

01;02

## Резонансы в сечении фотоотрыва $2p$ -электронов от отрицательного иона $\text{Na}^-$

© В.К. Иванов, П.И. Яцышин

Санкт-Петербургский государственный политехнический университет,  
195251 Санкт-Петербург, Россия  
e-mail: ivanov@tuexph.stu.neva.ru

(Поступило в Редакцию 14 марта 2008 г.)

В рамках методов теории многих тел проведены вычисления сечения фотоотрыва электронов от отрицательного иона  $\text{Na}^-$ . Основное внимание уделено описанию экспериментально обнаруженных резонансов в окрестности порога ионизации внутренней  $2p$ -оболочки. Показано, что решающую роль в образовании резонансов при фотоотрыве играют такие многоэлектронные корреляции, как динамическое экранирование внешнего электромагнитного поля, перестройка оболочек атомного остатка и воздействие поляризованного атомного остатка на фотоэлектрон.

PACS: 31.15.Ar, 32.80.Gc

### Введение

Целью настоящей работы является теоретическое исследование околопороговых резонансов в сечениях фотоотрыва внутренних электронов от отрицательных ионов. Ряд недавних теоретических и экспериментальных работ (см. обзоры [1–3]) показал, что поведение сечения фотоионизации в окрестности порогов внутренних оболочек отрицательных ионов существенно отличается от его поведения в нейтральных атомах. Основное отличие связано с появлением околопороговых резонансов, которые отсутствуют в нейтральных атомах. Кроме того, было показано, что амплитуда и сечение фотоотрыва от отрицательных ионов сильно чувствительны к многоэлектронным взаимодействиям.

В представленной работе приводятся результаты *ab initio* вычислений сечения фотоотрыва  $2p$ -электронов от отрицательного иона  $\text{Na}^-$  ( $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 1S$ ), для которого эксперимент обнаружил ряд резонансов в окрестности порога ионизации  $2p$ -оболочки [4]. Основное внимание уделено описанию двух экспериментально наблюдаемых резонансов в сечении фотоотрыва: непосредственно на пороге  $2p$ -оболочки ( $\approx 31$ – $32$  eV), и широкого резонанса сразу за порогом в области  $\approx 34$ – $36$  eV. Вычисления проведены с последовательным учетом многоэлектронных корреляций в рамках методов квантовой теории многих тел. Численный расчет осуществлялся с помощью комплекса вычислительных программ теоретической группы кафедры экспериментальной физики СПбГПУ.

Многоэлектронные корреляции играют определяющую роль в описании резонансных процессов фотоотрыва электронов от отрицательных ионов. В рассматриваемой задаче их можно разделить на три группы. Коллективный динамический отклик электронной системы на внешнее электромагнитное поле рассчитывался в рамках приближения случайных фаз с обменом (ПСФО) [1,2,5,6]. Эффекты релаксации, связанные

с перестройкой остова системы после вылета фотоэлектрона, учитывались обобщенным методом ПСФО (ОПСФО) [5–7]. И наконец, было рассмотрено влияние поляризованного фотоэлектроном остова на движение самого фотоэлектрона. Для его учета с помощью уравнения Дайсона для одночастичной функции Грина отрицательного иона была найдена фаза упругого рассеяния фотоэлектрона. Она использовалась для получения параметров полуэмпирического потенциала, который вводился в уравнения Хартри–Фока для описания поляризационного взаимодействия между остовом и фотоэлектроном [5,6,8].

Аналогичные эффекты были рассмотрены и учтены ранее в вычислениях сечений фотоотрыва внутренних электронов от ионов  $\text{Li}^-$  [3,9,10] и  $\text{C}^-$  [11]. На эксперименте в случае фотоотрыва  $1s$ -электрона от иона  $\text{Li}^-$  резонанс в окрестности порога  $1s$ -оболочки отсутствует, в то время как на пороге  $1s$ -оболочки иона  $\text{C}^-$  проявляется сильный резонанс в сечении. Физическая причина этого различия была описана в работах [1,3,10,11]. В работе [11] был проведен расчет точной волновой функции фотоэлектрона в поле поляризованного его движением атомного остатка. Все вычисления показали решающую роль поляризационного взаимодействия в описании экспериментальных сечений фотоотрыва.

