

УДК 539.186.2+537.56 : 546.289

ИОНИЗАЦИЯ ГЕЛИЯ БЫСТРЫМИ ЭЛЕКТРОНАМИ В ОБЛАСТИ ВЫШЕ ПОРОГА ОБРАЗОВАНИЯ ВОЗБУЖДЕННЫХ ИОНОВ

Бурков С. М., Зяцк Т. М., Страхова С. И.

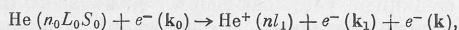
Рассчитаны обобщенные силы осциллятора (ОСО) перехода в непрерывный спектр гелия в области между вторым и третьим порогами при ионизации гелия быстрыми электронами. Получены ОСО для прямой и резонансной ветвей процесса, отношения ОСО при ионизации на $n=1$ и 2 состояния остаточного иона He^+ , параметры автоионизационных состояний, сходящихся к третьему порогу ионизации гелия, в парциальных ОСО. Основное состояние гелия в расчете описывалось многопараметрической функцией. При описании непрерывного спектра гелия в области автоионизационных состояний между вторым и третьим порогами точно учтены все межконфигурационные взаимодействия между 20 конфигурациями, соответствующими двухэлектронным возбуждениям, и четырема конфигурациями со свободным электроном над $n=1$ и 2 состояниями иона He^+ .

При ионизации атомов электронами в условиях применимости борновского приближения обобщенные силы осциллятора перехода (ОСО) в непрерывный спектр определяются только переданным импульсом и энергией потерь [1]. Кривые ОСО в зависимости от энергии потерь могут иметь резонансную структуру, обусловленную проявлением автоионизационных состояний системы (АИС) [2-11]. 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 состояний атома, 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) [2-11]. При этом АИС имеют единственный канал распада, в результате чего заселяется основное состояние иона He^+ . При распаде АИС, расположенных между вторым и третьим порогами ионизации гелия (65.4 ÷ 72.9 эВ), открыт и канал заселения возбужденных $n=2$ состояний остаточных ионов 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 [12-13]. Резонансная структура парциальных сечений фотоионизации в этой области обусловлена наличием АИС гелия, сходящихся к порогу $n=3$. Большой интерес представляют данные о проявлении этих АИС при отличных от нуля значениях переданного импульса. Экспериментальных данных по ОСО в гелии в области между вторым и третьим порогами ионизации пока нет. Далее будут приведены результаты теоретических расчетов характеристик таких процессов.

Общие положения формализма

Обозначим схему рассматриваемой реакции как



где k_0 , k_1 и k — импульсы налетающего, выбиваемого и рассеянного электронов соответственно. В борновском приближении ОСО могут быть представлены в виде [14]

$$\frac{\partial f_{n_l}}{\partial E}(Q) = \frac{E}{Q^2} \sum_{lL} \left| \langle n_l l E l : L S_0 | \sum_{i=1}^2 \exp(iQr_i) | n_0 L_0 S_0 \rangle \right|^2$$

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

Расчетные формулы ОСО перехода в непрерывный спектр приведены, например, в [11, 14]. В качестве функции основного состояния гелия в расчетах использовалась функция Твида с 41 параметром [15]. Сумма по полному моменту гелия ограничивалась вкладом состояний с $L \leq 3$.

Модель непрерывного спектра гелия. Обсуждение результатов расчета

1. Прямая ионизация электронным ударом. В области спектра гелия между вторым и третьим порогами открыты четыре канала прямой ионизации, соответствующие электрону над основным и первым возбужденным состояниями иона He^+ . Как показали исследования процесса неупругого рассеяния электронов на ионе He^+ [16–18] и процессов фотоионизации гелия [18–22], связь этих открытых каналов оказывается сильной. Вследствие этого при описании процессов прямой ионизации He быстрыми электронами в области выше второго порога волновая функция ионизованного гелия рассчитывалась в рамках интегральной формулировки метода сильной связи открытых каналов. Для значения $L=0$ решалась система трех, а для остальных значений полного момента — система четырех интегральных уравнений для определения K -матрицы рассеяния электрона на ионе He^+ . Явный вид системы таких уравнений и связь K -матрицы с требуемой функцией непрерывного спектра приведены, например, в [23]. При решении систем уравнений для K -матрицы в качестве базисных функций для описания электрона в непрерывном спектре использовались решения одноканального уравнения Шредингера с экранированным кулоновским потенциалом.

