

АКАДЕМИЯ НАУК СССР

Научный совет по проблеме

"Физика электронных и атомных столкновений"

ОРДЕНА ЛЕНИНА ФИЗИКО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ им. А.Ф.ИОФЕ

Ф И З И К А
Э Л Е К Т Р О Н Н Ы Х И А Т О М Н Ы Х
С Т О Л К Н О В Е Н И Й
(сборник научных трудов)

Ленинград

1989

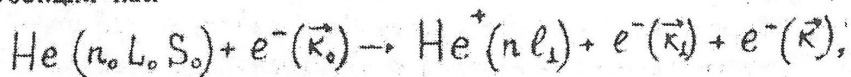
ПОЛНЫЕ И ПАРЦИАЛЬНЫЕ ОБОБЩЕННЫЕ СИЛЫ ОСЦИЛЛЯТОРА ПЕРЕХОДА В КОНТИНУУМ ГЕЛИЯ

С.М.Бурков, Т.М.Заяц, С.И.Страхова

Введение. При ионизации атомов электронами в условиях применимости Борновского приближения обобщенные силы осциллятора перехода (ОСО) в континуум зависят только от переданного импульса и энергии потерь. Кривые ОСО в зависимости от энергии потерь могут иметь резонансную структуру, обусловленную проявлением автоионизационных состояний (АИС) системы. Возбуждение одним электроном двухэлектронных АИС осуществляется за счет электронных корреляций. Таким образом, при изучении ОСО оказывается возможным получать информацию о структуре непрерывного спектра атома, применимости тех или иных моделей описания континуума, механизмов возбуждения и распада АИС. Широкие возможности такого рода исследований для атома гелия уже были продемонстрированы в задаче ионизации его электронным ударом в области АИС между первым и вторым порогами ионизации (60,1-65,4 эВ)/I-5/. При этом АИС имеют единственный канал распада, в результате чего заселяется основное состояние иона He^+ .

В экспериментах по фотоионизации гелия в настоящее время активно изучаются парциальные характеристики процессов, когда ион He^+ остается как в основном, так и в первом возбужденном состояниях /6-8/. Резонансная структура парциальных сечений фотоионизации в этой области (65,4-72,9 эВ) обусловлена АИС гелия, сходящимися к порогу $N = 3$. Большой интерес представляют данные о проявлении этих АИС при отличных от нуля значениях переданного импульса. Экспериментальных данных по резонансным ОСО в гелии в области между вторым и третьим порогами ионизации пока нет. Ниже мы приводим результаты теоретических расчетов.

Общие положения формализма. Обозначим схему рассматриваемой реакции как



где \vec{k}_0 , \vec{k}_1 и \vec{k}' - импульсы налетающего, выбиваемого и рассеянного электронов, соответственно. В борновском приближении ОСО могут быть представлены в виде (например, /9/):

$$\frac{\partial f_{nl\ell_1}(Q)}{\partial E} = \frac{E}{Q^2} \sum_{\ell_2} |\langle nl_1 \ell_1 \ell_2 : L S_0 | \sum_{i=1}^2 e^{i\vec{Q}\vec{r}_i} | n_0 L_0 S_0 \rangle|^2 \quad (I)$$

Здесь $E = k_0^2 - k^2$ - энергия потерь, $\vec{Q} = \vec{k}_0 - \vec{k}$ - передаваемый импульс; $|nl_1 \ell_1 \ell_2 : L S_0\rangle$ - волновая функция гелия с полным моментом L и спином S_0 , при этом электрон с моментом ℓ и энергией ϵ находится в поле иона He^+ ; электрон иона He^+ имеет квантовые числа $(n \ell_1)$; $|n_0 L_0 S_0\rangle$ - волновая функция основного состояния гелия.

Расчетные формулы ОСО перехода в континуум приведены, например, в работах /5,9/. В настоящих расчетах в качестве функции основного состояния гелия использовалась функция с 41 параметром /10/. Сумма по полному моменту гелия ограничивалась вкладом состояний с $L \leq 3$.

Модель непрерывного спектра гелия. Обсуждение результатов расчета. В области спектра гелия между вторым и третьим порогами ионизации открыты четыре канала прямой ионизации для значений полного момента $L \geq 1$ и три канала для $L = 0$, соответствующие электрону над основным и первым возбужденным состояниями иона He^+ . Исследования процесса неупругого рассеяния электронов на ионе He^+ показали, что связь этих открытых каналов в континууме гелия оказывается сильной /11-15/.

