ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3. ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ, 1983, Т. 24, № 3

УДК 539.184.56:539.186.22

РАСЧЕТ ХАРАКТЕРИСТИК НИЖАЙШЕГО РЕЗОНАНСА «ДВЕ ЧАСТИЦЫ — ДВЕ ДЫРКИ» В АТОМЕ НЕОНА В ДИАГОНАЛИЗАЦИОННОМ ПРИБЛИЖЕНИИ

В. Г. Любарцев, С. И. Страхова, В. А. Шакиров

(НИИЯФ)

В многоэлектронных атомах инертных газов нижайшие квазистационарные состояния типа «частица—дырка (вакансия) во внутренней подоболочке» и «две частицы — две дырки во внешней оболочке» располагаются в одной области энергий возбуждения (рисунок). В работе [1] было показано, что характеристики нижайшего частично-дырочного резонанса в атоме неона могут быть описаны в диагонализационном приближении. Диагонализационное приближение давно с успехом используется для описания резонансов в гелии при возбуждении фотонами, электронами, протонами [2].

Нижайший резонанс типа «две частицы — две дырки» в атоме неона рассматривался в приближении сильной связи каналов [3, 4]. Ис-

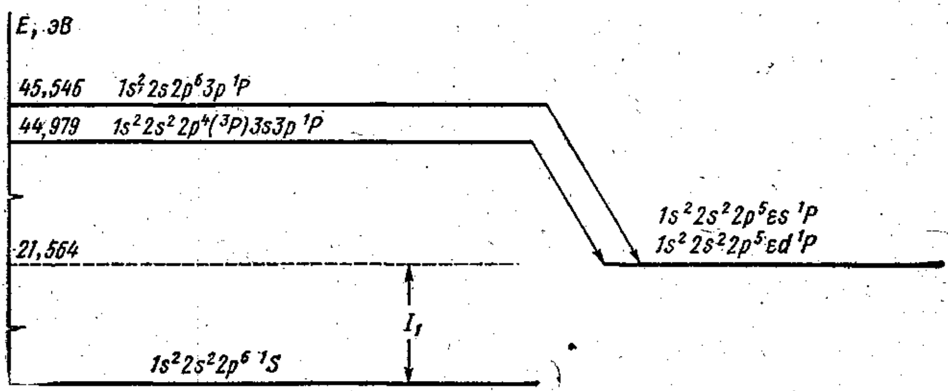


Схема спектра нижайших квазистационарных состояний атома неона; энергии состояний [6] отсчитываются от энергии основного состояния атома неона. Указаны каналы распада состояний

пользование этого технически сложного метода оправдывалось стремлением возможно более точно учесть взаимодействие состояний «частица — дырка» и «две частицы — две дырки» через непрерывный спектр, поскольку прямое взаимодействие этих состояний, как показано в работе [3], в схеме LS-связи отсутствует. Было показано, что при использовании классической формулировки метода сильной связи каналов не удается достичь согласия с экспериментом при описании профиля нижайшего резонанса типа «две частицы — две дырки». Такое согласие достигнуто только при введении в уравнения сильной связи каналов отличного от нуля матричного элемента прямого взаимодействия нижайших конфигураций «частица — дырка» и «две частицы — две дырки» [3]. В связи с этим возникает вопрос о возможностях диагонализационного метода для описания характеристик нижайшего состояния «две частицы — две дырки» в атоме неона при сохранении в рамках диагонализационного подхода отличного от нуля матричного элемента прямого взаимодействия упомянутых выше конфигураций. Выяснение этого вопроса и составляет предмет настоящей работы.