На рис. 1 для значения передаваемого импульса $Q=1.6$ а. е.⁻¹ выделены вклады в полную ОСО отдельных членов суммы по полному моменту гелия L . Видно, что вклад термина с $L=3$ уже мал. На рис. 1 приведены вклады различных каналов прямого процесса в ОСО в состоянии с $L=0$. Видно, что при расчете ОСО перехода в непрерывный спектр с возбуждением He^+ в состоянии $2p$ и $2s$ необходимо учитывать связь открытых каналов; влияние связи каналов на ОСО по каналу $1s \approx L$ в области между вторым и третьим порогами, как правило, мало.

Согласно проведенным расчетам, в области энергий потерь между вторым и третьим порогами в процессе прямой ионизации заселяется в основном состояние $n=1$ иона He^+ . Так, $(\partial f_{n=2}/\partial E)/(\partial f_{n=1}/\partial E)$ при значении $Q=0.3$ а. е.⁻¹ меняется в области между порогами в интервале от 0.3 до 0.8; а при значении $Q=1$ а. е.⁻¹ в интервале от 0.05 до 0.1. При заселении возбужденного $n=2$ состояния ион He^+ в этой области энергий потерь остается, как и в процессе прямой фотоионизации гелия [12, 13], с большой вероятностью в $2p$ -состоянии. Отношение $(\partial f_{2p}/\partial E)/(\partial f_{2s}/\partial E)$ при значении $Q=0.3$ а. е.⁻¹ меняется в пределах от 3.0 до 2.5, а при $Q=1$ а. е.⁻¹ в пределах от 2.5 до 2.0.

2. Резонансная ионизация гелия в области между вторым и третьим порогами. Состояния гелия в области непрерывного спектра, где расположены АИС, сходящиеся к порогу $n=3$, описывались волновой функцией, учитывающей все межконфигурационные взаимодействия конечного числа базисных конфигураций, соответствующих двух-

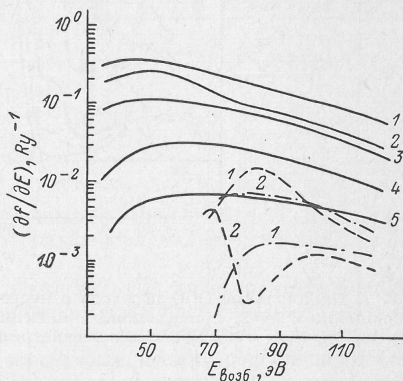
электронным возбуждениям в области между вторым и третьим порогами (закрытые каналы) и электрону с положительной энергией над основным или первым возбужденным состоянием иона He^+ (открытые каналы). В расчете учитывались состояния с полным моментом гелия $L \leq 3$. Для каждого момента L подпространство закрытых каналов заполнялось двадцатью конфигурациями. В качестве базисных функций для их описания использовались кулоновские с зарядом $Z=2$. Далее подпространство этих состояний предварительно диагонализировалось. Подпространство открытых каналов включало три конфигурации для $L=0$ и четыре конфигурации для остальных значений L , что соответствовало включению в расчет каналов, соответствующих основному и первому возбужденному состояниям иона He^+ : $1s\epsilon L$, $2s\epsilon L$, $2p\epsilon(L-1)$, $2p\epsilon(L+1)$.

Подпространство открытых каналов также было предварительно диагонализировано. Процедура получения предварительно диагонализированных функций подпространства открытых каналов [24] в данном случае эквивалентна нахождению волновой функции электрона в поле иона He^+ с учетом сильной связи каналов нерезонансного неупругого рассеяния. Таким образом, в качестве предварительно диагонализированных функций подпространства открытых каналов использовались функции непрерывного спектра гелия, полученные решением системы связанных интегральных уравнений для K -матрицы уравнения электронов на ионе He^+ .

