

УДК 539.186.22

ПРЯМАЯ ФОТОИОНИЗАЦИЯ И СТРУКТУРА НЕПРЕРЫВНОГО СПЕКТРА ГЕЛИЯ

С. М. Бурков, С. И. Страхова

(НИИЯФ)

Введение. Новые экспериментальные данные по фотоионизации гелия [1—3] активизировали интерес к изучению структуры непрерывного спектра этого простейшего из «сложных» атомов. Повышение точности экспериментальных исследований полных, парциальных и дифференциальных сечений прямой фотоионизации гелия в широкой области энергий возбуждения позволяет изучать в этом процессе проявления корреляций в начальном и конечном состояниях системы.

Что касается описания основного состояния гелия в задаче фотоионизации, то в настоящее время актуальными остаются вопросы выяснения качества большого числа многопараметрических функций [4—6] и влияния корреляций в основном состоянии на сечения фотоионизации. Описание основного состояния гелия продолжает оставаться и важной самостоятельной задачей, центр тяжести которой перемещается в область прикладной математики [7].

При рассмотрении процессов прямой фотоионизации атомов в качестве «блока» традиционно привлекается задача рассеяния электронов на ионах: для описания ионизованных атомов используются волновые функции, рассчитываемые в задаче рассеяния [8].

Таким образом оказываются взаимосвязанными несколько физических задач, имеющих, вообще говоря, самостоятельный интерес.

В предлагаемой работе проблема прямой фотоионизации гелия рассматривается в приближении сильной связи каналов. Одновременно для выяснения роли отдельных межканальных связей проведены более простые в техническом плане расчеты в первом порядке теории возмущений по межканальному взаимодействию.

Краткий формализм и техника расчета. Подпространство открытых 1P каналов состояний непрерывного спектра в гелии в области между вторым и третьим порогами ионизации включает четыре состояния: $1s\epsilon p$, $2s\epsilon p$, $2p\epsilon s$ и $2p\epsilon d$. K -матрица рассеяния электрона на ионе He^+ в приближении сильной связи этих каналов может быть определена из решения системы интегральных уравнений [9]

$$K(\lambda, \lambda', E) + \sum_{\mu} v. p. \int_0^{\infty} \frac{\langle \lambda' E | \hat{V} | \mu \epsilon' \rangle}{\epsilon' - \epsilon_{\mu}} K(\lambda, \mu, \epsilon') d\epsilon' = - \langle \lambda' E | \hat{V} | \lambda \epsilon_{\lambda} \rangle. \quad (1)$$

Здесь $\epsilon_{\lambda} = E - E_{\lambda}$, E_{λ} — порог канала λ ; $\hat{V} = \hat{H} - \hat{H}_0$, где \hat{H} — гамильтониан для атома гелия; функции $|\lambda \epsilon\rangle$ являются собственными функциями модельного гамильтониана \hat{H}_0 . В настоящем расчете функции $|\lambda \epsilon\rangle$ являются решениями уравнения

$$[\hat{T} + \hat{W} + \langle nl(\lambda) | 1/r_{12} | nl(\lambda) \rangle - \epsilon] |\lambda \epsilon\rangle = 0. \quad (2)$$

Здесь \hat{T} и \hat{W} — кинетическая и потенциальная энергии электрона в поле He^+ , $1/r_{12}$ — взаимодействие электронов в гелии, $|nl(\lambda)\rangle$ — кулоновская функция электрона в связанном $|nl\rangle$ -состоянии иона He^+ , соответствующем каналу λ в непрерывном спектре гелия. Определен-

ная таким образом K -матрица входит в выражение для волновой функции He в области выше порога следующим образом [10, 11]:

$$\Psi_{\lambda}^E = \sum_{\mu} A_{\lambda\mu}^E (|\mu \epsilon_{\mu} \rangle + \sum_{\lambda'} v.p. \int_0^{\infty} K(\mu, \lambda', \epsilon) \cdot |\lambda' \epsilon \rangle / (\epsilon - \epsilon_{\lambda'}) \cdot d\epsilon). \quad (3)$$

При нормировке Ψ_{λ}^E на δ -функцию по энергии константы $A_{\lambda\mu}^E$ определяются выражением

$$A_{\lambda\mu}^E = [1 - i\pi K(\lambda, \mu, E)]^{-1}.$$

Парциальные сечения σ_{nl}^{ν} процесса фотоионизации



рассчитывались с использованием многоканальных функций Ψ_{λ}^E , определенных выражением (3). Полное сечение фотоионизации получалось суммированием парциальных. Одновременно вычислялись изучаемые экспериментально отношения парциальных сечений типа $\sigma_{2p}^{\nu} / \sigma_{2s}^{\nu}$. В качестве функции основного состояния He использовались функция Твидда с 41 параметром [6] и более простая функция Экарта [12], хорошо воспроизводящая силу осциллятора перехода на квазистационарное состояние $2s2p^4P$ в He [13].

