

01;02

Автоионизационные резонансы в сечении фотоионизации внешних p -электронов атомов щелочных металлов

© М.А. Кулов, Н.О. Васецкая, В.К. Иванов

С.-Петербургский государственный политехнический университет

E-mail: ivanov@tuexph.stu.neva.ru

Поступило в Редакцию 20 декабря 2004 г.

Представлены результаты расчета сечения фотоионизации внешних p -электронов в атомах рубидия и цезия. Исследована резонансная структура, связанная с возбуждением автоионизационных состояний $ns^1np^6(n+1)s^1mp$ ($m = n+1, n+2, n+3, \dots$). Многоэлектронные корреляции учитываются в рамках приближения случайных фаз с обменом и дальнейших порядков многочастичной теории возмущений. Показана решающая роль двухэлектронных процессов в формировании резонансных профилей. Прослежены различия в поведении электронов с различными проекциями собственного момента.

В последние годы исследование фотоионизации внешних электронов атомов и ионов привлекают внимание как экспериментаторов [1–4], так и теоретиков [4–6 и ссылки там]. Особый интерес связан с диапазоном энергий поглощаемого фотона, близким к энергии возбуждения внутренней электронной оболочки. Благодаря возбуждению внутреннего электрона в автоионизационное квазидискретное состояние, в сечении фотоионизации внешнего электрона образуется резонансный профиль. Процесс, отвечающий за образование резонанса, носит сугубо многоэлектронный характер, поэтому для теоретического описания данного эффекта необходимо правильным образом учесть межэлектронные корреляции [7].

Численный метод, основанный на многочастичной теории возмущений (МТВ), применен в работе для исследования ридберговской серии автоионизационных резонансов $ns \rightarrow (n+1, n+2, n+3, \dots)p$ в атомах рубидия и цезия, спектры которых недавно были измерены экспериментально [2,3]. Электронная структура атомов щелочных металлов представляет замкнутую электронную

оболочку с дополнительным s -электроном снаружи, поэтому ее удобно записывать в рамках спин-поляризованного приближения: $1s \uparrow 1s \downarrow \dots ns \uparrow ns \downarrow np^3 \uparrow np^3 \downarrow (n+1)s \uparrow$ (где стрелками обозначены проекции спина электронов). Если энергия внешнего фотона близка к энергии возбуждения одного из следующих переходов: $ns \uparrow ns \downarrow np^3 \uparrow np^3 \downarrow (n+1)s \uparrow \rightarrow ns \downarrow np^3 \uparrow np^3 \downarrow (n+1)s \uparrow mp \uparrow$ или $ns \uparrow ns \downarrow np^3 \uparrow np^3 \downarrow (n+1)s \uparrow \rightarrow ns \uparrow np^3 \uparrow np^3 \downarrow (n+1)s \uparrow mp \downarrow$, процесс прямой фотоионизации p -электрона конкурирует с резонансной фотоионизацией (через возбуждение автоионизационного состояния). Интерференция этих каналов фотоионизации приводит к формированию асимметричного профиля в сечении фотоионизации оболочки np , который описывается формулой Фано [5]:

$$\sigma(\varepsilon) = \sigma_0 \left(1 - \rho^2 + \rho^2 \frac{(q + \varepsilon)^2}{\varepsilon^2 + 1} \right), \quad (1)$$

где $\varepsilon = 2(\omega - \tilde{\omega}_s)/\gamma$ — безразмерная энергия отстройки от энергии резонанса, измеренная в его полуширинах $\gamma/2$; ω и $\tilde{\omega}_s$ — энергия фотона и перенормированная энергия резонанса соответственно; σ_0 — сечение без учета резонанса; q — профильный индекс; ρ^2 — параметр, определяющий глубину резонанса. Все параметры определяются матричными элементами фотопереходов и эффективного межэлектронного взаимодействия [1,5]. Таким образом, значения резонансных параметров зависят от приближения, выбранного для расчета этих матричных элементов.

Первое приближение для вычисления амплитуд и матричных элементов взаимодействия — это приближение случайных фаз с обменом (ПСФО). В рамках данного приближения учитывается вклад в фотоамплитуды корреляций, связанных с возбуждением одной электрон-дырочной пары в каждый момент времени. Базис одночастичных волновых функций и энергий получен корректировкой базиса, полученного из уравнения Хартри–Фока, методами уравнений Дайсона для собственно энергетической части дырочного пропагатора [5,6]. Учет поправок уравнения Дайсона включает в рассмотрение динамическую поляризацию электронных орбиталей атома, что приводит к лучшему согласию рассчитанных энергий возбуждения с экспериментальными [2,3]. В процедуре ПСФО учитывается взаимодействие 7 различных каналов фотоионизации из наружных оболочек: $ns \uparrow (ns \downarrow) \rightarrow Ep$,