Кроме того, за порогом фотоотрыва  $1s$ -электрона от  $\text{Li}^-$  был обнаружен резонанс, связанный с двухэлектронным процессом, при котором наряду с фотоионизацией происходит возбуждение электрона внутренней  $1s$ -оболочки [3,10]. Как было показано в [5,6,10], большую роль в формировании формы таких резонансов играют эффекты послестолкновительного взаимодействия.

В настоящей работе использована атомная система единиц:  $e = m_e = \hbar = 1$ , единица энергии — Ридберг. В следующем разделе описываются основные использованные приближения и методы; далее приводятся результаты расчета и сравнение их с экспериментальными данными.

## 1. Основные уравнения

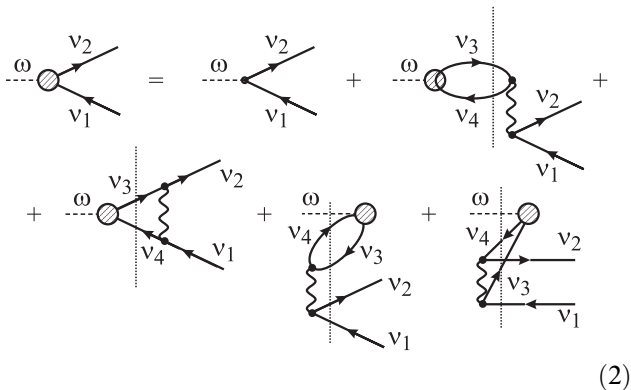
### 1.1. Приближение случайных фаз с обменом

В данной работе в качестве одноэлектронного базиса используются функции, полученные в приближении Хартри–Фока (ХФ):

$$\hat{H}^{(0)}\varphi_v^{(0)}(\mathbf{r}) = \varepsilon_v^{(0)}\varphi_v^{(0)}(\mathbf{r}), \quad (1)$$

где  $\varepsilon_v^{(0)}$  — ХФ энергия электрона в состоянии  $v$ . Множество собственных функций  $\hat{H}^{(0)}$  включает дискретные  $\varphi_{nl}^{(0)}(x)$  ( $v = nl$ ), соответствующие заполненным оболочкам отрицательного иона в основном состоянии, и непрерывные  $\varphi_{\varepsilon l}^{(0)}(x)$  ( $v = \varepsilon l$ ). Последние описывают электроны, рассеянные ХФ потенциалом нейтрального атома.

ПСФО является многочастичным обобщением метода ХФ. Уравнения ПСФО могут быть получены путем введения зависимости от времени в уравнении (1) для системы, находящейся в слабом внешнем электромагнитном поле [5,6]. В представлении диаграммной техники уравнения ПСФО для амплитуды фотоперехода  $v_1 \rightarrow v_2$  имеют вид, представленный на диаграмме (2).



Сплошная линия со стрелкой направо (налево) соответствует распространению электрона (дырки — электрона ниже поверхности Ферми  $F$ ), пунктир — налетающему фотону энергии  $\omega$ , волнистая — кулоновскому взаимодействию, а заштрихованный блок — корреляциям ПСФО. По всем промежуточным состояниям, отмеченным в (2) вертикальным рассечением, происходит суммирование.

Аналитически ПСФО представляет собой систему зацепляющихся интегральных уравнений для матричного элемента оператора взаимодействия с полем  $\hat{D}(\omega)$ :

$$\langle v_2 | \hat{D}(\omega) | v_1 \rangle = \langle v_2 | \hat{d} | v_1 \rangle + \sum_{v_3, v_4} \frac{(n_{v_3} - n_{v_4}) \langle v_2 | \hat{D}(\omega) | v_3 \rangle \langle v_2 v_3 | \hat{U} | v_1 v_4 \rangle}{\varepsilon_{v_3} - \varepsilon_{v_4} + \omega + i\delta(1 - 2n_{v_4})}, \quad (3)$$

где  $\hat{d}$  — одночастичный оператор взаимодействия с полем;  $n_v$  — ступенчатая функция Ферми ( $n_v = 1$ ,  $v \leq F$ ;  $n_v = 0$ ,  $v > F$ ),  $\delta \rightarrow +0$ ,  $\varepsilon_v$  — энергия состояния  $v$ , а комбинированный матричный элемент

$\langle k_1 k_2 | \hat{U} | k_3 k_4 \rangle = \langle k_1 k_2 | \hat{V} | k_3 k_4 - k_4 k_3 \rangle$  представляет собой сумму прямого и обменного кулоновских матричных элементов. Оператор  $\hat{d}$  может быть представлен в форме скорости:  $\hat{d} \equiv \hat{d}^{\nabla} = i(\mathbf{e}\nabla)$  или форме длины:  $\hat{d} \equiv \hat{d}^r = \omega(\mathbf{e}\mathbf{r})$ , где  $\mathbf{e}$  — вектор поляризации фотона. В соответствии с этим различают формы длины и скорости для оператора  $\hat{D}(\omega)$ .