В настоящей работе при расчете ОСО перехода волновая функция ионизованного гелия рассчитывалась методом сильной связи каналов. Для значения $L = 0$ решалась система трех, а для остальных значений полного момента - система четырех интегральных уравнений для определения К-матрицы рассеяния электрона на ионе He^+ . Явный вид системы уравнений и связь К-матрицы с функцией континуума приведены, например, в работах /16-17/. Связь открытых каналов существенно меняет абсолютные значения ОСО, соответствующих заселению возбужденных 2s- и 2p-состояний иона He^+ (рис.1). Что же касается канала $(s \ell L)$, то соответствующие ему ОСО в области выше второго порога мало меняются при учете каналов соответствующих ионизации с одновременным возбуждением иона He^+ .

Что касается вклада в ОСО перехода состояний с разными L , то из анализа данных, приведенных на рис.2, видно, что при малых

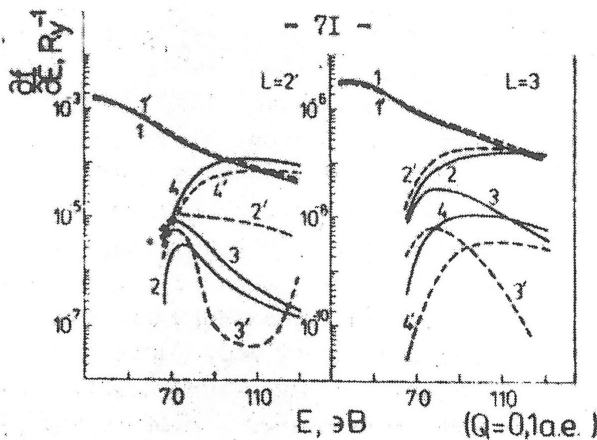


Рис. I.

ОСО прямого перехода в континуум гелия в зависимости от энергии потерь E для значений полного момента $L=2,3$; сплошная кривая - расчет со связью открытых каналов, пунктир - расчет без связи каналов. Значение переданного импульса $Q = 0,1$ а.е. Кривые I и I' соответствуют каналу $l \in L$, 2 и 2' - $2 \in L$, 3 и 3' - $2 \in (L-1)$, 4 и 4' - $2 \in (L-1)$.

значениях переданного импульса (например, $Q = 0,3$) основной вклад в полную ОСО вносят состояния с $L = 0$ и $L = 1$. При увеличении переданного импульса вклад состояний с определенным L убывает с ростом L . Вследствие этого нет оснований ожидать увеличения вклада в полную ОСО состояний с $L > 3$, так как уже $L = 3$ состояние дает малый вклад при всех значениях переданного импульса, рассматривавшихся в расчете.

При малых переданных импульсах вклад парциальных на $n=2$ состояние иона He^+ ОСО прямого перехода в полную ОСО значителен и существенно влияет на поведение кривой (рис.3). Согласно данным эксперимента и теории при $Q=0$ в процессах фотоионизации, остаточный ион He^+ с большей вероятностью остается в состоянии с $n=2$, нежели в состоянии с $n=1$ /6-8, 13/. С ростом Q при значениях переданного импульса $Q \geq 1,0$ а.е. вклад в полную ОСО парциальных ОСО на $n=2$ состояние остаточного иона уменьшается. Зависимость соотношения $(\partial f_{n=2} / \partial E) / (\partial f_{n=1} / \partial E)$ от энергии потерь приведена на рис.4. Анализ этих данных позволяет заключить, что при $Q = 0,1$ а.е. отношение парциальных ОСО изменяется в интервале 0,5 - 10,0; при $Q = 0,3$ а.е. - 0,12 - 2,0; при $Q = 0,5$ а.е. - 0,07 - 1,2. Далее при увеличении Q интервал еще более сужается, затем, начиная с $Q = 2,5$ а.е., наблюдается незначительный рост этого интервала, а при $Q = 5$ а.е. отношение меняется в пределах 0,08 - 0,14.