Решение системы (1) проводилось двумя способами: итерационным, для исследования характера сходимости ряда теории возмущений

по степеням малости оператора межканального взаимодействия V , и безытерационным. В последнем случае система интегральных уравнений сводилась к системе алгебраических уравнений, как это сделано в работах [10, 11, 14]. Учитывалась область энергий возбуждения до 20 а. е. при замене интегралов в системе на сумму. При использовании итерационной схемы оказалось необходи-

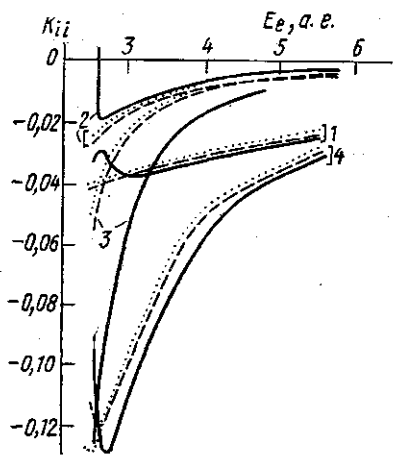


Рис. 1. Диагональные элементы K -матрицы рассеяния электронов на ионе He^+ : — без учета сильной связи каналов; результат первой итерации по межканальному взаимодействию приведенных в тексте уравнений; — с учетом сильной связи четырех открытых каналов. Цифры при кривых обозначают номер канала: 1 — $1sep$, 2 — $2sep$, 3 — $2res$, 4 — $2ped$. Энергии даны в атомной системе единиц

мым для достижения удовлетворительной точности проведение 3—6 итераций. Первая итерация по взаимодействию при расчете парциальных сечений фотоионизации He и K -матрицы рассеяния электронов на He^+ в области между вторым и третьим порогами не обеспечивает необходимой точности.

Результаты расчета и обсуждения. На рис. 1 приведены диагональные элементы K -матрицы рассеяния электронов на ионе He^+ в различных каналах, рассчитанные без учета связи каналов, с учетом сильной связи четырех каналов рассеяния и полученные в результате первой итерации уравнений (1). Рассчитанные с учетом сильной связи каналов сечения возбуждения иона He^+ электронами в состоянии $2s$ и $2p$ в широкой области энергий хорошо совпадают с результатами расчета группы Бёрка [15], выполненного с использованием диффе-

рениальной формулировки метода сильной связи каналов. Некоторое отличие результатов наблюдается в области вблизи порога и, возможно, связано с точностью проводимых расчетов. Соотношение дифференциальной и интегральной формулировок метода сильной связи обсуждено, например, в работе [14].

На рис. 2 приведены сечения прямой фотоионизации He в каждом из четырех каналов. Для выяснения влияния связи каналов в непрерывном спектре проводились расчеты с «выключением» отдельных межканальных связей и без учета связи каналов. Оказалось, что существенную роль в области выше 80—90 эВ в спектре He играет связь $1s\epsilon p$ канала со всеми остальными. При этом связью каналов

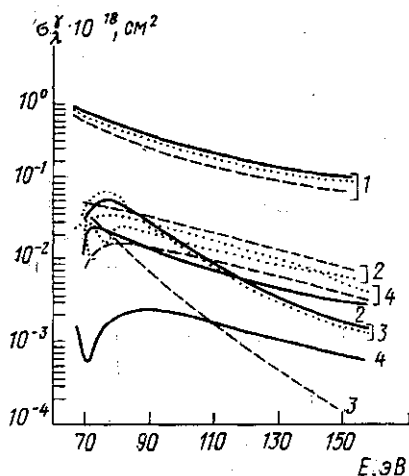


Рис. 2. Сечения прямой фотоионизации He. Обозначения, как на рис. 1

$2s\epsilon p$, $2p\epsilon s$, $2p\epsilon d$ между собой в этой области спектра можно пренебречь. Качественный характер зависимости сечений в области между вторым и третьим порогами определяется в первую очередь сильной связью $2s\epsilon p$ и $2p\epsilon s$ каналов. При выключении связи каналов вкладом $2p\epsilon s$ канала, например в $\sigma_{n=2}^v$, как это видно из рис. 2, можно было бы пренебречь по сравнению с вкладом двух других каналов. Однако видно, что исключение из расчета этого канала привело бы к недооценке сечений, рассчитанных с учетом сильной связи оставшихся каналов, по порядку величины. Одновременно следует отметить изменение характера зависимости сечений в каналах при включении их связи в области между вторым и третьим порогами.

