

АКАДЕМИЯ НАУК СССР

ИЗВЕСТИЯ  
АКАДЕМИИ НАУК СССР  
СЕРИЯ ФИЗИЧЕСКАЯ

(ОТДЕЛЬНЫЙ ОТТИСК)

7

---

МОСКВА · 1986

УДК 539.186.22

БУРКОВ С. М., ЗАЯЦ Т. М., ЛЕТЯЕВ Н. А. и СТРАХОВА С. И.

**ПРОЯВЛЕНИЕ АВТОИОНИЗАЦИОННЫХ СОСТОЯНИЙ  
В ПРОЦЕССАХ ИОНИЗАЦИИ ГЕЛИЯ И ГЕЛИЕПОДОБНОГО  
ЛИТИЯ ФОТОНАМИ И ЭЛЕКТРОНАМИ В ОБЛАСТИ  
ВЫШЕ ПОРОГА ОБРАЗОВАНИЯ ВОЗБУЖДЕННЫХ ИОНОВ**

Усовершенствование техники эксперимента, дальнейшее развитие методов теоретической и вычислительной физики позволяют исследовать проявления автоионизационных состояний в области между вторым и третьим порогами при ионизации гелиеподобных систем фотонами и электронами. В отличие от области спектра между первым и вторым порогами, где резонансы распадаются только по одному открытому каналу, при энергиях выше порога возбуждения остаточных ионов появляется возможность исследовать профили резонансов, сходящихся к состоянию  $n=3$  остаточного иона, как в полных, так и в парциальных, соответствующих заселению основного и возбужденного состояний ионов сечениях ионизации, а также в корреляционных и поляризационных характеристиках: в угловых распределениях и поляризации испускаемых электронов при распаде на возбужденные состояния ионов, выстроенности возбужденных ионов, в угловых распределениях и поляризации фотонов, снимающих возбуждение остаточных ионов. Совокупность перечисленных выше характеристик позволяет получить сведения об отличных от нуля в этой области спектра амплитудах процесса ионизации.

Экспериментальные исследования структуры непрерывного спектра гелия в области между вторым и третьим порогами по существу начались в 1982 г. [1], когда с хорошим разрешением были измерены сечения резонансной фотоионизации гелия на состоянии  $n=2$  иона  $He^+$  в технике флуоресцентной спектроскопии. Первые эксперименты по полным сечениям фотопоглощения гелия в области нижайшего  $3s3p$ -резонанса [2] в настоящее время повторены и уточнены [3]. Теоретические оценки впервые были проведены в работах [4, 5], позднее в работах [6–9]. В связи с выполнением новых экспериментов [3] мы в настоящей работе продолжаем анализ совокупности имеющихся экспериментальных данных по резонансной фотоионизации гелия в области 65,4–72,9 эВ. Одновременно мы приводим результаты расчета характеристик процесса фотоионизации гелиеподобного лития в области между вторым и третьим порогами.

Большой интерес представляют сведения о профилях резонансов, распадающихся на возбужденные состояния ионов, в зависимости от переданного импульса. Экспериментальных данных такого рода пока нет. Мы рассчитали полные и парциальные обобщенные силы осциллятора (ОСО) при ионизации гелия быстрыми электронами в области между вторым и третьим порогами в широкой области значений переданного импульса.

Узловым моментом задачи ионизации атомной системы быстрыми электронами и фотонами является описание конечного состояния, принадлежащего области непрерывного спектра рассматриваемой системы. Проведенные расчеты сечений прямых процессов фотоионизации гелия [10] и сечений рассеяния электронов ионами  $He^+$  [11] показали, что связь открытых каналов в области между вторым и третьим порогами в гелии сильна. В расчетах [4, 5, 8] этой связью пренебрегалось. Наиболее по-

следовательно сечения резонансной ионизации рассчитываются в рамках методов сильной связи открытых и закрытых каналов [12].