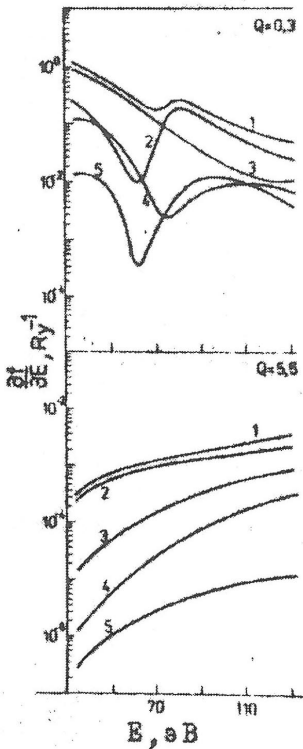


Рис. 2.
Вид в полную ОСО прямых переходов в континуум гелия (кривая 1) состояний с $L=0$ (кривая 2), $L=1$ (кривая 3), $L=2$ (кривая 4) и $L=3$ (кривая 5) для значений переданного импульса $Q=0,3$ и $5,5$ а. е. в зависимости от энергии потерь E .

В области континуума гелия выше порога образования He^+ в состоянии с $n=2$ возбуждаются АИС, сходящиеся к порогу $N=3$ атома He. ОСО перехода в этой области спектра будут иметь немонотонное поведение, обусловленное проявлением АИС. В настоящем расчете при описании состояний гелия в континууме, где расположены сходящиеся к третьему порогу АИС, учитывались межконфигурационные взаимодействия конечного числа базисных конфигураций, соответствующих двухэлектронным состояниям (закрытые каналы) и свободному электрону над основным и первым возбужденным состояниями иона He^+ (открытые каналы). В расчете учитывались состояния с полным моментом гелия $L \leq 3$. Подпространство открытых каналов включало три конфигурации для $L=0$ и четыре для остальных значений L , что соответствовало включению в расчет каналов $1s\epsilon L$, $2s\epsilon L$, $2p\epsilon(L-1)$, $2p\epsilon(L+1)$. Для каждого момента L подпространство закрытых каналов заполнялось двадцатью конфигурациями $3lnl'$ с $l=0, 1$ и 2 . В качестве базисных функций для их описания использовались кулоновские с зарядом $Z=2$. Далее подпространство этих состояний было предварительно диагонализировано.

Подпространство открытых каналов также было предварительно диагонализировано. Процедура получения функций предварительно диагонализированных открытых каналов /16/ в данном случае эквивалентна нахождению волновой функции электрона в поле иона He^+ с учетом сильной связи каналов нерезонансного неупругого рассеяния. Таким образом, в качестве функций предварительно диагонализирован-

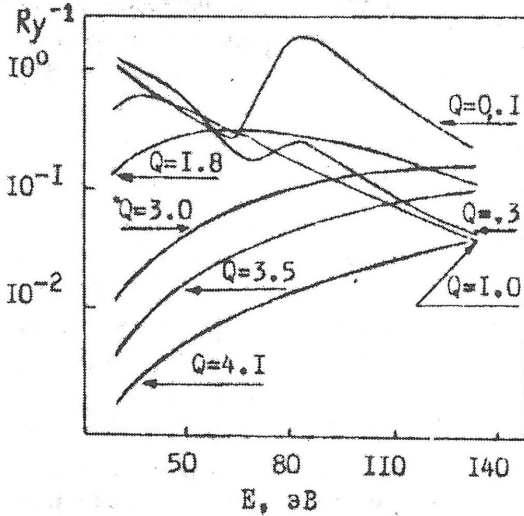


Рис. 3.

ОСО прямых переходов в континуум гелия при различных значениях переданного импульса в интервале $Q=0,1 - 4,1$ а.е. в зависимости от энергии потерь E .

темы уравнений Фано записывалось таким образом, чтобы комплексная волновая функция континуума в области АМС имела Т-матричную асимптотику. Фано /18/ использовал К-матричную асимптотику в представлении вещественных чисел. В рамках этого подхода положения и ширины резонансов рассчитываются как действительная и мнимая части собственных значений комплексной матрицы гамильтониана, учитывающей взаимодействие конфигураций предварительно диагонализированных закрытых каналов через предварительно диагонализированные открытые каналы в точках на и вне энергетической поверхности. Зависимость от энергии собственных значений комплексной матрицы для рассматриваемой области энергии возбуждения гелия слабая, поэтому оказывается возможным и в случае многих резонансов ввести характеристики отдельных АМС - положения E_r , ширины Γ , профильные индексы q в полных и парциальных ОСО - по аналогии с тем, как это сделано в работе Фано /18/ для случая одного резонанса. Характеристики резонансов в данном расчете оказывается возможным ввести в формализм независимо от того, выделен этот резонанс в сечениях как обособленный или он дает вклад

ного подпространства открытых каналов использовались функции непрерывного спектра гелия, полученные решением системы связанных интегральных уравнений для К-матрицы рассеяния электронов на ионе He^+ .

