



СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА

P4-93-198

С.Данзан¹, Б.Жадамба¹, О.Лхагва*, С.И.Страхова²,
Ц.Сухбаатар¹

ПРЯМАЯ ФОТОИОНИЗАЦИЯ ВОЗБУЖДЕННОГО ГЕЛИЯ

¹Педагогический университет, Улан-Батор, Монголия

²Научно-исследовательский институт ядерной физики МГУ,
Москва

*Постоянный адрес: Монгольский государственный университет,
Улан-Батор, 210646, Монголия

1. Введение

Значительный прогресс в экспериментальных исследованиях^[1,3] взаимодействия излучения с веществом и использование мощных теоретических методов^[2] для интерпретации экспериментальных данных высокой точности позволяют получать новые сведения о структуре исследуемых атомных систем и механизмах взаимодействия^[1-3] фотонов с атомами. Фотоны с энергией от порога до нескольких сотен эВ являются хорошим инструментом для изучения свойств атомной системы.

Гелий из-за своей простой структуры продолжает оставаться объектом тестирования теоретических подходов и новых экспериментальных методов с целью получения сведений об электронных корреляциях в атомах. В этой связи в последние годы изучению фотоионизации гелия было уделено много внимания.

В экспериментах^[4-6] по фотопоглощению на невозбужденном гелии с достаточно высокой степенью точности измерены сечения фотоионизации в широкой области энергий фотонов от порога до нескольких десятков эВ. Теоретические аспекты проблемы прямой фотоионизации из основного состояния гелия исследованы с использованием различных моделей структуры гелия^[7-15]. Следует сказать, что описание основного состояния гелия продолжает оставаться трудной задачей, поскольку наряду с угловой корреляцией особенно важную роль играет радиальное коррелированное движение электронов, когда в $(1s^2)^1S$ - состоянии гелия оба электрона одновременно могут с заметной вероятностью находиться вблизи ядра.

В настоящее время интенсивно ведутся эксперименты по фотоионизации возбужденных атомов^[16], в частности гелия^[17,18]. Прогресс в экспериментальной технике по приготовлению возбужденных мишеней и одновременное использование лазерного и синхротронного излучений открывают широкие перспективы для изучения фотоионизации атомных систем из возбужденных состояний.

Фотоионизация возбужденных атомов представляется сегодня в значительной степени менее изученной по сравнению с фотоионизацией основных состояний атомов.

Исследование фотоионизации возбужденных атомов гелия важно как для фундаментальной физики, так и для прикладных задач. С точки зрения фундаментальных исследований, в этих процессах задействованы состояния континуума, например $1,^3S$, $1,^3P$, $1,^3D$ и др., которые не возбуждаются однофотонным переходом из основного состояния. Тем самым предоставляется возможность изучения нового класса межэлектронных корреляций. Одновременно надежные данные по характеристикам ионизации возбужденных атомов, ионов и молекул все больше требуются в смежных областях, таких как астрофизика, физика плазмы, физика атмосферы.

Экспериментальное измерение сечений фотоионизации метастабильных $He(2^1,^3S)$ атомов было осуществлено^[17] только вблизи порога ионизации. Кроме того, также измерены^[18] абсолютные сечения фотоионизации $He(n\ 1,^3P)$ атомов для $n=3,4$ и 5 при одном значении длины волны в каждом случае. В этом эксперименте гелиевая мишень получена путем накачки $He(2^1,^3S)$ атомов лазерным излучением, т.е. в

процессах $\text{He}(2^{1,3}\text{S}) + \gamma \rightarrow \text{He}(n^{1,3}\text{P})$. Далее часть атомов, находящихся в $n^{1,3}\text{P}$ -состоянии, ионизовалась тем же излучением лазерного пучка, т.е. в процессе $\text{He}(n^{1,3}\text{P}) + \gamma \rightarrow \text{He}^+ + e$.

Характеристики прямой фотоионизации возбужденных атомов гелия с переходом на основное состояние иона ниже второго порога ионизации были рассчитаны в работах^[15, 19-28]. В этих работах использовались различные модели структуры атома, учитывавшие корреляции электронов как в исходном, так и в конечном состояниях континуума.

