

01;02

Фотоотрыв электронов из $1s$ -оболочки отрицательного иона лития

© В.К. Иванов, К.В. Лапкин, М.А. Кулов

С.-Петербургский государственный политехнический университет
E-mail: ivanov@tuexph.stu.neva.ru, const@tuexph.stu.neva.ru

Поступило в Редакцию 17 марта 2003 г.

Представлены результаты вычислений сечения фотоотрыва электронов из $1s$ -оболочки отрицательного иона лития. Основное внимание уделяется изучению поведения сечения ионизации $1s$ -электрона на пороге и выше порога с одновременным возбуждением наружного $2s$ -электрона в дискретное состояние. Проводится сравнение с результатами расчетов в рамках метода R -матрицы (Phys. Rev. Lett. 2001. V. 87. P. 023001-1), предсказывающими необычно сильные резонансы в сечении, и с экспериментальными данными.

Недавние вычисления сечения фотоотрыва внутренних $1s$ -электронов от отрицательного иона Li^- в рамках приближения R -матрицы [1] предсказали существование мощных резонансов как на пороге $1s$ -оболочки ($\sim 40 \text{ Mb}$), так и выше порога $1s$. Из числа последних наиболее сильный резонанс в сечении, достигающий $\sim 20 \text{ Mb}$, связывался с процессом фотоотрыва $1s$ -электрона с одновременным возбуждением наружного $2s$ -электрона в $2p$ -состояние нейтрального лития. Поскольку резонансное поведение сечения фотоотрыва доминировало над фоновым в работах [1,2], была выдвинута идея, что физические процессы во внутренних оболочках отрицательных ионов существенно отличаются от аналогичных процессов в нейтральных атомах. Последующие за этими работами экспериментальные измерения сечения как в абсолютных [3], так и в относительных единицах [2] также получили ряд резонансов за порогом $1s$ -оболочки, однако их величины оказались существенно меньшими по сравнению с предсказываемыми. Более того, эксперимент показал отсутствие резонанса на пороге $1s$ -оболочки. Аналогичные результаты были получены для $2p$ -оболочки Na^- [4].

Цель настоящей работы — провести вычисления сечения фотоотрыва $1s$ -электронов от отрицательного иона лития в окрестности порога ионизации в рамках теории многих тел [5,6], в частности рассмотреть

процесс $1s$ -ионизации с возбуждением наружного $2s$ -электрона в ближайшее возбужденное $2p$ -состояние нейтрального Li.

Итак, рассматриваются следующие два канала реакции в дипольном приближении:

$$\text{Li}^{-}(1s^2 2s^2) + \omega \rightarrow \text{Li}^{*}(1s 2s^2) + \varepsilon p, \quad (1a)$$

$$\text{Li}^{-}(1s^2 2s^2) + \omega \rightarrow \text{Li}^{*}(1s 2s 2p) + \varepsilon l', \quad (1b)$$

где ω — энергия фотона, ε — энергия электрона в сплошном спектре, l' соответствует s - и d -состояниям в сплошном спектре. Сечение обоих процессов может быть вычислено по обычным формулам (здесь и далее атомная система единиц: $\hbar = e = m = 1$, энергия — в Ридбергах, см., например, [5]):

$$\sigma_{nl \rightarrow \varepsilon l'}^{(r, \nabla)}(\omega) = \frac{4\pi^2 \alpha}{3} \frac{N_{nl} \omega}{2l + 1} \left| D_{nl \rightarrow \varepsilon l'}^{(r, \nabla)} \right|^2, \quad (2)$$

где α — постоянная тонкой структуры, N_{nl} — число электронов в состоянии nl , $D_{nl \rightarrow \varepsilon l'}^{(r, \nabla)}$ — приведенная амплитуда фотоперехода $nl \rightarrow \varepsilon l'$, вычисленная с операторами „длины“ или „скорости“. Амплитуда $D_{nl \rightarrow \varepsilon l'}^{(r, \nabla)}$ вычисляется с учетом многоэлектронных корреляций.