Парциальные и полные сечения прямой фотоионизации He рассчитывались в приближении сильной связи каналов дважды в работах группы Бёрка [8, 16] и в работе Чанга [17] (рис. 3—5). Особенно интересно сопоставление расчета Чанга с первым расчетом группы Бёрка [8], выполненным Джакобсом и Бёрком. В этих двух расчетах задача рассеяния электронов на ионе He⁺ решается в одинаковых приближениях вдали от порога — учитывается связь четырех открытых каналов. Небольшое отличие сечений фотоионизации в этой области связано, возможно, с использованием различных функций основного

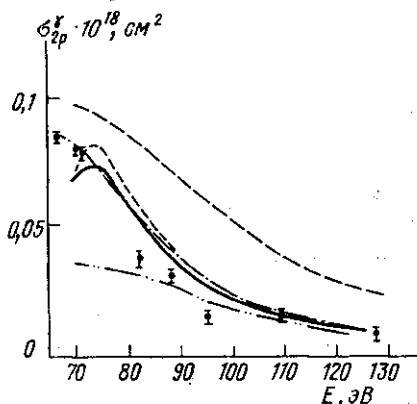


Рис. 3. Сечения прямой фотоионизации He в состоянии $2p$ иона He⁺. Настоящий расчет: — с учетом сильной связи четырех открытых каналов, использована функция Твида для описания основного состояния; — — — то же, но с функцией Эккарта; --- связь каналов учтена в первом порядке по межканальному взаимодействию, использована функция Твида. Экспериментальные данные Вудруф и Сэмсона [1], — — — расчет Джакобса и Бёрка [8], — — — расчет Чанга [17]

состояния He: Джакобс и Бёрк используют 56-параметрическую функцию Хиллерааса [4], а Чанг использует свой оригинальный метод учета корреляций в основном состоянии. Отличие сечений фотоионизации вблизи порога обусловлено кроме различий в функциях основного состояния еще и фактом учета псевдосостояний дополнительно к учету четырех открытых каналов при расчете функций непрерывного спектра He в работе Джакобса и Бёрка. Эти два расчета приводят к противоположным физическим результатам: согласно Чангу, при фотоионизации He вблизи порога He⁺ остается с большой вероятностью в 2s-состоянии, согласно Джакобсу и Бёрку, — в 2p-состоянии (см. рис. 5). Суммарное сечение фотоионизации He в состояние He⁺ n=2 получается приблизительно одинаковым у обоих авторов (см. рис. 4). Проведенные в 1982 г. экспериментальные исследования с использованием техники флюоресцентного выхода [1] и фотоэлектронной спектроскопии [2] не позволили однозначно разрешить это противоречие. Более тщательные и мощные расчеты группы Бёрка [16], выполненные в R-матричной формулировке метода сильной связи 1s—2s—2p-состояний и 3s—3p—3d-псевдосостояний He⁺ для определения функций основного и конечного состояний He, а также специально выполненные группой Шмидта [3] эксперименты в технике фотоэлектронной спектроскопии подтвердили основные физические выводы, сделанные ранее в работе Джакобса и Бёрка.

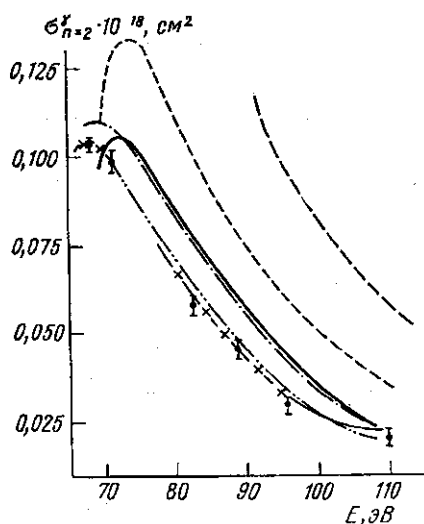


Рис. 4. Сечения прямой фотоионизации в состоянии $n=2$ He⁺. Обозначения, как на рис. 3, —X— расчет Бёрка и др. [16]