При изучении процесса прямой фотоионизации атома гелия из его возбужденных состояний для описания континуума атома использовались метод сильной связи каналов^[20, 24-26], метод Хартри-Фока с замороженным остовом^[27], теория возмущений^[23], модель с центральным параметрическим потенциалом^[22] и метод конфигурационного взаимодействия^[15, 28]. При этом структура атома в исходном состоянии описывалась функциями Хартри-Фока с замороженным остовом^[24], решением уравнения Шредингера с центральным параметрическим потенциалом^[22], многопараметрическими вариационными функциями^[20, 25-27], а также методом Хартри-Фока^[15]. Теоретические расчеты для характеристик фотоионизации возбужденных атомов гелия были проведены^[19-25] в основном при относительно малых энергиях электрона. Оценки, полученные в вышеупомянутых работах в припороговой области энергии, хорошо согласуются с экспериментальными данными по сечениям ионизации $\text{He}(2^1\text{S})$ и $\text{He}(n^{1,3}\text{P})$ атомов, а для ионизации из $\text{He}(2^3\text{S})$ состояния атома расходятся с экспериментом. В более широкой области энергии фотоэлектронов ($0 < E < 1,2$ а.е.) выполнено несколько расчетов^[22-24, 26, 27], в которых рассматривались процессы фотоионизации гелия, главным образом из $2^{1,3}\text{S}$ -состояний^[22-24, 27, 28] и $2^{1,3}\text{P}$ -состояний^[22, 26].

Результаты этих работ весьма хорошо согласуются между собой в области энергии фотоэлектрона $E < 0,5$ а.е. При энергиях электрона $E > 0,5$ а.е. сечение прямого фотоперехода в континуум из возбужденных состояний гелия быстро уменьшается. Вместе с тем оценки, полученные в разных моделях структуры атома, заметно отличаются^[26, 27] друг от друга. Сечение прямой фотоионизации $2^{1,3}\text{P}$ -состояния гелия в этой области энергии рассчитано только в работе^[26]. В сечениях, полученных в работах^[15, 23, 24, 26], где учтено влияние закрытых каналов, появляется некоторый минимум, который отсутствует в других расчетах^[27]. Подобная особенность наблюдалась в задаче диэлектронной рекомбинации^[29].

В работе^[26] такое поведение в сечении прямой фотоионизации истолковано в соответствии с теорией Фано^[30] как результат проявления "нуля" минимума кривой, описывающей профиль резонанса. Видели от области резонансов появление подобного минимума, скорее всего, указывает на важность эффекта влияния закрытых каналов

на характеристики фотоионизации в открытых каналах^{*}. Сущность этого явления состоит в том, что в области энергии, где амплитуды прямых фотопереходов весьма малы, вклады фотопроцесса, обусловленные влиянием закрытых каналов, уже могут конкурировать с ними и играть заметную роль в сечении ионизации атома. Естественно, что вклад ветви фотопроцесса, идущей через закрытые каналы, увеличивается с ростом энергии и может доминировать в сечении. Подобное явление было обнаружено в теории ядерных реакций^[31]. Имеющиеся теоретические оценки подсказывают, что эти эффекты сильно проявляются в случае ионизации из $2^{1,3}\text{S}$ - и $2^{1,3}\text{P}$ -состояний гелия. В этой связи изучение механизма прямого фотоэффекта, идущего через закрытые каналы, и его вклада в сечение фотоионизации представляет несомненный интерес в физике взаимодействия фотонов с атомами. Однако в методе сильной связи каналов невозможно разделить количественно вклады в сечения открытых и закрытых каналов и выяснить, какие именно закрытые каналы вносят основной вклад в сечения в этой области.

Вместе с тем в диагонализационном подходе^[32] можно представить сечение в виде суммы компонент, соответствующих в отдельности как прямым фотопереходам, так и фотопроцессам, проходящим через закрытые каналы. Это позволяет получить количественные оценки вклада закрытых каналов в сечение процесса прямой фотоионизации.

Проблема фотоионизации возбужденных атомов сопряжена также с трудностью описания структуры атома в исходных состояниях. В частности, для гелия недостаточно изучена структура исходных возбужденных состояний, связанных дипольными переходами с континуумом. Другими словами, остается пока неясным, корреляции какого типа должны быть учтены в описании исходных состояний в первую очередь, чтобы обеспечить согласие теории и эксперимента.

Многопараметрические вариационные функции, используемые во многих работах для описания основного состояния гелия, учитывают корреляции определенного типа, что закреплено явным видом этих функций. В этих случаях не всегда последовательно учитываются тождественность электронов, нелокальность межэлектронного взаимодействия, некоторые типы корреляций вообще не включаются.