Неудобства этих подходов на этапе расшифровки и сопоставления полученных в теории и эксперименте результатов обусловлены тем, что характеристики резонансов не являются параметрами теории в методах сильной связи каналов и извлекаются из расчета с использованием, как правило, приближения невзаимодействующих резонансов. Наблюдаемые же структуры в сечениях часто оказываются огибающими нескольких перекрывающихся резонансов [1, 9].

Притягательным с этой точки зрения остается метод конфигурационного взаимодействия Фано [13, 14], в котором при той же степени точности воспроизведения кривых сечений, что и в методах сильной связи каналов, есть возможность оценить спектроскопические характеристики резонансов, формирующих картину сечений. Однако формализм Фано развит только для случая, когда хотя бы одно из подпространств открытых или закрытых каналов заполнено не более чем одним состоянием. Попытки непосредственно обобщить подход Фано на общий случай нескольких резонансов, распадающихся по нескольким открытым каналам, используя представление вещественных чисел, приводят к выражениям для сечений, содержащим особенности в зависимости от энергии [15]. Такие выражения использовались в расчетах только для задачи с одним резонансом, когда особенности в выражениях для сечений устраняются на уровне формул. В пренебрежении некоторыми классами межконфигурационных взаимодействий подобная задача рассмотрена в работе [16].

В работах [6, 7] для описания процесса фотоионизации с учетом распада нескольких резонансов по нескольким каналам было использовано представление комплексных чисел на этапе записи общих решений систем уравнений, реализующих метод Фано на базисе предварительно диагонализированных подпространств открытых и закрытых каналов. Такой подход позволяет при учете всех межконфигурационных взаимодействий записать выражения для сечений в виде формул, не содержащих особенностей в зависимости от энергии. Если в конкретном расчете функции от энергии, определяющие сечения, могут быть заменены их значениями в точке резонанса, выражения для сечений параметризуются и оказываются возможным в качестве параметров ввести и рассчитать характеристики резонансов в полных и парциальных сечениях ионизации. Подход оказывается удобным для исследования роли различных межконфигурационных взаимодействий.

Учет в рамках такого подхода тех или иных классов межконфигурационных взаимодействий позволяет реализовать на его основе ряд приближенных методов, например метод диагонализации с учетом сильной связи открытых каналов, когда пренебрегается частью взаимодействия резонансов через непрерывный спектр, и др. Основные формулы для такого подхода приведены в работах [6, 7]. Получаемая в рамках метода конфигурационного взаимодействия в представлении комплексных чисел волновая функция непрерывного спектра системы используется и для расчета корреляционных характеристик процесса фотоионизации. Общее выражение для угловых распределений фотоэлектронов и выстроенности ионов приведены, например, в работах [17, 18]. Системы интегральных уравнений, реализующих процедуру предварительной диагонализации подпространства открытых каналов, приведены в работах [10, 19]. Общие выражения для ОСО можно найти, например, в работе [20].

В настоящем расчете подпространство закрытых каналов всегда заполнялось 20 конфигурациями, соответствующими двухэлектронным возбуждениям гелиеподобной системы в области между вторым и третьим порогами. В качестве базисных функций для их описания использовались кулоновские с зарядом  $Z=2$  для гелия и  $Z=3$  для гелиеподобного лития. Подпространство открытых каналов заполнялось четырьмя (для нулевого полного момента тремя) конфигурациями, соответствующими электрону над основным и первым  $n=2$  возбужденным состоянием остаточного иона. В качестве базисных функций для них использовались численные реше-

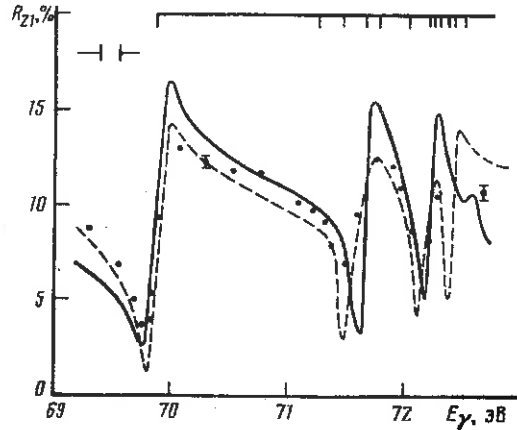


Рис. 1. Отношение парциальных сечений фотоионизации гелия  $R_{21} = \sigma_{n=2}/\sigma_{n=1}$  на  $n=2$  и  $n=1$  состояния иона  $\text{He}^+$ . Сплошная кривая — настоящий расчет с учетом всех межконфигурационных взаимодействий, точки — экспериментальные данные из [3]. Штриховая — фитированные экспериментальных данных авторами [3] с исключением уширения монохроматора. Вверху — положение  $^1P$ -резонансов и разрешение монохроматора в экспериментах [3]