Для учета взаимодействия между предварительно диагонализированными подпространствами закрытых и открытых каналов в настоящей работе использован метод взаимодействующих конфигураций в представлении комплексных чисел

/13/. Общее решение системы уравнений Фано записывалось таким образом, чтобы комплексная волновая функция континуума в области АМС имела Т-матричную асимптотику. Фано /18/ использовал К-матричную асимптотику в представлении вещественных чисел. В рамках этого подхода положения и ширины резонансов рассчитываются как действительная и мнимая части собственных значений комплексной матрицы гамильтониана, учитывающей взаимодействие конфигураций предварительно диагонализированных закрытых каналов через предварительно диагонализированные открытые каналы в точках на и вне энергетической поверхности. Зависимость от энергии собственных значений комплексной матрицы для рассматриваемой области энергии возбуждения гелия слабая, поэтому оказывается возможным и в случае многих резонансов ввести характеристики отдельных АМС - положения E_r , ширины Γ , профильные индексы q в полных и парциальных ОСО - по аналогии с тем, как это сделано в работе Фано /18/ для случая одного резонанса. Характеристики резонансов в данном расчете оказывается возможным ввести в формализм независимо от того, выделен этот резонанс в сечениях как обособленный или он дает вклад

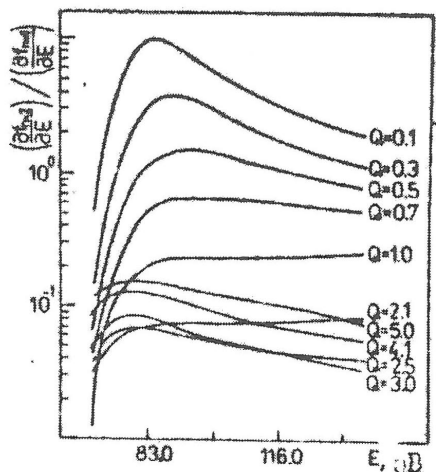


Рис. 4.

Отношение парциальных дифференциальных ОСО прямых переходов в гелии при различных значениях переднего импульса Q (в.е.) в зависимости от энергии потерь E .

сильно проявляется в энергетической зависимости парциальных ОСО, соответствующих ионизации гелия на $n = 2$ состояние иона He^+ (рис. 5-7):

Сравнивая расчеты ОСО резонансных переходов методом взаимодействующих конфигураций в представлении комплексных чисел (рис. 5) с расчетом в диагонализационном приближении (рис. 6), видим, что в ряде случаев, особенно в интервале 70-72 эВ, резонансная структура на рис. 5 более четкая, позволяющая различить вклад в кривые ОСО отдельных резонансов, в то время как на рис. 6 участки кривых носят характер огибающих. Это указывает на то, что для отдельных резонансов взаимодействие в подпространстве закрытых каналов через континуум вне энергетической поверхности играет значительную роль.

Как показали проведенные расчеты, при малых значениях переднего импульса вклад S -терма определяющий, и до значения $Q = 1,0$ в.е. резонансы других термов в суммарных ОСО проявляются слабо. Но уже при $Q = 1,5$ в.е. вклад P -терма превосходит

в огибающую нескольких взаимодействующих близко расположенных резонансов. Формулы, реализующие этот подход для случая резонансной фотоионизации гелия в области между вторым и третьим порогами, приведены, например, в работе /13/. При проведении настоящих расчетов по формуле (1) вышеуказанный формализм был использован для получения волновой функции континуума гелия при определенных значениях полного момента L .

Анализ результатов проведенных расчетов показал, что резонансная структура, обусловленная АИС, наиболее

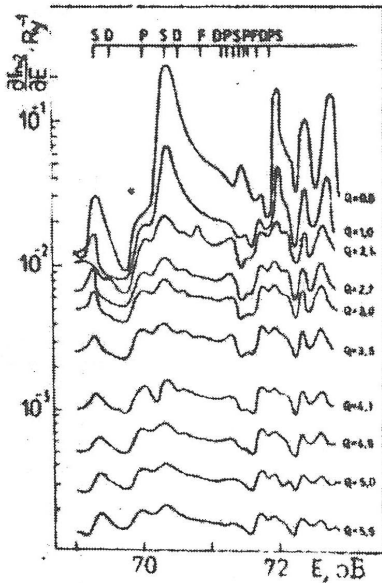


Рис. 5.

Парциальные ОСО перехода в континуум гелия (резонансный процесс) с заселением $n=2$ состояния иона He^+ при различных значениях Q . Расчет проведен методом взаимодействующих конфигураций в представлении комплексных чисел.