В соответствии с целями работы мы в данном конкретном случае ограничимся тем же набором базисных конфигураций, что и в работе [3]: два резонанса в области непрерывного спектра атома $1s^2 2s^2 2p^4 (^3P) 3s3p\,^1P$ и $1s^2 2s 2p^6 3p\,^1P$ и два канала их распада $1s^2 2s^2 2p^5 \varepsilon s\,^1P$ и $1s^2 2s^2 2p^5 \varepsilon d\,^1P$. В рамках диагонализационного приближения [5] волновые функции дискретных состояний модельного гамильтониана в этом конкретном случае принимают вид

$$\Phi_1 = (|\varphi_1\rangle + \alpha|\varphi_2\rangle)/\sqrt{1+\alpha^2}\,; \Phi_2 = (|\varphi_2\rangle - \alpha|\varphi_1\rangle)/\sqrt{1+\alpha^2}\,.$$

Здесь $|\varphi_1\rangle$ и $|\varphi_2\rangle$ — одноконфигурационные базисные функции состояний $2s^{-1}3p\,^1P$ и $2p^{-2}(^3P)3s3p\,^1P$ соответственно. Параметр α связан с матричным элементом прямого взаимодействия указанных конфигураций соотношением $\alpha = V/\Delta E$, энергетическое разделение уровней бралось из эксперимента [6]. В нашем расчете, как и в работе [3], мы будем варьировать значение параметра V с целью получения наилучшего согласия с экспериментом характеристик состояния $2p^{-2}(^3P)3s3p\,^1P$ в атоме неона.

Согласно формуле Фано [7], сечение резонансной фотоионизации атома σ_τ в области резонанса описывается формулой

$$\sigma_\tau(E) = \sigma_0(E)[1 - \rho^2 + \rho^2(q+\varepsilon)^2/(1+\varepsilon^2)]; \quad \varepsilon = 2(E - E_r)/\Gamma. \tag{1}$$

Здесь $\sigma_0(E)$ — сечение прямого выбивания электрона фотоном. В рамках диагонализационного приближения формула (1) описывает сечение и в области взаимодействующих, но не перекрывающихся резонансов. При этом выражения для входящих в формулу (1) параметров в частном случае распада i-го резонанса по двум открытым каналам имеют вид [8]:

$$\Gamma_i = 2\pi \sum_j |\langle Ej|\hat{W}|\Phi_i\rangle|^2,$$

$$q_i = \frac{\langle \Phi_i|\hat{d}|0\rangle}{\pi \sum_j \langle \Phi_i|\hat{W}|Ej\rangle\langle Ej|\hat{d}|0\rangle} \tag{2}$$

$$\rho_i^2 = \frac{\left(\sum_j \langle \Phi_i|\hat{W}|Ej\rangle\langle Ej|\hat{d}|0\rangle\right)^2}{\sum_j |\langle \Phi_i|\hat{W}|Ej\rangle|^2 \cdot \sum_j |\langle Ej|\hat{d}|0\rangle|^2}.$$

В формулах введены следующие обозначения: $|0\rangle$ — функция основного состояния атома неона; $|Ej\rangle$ — волновые функции непрерывного спектра атома при энергии E в состояниях с квантовыми числами $\{j\}$; $\hat{d}$ и $\hat{W}$ — операторы соответственно дипольного возбуждения и кулоновского взаимодействия. Значения параметров вычисляются при энергии системы $E = E_r - I_1$, где E_r — положение резонанса, I_1 — потенциал ионизации атома.

В данном расчете использовались следующие модельные функции атома неона. Функция основного состояния находилась процедурой полного самосогласования в методе Хартри—Фока. Таким образом были получены одночастичные орбитали $|1s\rangle$, $|2s\rangle$ и $|2p\rangle$. В поле замороженного остова, соответствующего основному состоянию атома, определялись волновые функции состояний $|3s\rangle$ и $|3p\rangle$. Используя эти орбитали, с помощью техники Рака строились функции $|\varphi_1\rangle$ и $|\varphi_2\rangle$. Одночастичные орбитали, соответствующие состояниям электрона в области непрерывного спектра, рассчитывались в приближении Хартри—Фока с замороженным остовом, соответствующим конфигурации $1s^2 2s^2 2p^5$. Для вычисления матричных элементов взаимодействия конфигураций использовалась техника вторичного квантования.