ния одноконфигурационного уравнения Шредингера с экранированным кулоновским потенциалом. При проведении предварительной диагонализации непрерывных спектров из системы интегральных уравнений исключались соответствующие вклады монополярных слагаемых в матричных элементах кулоновского взаимодействия.

Согласно формализму положения и полные ширины определялись как действительная и мнимая части собственных значений комплексной матрицы, учитывающей все межконфигурационные взаимодействия. В рамках диагонализационного подхода энергии резонансов, как и в работе [21], определялись через собственные значения вещественной матрицы, учитывающей взаимодействия в подпространстве закрытых каналов, а ширины рассчитывались по теории возмущений. В расчетах ОСО в сумме по полному моменту системы учитывался вклад первых четырех членов. Как показали расчеты нерезонансных ОСО, вкладом остальных членов можно пренебречь. Основное состояние атома гелия и гелиеподобного лития описывалось функцией Гвида с 41 параметром [22].

Опыт расчетов [6, 7], как и опыт авторов [9, 11], показывают, что в проводимых расчетах на этапе вычисления матричных элементов с базисными функциями должна быть обеспечена высокая точность вычислений. С этой точки зрения предварительные данные [6, 7] в настоящей работе уточнены. Обеспечение необходимой точности требует больших затрат времени на ЭВМ. Так реализация процедуры предварительной диагонализации непрерывных спектров при одном значении полного момента системы требует нескольких часов на ЕС-1045.

В результате проведенных расчетов были получены положения и ширины синглетных  $S$ -,  $P$ -,  $D$ -,  $F$ -резонансов в гелии и гелиеподобном литии, сходящихся к порогу  $n=3$ . Энергии и ширины нижайших резонансов этих серий рассчитывались различными авторами. Полученные нами результаты для положений и ширин находятся в согласии с данными других авторов, использовавших аналогичные физические приближения. Поскольку обсуждению положений и ширин в литературе уделено значительное внимание (см. [1–9, 11] и ссылки в них), в настоящей работе мы не будем останавливаться на их анализе.

На рис. 1 приведено отношение парциальных сечений фотоионизации гелия на состояния  $n=2$  и  $n=1$  иона  $\text{He}^+$  в области между вторым и третьим порогами. Проведенный нами расчет в основном воспроизводит экспериментальные данные. Особый интерес представляет область минимума в районе 70 эВ. В экспериментах [1] парциальные сечения на  $n=2$

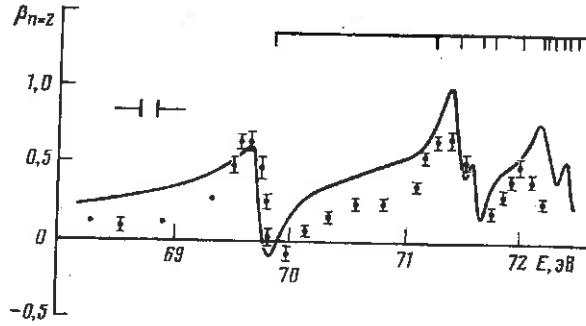


Рис. 2. Параметр асимметрии в угловом распределении фотоэлектронов при ионизации гелия на  $n=2$  состояние иона  $\text{He}^+$ . Точки — экспериментальные данные из работы [3], кривая — результаты настоящего расчета с учетом указанного на графике разрешения монохроматора. Вверху — положения  $P$ -резонансов. В расчете учтены все межконфигурационные взаимодействия