вклад S -терма по абсолютной величине и P -резонансы становятся более заметными в парциальных на $n=2$ состоянии остаточного иона ОСО. Нижайший D -резонанс также начинает проявляться при $Q=1,0$ а.е. Первый F -резонанс, как видно из рис.5, имеет выделенный профиль, только начиная с $Q=2,1$ а.е. В диагонализационном расчете (рис.6) его профиль выделен значительно слабее.

При фиксированных значениях энергий потерь, как следует из данных, приведенных на рис.5 и рис.6, абсолютные значения парциальных ОСО, как правило, убывают с ростом переданного импульса Q .

На рис.7 представлено отношение $(\partial f_{n=2}/\partial E)/(\partial f_{n=1}/\partial E)$ парциальных ОСО, соответствующих заселению $n=2$ и $n=1$ состояний иона He^+ в процессе ионизации гелия электронами. Это отно-

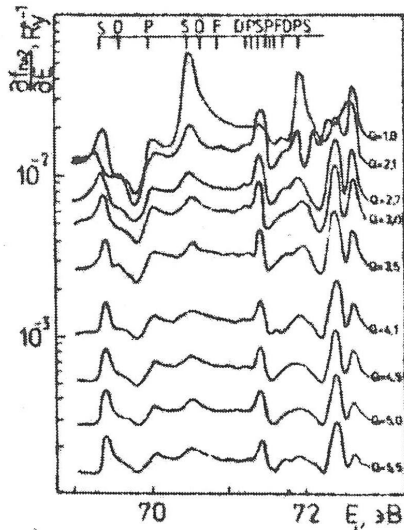


Рис. 6

То же, что на рис.5, но расчет проведен в диагонализационном приближении.

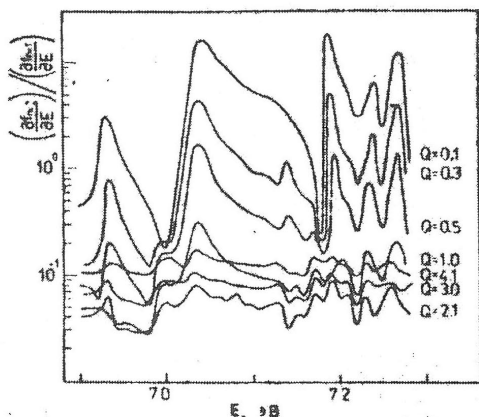


Рис. 7.

Зависимость отношения парциальных ОСО резонансного перехода в континуум гелия на $n=2$ и $n=1$ состояния иона He^+ от энергии потерь для Q в интервале $0,1 - 4,1$ в.е.

сходящихся к третьему порогу, значительно больше при малых значениях переданного импульса.

На рис. 8 приведены примеры зависимостей профильных индексов q , $q_{n=1}$, $q_{n=2}$, а также параметров g^2 , $g_{n=1}^2$ и $g_{n=2}^2$, введенных Фано (1961) и определенных в работе /13/, от переданного импульса. В зависимостях $q_{n=2}$ и q от Q для нижайших 1S и 1F АИС наблюдается разрыв. Соответствующие параметры $g_{n=2}^2$ и g^2 в этих точках стремятся к нулю так, что в кривой ОСО в этих точках не возникает особенностей. Как можно заключить из рис. 15, при $Q \rightarrow 0$ для 1P нижайшего резонанса значения указанных характеристик выходят на фотоионизационный предел /6-8, 13, 19/. Что касается других резонансов, то зависимости такого рода помогают представить, как будут трансформироваться кривые ОСО, приведенные на рис. 5-7, при переходе к другим значениям переданного импульса.

шение также проявляет резонансную структуру. Из рис. 7 видно, что при малых значениях переданного импульса, например, $Q=0,1$ в.е., это отношение изменяется в пределах $0,2-12,0$; при $Q=0,3$ в.е.

