

УДК 539.186.22

ПРЯМАЯ И РЕЗОНАНСНАЯ ФОТОИОНИЗАЦИЯ ИОНОВ ИЗОЭЛЕКТРОННЫХ РЯДОВ НЕОНА И АРГОНА В ОБЛАСТИ НИЖАЙШИХ АВТОИОНИЗАЦИОННЫХ СОСТОЯНИЙ

Зяц Т. М., Страхова С. И.

В интегральной формулировке метода сильной связи каналов проведен расчет сечений прямой и резонансной фотоионизации ионов Na^+ , Mg^{++} , Al^{+++} , а также K^+ , Ca^{++} , Sc^{+++} в области нижайших 1P резонансов типа «частица—дырка» с конфигурацией $ns^{-1}(n+1)p$ 1P и «две частицы—две дырки» с конфигурацией $np^{-2}(^3P)(n+1)s(n+1)p$ 1P . Учтены связь этих состояний между собой, а также два канала их распада на состояния остаточных ионов с конфигурацией np^{-1} . Характеристики резонансов извлекались из кривых сечений аппроксимацией их формулой Фаю для изолированного резонанса. Расчеты проведены в приближении LS -связи.

Сведения о спектрах и характеристиках состояний ионов изоэлектронных рядов многоэлектронных атомов важны для развития техники диагностики плазмы [1]. Основная масса экспериментальных исследований такого рода сконцентрирована на нейтральных атомах. Экспериментальные данные для ионов крайне малочисленны. Для ионов, имеющих конфигурации многоэлектронных атомов инертных газов, они ограничены исследованиями спектров фотопоглощения ионов Na^+ [2] и Mg^{++} [3] и изучением квазистационарных состояний иона Na^+ в процессе возбуждения их электронами [4]. Анализ этих экспериментальных данных был проведен в [5, 6] в рамках методов сильной связи каналов. Упомянутые выше экспериментальные и теоретические исследования касались изучения частично-дырочных резонансов.

Квазистационарные состояния атомов и ионов сильно интерферируют с фоном прямых переходов в континуум. Задача прямой фотоионизации ионов представляет большой самостоятельный интерес в связи с наличием в непрерывном спектре ионов, начиная с K^+ , так называемых резонансов формы в d -волне [7]. Представляет интерес выявление общих закономерностей в сечениях прямой фотоионизации изоэлектронных рядов. Для ионов, изоэлектронных с атомами неона и аргона, такие исследования были проведены в рамках многочастичной теории атомных переходов Чанга [8] и с использованием методов сильной связи каналов в дифференциальной и R -матричной формулировках [9].

В настоящей работе мы рассчитали вклад внешней np -подоболочки в сечения прямой фотоионизации ионов, изоэлектронных с атомами неона и аргона, с учетом сильной связи двух каналов, соответствующих состоянию остаточного иона с конфигурацией np^{-1} . В отличие от расчетов [9] все базисные функции, как и функции основного состояния ионов, рассчитывались в приближении Хартри—Фока. В рамках интегральной формулировки метода сильной связи открытых и закрытых каналов мы рассчитали профили нижайших частично-дырочных резонансов в сечениях резонансной фотоионизации ионов и положения нижайших двухчастичных-двухдырочных состояний.

Техника расчета

Мы использовали интегральный вариант метода сильной связи каналов, в рамках которого были проведены аналогичные расчеты для атомов неона и аргона [15]. В соответствии с формализмом этого подхода для волновой функции

иона в области непрерывного спектра, где располагаются резонансы, необходимо решить систему связанных интегралалгебраических уравнений

$$\begin{aligned}
 (E_\alpha - E) a_{\lambda\alpha} + \sum_{\alpha'} \langle \alpha | \hat{V} | \alpha' \rangle a_{\lambda\alpha'} + \sum_{\lambda'} \int_0^\infty \frac{\langle \alpha | \hat{V} | \lambda' \epsilon' \rangle}{\epsilon' - \epsilon_\lambda} K(\lambda, \lambda', \epsilon) d\epsilon' = \\
 = -\langle \lambda \epsilon_\lambda | \hat{V} | \alpha \rangle, K(\lambda, \lambda', \epsilon) + \sum_{\mu} \int_0^\infty \frac{\langle \lambda' \epsilon' | \hat{V} | \mu \epsilon'' \rangle K(\lambda, \mu, \epsilon'')}{\epsilon'' - \epsilon_\mu} d\epsilon'' + \\
 + \sum_{\alpha'} \langle \lambda' \epsilon' | \hat{V} | \alpha' \rangle a_{\alpha'\lambda} = -\langle \lambda' \epsilon' | \hat{V} | \lambda \epsilon_\lambda \rangle. \quad (1)
 \end{aligned}$$