Для точного учета взаимодействия между подпространствами открытых и

Рис. 1. Обобщенные силы осциллятора ОСО перехода в непрерывный спектр гелия при ионизации его электронами для значения переданного импульса $Q=1.6$ а. е.⁻¹.

Сплошные кривые: 1 — полная ОСО, 2 — вклад в полную ОСО состояний с $L=0$, 3 — с $L=1$, 4 — с $L=2$, 5 — с $L=3$. Штриховые кривые: 1 — ОСО в канале $2p\epsilon p^1S$, 2 — в канале $2s\epsilon s^1S$, учтена сильная связь каналов ионизации. Штрихпунктирные кривые: 1 — ОСО в канале $2p\epsilon p^1S$, 2 — в канале $2s\epsilon s^1S$, вариант расчета без учета сильной связи каналов ионизации.



закрытых каналов (предварительно диагонализированных) в настоящей работе использовался метод взаимодействующих конфигураций в представлении комплексных чисел [19]. Общее решение системы уравнений Фано [25] записывалось таким образом, чтобы волновая функция непрерывного спектра в области АИС имела T -матричную асимптотику в отличие от формализма Фано, использовавшего K -матричную асимптотику в представлении вещественных чисел. Все формулы, реализующие этот подход для случая резонансной фотоионизации гелия в области между вторым и третьим порогами ионизации, приведены в [19]. При проведении настоящих расчетов указанный формализм был обобщен на случай описания ионизации гелия электронами. В рамках этого подхода положения и ширины резонансов рассчитываются как действительная и мнимая части собственных значений комплексной матрицы гамильтониана, учитывающей взаимодействия конфигураций предварительно диагонализированных закрытых каналов через предварительно диагонализированные открытые в точках на энергетической поверхности и вне ее. Зависимость от энергии собственных значений комплексной матрицы для рассматриваемой области энергий возбуждения гелия слабая, поэтому оказывается возможным и в случае многих резонансов ввести параметры — характеристики отдельных резонансов (положение E_m , ширина Γ_m , профильный индекс q_m в полных или частичных ОСО) — по аналогии с тем, как это сделано в [25] для случая одного резонанса. Параметры резонанса в данном расчете оказывается возможным ввести в формализм независимо от того, выделен этот резонанс в сечениях как обособленный или он дает вклад в огибающую нескольких взаимодействующих близко расположенных резонансов.

Анализ результатов проведенных расчетов показал, что резонансная структура, обусловленная наличием АИС, сходящихся к третьему порогу ионизации гелия, наиболее сильно проявляется в зависимости от переданной энергии пар-

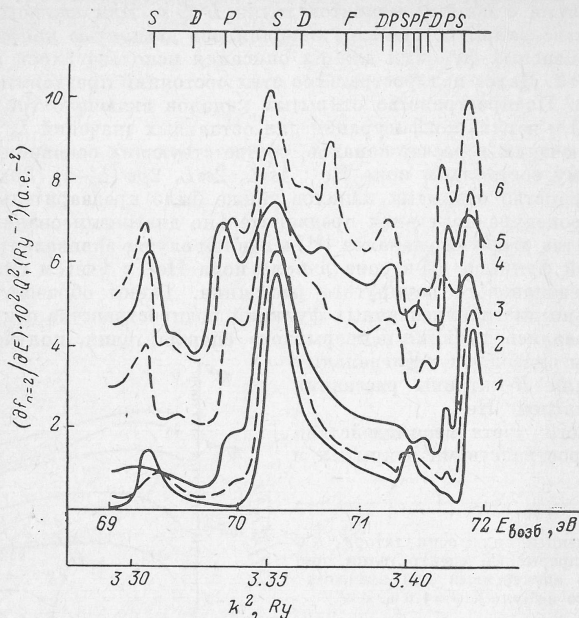


Рис. 2. Парциальные ОСО перехода в непрерывный спектр гелия, когда ион He^+ остается в состоянии с $n=2$, при различных значениях переданного импульса Q . Вверху помечено расчетное положение резонансов с указанием термина.