Замена одной многопараметрической вариационной функции на другую влечет за собой, как правило, существенное изменение программного обеспечения. Но самая главная трудность связана с тем, что многопараметрические вариационные функции получены только для нескольких возбужденных состояний^[25-27, 37], и предстоит

* Каналом реакции, или рассеяния, будем называть совокупность квантовых чисел подсистем. Каналы разные, если совокупности квантовых чисел отличаются хотя бы одним числом. Канал закрыт, если функция канала затухает на бесконечности по всем радиальным переменным. Если хоть по одной радиальной переменной функция канала отлична от нуля на бесконечности, канал открыт. Например, в гелии при энергии фотонов $E_\gamma = 24,6$ эВ канал $1s^2\text{He}^1\text{D}$ открыт, а канал $2s3d^1\text{D}$ закрыт. Он откроется только при $E_\gamma = 60,05$ эВ.

большая работа по расчету таких функций для других возбужденных состояний гелия. Важным является унифицированный подход к учету корреляции электронов в атоме. В этой связи следует обратить внимание на то, что большой интерес представляет использование многоконфигурационного метода Хартри-Фока^[33] (МСНФ) для получения волновых функций исходных состояний атома. В МСНФ учитываются различные типы межэлектронных корреляций путем включения конфигурационного взаимодействия, а также эффект обмена и динамической поляризации остова атома, полностью самосогласованным образом вычисляются одночастичные орбитали и коэффициенты смешивания конфигураций. В последнее время МСНФ был успешно использован для описания процесса фотоионизации атомов некоторых элементов^[15].

В данной работе рассматриваются процессы прямой фотоионизации метастабильных ($2^1,^3S$) и возбужденных ($2^1,^3P$ и $3^1,^3P$) состояний гелия с использованием волновой функции континуума, полученной в рамках диагонализационного приближения^[32]. При этом в области энергии $0 < E < 1,2$ а.е. исследованы эффекты проявления закрытых каналов в различных характеристиках прямой фотоионизации. В работе много внимания уделено изучению роли корреляции электронов как в исходном дискретном, так и в конечном состоянии континуума. Движение фотоэлектрона в открытом канале описывалось решением уравнения Шредингера с центральным параметрическим потенциалом^[22]. Этот простой потенциал, представляющий экранированный кулоновский потенциал, был введен^[19] впервые в теории квантового дефекта и широко использован для расчетов сечений одно- и многофотонного процесса ионизации гелия^[19,22]. Волновые функции исходных состояний вычислялись многоконфигурационным методом Хартри-Фока. Наряду с этим проведен совокупный анализ имеющихся экспериментальных данных и теоретических оценок, полученных в различных моделях структуры с целью выявления роли корреляции электронов в тех или иных приближенных подходах. Нами также проведены расчеты сечения фотоионизации основного состояния гелия без учета влияния закрытых каналов. В этом случае основное внимание обращалось на изучение качества используемых нами волновых функций начального и конечного состояний путем сравнения наших результатов с экспериментальными данными^[6] и оценками, полученными в известных приближенных подходах^[8-12].

Во втором разделе работы изложен формализм задачи, в третьем и четвертом разделах описаны процедура расчетов, результаты и обсуждение. Везде используется атомная система единиц, если это специально не оговорено.

2. Математическая модель описания прямой фотоионизации

а. Волновая функция континуума

Рассмотрим процесс прямой фотоионизации гелия из исходного состояния $\Phi_{1s n_1 L_1 M_1}$, в результате чего ион остается в основном состоянии Φ_0 , а испущенный

электрон вылетает с волновым числом k_1 . L_1, M_1 - орбитальное и магнитное квантовые числа, n_1 - главное квантовое число.

Ниже мы будем изучать случай одноканальной прямой фотоионизации, когда энергии фотона недостаточно для возбуждения нижайших автоионизационных резонансов.

Влияние закрытых каналов на открытые мы будем учитывать в рамках так называемого диагонализационного подхода, поэтому далее мы представим формализм этого метода применительно к задаче фотоионизации возбужденного гелия. В соответствии с идеей диагонализационного подхода Балашова^[32] волновую функцию атома в континууме представим в виде:

$$\Psi_E^{(-)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \left[F_0(E, \mathbf{r}_2) \Phi_0(\mathbf{r}_1) \right] + \sum_{\mu} \Lambda_{\mu} \Phi_{\mu}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2), \quad (1)$$