Здесь $|\alpha\rangle$ и $|\lambda\epsilon\rangle$ — базисные функции подпространств закрытых и открытых каналов, являющиеся собственными функциями некоторого модельного гамильтониана \hat{H}_0 ; $\hat{V} = \hat{H} - \hat{H}_0$, где \hat{H} — полный гамильтониан иона; E_α — собственные значения \hat{H}_0 , $\epsilon_\lambda = E - I_\lambda$, где I_λ — порог открытого канала λ ; интегралы берутся в смысле главного значения. $K(\lambda, \lambda', \epsilon)$ на энергетической поверхности совпадает с K -матрицей рассеяния электрона на соответствующем остаточном ионе, имеющем зарядность на единицу больше зарядности иона, описываемого гамильтонианом \hat{H} . Коэффициенты $a_{\lambda\alpha}$ и $K(\lambda, \lambda', \epsilon)$ следующим образом входят в выражение для функции непрерывного спектра иона в области резонансов:

$$\Psi_\lambda^E = \sum_{\mu} A_\lambda^\mu \left(\sum_{\alpha} a_{\mu\alpha} |\alpha\rangle + \sum_{\lambda'} \int_0^\infty \frac{K(\mu, \lambda', \epsilon)}{\epsilon - \epsilon_{\lambda'}} d\epsilon' + |\mu \epsilon_\mu\rangle \right). \quad (2)$$

Константы A_λ^μ находятся из условия нормировки и должны быть согласованы с нормировкой базисных функций $|\lambda\epsilon\rangle$ и кинематическими множителями в сечениях фотоионизации.

В проведенных нами расчетах в подпространстве закрытых каналов неоподобных ионов учитывалось частично-дырочное состояние $2s^{-1}3p^1P$ и двухчастично-двухдырочное состояние $2p^{-2}(^3P)3s3p^1P$, для аргоноподобных ионов соответственно — $3s^{-1}4p^1P$ - и $3p^{-2}(^3P)4s4p^1P$ -состояния. Базисные волновые функции их и энергии E_α брались в приближении Хартри—Фока с полным самосоглашением. В том же приближении рассчитывались и функции основного состояния ионов. Подпространство открытых каналов включало два состояния $2p^{-1}\epsilon s^1P$ и $2p^{-1}\epsilon d^1P$ для неоподобных и соответственно $3p^{-1}\epsilon s^1P$ и $3p^{-1}\epsilon d^1P$ для аргоноподобных ионов. Базисные функции этих конфигураций рассчитывались в приближении замороженного остова, соответствующего дырке во внешней p -подоболочке.

Расчеты проводились в приближении LS -связи для классификации состояний ионов. Учитывалась возможность прямого возбуждения состояний типа «две частицы—две дырки» из основного состояния за счет неортогональности одночастичных функций Хартри—Фока. Параметры квазистационарных состояний извлекались аппроксимацией резонансных сечений формулой Фано для изолированного резонанса [10]. Расчет проводился по формулам скорости и длины. Расхождение результатов, полученных в этих двух вариантах расчета, составляет $\approx 20\%$.

При расчетах сечений прямой фотоионизации в выражениях (1) и (2) опущены слагаемые, соответствующие вкладу подпространства закрытых каналов. Таким образом, вместо системы четырех уравнений (2) решалась система двух связанных интегральных уравнений для K -матрицы (второе уравнение системы (2)).

Результаты расчета и обсуждение

Вклад внешней p -подоболочки иона в сечение прямой фотоионизации ионов, изоэлектронных с неонем и аргоном, показан соответственно на рис. 1 и 2. Наши расчеты для ионов изоэлектронного ряда неона хорошо согласуются

по абсолютной величине с расчетами, проведенными в [9] в приближении сильной связи открытых каналов в дифференциальной формулировке метода. Тем самым можно сделать вывод, что сечения прямой фотоионизации этих ионов не чувствительны к замене функции Рутана основного состояния, используемой в [9], на функцию Хартри—Фока с полным самосогласованием. Пример сопоставления результатов различных расчетов приведен на рис. 3 для сече-