При вычислениях амплитуд и матричных элементов в качестве базисных используются Хартри–Фоковские (ХФ) волновые функции. Однако одноэлектронные ХФ энергии для основного состояния отрицательного иона лития ($E_{1s} = -63.21$ eV и $E_{2s} = -0.40$ eV) существенно отличаются от экспериментальных энергий связи ($E_{\text{exp } 1s} = -56.9$ eV и $E_{\text{exp } 2s} = -0.618$ eV) [3,7]. Для того чтобы подправить энергии связи и соответствующие волновые функции основного состояния, необходимо выйти за рамки приближения ХФ. В частности, точные одночастичные волновые функции ϕ_E и энергии можно определить из интегрального уравнения, получающегося из уравнения Дайсона для одночастичной функции Грина [8]:

$$\tilde{H}^{(0)} \phi_E(\mathbf{r}) + \int \Sigma_E(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \phi_E(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' = E \phi_E(\mathbf{r}). \quad (3)$$

Здесь $\tilde{H}^{(0)}$ — Хартри–Фоковский гамильтониан иона, $\Sigma_E(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ — собственно-энергетическая часть одночастичной функции Грина, которая играет роль нелокального, зависящего от энергии потенциала.

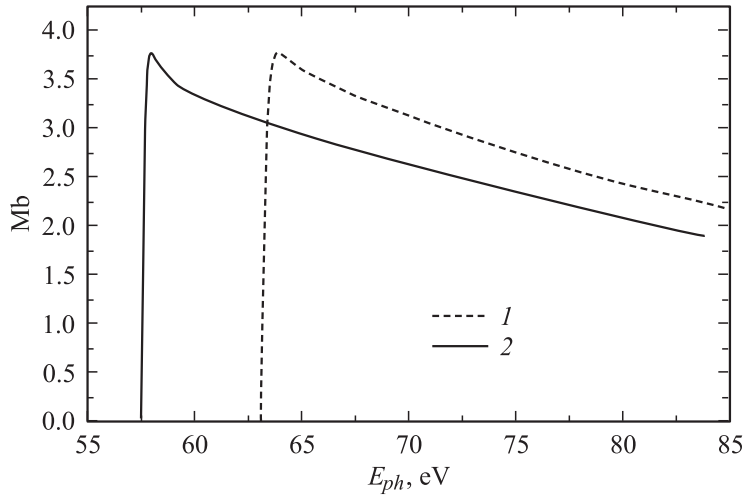


Рис. 1. Сечение фотоотрыва $1s$ -электронов от отрицательного иона Li^- . Расчет: 1 — в приближении ПСФО и 2 — ПСФО с дайсоновскими волновыми функциями основного состояния (E_{ph} — энергия фотона).

Дипольные амплитуды $D_{1s \rightarrow \varepsilon p}^{(r, \nabla)}$ вычислялись в приближении случайных фаз с обменом (ПСФО) [5]:

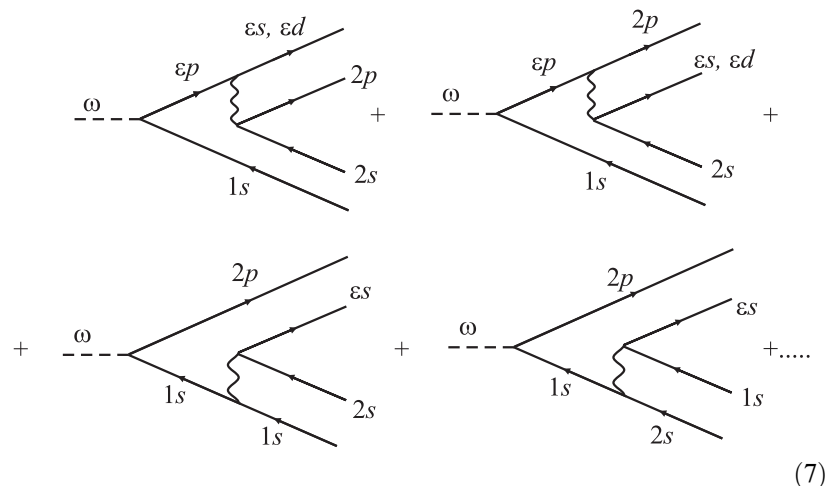
$$\begin{aligned} \langle \varepsilon p | \hat{D}(\omega) | 1s \rangle &= \langle \varepsilon p | \hat{d} | 1s \rangle \\ &+ \sum_{\substack{k_3 \leq F \\ k_4 > F}} \left(\frac{\langle k_2 | \hat{D}(\omega) | k_1 \rangle \langle k_1, \varepsilon p | \hat{U} | k_2, 1s \rangle}{\omega - E_2 + E_1 + i\delta} - \frac{\langle k_1 | \hat{D}(\omega) | k_2 \rangle \langle k_2, \varepsilon p | \hat{U} | k_1, 1s \rangle}{\omega + E_2 - E_1 - i\delta} \right), \end{aligned} \quad (6)$$