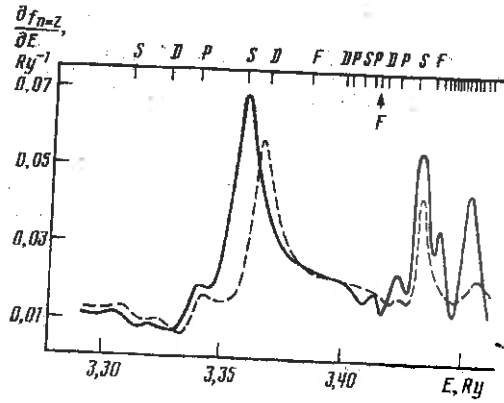


Рис. 3. Парциальные обобщенные силы осциллятора перехода при ионизации гелия на состояние  $n=2$  иона  $\text{He}^+$  при значении переданного импульса 1 ат. ед.<sup>-1</sup>. Сплошная кривая — настоящий расчет с учетом всех межконфигурационных взаимодействий, штриховая — в диагональном приближении с учетом сильной связи открытых каналов. Вверху — расчетное положение резонансов с указанием значения полного орбитального момента  $\text{He}$

состояние  $\text{He}^+$  имеют в этой области нуль, данные [3] не воспроизводят этот эффект.

Следует обратить внимание (см. табл. 4), что данные [1] получены с большей ошибкой, нежели результаты [3]. Одновременно разрешение в экспериментах [1] лучше, чем у авторов [3]. Теоретический расчет [9], проведенный в рамках  $R$ -матричного формализма, также приводит к значениям сечения, отличным в области минимума от нуля. Нам представляется, что и теоретические, и экспериментальные данные в этой области еще будут уточняться.

При фотоионизации гелиеподобных систем кроме сечений нетривиальными оказываются угловые распределения испускаемых электронов при заселении возбужденных состояний остаточных ионов. Поляризация фотоэлектронов тривиальна, а угловые распределения и поляризация фотонов, снимающих возбуждение в остаточных ионах, полностью определяются выстроенностью возбужденных ионов.

На рис. 2 приведены данные для коэффициента асимметрии в угловых распределениях фотоэлектронов при ионизации  $\text{He}$  на  $n=2$  состояние  $\text{He}^+$ . Соответствующие данные для иона  $\text{Li}^+$  приведены в табл. 2. Корреляционные характеристики более чувствительны к модели структуры атома, нежели интегральные, например, сечения. Оценки коэффициента асимметрии при фотоионизации  $\text{He}$  на  $2p$ -состояние  $\text{He}^+$  в диагональном приближении без учета связи открытых каналов проведены в работе [8].

Таблица 1

Параметры нижайшего  $^1P$ -резонанса в He из серии сходящихся к порогу  $n=3$  в полном и парциальном сечениях фотоионизации  
Обозначения параметров, как в работе [1]

Сечение	Параметр	Настоящий расчет	Экспериментальные данные (в скобках ошибки эксперимента)		Расчеты [5, 8]
$\sigma_{n=2}$	A, Мб	0,120	0,120(2) [3]	0,081(14) [1]	0,072
	B, Мб	-0,005	-0,044(2)	-0,065(8)	-0,004
	q	0,960	0,7 *	0,48(9)	0,95
	$\rho^2$	0,670	0,88 *	0,98 $\left(\begin{smallmatrix} +2 \\ -28 \end{smallmatrix}\right)$	0,39
	C, Мб	0,061	0,097(1)	0,086(7)	
$\sigma_{\text{полн}}$	A, Мб	0,068	0,18(8) [3]	0,032(6) [2]	0,046
	B, Мб	-0,042	-0,032(56)	0,010(5)	0,015
	q	0,553	0,84(30)	1,36(20)	1,37
	$\rho^2$	0,067	0,11(3)	0,012(3)	0,018
	C, Мб	1,050	0,989(20)	0,957(30)	

\* Эти параметры Фано получены пересчетом параметров Шоре с помощью формул, приведенных, например, в работе [3].