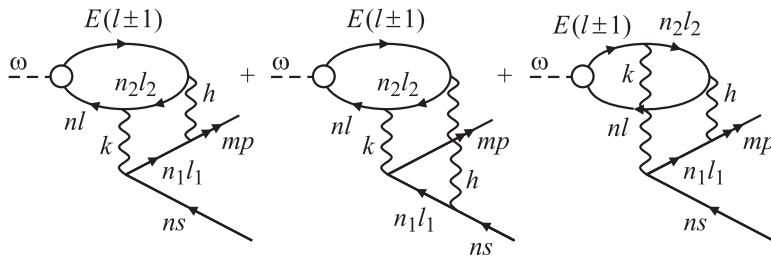


Рис. 1. Диаграммы Голдстоуна, соответствующие амплитуде возбуждения с учетом экранировки.

$np \uparrow (np \downarrow) \rightarrow Ed$, $np \uparrow (np \downarrow) \rightarrow Es$ и $(n+1)s \uparrow \rightarrow Ep$ (E — энергия электрона в конечном состоянии).

Ранее было показано [1,5–7], что включение в расчет корреляций, связанных только с ПСФО и динамической поляризацией, является недостаточным для описания поведения сечения в окрестности аналогичных резонансов в атомах благородных газов. Это связано с тем, что „слабые“ амплитуды дискретных $ns \rightarrow mp$ возбуждений в ПСФО становятся сравнимыми с амплитудами второго порядка МТВ по взаимодействию, выходящего за пределы ПСФО и учитывающего динамическую экранировку взаимодействия возбужденного электрона с дыркой за счет возбуждения второй „сильной“ электрон-дырочной пары (например $np \rightarrow Ed$). Диаграммы Голдстоуна, соответствующие амплитуде возбуждения с учетом экранировки, представлены на рис. 1. Здесь ось времени направлена направо; пунктирная линия соответствует поглощаемому фотону; стрелка вправо (влево) соответствует частице (дырке); волнистая линия соответствует кулоновскому взаимодействию электронов; блок в вершине соответствует амплитуде фотоперехода в ПСФО; k и h — переданные орбитальные моменты; n , l — главное и орбитальное квантовое число электрона из внешней оболочки; n_1l_1 , n_2l_2 — возможные промежуточные состояния. Полный вклад процессов данного порядка в фотоамплитуду получается суммированием диаграмм со всеми возможными наборами k , h , n_1l_1 , n_2l_2 , а также с учетом обменных диаграмм. Наибольшая поправка получается, как и ожидалось, при возбуждении в промежуточном состоянии „сильного“ канала $np \rightarrow Ed$. Аналогичные поправки необходимо учесть и при

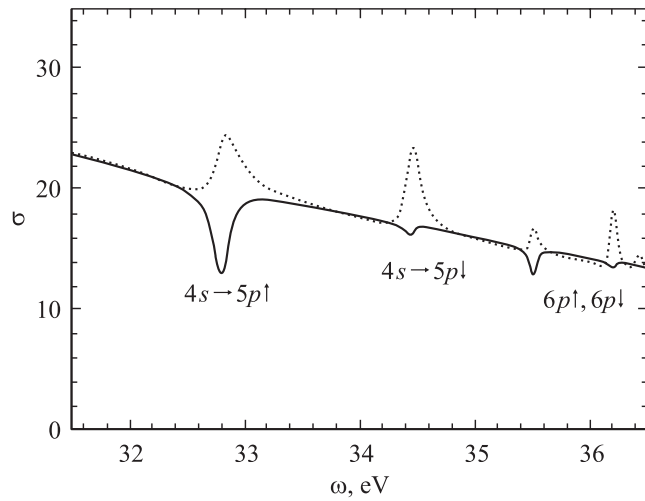


Рис. 2. Сечение фотоионизации наружной $4p$ -оболочки Rb в окрестности возбуждения $4s \rightarrow mp$ автоионизационных резонансов. Расчет: пунктир — приближение ПСФО, сплошная линия — ПСФО + двухэлектронные процессы.