где

$$\left[F_0(E, \mathbf{r}_2) \Phi_0(\mathbf{r}_1) \right] = \Phi_0(\mathbf{r}_1) F_0(E, \mathbf{r}_2) + (-1)^S (1 \mp 2), \quad (1a)$$

s - спин атомной системы. В формуле (1) первое и второе слагаемые соответствуют открытому и закрытым каналам. $F_0(E, \mathbf{r}_2)$ описывает движение фотоэлектрона, $\Phi_0(\mathbf{r}_1)$ - волновая функция основного состояния иона. Функция $\Phi_{\mu}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ является собственной функцией гамильтониана системы^[32] в подпространстве закрытых каналов с собственным значением E_{μ} . Она построена как суперпозиция произведений одночастичных кулоновских орбиталей $\phi_{\mu}(\mathbf{r})$ в поле с зарядом $z=2$. Следовательно, функции Φ_0 и Φ_{μ} в выражении (1) удовлетворяют следующему условию

$$\langle \Phi_{\mu} | \Phi_0 \rangle = 0. \quad (2)$$

Подставляя функцию (1) в уравнение Шредингера для атома гелия, умножая слева на Φ_{μ}^* и интегрируя по \mathbf{r}_1 и \mathbf{r}_2 , можно получить соотношение

$$\Lambda_{\mu}(E) = \frac{\langle \Phi_{\mu}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) | V_{12} | [F_0(E, \mathbf{r}_2) \Phi_0(\mathbf{r}_1)] \rangle}{E - E_{\mu}}, \quad (3)$$

где $V_{12} = 1/r_{12}$ - потенциал взаимодействия двух электронов. Если (1) также умножить на $\Phi_0(\mathbf{r}_1)$, проинтегрировать по \mathbf{r}_1 , то мы придем к неоднородному интегродифференциальному уравнению:

$$\left[-\frac{1}{2} \nabla_2^2 - \frac{2}{r_2} + E_0 + \langle \Phi_0(\mathbf{r}_1) | V_{12} | \Phi_0(\mathbf{r}_1) \rangle - E \right] F_0(E, \mathbf{r}_2) + \dots \quad (4)$$

$$+ (-1)^S \langle \Phi_0(\mathbf{r}_1) | V_{12} | F_0(E, \mathbf{r}_2) \rangle \Phi_0(\mathbf{r}_1) = \sqrt{2} \sum_{\mu} \Lambda_{\mu} \langle \Phi_0(\mathbf{r}_1) | V_{12} | \Phi_{\mu}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \rangle.$$

Если аппроксимировать все локальные и нелокальные потенциалы в уравнении

$$(4) \text{ эффективным центральным потенциалом } U_0^S(r_2)$$

$$\left[-\frac{2}{r_2} + \langle \phi_0 | V_{12} | \phi_0 \rangle F_0 + (-1)^{\pm} \langle \phi_0 | V_{12} | F_0 \rangle \phi_0 \right] \approx U_0^{\pm}(r_2) F_0(r_2) \phi_0(r_1),$$

то можно писать:

$$\left[\hat{H}_0 - E_0 \right] F_0(r_2) + \sum_{\mu} \Lambda_{\mu} \langle \phi_0 | (H-E) \phi_{\mu} \rangle = 0. \quad (5)$$

Решая уравнение (5) с помощью функции Грина, имеем

$$F_0(r_2) = f_0(E, r_2) + \sqrt{2} \sum_{\mu} \Lambda_{\mu} \frac{1}{E - E_{\mu} - i/2\Gamma_{\mu}} \langle \phi_0(r_1) | V_{12} | \phi_{\mu}(r_1, r_2) \rangle, \quad (6)$$

где $f_0(E, r_2)$ - решение однородного уравнения (5). Подставляя (6) в (3), можно записать

$$\Lambda_{\mu}(E - E_{\mu}) + \sum_{\nu} \Lambda_{\nu} \langle \phi_{\nu} | V_{12} | \phi_0(r_1) \rangle \frac{1}{E - E_{\nu} - i/2\Gamma_{\nu}} \langle \phi_0(r_1) | V_{12} | \phi_{\nu}(r_1, r_2) \rangle = \langle \phi_{\mu} | V_{12} | \phi_c(r_1, r_2) \rangle. \quad (7)$$

Здесь введено обозначение

$$\phi_c(r_1, r_2) = [\phi_0(r_1) f_0(E, r_2)]. \quad (8)$$

Система неоднородных алгебраических уравнений (7) для Λ_{μ} весьма сложна, чтобы ее решить точно, поэтому сделаем некоторые упрощения. С этой целью во втором слагаемом выражения (7) пренебрежем связью разных уровней в закрытом канале через открытый. Тогда мы приходим к тому, что Λ_{μ} -коэффициенты располагаются лишь в диагоналях, т.е. система распадается на отдельные уравнения. Отсюда и возникло название подхода-диагонализационный метод^[32]. При этом из (7) получаем:

$$\Lambda_{\mu}(E) = \frac{\langle \phi_{\mu} | V_{12} | \phi_c \rangle}{E - E_{\mu} - 2i \langle \phi_{\mu} | V_{12} | \phi_0 \rangle \frac{1}{E - E_{\mu} - i/2\Gamma_{\mu}} - \langle \phi_0 | V_{12} | \phi_{\mu} \rangle}. \quad (9)$$