Дипольная амплитуда фотоионизации (3) представляет собой сумму двух членов. Первый описывает удаление электрона за счет его непосредственного взаимодействия с полем, а второй, корреляционный, — удаление электрона под влиянием динамической реакции многоэлектронной системы на внешнее поле. Коллективная реакция системы проявляется в образовании виртуальных электрон-дырочных пар. Таким образом, учитывается поляризация системы внешним электромагнитным полем. Однако влияние на движение фотоэлектрона таких эффектов, как деформация остова системы за счет образования вакансии и его поляризация вылетающим фотоэлектроном, не описываются в рамках ПСФО.

Если известна дипольная амплитуда электрон-фотонного взаимодействия  $\langle v_1 | \hat{M}(\omega) | v_2 \rangle$ , полное сечение фотоионизации иона получается, согласно известной формуле [5,6]

$$\sigma(\omega) = \frac{4\pi^2}{\omega c} \sum_{v_1 \leq F} \int |\langle v_1 | \hat{M}(\omega) | v_2 \rangle|^2 \delta(\omega - E_{v_2} + E_{v_1}) dv_2. \quad (4)$$

Например, без учета корреляций ПСФО  $\langle v_1 | \hat{M}(\omega) | v_2 \rangle = \langle v_1 | \hat{d} | v_2 \rangle$ , а с их учетом —  $\langle v_1 | \hat{M}(\omega) | v_2 \rangle = \langle v_1 | \hat{D}(\omega) | v_2 \rangle$ .

### 1.2. Эффекты релаксации атомного остатка

Поскольку ПСФО использует ХФ волновые функции замороженного остова, остаются неучтенными эффекты, связанные с перестройкой системы после вылета фотоэлектрона. Межэлектронное взаимодействие приводит как к смешиванию волновых функций вакансии и фотоэлектрона с функциями других электронов, так и к тому, что потенциал ионизации не совпадает с ХФ энергиями уровней ( $\varepsilon_v \neq \varepsilon_v^{(0)}$ ). Влияние перестройки носит динамический характер, зависит от скорости удаляемого электрона, поэтому точный ее учет является чрезвычайно сложной задачей.

Если считать, что релаксация происходит очень быстро, то вылетающий фотоэлектрон с самого начала будет двигаться в поле полностью перестроенного атомного остатка. Такое статическое приближение соответствует модели ОПСФО [7]. С точки зрения теории многих тел, ОПСФО суммирует последовательность диаграмм рассеяния фотоэлектрона на остове диагональных по дырочному состоянию и учитывающих в неприводимой части только однократное взаимодействие фотоэлектрона с остовом.

Недиагональные по дырочному состоянию диаграммы малы в связи с большой энергетической разделенностью

внутренних оболочек. Влияние релаксационных процессов на движение перестроенной дырки также сводится к изменению самосогласованного поля, действующего на нее. В [7] показано, что при этом волновая функция дырки изменяется слабо. Учитывая это, можно при расчете амплитуд использовать в качестве волновых функций дырок их ХФ функции, а в качестве энергий — подставить в (3) экспериментальные значения потенциалов ионизации ( $\varepsilon_v = -I_v$ ).

Таким образом, в ОПСФО волновая функция фотоэлектрона рассчитывается в самосогласованном ХФ поле нейтрального атома с вакансией в ионизируемой оболочке. Дипольную амплитуду и кулоновские матричные элементы, входящие в (3), следует вычислять с использованием новых волновых функций для частичных состояний и старых, хартри-фоковских — для дырочных.