в пределах $0,15-4,0$; при $Q=0,5$ в.е. - $0,1-1,5$; при $Q=1,0$ в.е. - $0,04-0,3$ и далее падает; при $Q=3,0$ в.е. это отношение составляет $0,05-0,12$. Таким образом, вероятность заселения возбужденного $n=2$ состояния иона He^+ в процессе ионизации гелия электронным ударом в области АИС,

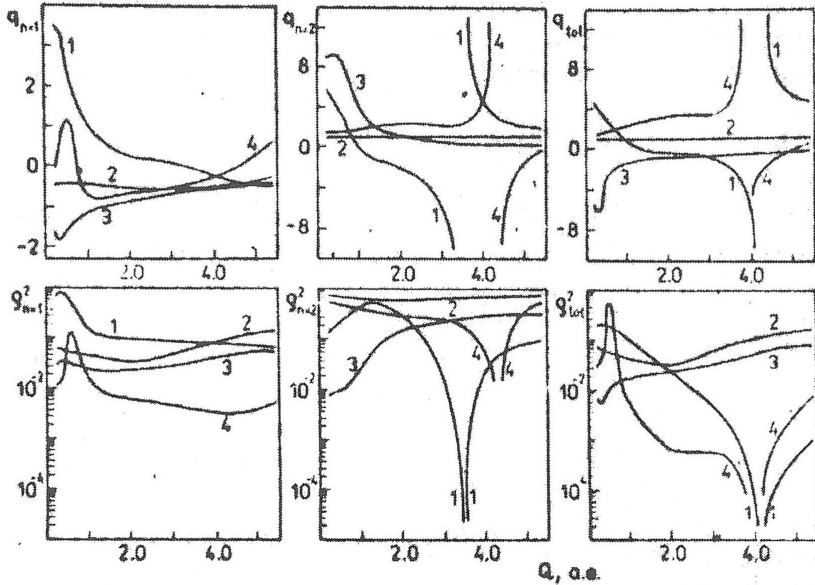


Рис. 8.

Профильные индексы q и параметры q^2 в полных и парциальных на $n=1$ и $n=2$ состояния иона He^+ ОСО перехода для нижайших 4S (кривая 1), 1P (кривая 2), 1D (кривая 3), 1F (кривая 4) резонансов в зависимости от переданного импульса Q . Расчет методом взаимодействующих конфигураций в представлении комплексных чисел.

Авторы благодарят проф. Балашова В.В. за предложенную тему, полезные обсуждения и советы.

Л и т е р а т у р а

1. Silverman S.M., Lassette E.N. // J.Chem.Phys.-1964.-v.40. P.1265.
2. Simpson J.A., Chamberlain G.E., Mielzarek S.R. // Phys.Rev.-1965.-v.A139.-P.1039.
3. Балашов В.В., Липовецкий С.С., Павличенков А.В., Полюдов А., Сеняшенко В.С. // Опт. и спектр.-1972.-Т.32.-С.10.
4. Балашов В.В., Липовецкий С.С., Сеняшенко В.С. // Опт. и спектр.-1973.- Т.35.- С.11.
5. Jacobs V.L. // Phys.Rev.-1974.-v.A10.-p.499.
6. Woodruff P.R., Samson J.A.R. // Phys.Rev.-1982.-v.A25.-p.848.

7. Lindle D.W., Ferrett T.A., Becker U. et al // Phys.Rev., 1985.- V.A31.-P.714.
8. Lindle D.W., Ferrett T.A., Heimann P.A et al // Phys.Rev., 1987.-V.A36.-P.2112.
9. Robb W.D. Rountree S.P., Burnett T. // Phys.Rev., 1975.-V.A11.-P.1193.
10. Tweed R.J. // J.Phys.B: Atom.Mol.Phys.,-1972.-V.5.-p.810.
11. Burke P.G., Taylor A.J. // J.Phys.B: Atom.Mol.Phys.-1969.-V.2.-P.44.
12. Гайсак М.И., Лендлел В.И., Навроцкий В.Т., Сабад Е.П. // УФЖ.- 1982.- Т.27.- С.1616.
13. Burkov S.M., Lotyaev N.A., Strakhova S.I., Zajac T.M. // J. Phys. B: Atom. Mol.Phys.,-1988.-V.21.-P.1195.
14. Заге А., Иванов П.Б., Сенашенко В.С. // Вестник МГУ. Сер.8. Физика.Астрономия.-1982.-Т.23.-№1.-С.49.
15. Salomonson S., Carter S.L., Kelly R.P. // J.Phys.B: Atom. Mol.Phys.,-1985.- V.1.-P.1985.
16. Fano U., Prata F. // Proc.Nat.Acad.Sci.India.-1963.-V.A33.-P.1193.
17. Заяц Т.М., Страхова С.И. // Опт. и спектр.-1985.-Т.59.-С.17.
18. Fano U. // Phys.Rev.,-1961.-V.124.-P.1866.
19. Бурков С.М., Заяц Т.М., Страхова С.И. // Опт. и спектр.-1988.-Т.65.-С.523.