Q : 1 — 0.1, 2 — 0.5, 3 — 1.0, 4 — 1.6, 5 — 3.0, 6 — 2.1.

циальных ОСО, соответствующих ионизации на $n=2$ состояние иона He^+ . Абсолютные значения и форма кривых ОСО существенно зависят от значения переданного импульса (рис. 2). При этом можно определить значения кинематических переменных, для которых тот или иной резонанс (или группа резонансов) проявляется наиболее вероятно. Так, например, нижайший 1S -резонанс (энергия возбуждения $E=69.32$ эВ, $\Gamma=0.088$ эВ) слабо проявляется при значениях переданного импульса $Q=0.5$ или 1.0 а. е. $^{-1}$; второй 1S -резонанс

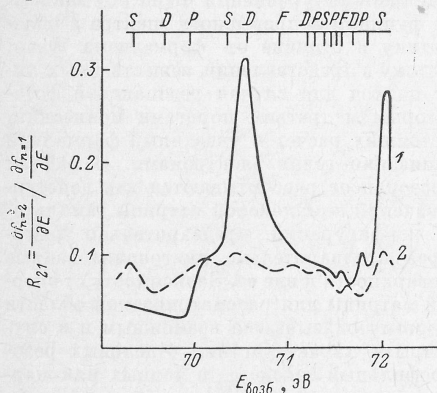


Рис. 3. Отношение парциальных ОСО перехода в непрерывный спектр гелия.

1 — для значения переданного импульса $Q=1$ а. е. $^{-1}$, 2 — для $Q=3$ а. е. $^{-1}$. Вверху помечено расчетное положение резонансов с указанием термина.

($E=70.32$ эВ, $\Gamma=0, 179$ эВ) заметен при всех Q , но лучше проявляется при малых значениях переданного импульса. Как показали проведенные расчеты, при малых значениях переданного импульса (до 1 а. е. $^{-1}$) определяющий вклад

в ОСО дает терм 1S , поэтому в этой области переданных импульсов резонансы термов 1P , 1D и 1F проявляются слабо. При $Q=1.5$ а. е. $^{-1}$ вклад 1P -терма, например, превосходит вклад 1S -терма, и 1P -резонансы начинают проявляться более заметно. Нижайший 1D -резонанс начинает проявляться практически только при $Q > 1.0$ а. е. $^{-1}$.

При фиксированных значениях энергий потерь абсолютные значения парциальных ОСО убывают с ростом переданного импульса Q (рис. 2; учесть, что кривые ОСО умножены на Q^2).

На рис. 3 представлено отношение R_{21} парциальных ОСО, соответствующих заселению $n=2$ и 1 состояний иона He^+ в процессе ионизации гелия. Видно, что при значении $Q=1$ а. е. $^{-1}$ отношение R_{21} меняется в области между вторым и третьим порогами в пределах от 4 до 30 %, а для $Q=3$ а. е. $^{-1}$ в пределах от 5 до 12 %. При дальнейшем увеличении переданного импульса этот интервал еще больше сужается. Наоборот, при $Q < 1$ а. е. $^{-1}$ он значительно шире. Таким образом, вероятность заселения возбужденного $n=2$ состояния остаточного

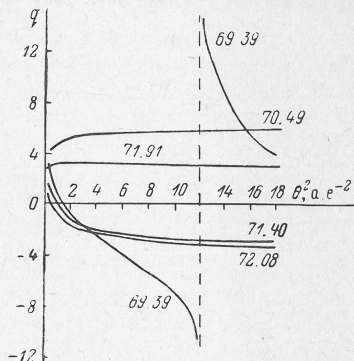


Рис. 4. Профильные индексы нижайших 1S -резонансов (указаны их положения в электронвольтах) в парциальных ОСО перехода на $n=2$, состояние иона He^+ в зависимости от переданного импульса.