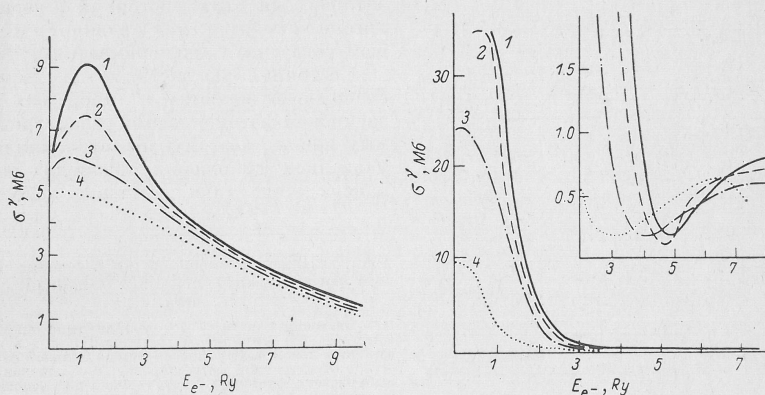


Рис. 1. Вклад $2p$ -подоболочки в сечение прямой фотоионизации неоподобных ионов. L -вариант расчета.

По горизонтальной оси отложена энергия фотоэлектронов. 1 — Ne, 2 — Na⁺, 3 — Mg⁺⁺, 4 — Al⁺⁺⁺.

Рис. 2. Вклад $3p$ -подоболочки в сечения прямой фотоионизации аргоноподобных ионов. L -вариант расчета.

1 — Ar, 2 — K⁺, 3 — Ca⁺⁺, 4 — Sc⁺⁺⁺.

ний прямой фотоионизации иона K⁺. Следует отметить, что различные варианты метода сильной связи каналов дают близкие результаты для сечения прямого процесса. Чтобы не загружать рис. 3, мы привели только L -вариант расчета. Аналогичная ситуация наблюдается при сопоставлении результатов различных расчетов и для других ионов, изоэлектронных с аргоном. Проведенные нами расчеты воспроизводят минимум в сечениях, обусловленный наличием резонанса формы в d -волне. С увеличением зарядности иона минимум сдвигается в область меньших энергий, что согласуется с результатами расчетов [9].

Характеристики нижайших частично-дырочных резонансов в неоподобных и аргоноподобных ионах приведены в табл. 1 и 2. Там, где это возможно,

Таблица 1

Характеристики нижайшего резонанса $2s^{-1}3p\ ^1P$ в неоне и неоподобных ионах

Характеристика	Способ получения	Ne	Na ⁺	Mg ⁺⁺	Al ⁺⁺⁺
E , эВ	Настоящий расчет (L)	24.84	23.34	18.28	9.79
	Эксперимент	23.97 [11]	22.67 [2]	17.88 [13]	
	Другие расчеты		22.69 [6]	18.17 [5] 18.91 [3]	
Γ , эВ	Настоящий расчет (L)	0.0136	0.26	0.26	1.175
	Эксперимент	0.013 ± 0.002 [11]	0.082 [4]		
	Другие расчеты		0.409 [6]	0.10 [5]	
q	Настоящий расчет (L)	-1.87	-1.58	-2.8	-1.12
	Эксперимент	-1.6 ± 0.2 [11]			
ρ^2	Настоящий расчет (L)	0.76	0.64	0.46	0.26
	Эксперимент	0.70 ± 0.07 [11]			

приведены результаты расчетов других авторов и экспериментальные данные. Энергии состояний отсчитываются от соответствующих экспериментальных порогов ионизации. Для полноты в табл. 1—3 приведены также данные настоящего расчета и экспериментальные данные для нижайших частично-дырочных резонансов в неоне и аргоне. Результаты многочисленных расчетов других авторов для этих состояний в неоне и аргоне находятся, как правило, в хорошем согласии с экспериментом [16-19].

Состояния «две частицы—две дырки» слабо возбуждаются в процессах резонансной фотоионизации рассматриваемых ионов, поэтому мы ограничились указанием положений нижайших резонансов этого типа в шкале энергий,

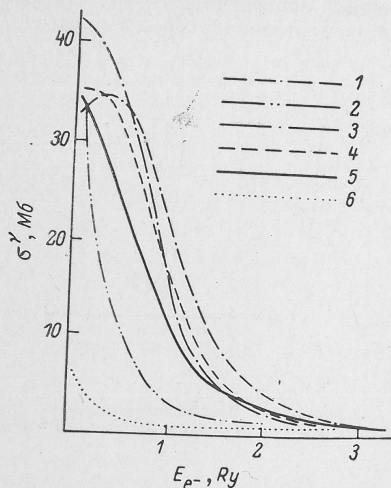


Рис. 3. Вклад $3p$ -подобочки в сечение прямой фотоионизации иона K^+ . L -вариант расчета.