В формуле (9), используя для функции Грина следующее символическое тождество

$$\frac{1}{E - E_{\mu} - i/2\Gamma_{\mu}} = \frac{P}{E - E_{\mu}} - i\pi \delta(E - E_{\mu}), \quad \delta(E - E_{\mu}) = |f_0^{(+)} \rangle \langle f_0^{(-)}| \quad (10)$$

и пренебрегая слагаемым, содержащим интеграл по главному значению $P/E - E_{\mu}$ для $\Lambda_{\mu}(E)$, имеем

$$\Lambda_{\mu}(E) = \frac{\langle \phi_{\mu} | V_{12} | \phi_c \rangle}{E - E_{\mu} - i/2\Gamma_{\mu}(E)}. \quad (11)$$

где величина

$$\Gamma_{\mu}(E) = 2\pi |\langle \phi_c(E) | V_{12} | \phi_{\mu} \rangle|^2. \quad (12)$$

Теперь, подставляя (6) в выражение (1), принимая во внимание тождество (9) и формулу (11), можно записать волновую функцию континуума в виде:

$$\psi(E, r_1, r_2) = a(E) \phi_c(r_1, r_2) + \sum_{\mu} b_{\mu}(E) \phi_{\mu}(r_1, r_2), \quad (13)$$

где

$$a(E) = \sum_{\mu} \frac{E - E_{\mu}}{E - E_{\mu} - i/2\Gamma_{\mu}(E)}, \quad (14)$$

$$b_{\mu}(E) = \frac{\langle \phi_{\mu} | V_{12} | \phi_c \rangle}{E - E_{\mu} - i/2\Gamma_{\mu}(E)}. \quad (15)$$

Таким образом волновая функция атома в континууме (13) определяется суперпозицией волновых функций открытого (ϕ_c) и закрытого (ϕ_{μ}) каналов, с коэффициентами a и b_{μ} . Вероятность пребывания электрона в закрытом канале определяется квадратом модуля коэффициента b_{μ} , т.е.

$$|b_{\mu}(E)|^2 = \langle \phi_{\mu} | V_{12} | \phi_{\mu} \rangle \frac{1}{(E - E_{\mu})^2 + 1/4\Gamma_{\mu}^2(E)} \langle \phi_{\mu} | V_{12} | \phi_c \rangle. \quad (16)$$

Физический смысл вероятности (16) состоит в том, что, благодаря двух-электронной корреляции, электрон уходит из континуума в закрытый канал, а из него, тоже из-за корреляции, переходит обратно в открытый канал. В дальнейшем в расчетах мы не будем учитывать спин-орбитального взаимодействия. Следовательно, удобно записывать волновую функцию континуума (13) в L-S-представлении, в котором вылетающий электрон характеризуется определенным угловым моментом L и четностью, т.е. в виде:

$$\psi_E^{(-)}(k_1, r_1, r_2) = \sum_{LM} Y_{LM}^*(k_1) |1sEL:LSM\rangle. \quad (17)$$

Здесь $Y_{LM}^*(k_1)$ - сферическая функция от угла импульса вылетающего электрона k_1 . Функция $|1sEL:LSM\rangle$ представляется в следующей форме:

$$|1sEL:LSM\rangle = a(E) |1sELS:LSM\rangle + \sum_{\mu} b_{\mu}(E) |\mu LSM\rangle. \quad (18)$$

Введем обозначения с учетом (9):

$$|1sEL:LSM\rangle = \phi_{cLM}(E, r_1, r_2) = e^{i\delta_L} L(\phi_{1s}(r_1) f_{EL}^*(r_2) Y_{LM}(r_2) + (-1)^{\pm} (1 \pm 2)), \quad (19)$$

$$|\mu LSM\rangle = \phi_{\mu LSM}(r_1, r_2). \quad (20)$$

Радиальная функция фотоэлектрона $f_{EL}(r)$ удовлетворяет следующему условию на асимптотике

$$f_{EL}(r) \sim \sin(k_1 r - \frac{\pi}{2} - \frac{1}{k} \ln(2k_1 r) + \delta_1), \quad r \rightarrow \infty, \quad (21)$$

а условия нормировки для нее

$$\langle f_{EL} | f_{E'1} \rangle = \delta(E - E') \delta_{11}, \quad (22)$$

где фаза рассеяния

$$\delta_1 = \eta_1 + \sigma_1, \quad \eta_1 = \arg(1 + i/k_1), \quad (23)$$

дополнительная фаза σ_1 обусловлена отклонением поля иона от чисто кулоновского поля.