Таблица 1

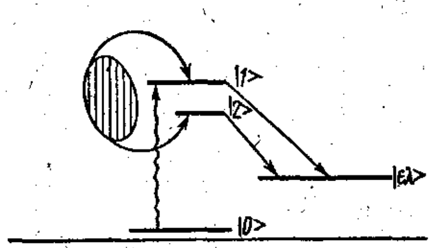
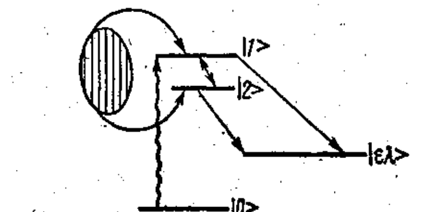
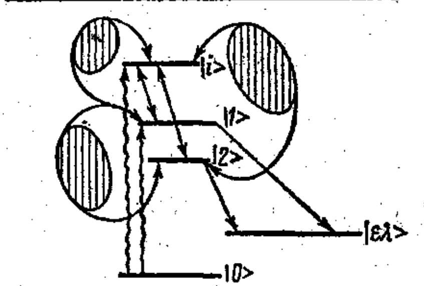
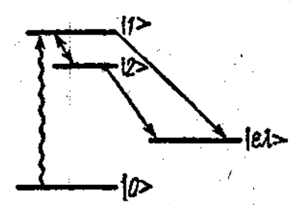
Характеристики резонанса $1s^2 2s^2 2p^4(^3P)3s3p\,^1P$ в атоме неона

Метод определения	Г, эВ	q	ρ^2
Эксперимент [6]	0,010±0,003	−2,0±0,3	0,17±0,05
Метод сильной связи каналов с псевдосостояниями [4]	0,0082	−2,99	0,027
с введением константы взаимодействия между нижайшими резонансами [3]			
$V = 0$	0,0005	0,70	0,110
$V = -0{,}002$	0,0085	−2,29	0,155
$V = -0{,}006$	0,0121	−1,91	0,175
без учета связи открытых каналов [3]			
$V = -0{,}002$	0,0087	−2,52	0,186
$V = -0{,}006$	0,0115	−2,84	0,194
Диагонализационное приближение с введением константы взаимодействия между нижайшими резонансами (настоящий расчет)			
$V = +0{,}002$	0,0004	−0,94	0,85
$V = 0$	0,0001	0	0,12
$V = -0{,}0012$	0,0002	−2,17	0,13
$V = -0{,}0015$	0,0002	−1,91	0,20
$V = -0{,}002$	0,0003	−1,66	0,34
$V = -0{,}006$	0,0022	−1,33	0,72

Приведенные в табл. 1 результаты расчета показывают, что в рамках диагонализационного подхода даже при введении отличного от нуля матричного элемента прямого взаимодействия резонансных состояний «частица — дырка» и «две частицы — две дырки» не удается достичь согласия с экспериментом при описании характеристик нижайшего состояния «две частицы — две дырки» в атоме неона. Табл. 2 вместе с табл. 1 помогает понять роль межканальных связей в формировании профиля резонанса $2p^{-2}(^3P)3s3p\,^1P$ в атоме неона. Определяющую роль играет взаимодействие дискретных состояний модельного гамильтониана, расположенных в области непрерывного спектра, с непрерывным спектром атома. Это взаимодействие учитывается точно только в приближении сильной связи каналов. При переходе к аналогичным состояниям в атоме аргона обсуждаемое взаимодействие играет определяющую роль и в формировании профиля нижайшего частично-дырочного резонанса [9].

Таблица 2

Схематическое изображение межканальных взаимодействий, учитываемых в расчетах

<table>
<tr><th>Метод расчета</th><th>Схема учитываемых межканальных взаимодействий</th></tr>
<tr><td>Метод сильной связи каналов [3]: LS-связь, учтена связь двух открытых и двух закрытых каналов</td><td></td></tr>
<tr><td>Метод сильной связи каналов [3]: учтена связь двух открытых и двух закрытых каналов, отличен от нуля матричный элемент прямого взаимодействия состояний «частица — дырка» и «две частицы — две дырки»</td><td></td></tr>
<tr><td>Метод сильной связи каналов [4]: учтена связь большого числа открытых и закрытых каналов, а также псевдосостояния, LS-связь</td><td></td></tr>
<tr><td>Диагонализационное приближение, настоящий расчет: два дискретных состояния на фоне двух континуумов. Отличен от нуля матричный элемент взаимодействия дискретных состояний</td><td></td></tr>
</table>