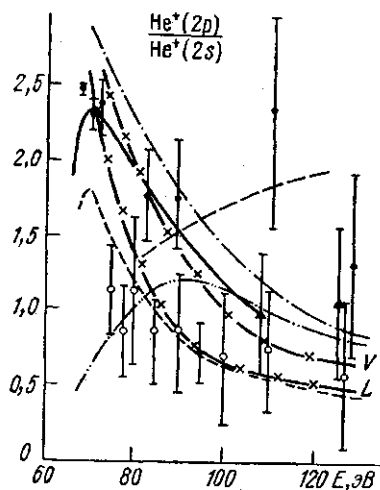


Рис. 5. Отношение сечений прямой фотоионизации He в состоянии He⁺ 2p и 2s. Обозначения, как на рис. 4, ○ — экспериментальные данные Бисау и др. [2], ● — Шмидта и др. [3], ▲ — Краузе и др. [18]

Однако следует отметить, что имеющиеся на сегодня экспериментальные данные различных авторов плохо согласуются между собой по абсолютному значению. Нет окончательной ясности в детальном характере поведения сечений в области между вторым и третьим порогами. По существу требуется более частое экспериментальное сканирование этого интервала спектра возбуждения, ибо характер энергетической зависимости фона прямых переходов сильно влияет на профили резонансов, расположенных в этой области.

Результаты проведенных нами расчетов (см. рис. 3—5) в широкой области энергий согласуются с данными группы Бёрка, подтверждая выход He^+ в области 70—80 эВ в 2р-состоянии. Сопоставление результатов различных расчетов иллюстрирует сильную зависимость абсолютных значений фотоионизации от качества функции основного состояния He. Согласие результатов проведенных нами расчетов с данными группы Бёрка позволяет сделать вывод о важности учета корреляций $(nl)^2$ -типа в основном состоянии гелия.

Отличие наших и вышеупомянутых расчетов группы Бёрка наблюдается в узкой области энергий между вторым и третьим порогами. В этой области наиболее сильно проявляются исходные приближения различных подходов: учет псевдосостояний, корреляций в основном состоянии, подпороговых состояний и др. Мы получили в этой области энергий иной характер энергетической зависимости фона прямых переходов; в нашем расчете резонансы в парциальных сечениях должны располагаться на возрастающей по энергии «подложке», в расчетах Бёрка с соавт. — на ниспадающей. Это приведет к сильному различию в оценке спектроскопических характеристик резонансов, сходящихся к порогу $n=3$, и может быть проверено сопоставлением расчетных характеристик резонансов с уже имеющимися экспериментальными данными [1].

Заключение. Результаты проведенного анализа позволяют сделать вывод о необходимости учета сильной связи открытых каналов для описания парциальных сечений прямой фотоионизации He в области выше второго порога ионизации. Целесообразно более тщательное как теоретическое, так и экспериментальное исследование прямой фотоионизации гелия в области между вторым и третьим порогами.

Авторы благодарят проф. В. В. Балашова и участников теоретического семинара Лаборатории теоретического практикума НИИЯФ за полезные обсуждения.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Woodruff P. R., Samson J. A. Phys. Rev., 1982, 25A, p. 848. [2] Bizau J. M. et al. Phys. Rev. Lett., 1982, 48, p. 588. [3] Schmidt V., Derenbach H., Maletzki R. J. Phys. B: Atom. Molec. Phys., 1982, 15, p. L523. [4] Hylleraas E. A. Z. Phys., 1929, 54, p. 341. [5] Stewart A. L., Webb T. G. Proc. Phys. Soc., 1963, 82, p. 532. [6] Tweed R. J. J. Phys. B: Atom. Molec. Phys., 1972, 5, p. 810. [7] Решетняк В. И. и др. ДАН СССР, 1982, 263, с. 1356. [8] Jacobs V. L., Burke P. G. J. Phys. B: Atom. Mol. Phys., 1972, 5, p. L67. [9] Fano U., Prats F. Proc. Nat. Acad. Sci. India, 1963, A33, p. 553. [10] Strakhova S. I., Shakirov V. A. J. Phys. B: Atom. Mol. Phys., 1982, 15, p. 2149. [11] Bloch C. In: Enrico-Fermi-Course, 1966, 36 (Saclay: CEN), p. 349. [12] Eckart C. Phys. Rev., 1930, 36, p. 878. [13] Fano U. Rep. Prog. Phys., 1983, 46, p. 97. [14] Altick P. L., Moore E. N. Phys. Rev., 1966, 147, p. 59. [15] Burke P. G., Taylor A. J. J. Phys. B: Atom. Mol. Phys., 1969, 2, p. 44. [16] Berrington K. et al. J. Phys. B: Atom. Mol. Phys., 1982, 15, p. L603. [17] Chang T. N. J. Phys. B: Atom. Mol. Phys., 1980, 13, p. L551. [18] Krause M. O., Wuilleumier F. J. Phys. B: Atom. Mol. Phys., 1972, 5, p. L143.

Поступила в редакцию
03.11.83