973, 6B, p. 59. [3] Madden R. P., Codling K. Phys. Rev. Lett. 1963, 10, p. 516. [4] Балашов В. В., Гришанова С. И., Круглова И. М., Сенашенко В. С. Оптика и спектроскопия, 1970, 28, с. 859.
 [5] Senashenko V. S., Wague A. J. Phys., 1979, 12B, p. 269. [6] Ramaker D. E., Schrader D. M. Phys. Rev., 1974, 9A, p. 1980. [7] Oberoi R. S. J. Phys., 1972, 5B, p. 1120. [8] Callaway J. Phys. Lett., 1978, 66A, p. 201.
 [9] Ormonde S., Whitaker W., Lipsky L. Phys. Rev. Lett., 1967, 19, p. 1161.
 [10] Chung K. T. Phys. Rev. 1972, 6A, 1809. [11] Burke P. G., Taylor A. J. J. Phys., 1969, 2B, p. 44. [12] Herrick D. R., Sinanoglu O. Phys. Rev., 1975, 11A, p. 97. [13] Ho Y. K. J. Phys. 1979, 12B, p. 387.

Поступила в редакцию
31.03.80

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3. ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ, 1982, Т. 23, № 1.

УДК 621.373.7

ТЕОРИЯ КОГЕРЕНТНОГО РАМАНОВСКОГО СМЕШЕНИЯ ПРИ СИЛЬНОМ ПОЛЕ НАКАЧКИ (ШЕСТИВОЛНОВАЯ МОДЕЛЬ)

Ю. Е. Дьяков, С. Ю. Никитин

(кафедра общей физики и волновых процессов)

Введение. В работах [2, 3] развита теория когерентного рамановского смешения (КРС) при относительно слабой накачке, когда антистоксова компонента, возникающая при ВКР на частоте $\omega_A = \omega_n + \omega_0$, несутворственна:

$$\Delta_1, \Delta_2 \geq \Gamma_0 \ll \Delta.$$