Обозначения:

 — возбуждение состояния

 — распад состояний

 — прямое взаимодействие между состояниями

 — взаимодействие состояний через непрерывный спектр

|0 > — основное состояние атома

|1 > — состояние «частица — дырка»

|2 > — состояние «две частицы — две дырки»

| i > — вышележащие квазистационарные состояния атома

| ελ > — состояния атома в области непрерывного спектра

Проведенный расчет еще раз подтверждает актуальность вопроса о применимости LS-связи для классификации состояний сложной природы в многоэлектронных атомах инертных газов, поднятого в работах [6, 3].

Авторы благодарят сотрудников лаборатории теоретического практикума за интерес к работе.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

[1] Balashov V. V. et al. J. Phys. B: Atom. Molec. Phys., 1979, 12, p. 2233. [2] Сенашенко В. С. В кн.: Мат. III ВШФЭАС. Л.: ЛГУ, 1976, с. 163. [3] Страхова С. И., Шакиров В. А. В кн.: Автоионизационные явления в атомах. II. М.: МГУ, 1981, с. 88; Strakhova S. I., Shakirov V. A. Phys. Lett., 1981, 85A, p. 269. [4] Lüke T. M. J. Phys. B: Atom. Molec. Phys., 1978, 11, p. 2457. [5] Балашов В. В. и др. Опт. и спектр., 1970, 28, с. 859. [6] Codling K., Madden R. P., Ederer D. L. Phys. Rev., 1967, 155, p. 26. [7] Fano U. Phys. Rev., 1961, 124, p. 1866. [8] Fano U., Cooper J. W. Phys. Rev., 1965, 137A, p. 1364. [9] Амусья М. Я., Хейфец А. С. В кн.: Автоионизационные явления в атомах. II. М.: Изд-во МГУ, 1981, с. 110.

Поступила в редакцию
06.09.82

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3. ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ, 1983, Т. 24, № 3

УДК 538.574

К ОБЩЕЙ ТЕОРИИ МНОГОКРАТНОГО РАССЕЯНИЯ В СЛУЧАЙНО-НЕОДНОРОДНЫХ СРЕДАХ

А. Н. Стародумов

(кафедра общей физики и волновых процессов)

Существующие методы решения задач распространения волн в случайно-неоднородных средах (приближение марковского процесса, метод плавных возмущений и др.) дают удовлетворительное описание поля и его моментов при многократном рассеянии вперед, но ограничены различными условиями на линейные размеры флуктуирующей среды, длину волны λ, дисперсию флуктуаций σ^2 и радиус корреляции неоднородностей l. В общей теории многократного рассеяния, опирающейся на суммирование фейнмановских диаграмм, хотя и снимаются данные ограничения, но получение конкретных результатов сопряжено с большими трудностями. Это связано с тем, что входящие в интегральные уравнения Дайсона для среднего поля и Бете—Солпитера для ковариации массовый оператор и оператор интенсивности представляются в виде бесконечных рядов. Суммирование данных рядов реально неосуществимо и о сходимости при сильных флуктуациях ничего не известно. Попытки перейти от уравнений для поля к уравнениям для моментов приводят к зацепляющейся бесконечной системе уравнений [1].

В данной работе предлагается использовать для решения стохастических уравнений метод «интегрирования по траекториям». Этот метод позволяет в явном виде выделить зависимость решения от случайного коэффициента и произвести корректную процедуру статистического усреднения уже на начальном этапе задачи.

Рассмотрим скалярную задачу определения моментов поля точечного источника в безграничной случайно-неоднородной сферически-слоистой среде с $\varepsilon(r)=1+\varepsilon_1(r)$, где $\varepsilon_1(r)$ распределено по нормальному закону и $\langle\varepsilon_1\rangle=0$. Случайное поле статистически однородно и изотроп-