б. Формулы для характеристик фотоионизации

Приведем рабочие расчетные формулы для характеристик прямой фотоионизации возбужденного гелия. Они получены, например, в работе^[26]. Дифференциальное

сечение фотопроцесса $\text{He}(1s n_1 L_1 S_1; L_1 S_1) + \gamma \Rightarrow \text{He}(1s) + e$ можно представить в виде:

$$\frac{d\sigma_{1s}}{d\Omega} = \frac{\sigma_{1s}}{4\pi} \left[1 + \beta_2(1s, L_1) P_2(\cos\theta) \right], \quad (24)$$

где $P_2(\cos\theta)$ - полином Лежандра. θ -угол вылета фотоэлектрона - выбирается в зависимости от состояния поляризации падающего фотона, $\beta_2(1s)$ - коэффициент угловой анизотропии. Полное сечение прямой фотоионизации атома, оставляющего ион в основном (1s)- состоянии, записывается как

$$\sigma(E) = \sum_L \sigma_{LS}^{(0)}(E), \quad (25)$$

а частичное сечение прямого фотоперехода в открытый канал $\sigma_{LS}^{(0)}(1s)$ определяется формулой

$$\sigma_{LS}^{(0)}(E) = \frac{4\pi^2 \alpha^2 \omega a_0^2}{3(2L_1+1)} |R_L|^2, \quad (26)$$

Здесь α , ω и a_0 - постоянная тонкой структуры, частота фотона и борковский радиус соответственно. R_L - приведенный матричный элемент:

$$R_L = \langle 1s \text{ ELS}; LS || D || n_1 L_1 \rangle, \quad (27)$$

где $D = \sum_k r_k$ - оператор дипольного перехода. Подставляя (18) в формулу (26), принимая во внимание соотношения (19,20) и (27), можно записать частичное сечение ионизации с учетом изолированного уровня $E_{\mu L}$ в закрытом канале в следующей форме:

$$\sigma_{LS}^{(0)}(E) = \sigma_{LS}^{(0)}(E) + \sigma_{LS}^{(0)}(E) \left[\frac{(q_{\mu L} + \epsilon_{\mu L})^2}{1 + \epsilon_{\mu L}^2} - 1 \right]. \quad (28)$$

Введем величину η , характеризующую долю вклада закрытого канала по отношению к сечению фотоперехода в открытый канал

$$\eta(E) = \frac{\Delta\sigma(E)}{\sigma_{LS}^{(0)}(E)} = \frac{(q_{\mu L} + \epsilon_{\mu L})^2}{1 + \epsilon_{\mu L}^2} - 1, \quad (29)$$

$$\Delta\sigma(E) = \sigma_{LS}(E) - \sigma_{LS}^{(0)}(E). \quad (29a)$$

В формулах (28) и (29) $q_{\mu L}$ и $\epsilon_{\mu L}$ определяются как

$$q_{\mu L}^{(1)}(E) = \frac{\langle \mu SL || D || 1s n_1 L_1; L_1 S \rangle}{\pi \langle \mu SL | V_{12} | 1s \text{ ESL}; LS \rangle \langle 1s \text{ ESL}; LS || D || 1s n_1 L_1 S; L_1 S \rangle}, \quad (30)$$

где $\epsilon_{\mu L} = 2 \frac{E - E_{\mu L}}{\Gamma_{\mu L}(E)}$.