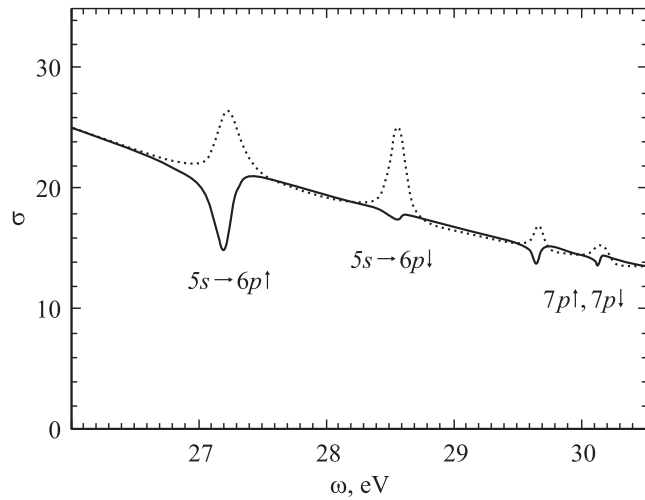


Рис. 3. Сечение фотоионизации наружной $5p$ -оболочки Cs в окрестности возбуждения $5s \rightarrow mp$ автоионизационных резонансов. Расчет: пунктир — приближение ПСФО, сплошная линия — ПСФО + двухэлектронные процессы.

Параметры автоионизационных резонансов в рубидии и цезии

Rb	ПСФО		ПСФО + экранировка		Эксперимент [3]	
	q	γ, eV	q	γ, eV	q	γ, eV
$4s \rightarrow 5p \uparrow$	2.70	0.210	0.05	0.180	0.11 ± 0.05	0.16 (5)
$4s \rightarrow 5p \downarrow$	7.07	0.119	0.32	0.100	0.4 ± 0.1	0.1 (2)
$4s \rightarrow 6p \uparrow$	6.45	0.028	0.09	0.080	0.12 ± 0.02	0.10 (3)
$4s \rightarrow 6p \downarrow$	19.1	0.020	0.41	0.062	—	—
Cs	ПСФО		ПСФО + экранировка		Эксперимент [3]	
	q	γ, eV	q	γ, eV	q	γ, eV
$5s \rightarrow 6p \uparrow$	6.16	0.185	0.23	0.162	0.26 ± 0.01	0.15 (1)
$5s \rightarrow 6p \downarrow$	-24.9	0.102	0.38	0.082	0.5 ± 0.1	0.06 (1)
$5s \rightarrow 7p \uparrow$	-28.4	0.028	0.27	0.057	—	—
$5s \rightarrow 7p \downarrow$	-29.2	0.030	0.44	0.039	—	—

рассмотрении матричных элементов эффективного взаимодействия возбужденного электрона с дыркой, определяющего ширину резонанса. В этом случае фотонная вершина ПСФО заменится на матричный элемент межэлектронного взаимодействия в ПСФО.

Результаты расчетов сечения фотоионизации внешних p -электронов атома рубидия и цезия в окрестности резонансов приведены на рис. 2 и 3 соответственно. В рамках ПСФО резонансы и в Rb, и в Cs носят характер небольших антисимметричных пиков. Однако экспериментально в обоих элементах наблюдаются неглубокие провалы в сечении [2,3]. Учет процессов динамической экранировки приводит к кардинальным изменениям резонансных параметров (ширины, глубины, профильного индекса). Резонансные параметры для первых двух резонансов $ns \uparrow \rightarrow mp \uparrow$ и $ns \downarrow \rightarrow mp \downarrow$ в рубидии и цезии представлены в таблице. Профили резонансов изменяются по сравнению с ПСФО качественным образом, что приводит к значительному улучшению согласия теоретических данных с экспериментальными [2,3].

Таким образом, в работе было показано, что многоэлектронные процессы высокого порядка играют определяющую роль в формировании автоионизационных резонансов в атомах щелочных металлов. Только совместный учет динамической поляризуемости многоэлектронной

системы (ПСФО), динамической поляризации (уравнение Дайсона) и динамической экранировки приводит к удовлетворительному согласию теоретического расчета с экспериментальными данными.

Работа поддержана грантами Министерства образования РФ (Е02–3.2–267, А03–2.9–332).

Список литературы

- [1] *Van Kampen P.* et al. // *Phys. Rev. Lett.* 1997. V. 78 (16). P. 3082–3085.
- [2] *Koide M.* et al. // *J. Phys. Soc. Jpn.* 2002. V. 71 (7). P. 1676–1679.
- [3] *Koide M.* et al. // *J. Phys. Soc. Jpn.* 2002. V. 71 (11). P. 1–13.
- [4] *Neogi A.* et al. // *Phys. Rev. A.* 2003. V. 67. P.042707-1–042707-10.
- [5] *Ivanov V.K., Koulov M.A.* // *Proc. SPIE.* 2003. V. 5127. P. 31–36.
- [6] *Koulov M.A., Vasetskaya N.O., Ivanov V.K.* // *Proc. SPIE.* 2004. V. 5400. P. 50–53.
- [7] *Amusia M.Ya., Kheifets A.S.* // *Phys. Lett. A.* 1982. V. 82 (8). P. 407–411.