### 1.3. Поляризационное взаимодействие

Двигаясь в поле атомного остатка, фотоэлектрон поляризует его, вызывая реальные или виртуальные возбуждения. Поляризация остова в свою очередь сказывается на волновой функции фотоэлектрона, который в результате испытывает дополнительное воздействие, вызванное движением самого электрона и поэтому зависящее от его характеристик — углового момента и энергии. Это дополнительное воздействие описывается динамическим поляризационным потенциалом.

Точная волновая функция вылетающего электрона с энергией  $E \equiv \varepsilon = k^2/2 > 0$ ,  $\varphi_E(\mathbf{r}) \neq \varphi_E^{(0)}(\mathbf{r})$  удовлетворяет уравнению [5,8,11]

$$\hat{H}^{(0)}\varphi_E(\mathbf{r}) + \int \Sigma_E(\mathbf{r}, \mathbf{r}')\varphi_E(\mathbf{r}')d\mathbf{r}' = E\varphi_E(\mathbf{r}), \quad (5)$$

где  $\Sigma_E(\mathbf{r}, \mathbf{r})'$  — зависящий от энергии нелокальный потенциал, который учитывает корреляционные взаимодействия фотоэлектрона с атомным остатком. Параметр  $\Sigma_E(\mathbf{r}, \mathbf{r})'$  равен неприводимой собственно энергетической части одночастичной функции Грина отрицательно иона и может быть представлен в виде диаграммного разложения по степеням межэлектронного взаимодействия.

Результатом рассеяния фотоэлектрона на атомном остатке является поправка к фазе, которая определяется асимптотическим выражением для радиальной составляющей его волновой функции  $\varphi_\varepsilon(\mathbf{r})$ :

$$P_{kl}(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \sin(kr - l\pi/2 + \delta_l(\varepsilon)). \quad (6)$$

Полный сдвиг фазы  $\delta_l(\varepsilon)$  можно представить как сумму сдвига за счет рассеяния на ХФ потенциале  $\delta_l^{(0)}(\varepsilon)$  и сдвига  $\Delta\delta_l(\varepsilon)$ , связанного с рассеянием на поляризационном потенциале  $\Sigma_F(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$  [5,6,8,10]

$$\delta_l(\varepsilon) = \delta_l^{(0)}(\varepsilon) + \Delta\delta_l(\varepsilon). \quad (7)$$

Если известны значения диагональных матричных элементов приводимой собственно энергетической части

функции Грина, можно непосредственно получить фазовые сдвиги без вычисления волновой функции (5)

$$\text{tg}(\Delta\delta_l(\varepsilon)) = -\pi \langle \varepsilon l | \tilde{\Sigma}_\varepsilon | \varepsilon l \rangle, \quad (8)$$

где  $\langle \varepsilon l | \tilde{\Sigma}_\varepsilon | \varepsilon l \rangle$  — диагональный матричный элемент приводимой собственно энергетической части. Он удовлетворяет уравнению Дайсона [5,6,8], представленному диаграммой (9).

$$\tilde{\Sigma} = \Sigma + \Sigma \tilde{\Sigma} \Sigma + \Sigma \tilde{\Sigma} \Sigma \tilde{\Sigma} \Sigma + \dots \quad (9)$$

Аналитически это уравнение записывается так:

$$\langle \varepsilon | \tilde{\Sigma}_E | \varepsilon \rangle = \langle \varepsilon | \Sigma_E | \varepsilon \rangle + \int_{\varepsilon_n} \Sigma \frac{\langle \varepsilon | \Sigma_E | \varepsilon_n \rangle \langle \varepsilon_n | \tilde{\Sigma}_E | \varepsilon \rangle}{\varepsilon - \varepsilon_n}. \quad (10)$$

Для неприводимой собственно энергетической части воспользуемся приближением во втором порядке теории многих тел [7,8]

$$\langle \varepsilon | \Sigma_E | \varepsilon' \rangle = \left( \sum_{k_1 > F} \sum_{\substack{k_2 > F \\ k_3 \leq F}} + \sum_{k_1 \leq F} \sum_{\substack{k_2 \leq F \\ k_3 > F}} \right) \times \frac{\langle \varepsilon k_3 | \hat{U} | k_2 k_1 \rangle \langle k_1 k_2 | \hat{V} | k_3 \varepsilon' \rangle}{\varepsilon - E_{k_1} - E_{k_2} + E_{k_3} + i\delta(1 - 2n_{k_1})}. \quad (11)$$

Решение уравнения (10) с неприводимой собственно энергетической частью (11) позволяет определить точную фазу вылетающего электрона (7) с учетом поляризационного взаимодействия.