иона He^+ в процессе ионизации He электронным ударом в области АИС, сходящихся к третьему порогу, значительно больше при малых значениях переданного импульса.

На рис. 4 приведен пример зависимости профилейных индексов пяти нижайших 1S АИС от переданного импульса. В широком интервале значений переданного импульса они меняются незначительно, за исключением профилейного индекса нижайшего 1S -резонанса, терпящего разрыв. Такого рода зависимости помогают представить, как будут трансформироваться кривые ОСО, приведенные на рис. 2, при переходе к другим значениям переданного импульса.

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

Литература

- [1] Bethe H. — Ann. Phys. (Leipzig), 1930, v. 5, p. 325.
- [2] Silverman S. M., Lassetre E. N. — J. Chem. Phys., 1964, v. 40, p. 1265.
- [3] Simpson J. A., Chamberlein G. E., Mielzarek S. R. — Phys. Rev., 1965, v. A139, p. 1039.
- [4] Voersch H., Geiger J., Schröder B. — Abh. Dtsch. Acad. Wiss. Berl. Kl. Math. Phys. Tech., 1967, v. 1, p. 75.
- [5] Wellenstein H. F., Bonham R. A., Ulsh R. C. — Phys. Rev., 1973, v. A8, p. 304.
- [6] Щемелинин С. Г., Андреев Е. П., Черепков Н. А., Шефтель С. И. — ЖЭТФ, 1976, т. 71, с. 497.
- [7] Dillon M. A. — J. Chem. Phys., 1978, v. 68, p. 2037.
- [8] Ketkar S. N., Fink M., Bonham R. A. — Phys. Rev., 1983, v. A27, p. 806.
- [9] Балашов В. В., Липовецкий С. С. — Опт. и спектр., 1973, т. 32, в. 1, с. 10.
- [10] Балашов В. В., Липовецкий С. С., Сенашенко В. С. — Опт. и спектр., 1973, т. 35, в. 1, с. 11.
- [11] Jacobs V. L. — Phys. Rev., 1974, v. A10, p. 499.
- [12] Woodruff R. P., Samson J. A. R. — Phys. Rev., 1982, v. A25, p. 848.
- [13] Lindle D. W. e. a. — Phys. Rev., 1985, v. A31, p. 714.
- [14] Robb W. D., Rountree S. R., Burnett T. — Phys. Rev., 1975, v. A11, p. 1193.
- [15] Tweed R. J. — J. Phys., 1972, v. B5, p. 810.
- [16] Burke P. G., Taylor A. J. — J. Phys., 1969, v. B2, p. 44.
- [17] Гайсак М. И., Лендзел В. И., Навроцкий В. Т., Сабад Е. П. — Укр. физ. журн., 1982, т. 27, с. 1616.

- [18] Бурков С. М., Страхова С. И. — Вестн. МГУ. Сер. 3, Физика, астрономия, 1984, т. 25, № 4, с. 45.
- [19] Бурков С. М., Страхова С. И. — Вестн. МГУ. Сер. 3, Физика, астрономия, 1984, т. 25, № 3, с. 42.
- [20] Ваге А., Иванов П. Б., Сенашенко В. С. — Вестн. МГУ. Сер. 3, Физика, астрономия, 1982, т. 23, № 1, с. 49.
- [21] Бурков С. М., Заяц Т. М., Летяев Н. А., Страхова С. И. — Изв. АН СССР. Сер. физ., 1986, т. 50, с. 1315.
- [22] Salomonson S., Carter S. L., Kelly H. P. — J. Phys., 1985, v. B18, p. L149.
- [23] Заяц Т. М., Страхова С. И. — Опт. и спектр., 1985, т. 59, в. 1, с. 17.
- [24] Fano U., Prats F. — Proc. Nat. Acad. Sci. India, 1963, v. A33, p. 1193.
- [25] Fano U. — Phys. Rev., 1961, v. 124, p. 1866.

Поступило в Редакцию 23 июля 1987 г.