Таблица 2

Парциальное на  $n=2$  состояние иона  $\text{Li}^{2+}$  сечение, отношение парциальных сечений фотоионизации He-подобного лития, коэффициент асимметрии в угловом распределении фотоэлектронов  $\beta_{n=2}$  и выстроенность  $A_{20}$  иона  $\text{Li}^{2+}$  в состоянии  $n=2$   
Настоящий расчет методом конфигурационного взаимодействия в представлении комплексных чисел

E, эВ	$10 \cdot \sigma_{n=2}$ , Мб	$R = \frac{\sigma_{n=2}}{\sigma_{n=1}}$ , %	$\beta_{n=2}$	$A_{20}$
174,1	0,131	3,51	0,432	0,654
174,9	0,116	3,13	0,453	0,640
175,3	0,083	2,25	0,338	0,527
175,5	0,149	4,10	0,071	0,499
175,7	0,234	6,53	0,346	0,645
176,1	0,186	5,18	0,453	0,676
176,5	0,172	4,80	0,487	0,681
176,9	0,165	4,63	0,516	0,685
177,3	0,160	4,52	0,551	0,691
177,7	0,156	4,43	0,614	0,698
178,1	0,156	4,43	0,870	0,687
178,3	0,257	7,20	1,782	0,441
178,5	0,250	7,35	0,639	0,349
178,7	0,176	5,13	0,455	0,566
178,9	0,163	4,75	0,465	0,620
179,3	0,152	4,44	0,499	0,652

Как и в парциальных сечениях фотоионизации, наблюдаемая в коэффициентах асимметрии структура, за исключением области нижайшего резонанса, формируется за счет вкладов нескольких резонансов, поэтому мы не сопоставляем полученные в нашем расчете вклады отдельных резонансов с результатами фитирования экспериментальных структур. Непосредственное сравнение кривых оказывается в данном случае более наглядным, нежели сравнение на языке параметров, введенных в работе [18].

На рис. 3 приведены парциальные ОСО при ионизации гелия на состояние  $n=2$  иона  $\text{He}^+$ . Как и в сечениях фотоионизации, структуры в ОСО формируются за счет вклада нескольких резонансов, поэтому обработка таких структур в приближении изолированного резонанса на всегда оптимальна.

В табл. 3 приведены зависимости от переданного импульса  $Q$  профильных индексов резонансов в парциальных ОСО. В зависимости профильного индекса  $^1S$ -резонанса от переданного импульса в районе  $Q=3,4$  ат. ед. $^{-1}$  обнаруживается особенность. Такого рода особенности наблюдались и в зависимостях профильных индексов резонансов, расположенных ниже второго порога ионизации He [23]. Сечения ионизации не обнаруживают осо-

Таблица 3

Зависимости профильных индексов нижайших синглетных резонансов из серий, сходящихся к порогу  $n=3$  в He, от переданного импульса при ионизации He быстрыми электронами на  $n=2$  состояние иона  $He^+$ . Настоящий расчет в рамках метода конфигурационного взаимодействия в представлении комплексных чисел

Переданный импульс, ат. ед. <sup>-1</sup>	Значения профильных индексов резонансов с полным моментом $L$			
	$L=0$	$L=1$	$L=2$	$L=3$
0,1	6,18	0,98	2,70	1,20
0,3	4,76	1,07	9,80	1,15
0,5	3,55	1,08	10,0	1,38
1,0	-0,54	1,06	3,86	1,81
1,5	-1,37	1,03	1,84	2,10
3,0	-5,19	1,02	0,64	2,12
3,5	300	1,00	0,55	1,50
4,0	4,75	1,00	0,50	0,81
5,0	2,67	1,14	0,44	-1,10

бенностей, поскольку входящие в выражения для сечений произведения параметров Фано  $q$  и  $\rho^2$  конечны. Зависимости, приведенные в табл. 3, помогают понять, как будут трансформироваться кривые сечений, приведенные на рис. 3, при переходе к иным переданным импульсам.

Опыт проведенных расчетов, сопоставление результатов с данными других авторов и результатами имеющихся экспериментов позволяют сделать следующие заключения.