### 1.4. Локальный поляризационный потенциал

Уравнение (5) позволяет определить волновую функцию фотоэлектрона с учетом поляризации остова. При совмещении этой процедуры с учетом многоэлектронных корреляций (3) необходимо вычислить поляризационные волновые функции конечного и всех промежуточных состояний.

С другой стороны, известно, что при малых энергиях  $\varepsilon$  величина  $\Sigma_\varepsilon(\mathbf{r}, \mathbf{r})'$  локальна, не зависит от  $\varepsilon$  и имеет в области  $r \gg 1$  вид потенциала диполя [5,6,8]

$$\Sigma_\varepsilon(r) = -\frac{\alpha}{2r^4}, \quad (12)$$

где  $\alpha$  — дипольная поляризуемость атомного остатка. Поэтому в достаточно небольшом интервале энергий около порога можно заменить  $\Sigma_\varepsilon(\mathbf{r}, \mathbf{r})'$  на локальный потенциал, эффективно учитывающий влияние поляризации атомного остатка на фотоэлектрон [10] и имеющий асимптотику (12)

$$\Sigma(r) = -\frac{\alpha}{2(r^2 + h^2)^2}. \quad (13)$$

Чтобы потенциал (13) правильно описывал поведение точного потенциала вблизи порога, параметры  $\alpha$  и  $h$  будем подбирать таким образом, чтобы фаза полученных „поляризованных“ волновых функций фотоэлектрона воспроизводила поведение точной фазы (7).

Решение уравнений ХФ с дополнительным потенциалом (7) определяет новые волновые функции электронов, которые используются при расчете амплитуд и матричных элементов в приближениях ПСФО и ОПСФО.

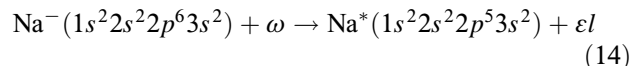
## 2. Сечение фотоотрыва от $\text{Na}^-$ в окрестности оболочки $2p$

В экспериментально измеренном сечении фотоотрыва электронов от отрицательного иона натрия было обнаружено несколько резонансов [4] (см. рисунок). В отличие от иона лития, где на пороге  $1s$ -оболочки резонанс отсутствует [3,10], у  $\text{Na}^-$  при энергии  $\approx 31$  eV, на самом пороге  $2p$ -оболочки, наблюдается резонансное поведение сечения. Однако этот околопороговый резонанс  $\text{Na}^-$  выражен в меньшей степени, чем резонанс у порога  $1s$ -оболочки иона  $\text{C}^-$  [11]. В интервалах  $\approx 34$ – $35$  eV и около  $36$  eV соответственно обнаружены широкий и узкий резонансы, которые авторами эксперимента [4] были связаны с процессами фотоионизации с возбуждением внешних электронов. В данной работе мы ограничились описанием околопорогового резонанса и широкого резонанса в области  $\approx 34$ – $35$  eV.

После перехода к радиальным составляющим волновых функций и приведенным матричным элементам [5] были выполнены численные расчеты. Сначала были вычислены ХФ волновые функции и одноэлектронные энергии для основного состояния иона  $\text{Na}^-$ . Так, для двух внешних оболочек расчетные значения одноэлектронных энергий равны  $E_{2p} = -37.33$ ,  $E_{3s} =$

$-0.36$  eV, в то время как экспериментальные значения —  $E_{2p} = -31.49$ ,  $E_{3s} = -0.54$  eV. Волновые функции оболочек рассчитывались вплоть до значений радиуса  $R = 100$  а.е. Бесконечный набор функций непрерывного спектра аппроксимировался конечным числом ХФ электронных состояний. При этом интегральные уравнения (3) и (10) сводятся к линейным.