Коэффициент угловой анизотропии $\beta_2(1s)$ имеет вид

$$\beta_2(1s) = f \frac{\sum_{LL'} SL' LLL'' R_L R_{L'} \cos(\delta_L - \delta_{L'})}{\sum_L |R_L|^2}, \quad (32)$$

$$S(L' L L L') = (-1)^{L+L'} [LL'] \langle L O L' 0 | 20 \rangle \times \begin{Bmatrix} 1 & L L_1 \\ L & 12 \end{Bmatrix} \rho_{20}^{(\gamma)}, \quad (33)$$

$$f = 3(-1)^{L_1}$$

$$[ab] = \sqrt{(2a+1)(2b+1)}; \begin{Bmatrix} a, b, c \\ d, e, f \end{Bmatrix} - 6j\text{- символ Вигнера.}$$

ρ_{20} - статистический тензор для неполяризованного и поляризованного фотона соответственно представляется в виде:

$$\rho_{20}^{(\gamma)} = \begin{cases} 1/2 \langle 1010 | 20 \rangle - \text{для неполяризованного фотона} \\ -\langle 1010 | 20 \rangle - \text{для линейно поляризованного фотона.} \end{cases} \quad (34)$$

Когда свет неполяризован, то полная система обладает аксиальной симметрией относительно направления падающего фотона n_γ . В этом случае, естественно, это направление выбирается за ось квантования и угол θ в выражении (7) определяется углом между направлениями падающего фотона и вылетающего электрона. В случае линейно поляризованного излучения ось Z можно выбирать параллельной электрическому вектору E , поэтому угол в формуле (24) характеризуется углом θ между вектором поляризации \vec{E}_λ и направлением вылета электрона. Отметим, что поглощение такого излучения происходит посредством π - переходов ($\Delta M=0$), так как ось квантования перпендикулярна к вектору n_γ .

Угловое распределение электронов, эжектированных в канале $1sEL$ при фотопереходах $\text{He}(1s n_1 L_1; n_1 L_1) + \gamma \Rightarrow \text{He}^+(1s) + e$, согласно формуле (17), характеризуется одним параметром $\beta_2(1s)$, значения которого ограничены в интервале:

$$-1 \leq \beta_2 \leq 2. \quad (35)$$

Если начальное связанное состояние атома является $n^{1,3}S$ - состоянием, то в силу закона сохранения углового момента $\beta_2(1s)$ при всех значениях n_1 и L_1 имеет одинаковое значение, равное 2. Этот результат легко получить, подставив в выражение (32) значение $L_1=0$. В случае отличного от нуля $L_1 (=L_1)$ в формуле (32) для коэффициента анизотропии $\beta_2(1s, L_1)$ фигурируют отличные от нуля матричные элементы, отвечающие переходам электрона в континуум с $L=L_1 \pm 1$.

Полное сечение фотоионизации $\text{He}(n^{1,3}P)$ атомов линейно поляризованными фотонами, которые использовались для их возбуждения, можно представить как [25]

$$\sigma(E) = 3\sigma_{S,S}^{(0)}(E) + 1,2\sigma_{D,S}^{(0)}(E), \quad (36)$$

где $\sigma_{S,S}^{(0)}(E)$ и $\sigma_{D,S}^{(0)}(E)$ определяются формулой (26). В наших исследованиях также понаблюдается сечение фоторекомбинации $\sigma^r(E)$, являющейся обратным процессом прямой фотоионизации. Полное сечение фоторекомбинации на основном состоянии иона $\sigma_{1s}^r(E)$ можно получить из сечения прямой фотоионизации (25), используя теорему "обращения времени":

$$\sigma^r(E) = q^2/k^2 \sigma(E), \quad (37)$$

где q и k - волновые числа фотона и электрона.

3. Модели расчета

Введем сокращенное обозначение $F|I$ для структурной модели атома, которое является комбинацией волновых функций исходного связанного I и конечного в континууме F состояний.

Для волновых функций основного и дискретных возбужденных состояний в ходе расчета использованы функции, полученные одно- и многоконфигурационным методом Хартри-Фока^[33]. Обозначим эти функции как $SCHF$ и $MSHF$ соответственно.

В расчетах функций $MSHF$ учитывалось взаимодействие следующих конфигураций:

$$\begin{array}{ll} 1s^2, 2s^2, 2p^2, 3s^2, 3p^2, 3d^2 & \text{для } 1^1S\text{- термина} \\ 1s2s, 1s^2, 2s^2, 2p^2 & \text{для } 2^1S\text{- термина} \quad (38) \\ 1s2s, 2s3s, 2p3p, 3d4d & \text{для } 2^3S\text{- термина} \\ 1s2p, 2s2p, 2s3p, 2p3s, 2p3d & \text{для } 2^1P\text{- и } 2^3P\text{- термов.} \end{array}$$

Волновая функция континуума, согласно формулам (1) и (18), представляется в виде суммы функций, характеризующих состояние электрона в открытом (PS) и закрытом (Φ_{μ}) каналах. Эту функцию конечного состояния ради краткости в целом опять-таки назовем как PS . Следовательно, наши расчеты проведены в моделях структуры $PS|MSHF$ и $PS|SCHF$. В качестве волновой функции фотоэлектрона в открытом канале взято решение радиального уравнения Шредингера $f_{EL}(r)$ в следующем центральном параметрическом потенциале^[22]:

$$V(\alpha, r) = -\frac{1}{r} \left[e^{-\alpha_1 r} + \alpha_2 r e^{-\alpha_3 r} + 1 \right]. \quad (39)$$

В потенциале (39) параметры $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ в случае синглетного состояния принимают значения 8,90663, 16,38067 и 9,82222, для триплетного состояния 33,46494, 7,91893 и 3,27399 соответственно.