1. Метод конфигурационного взаимодействия в представлении комплексных чисел обеспечивает описание имеющихся экспериментальных данных по резонансной фотоионизации гелия в области между вторым и третьим порогами ионизации. Это дает основание использовать его для оценки аналогичных характеристик резонансной фотоионизации гелиеподобного лития и описания ОСО при ионизации гелия быстрыми электронами в области выше порога образования возбужденных ионов.

2. Непосредственные расчеты показывают, что использование так называемого резонансного приближения, когда зависимости характеристик резонансов от энергии могут быть заменены их значениями в точке резонанса, в области между вторым и третьим порогами ионизации в гелиеподобных системах оправдано. Таким образом, в этой области спектра в теории можно ввести параметры резонансов и проследить, как формируются огибающие в структурах сечений, наблюдаемые экспериментально. Однозначного соответствия между наблюдаемыми пиками в сечениях и положением отдельных резонансов в общем случае провести не удается.

3. Распад автоионизационных состояний в гелии и гелиеподобном литии в области между вторым и третьим порогами происходит преимущественно с заселением возбужденных состояний остаточных ионов. Соответственно профили резонансов наиболее сильно проявляются в парциальных сечениях ионизации на возбужденные состояния остаточных ионов.

4. Диагонализационное приближение с учетом сильной связи открытых каналов не всегда обеспечивают необходимую точность описания профилей резонансов и огибающих в сечениях.

Научно-исследовательский институт  
ядерной физики  
Московского государственного университета  
им. М. В. Ломоносова

#### Литература

1. Woodruff P. R., Samson J. A. R. Phys. Rev., 1982, v. A25, p. 848.
2. Dhez P., Ederer D. L. J. Phys., 1973, v. B6, p. L59.
3. Lindle D. W., Ferrett T. A. et al. Phys. Rev., 1985, v. A31, p. 714.
4. Ваге А., Иванюк П. Б., Сенашенко В. С. Вестн. МГУ. Сер. 3, Физика, астрономия, 1982, т. 23, с. 49.
5. Senashenko V. S., Wague A. J. Phys., 1979, v. B12, p. L269.
6. Бурков С. М., Страхова С. И. Вестн. МГУ. Сер. 3. Физика, астрономия, 1984, т. 25, с. 42.

7. Бурков С. М., Страхова С. И., Шакиров В. А. В кн.: Автоионизационные явления в атомах и ионах. М.: Изд-во АН СССР, 1983, с. 137.
8. Иванов П. Б., Сенашенко В. С. Там же, с. 34.
9. Salomonson S., Carter S. L., Kelly H. P. J. Phys., 1985, v. B18, p. L149.
10. Бурков С. М., Страхова С. И. Вестн. МГУ. Сер. 3. Физика, астрономия, 1984, т. 25, с. 45.
11. Гайсак М. И., Лендъел В. И. и др. Укр. физ. журн., 1982, т. 27, с. 1617.
12. Berrington K. A., Burke P. G. et al. J. Phys., 1982, v. B15, p. L603.
13. Fano U. Phys. Rev., 1961, v. 124, p. 1866.
14. Fano U., Cooper J. W. Phys. Rev., 1965, v. A137, p. 1364.
15. Starace A. Phys. Rev., 1972, v. B5, p. 1773.
16. Combet-Farnoux F. Phys. Rev., 1982, v. A25, p. 287.
17. Jacobs V. L., Burke P. G. J. Phys., 1972, v. 5, p. L67.
18. Kabachnik N. M., Sazhina I. P. J. Phys., 1976, v. B9, p. 1681.
19. Strakhova S. I., Zajac T. M. Phys. Letts, 1984, v. A105, p. 36.
20. Robb W. D. et al. Phys. Rev., 1975, v. A11, p. 1193.
21. Балашов В. В., Гришанова С. И. и др. Оптика и спектроскопия, 1970, т. 28, с. 859.
22. Tweed R. J. J. Phys., 1972, v. B5, p. 810.
23. Lipovetsky S. S., Senashenko V. S. J. Phys., 1974, v. B7, p. 693.