В процессе фотоотрыва  $2p$ -электрона

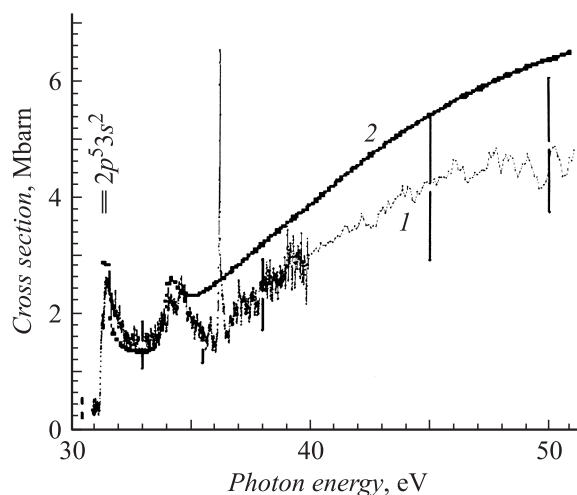


в длинноволновом приближении возможны два значения момента  $l = 0$  или  $2$ . Каждая парциальная волна при расчете была представлена 45 волновыми функциями, эквидистантными по значениям импульса ( $\epsilon = k^2/2$ ). Например, для состояний  $s$ -волны брался набор функций с импульсами  $k = 0.03, 0.13, 0.23, \dots, 4.43$  а.е. При этом в соответствии с разд. 1.2 для учета релаксации расчет производился в самосогласованном поле перестроенного иона с вакансией в оболочке  $2p$ , а при решении уравнений (3) были использованы экспериментальные значения энергий дырочных состояний.

Полное сечение фотоионизации дается формулой (4). Как известно, в ПСФО представления длины и скорости для оператора взаимодействия с полем эквивалентны, т.е. результаты расчетов не должны зависеть от использованных представлений. Сравнение результатов расчета в этих представлениях использовалось для контроля точности. Расчетное сечение с амплитудой, вычисленной в приближениях „замороженного“ остова, а также с учетом релаксации, воспроизводит общее поведение экспериментальной кривой, однако не описывает обнаруженные в [4] резонансы.

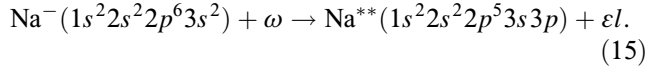
Для околопорогового отрезка  $\approx 31$ – $32$  eV исходя из соотношения (7) был проведен анализ фазы вылетающего  $s$ -электрона с учетом поляризационного взаимодействия с атомным остатком. Фотоионизация в  $s$ -волне дает более сильное, чем в  $d$ -волне, изменение фазы волновой функции в зависимости от энергии фотоэлектрона. Расчет для  $s$ -электрона при учете поляризации привел к скачку фазы относительно неполяризованных функций примерно на  $\pi$  для фотоэлектрона с энергией  $0.012$  eV. Согласно теореме Левинсона, это свидетельствует о появлении квазистационарного состояния, что может являться причиной порогового резонанса в сечении [5].

Для получения сечения в резонансе был проведен учет поляризационного взаимодействия, согласно разд. 1.3. Из сопоставления точной и ХФ фаз  $s$ -волны для эффективного потенциала (13) были получены значения дипольной поляризуемости атомного остатка  $\alpha = 270$  а.е. и параметра  $h = 3.77$  а.е. С новыми волновыми „поляризованными“ функциями фотоэлектрона вычислялось сечение с учетом корреляций ПСФО и релаксации остова. Результаты в околопороговой области показывают резонансное поведение сечения и удовлетворительно согласуются с имеющимися экспериментальными данными [4] (см. рисунок).



Сечение фотоотрыва электронов от отрицательного иона  $\text{Na}^-$ : 1 — экспериментальная кривая из работы [4], 2 — расчетная кривая.

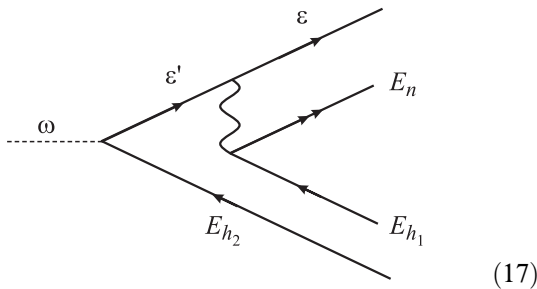
Достаточно широкий резонанс на отрезке 34–36 eV в сечении  $\text{Na}^-$ , по предположению авторов эксперимента [4], связан с дополнительным возбуждением валентного  $3s$ -электрона в дискретное  $3p$ -состояние:



Сечение, соответствующее процессу (15), следует прибавить к пороговому сечению фотоотрыва от  $2p$ -оболочки (14). Рассмотрим подробней механизмы реализации фотоотрыва с возбуждением. Амплитуда (16) и соответствующая диаграмма (17) описывают в первом порядке процесс „выбивания сходу“ (shake-up) [5,6], когда вылетающий из глубокой оболочки фотозлектрон  $|\varepsilon'\rangle$  возбуждает электрон наружной оболочки в дискретное состояние  $|E_n\rangle \equiv |E_{3p}\rangle$

$$D^{\text{shake-up}} = \int_{\varepsilon'} \frac{\langle \varepsilon' | \hat{d} | E_{h_2} \rangle \langle \varepsilon, E_n | V | \varepsilon', E_{h_1} \rangle}{\omega - (\varepsilon' - E_{h_2})}. \quad (16)$$

Одна из дырок  $|E_{h_1}\rangle$  или  $|E_{h_2}\rangle$  является вакантным  $3s$ -состоянием, а частичные линии  $|\varepsilon\rangle$  и  $|E_n\rangle$  могут меняться местами. Состояние  $|E_n\rangle$  обозначено двумя стрелками, поскольку при вычислении соответствующей волновой функции существенны процессы релаксации. Суммирование в (16), (17) производится по всем промежуточным состояниям  $|\varepsilon'\rangle$ .

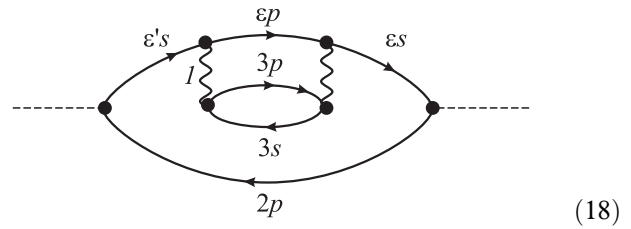


Подстановка в фотонной вершине вместо двухчастичного оператора взаимодействия с полем  $\hat{d}$  оператора взаимодействия в ПСФО из (2) соответствует учету коллективной реакции иона на внешнее поле. Однако, как показал расчет, корреляции ПСФО не вносят существенного вклада в сечение процесса (16), (17).

Наряду с „выбиванием сходу“ в том же порядке теории возмущений возможен механизм „встряски“ (shake-off) [10]. При этом фотозлектрон возбуждается в дискретное состояние, а деформация электронного облака вследствие образования вакансии во внутренней оболочке приводит к выбиванию электрона остова. В диаграммном описании встряски линия кулоновского взаимодействия выходит из дырочной линии, а не из частичной.

Для нахождения полного сечения процесса (15) был проведен численный анализ всех возможных амплитуд. Оказалось, что фотоионизация по механизму „встряски“ не вносит существенного вклада в сечение. Оно

полностью определяется четырьмя однотипными слагаемыми (18), различающимися лишь квантовыми числами одночастичных состояний.



Парциальное сечение поляризационного оператора диаграммы (18) и диаграмм обменных к ней пропорционально квадрату мнимой части соответствующего аналитического выражения [10]

$$\begin{aligned} \sigma(\omega) &= \frac{4\pi^2}{c} \omega \frac{2}{9} (D_1^{\text{direct}} (D_1^{\text{combined}})^* + D_2^{\text{direct}} (D_2^{\text{combined}})^*), \\ D_1^{\text{direct}} &= \int_{\varepsilon'} \frac{\langle \varepsilon' s | d | E_{2p} \rangle \langle \varepsilon p, E_{3p} | V_1 | \varepsilon' s, E_{3s} \rangle}{\omega - (\varepsilon' - E_{2p})}, \\ D_2^{\text{direct}} &= \int_{\varepsilon'} \frac{\langle \varepsilon' s | d | E_{2p} \rangle \langle \varepsilon s, E_{3s} | V_1 | E_{3p}, \varepsilon p \rangle}{\omega - (\varepsilon' - E_{2p})}, \\ D_1^{\text{combined}} &= 2D_1^{\text{direct}} - D_2^{\text{direct}}, \\ D_2^{\text{combined}} &= 2D_2^{\text{direct}} - D_1^{\text{direct}}. \end{aligned} \quad (19)$$

При описании  $3p$ -состояния существенны релаксационные процессы. Поскольку энергии возбуждения недостаточно, чтобы  $3s$ -электрон покинул атомный остаток (например, в результате Оже-процесса [3]), возможно использовать приближение статической перестройки остова. Волновые функции  $3p$ -электрона вычислялись в поле положительного иона с двумя дырками — в оболочках  $3s$  и  $2p$ . Влияние релаксации на состояние фотозлектрона в двухэлектронном процессе (18) значительно меньше, чем в процессе фотоотрыва одного электрона и существенно не меняет сечение. Поэтому состояния  $\varepsilon p$  в (19), как и других фотозлектронов в соответствующих диаграммах поляризационного оператора, вычислялись в поле замороженного остова  $\text{Na}^-$ .