где $\langle \hat{d} \rangle$ — дипольный матричный элемент в одночастичном приближении. Дипольные амплитуды $D_{1s \rightarrow \varepsilon p}^{(r, \nabla)}$ вычислялись с двумя наборами волновых функций для основного состояния: с использованием ХФ орбиталей и дайсоновских орбиталей. Волновые функции возбужденных состояний сплошного спектра определялись в рамках ХФ приближения в замороженном остове.

Результаты расчетов сечения процесса (1а) в рамках ПСФО (рис. 1) показывают обычное поведение сечения фотоионизации на пороге

внутренней оболочки: небольшой максимум на пороге ионизации 1s и дальнейшее плавное падение сечения с ростом энергии кванта. Причем большой разницы, за исключением ожидаемого сдвига по энергии, в поведении сечения не наблюдается при использовании чисто ХФ базиса (ПСФО) и дайсоновских орбиталей для основного состояния отрицательного иона (ПСФО+Дайсон).

Для рассмотрения процесса фотоотрыва (16) с возбуждением $2s \rightarrow 2p$ учитывались следующие диаграммы теории возмущений:



Здесь пунктирная линия соответствует налетающему фотону, блок при вершине учитывает корреляции ПСФО для амплитуды фотоэффекта. Первые две амплитуды описывают процесс ионизации, при котором фотоэлектрон выбивает (возбуждает) второй электрон, другие две — процесс „встряски“.

Вычисление амплитуд (7) проводилось с использованием дайсоновских волновых функций для дырочных 1s- и 2s-состояний и с различным выбором волновых функций возбужденных состояний. Волновая функция возбужденного электрона в состоянии 2p не может быть получена в рамках приближения ХВ в замороженном остове Li^- . Поэтому 2p-функция выбиралась из возбужденного состояния 1s2s2p нейтрального Li, вычисленного в самосогласованном приближении ХФ.

Волновые функции вылетающего ϵp -электрона в промежуточном состоянии амплитуд (7) были вычислены в рамках ХФ в двух случаях:

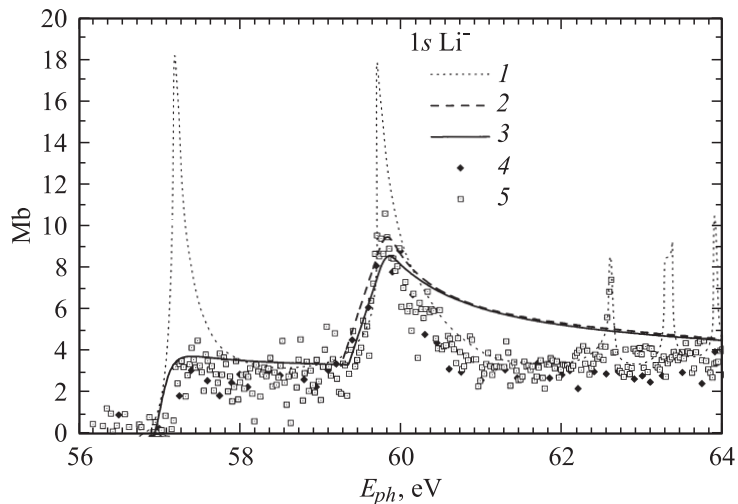


Рис. 2. Сечение фотоотрыва $1s$ -электронов Li^- . Экспериментальные данные из работ [2,3]. Теоретические результаты: 1 — R -матрица [2]; 2 — ϵs , ϵp , ϵd волновые функции в поле дайсоновского замороженного остова; 3 — ϵp функция в поле замороженного остова и перестроенные ϵs , ϵd волновые функции в поле $1s2s2p$ Li (Положение теоретического порога $1s2s2p$ возбуждения сдвинуты на 0.5 eV); 4 — экспериментальные данные [3]; 5 — экспериментальные данные [2].