1 — настоящий расчет; 2 — приближение хаотических фаз [8]. Результаты расчетов [1]: 3 — в дифференциальной формулировке метода сильной связи, 4 — в R -матричной формулировке; 5 — ортогональный расчет с функцией Хартри—Фока для основного состояния, 6 — с функцией Германа—Скиллмана. По горизонтальной оси отложена энергия фотоэлектронов.

отсчитываемых от порогов ионизации Хартри—Фока (табл. 3). Для сравнения мы привели и экспериментальные значения для первых порогов ионизации рассматриваемых атомов и ионов.

Авторы благодарят С. М. Буркова, В. А. Шакирова и О. И. Зацаринного за консультации при проведении расчетов на ЭВМ.

Таблица 2

Характеристики нижайшего резонанса $3s^{-1}4p^1P$ в аргоне и аргоноподобных ионах, настоящий расчет, L -вариант

Характеристика	Ar		K ⁺	Ca ⁺⁺	Sc ⁺⁺⁺
	настоящий расчет	эксперимент [12]			
E , эВ	14.63	10.85	12.09	7.61	0.61
Γ , эВ	0.04	0.080 ± 0.005	0.055	0.083	0.11
q	-0.22	-0.22 ± 0.05	-0.895	-0.96	-1.8
p^2	0.89	0.86 ± 0.04	0.81	0.83	0.64

Таблица 3

Энергии нижайшего двухчастичного-двухдырочного состояния и пороги ионизации изоэлектронных рядов неона и аргона

Характеристика	Ne	Na ⁺	Mg ⁺⁺	Al ⁺⁺⁺	Ar	K ⁺	Ca ⁺⁺	Sc ⁺⁺⁺
$E_{XФ}$, эВ	23.83	34.34	45.44	56.55	13.87	17.06	19.44	21.2
$I_{XФ}$, эВ	19.84	45.7	78.65	118.6	14.78	30.43	49.92	72.48
$I_{экс}$ [14], эВ	21.56	47.28	80.15	120.0	15.76	31.63	50.91	73.47

Литература

- [1] Barnett C. P. The Physics of Electronic and Atomic collisions. (IX ICPEAC) / Ed. by J. S. Risley, R. Geballe. Univ. of Washington, Seattle, 1976, p. 846.
- [2] Lucatorto T. B., McIlrath T. J. — Phys. Rev. Lett., 1976, v. 37, p. 428.
- [3] Esteva J. M., Mehlman G. — Astrophys., 1974, v. 193, p. 747.
- [4] Breuckmann E., Breuckmann B., Mehlhorn W. — J. Phys. B, 1977, v. 10, p. 3135.
- [5] Petrini D., Kaslahn E. — J. Phys. B, 1983, v. 16, p. 491.
- [6] Eissner W., Moores D. L., Petrini D. — J. Phys. B, 1980, v. 13, p. 891.
- [7] Manson S. T., Cooper J. W. — Phys. Rev., 1968, v. 165, p. 126.
- [8] Chang T. N. — Phys. Rev., 1977, v. A16, p. 1171.
- [9] Combet-Farnoux F., Lamoureux M. — J. Phys. B, 1976, v. 9, p. 897.
- [10] Fano U. — Phys. Rev., 1961, v. 124, p. 1866.
- [11] Codling K., Madden R. P., Ederer D. L. — Phys. Rev., 1967, v. 155, p. 26.
- [12] Madden R. P., Ederer D. L., Codling K. — Phys. Rev., 1969, v. 177, p. 136.
- [13] Newsom G. H. — Ap. J., 1971, v. 166, p. 243.
- [14] Радциг А. А., Смирнов Б. М. Справочник по атомной и молекулярной физике. М., 1980, с. 69.
- [15] Стрakhova S. I., Shakirov V. A. — J. Phys. B, 1982, v. 15, p. 2149.
- [16] Амусья М. Я., Иванов В. К., Ручиев М. Ю. — В кн.: Автоионизационные явления в атомах. М., 1976, с. 68.
- [17] Amusia M. Ya., Kheifets A. S. — Phys. Lett., 1981, v. A82, p. 407.
- [18] Luke T. M. — J. Phys. B, 1978, v. 11, p. 2457.
- [19] Burke P. G., Taylor K. T. — J. Phys. B, 1975, v. 8, p. 2630.

Поступило в Редакцию 17 июля 1984 г.