Вычисления без учета поляризационного взаимодействия показали, что сечение фотоотрыва  $2p$ -электрона имеет вид ступеньки, как при открытии нового канала, и медленно спадает с увеличением энергии фотона. Аналогичные результаты были получены ранее при фотоотрыве  $1s$ -электронов от отрицательного иона  $\text{Li}^-$  [10]. Резонансная форма сечения фотоотрыва с возбуждением проявляется только при учете поляризации. Удовлетворительное согласие с экспериментом достигнуто при значениях параметров поляризационного потенциала (13)  $\alpha = 380$  а.у.,  $h = 3.2$  а.у.

Общий вид кривой, представленной на рисунке, был получен в приближении ОПСФО и дает завышенное значение сечения в области высоких энергий. Хорошее согласие с экспериментом в околопороговой области

( $\approx 31$  eV) было достигнуто после учета поляризации. Для широкого резонанса ( $\approx 34$ – $36$  eV) согласие с экспериментом хуже, что связано с пренебрежением динамическими постстолкновительными процессами при вычислении полного сечения (15) [2,5]. Как показывает оценочный расчет, узкий резонанс в интервале  $\approx 36$ – $37$  eV также связан с процессами взаимодействия после столкновения.

## Заключение

Проведенные расчеты показали, что пороговый резонанс связан с возбуждением квазистационарного дискретного состояния ( $2p^5 3s^2 4s$ ), лежащего сразу за порогом ионизации  $2p$ -оболочки. Второй резонанс определяется двухэлектронным процессом фотоотрыва  $2p$ -электрона и одновременным возбуждением наружного  $3s$ -электрона в дискретное состояние ( $2p^5 3s^1 3p \epsilon p$ ),  $\epsilon$  — энергия фотоэлектрона в сплошном спектре. Показана определяющая роль многоэлектронных корреляций в формировании резонансов в сечении. В частности, помимо внутриканального и межканального взаимодействия электронов, учитываемого в приближении случайных фаз с обменом, наиболее существенным оказывается влияние динамического поляризационного и релаксационного взаимодействия со стороны остова на вылетающий фотоэлектрон.

Авторы выражают благодарность Г.Ю. Кашенок за помощь в вычислительной части работы и ценные советы.

Работа выполнена при поддержке гранта Швейцарского национального научного фонда (SNSF IB7420-111116).

## Список литературы

- [1] *Ivanov V.K.* // Rad. Phys. Chem. 2004. Vol. 70. P. 345.
- [2] *Ivanov V.K.* // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 1999. Vol. 32. N 12. P. R67.
- [3] *Gorzycza T.W.* // Rad. Phys. Chem. 2004. Vol. 70. P. 407.
- [4] *Covington A.M.* et al. // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 2002. Vol. 34. N 22. P. L735.
- [5] *Амусья М.Я.* Атомный фотоэффект. М.: Наук, 1987. 243 с.
- [6] *Амусья М.Я., Иванов В.К., Черепков Н.А., Чернышева Л.В.* Процессы в многоэлектронных атомах. СПб: Наука, 2006. 324 с.
- [7] *Амусья М.Я., Иванов В.К.* и др. // ЖЭТФ. 1980. Т. 78. № 3. С. 910.
- [8] *Gribakin G.F., Ivanov V.K.* et al. // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 1990. Vol. 23. P. 4505.
- [9] *Gorzycza G.W.* et al. // Phys. Rev. 2003. Vol. A68. P. 050 703 (R).
- [10] *Иванов В.К.* и др. // Письма в ЖТФ. 2003. Т. 29. Вып. 15. С. 9.
- [11] *Kashenok G.Yu., Ivanov V.K.* // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 2006. Vol. 392. P. 11.