а — в поле замороженного остова основного состояния Li^- с дыркой в $1s$ -оболочке (в поле дайсоновского остова $1s2s^2$) и б — в поле полностью перестроенного $1s2s^2$ остова [5]. В последнем случае вначале вычислялось самосогласованно в рамках ХФ возбужденное состояние $1s2s^2$, а затем в его поле находились ϵp -функции.

Волновые функции конечных ϵs -, ϵd -состояний также определялись двумя способами. В первом случае ϵs -, ϵd -функции были получены в поле дайсоновского замороженного остова с дыркой в $1s$ -оболочке. Другой подход заключался в рассмотрении этих волновых функций как волновых функций внешнего электрона, движущегося в поле конечного состояния $1s2s2p$ — полностью перестроенного остова.

Парциальное сечение фотоотрыва $1s$ с возбуждением (16) определяется по той же формуле (2), в которой вместо амплитуды $D_{nl \rightarrow \epsilon l'}^{(r, \nabla)}$

подставляется амплитуда (7). Полное сечение фотоионизации представляет собой сумму двух парциальных сечений: сечения процесса (1а) — ПСФО + Дайсон и сечения процесса (1б) с фотоамплитудами (7).

Результаты вычислений полных сечений фотоотрыва $1s$ -электронов с различными волновыми функциями ε_s , ε_p , ε_d -электронов в амплитудах (7) представлены на рис. 2.

Отметим два основных момента. 1. На пороге вычисленное в работе сечение не имеет мощного максимума, предсказанного в [1], и хорошо согласуется с экспериментально полученными данными [2,3]. 2. Все вычисления демонстрируют резонансное поведение сечения при энергиях фотона, соответствующих открытию канала (1б): $1s^2 2s^2 \rightarrow 1s 2s 2p \ell$. Полученные нами сечения имеют в максимуме существенно меньшее сечение, чем предсказано в работах [1,2] и численно лучше согласуются с экспериментом. Наилучшее согласие достигается при использовании волновых функций, полученных в рамках дайсоновского замороженного остова. Однако отметим, что эксперимент дает более острое и симметричное резонансное поведение сечения в окрестности возбуждения $2p$ -состояния, в то время как расчет дает результат ближе к обычной пороговой ступеньке в сечении. Очевидно, что для улучшения согласия с экспериментом необходимо выйти за рамки первого порядка теории возмущений и учесть влияние динамической поляризации остова на вылетающие фотоэлектроны, как это было сделано для основного состояния. Отметим также, что в целом многоэлектронные эффекты во внутренних оболочках отрицательных ионов проявляются сильнее, чем в нейтральных атомах.

Авторы выражают благодарность профессору М.Я. Амусья за обсуждение результатов работы.

Работа выполнена при поддержке гранта Министерства образования России (грант Е02–3.2–267).

Список литературы

- [1] Zhou H.L., Manson S.T., VoKy L. et al. // Phys. Rev. Lett. 2001. V. 87 (2). 023001-1/4.
- [2] Berrah N., Bozek J.D., Wills A.A. et al. // Phys. Rev. Lett. 2001. V. 87 (25). 253002-1/4.
- [3] Kjeldsen H., Andersen P., Folkmann F. et al. // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 2001.

- [4] *Covington A.M., Agilar A., Daves V.T. et al. // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 2001.
- [5] *Амусья М.А. Атомный фотоэффект. М., 1987.*
- [6] *Ivanov V.K. // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 1999. V. 32 (12). R67–R101.
- [7] *Andersen T., Andersen H.H., Balling P. et al. // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 1997. V. 30. P. 3317–3332.
- [8] *Gribakin G.F., Gultsev B.V., Ivanov V.K. et al. // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 1990. V. 23. P. 4505–4519.