Расчеты проводились с использованием также решений уравнения Шредингера в статическом, статическом с учетом обмена потенциалах, использованных нами ранее^[35]. Эти функции для электрона в открытом канале обозначим как S и SE . Наши тестовые расчеты в сравнении с экспериментальными данными и другими теоретическими оценками показывают, что функции SE и PS в сочетании с функциями $SCHF$ и $MSHF$ приводят к весьма близким между собой результатам в достаточно большом интервале энергии. Эти функции оказались лучше, чем решения уравнения Шредингера со статистическим потенциалом (S) во всех рассмотренных нами случаях. С другой стороны, функция PS является весьма простой и согласно расчетам^[19,22] и нашим тестам оказывается достаточно надежной в отношении описания фотопроцессов. Наши значения фазы рассеяния в статическом потенциале воспроизводят соответствующие оценки из работы^[36] до трех значащих цифр. Компонента волновой функции конечного состояния, соответствующая состоянию в закрытом канале, получена^[32] диагонализацией полного гамильтониана атома в подпространстве закрытых каналов на кулоновском базисе с зарядом $Z=2$. При этом для $1^1,3S$ - состояний в континууме учитывалась связь конфигураций $2sns, 2pnp, 3sns, 3pnp, 3dnd$, для $1^1,3P$ - $2snp, 2pns, 2pnd$, а для $1^1,3D$ - состояний - связь

$2pnp, 2snd, 2pnf$ конфигураций ($n \leq 5$). Волновая функция электрона в открытом канале PS была ортогонализирована к одночастичным кулоновским орбиталам с $z=2$ с помощью процедуры Шмидта.

Введем также сокращенные обозначения для моделей расчетов других авторов. Вариант расчета с вариационной функцией для исходного состояния атома типа Хиллерааса, содержащей n параметров, обозначим как nH , например, функции с параметрами $n=20$ и 56 пишутся как $20H$ и $56H$ соответственно. Для функции Хартри-Фока с замороженным остовом^[8,27] в континууме введем обозначение $FCHF$; функции, полученные методом поляризованных орбиталей^[8,27] и сильной связи каналов, обозначим как $PLRV$ и CS соответственно. Структурные модели, в которых волновые функции атома как в исходном связанном состоянии, так и в континууме вычисляются методами теории возмущения^[12,23] и гиперсферических координат^[13], обозначим как PRT и MCS соответственно.

4. Результаты и обсуждения

Преимущества фотоионизации из основного состояния

Характеристики фотоионизации из основного состояния были рассчитаны многими авторами^[7-15] с учетом достаточно широкого спектра корреляций электронов в гелии. При этом возбуждается только $1P$ - континуум гелия. Эти расчеты заметно отличаются по точности в различных областях спектра фотоэлектрона. Белл и Кингстон^[8] в своем цикле исследований еще до появления более точных экспериментальных данных^[5,6] показали, что при энергиях $E \leq 1$ а.е. функция $FCHF$ по сравнению с функцией $PLRV$ оказывается более адекватной для описания характеристик фотоионизации в обеих L - и V - дипольных формулах. Табл.1 показывает, что при энергиях $E \leq 1,5$ а.е. модель $FCHF|20H$ дает оценки с отклонением от экспериментальных данных в пределах 0,2-4,7%. При больших энергиях ($1 < E < 2$ а.е.) оценки в моделях $PLRV|56H, 20H$ и $50H$ выглядят несколько ближе к экспериментальным данным по сравнению с результатами, полученными в других моделях. При энергии $E < 1$ а.е. оценки, полученные методом теории возмущения^[12] (модель PRT), согласуются с экспериментальными данными^[6] в пределах 0,9- 2,7% (табл.1). Отметим, что в работе^[12] согласие между расчетами в L - дипольной и V - дипольной формулировках было достигнуто с точностью до 0,001, что дает уверенность в точности волновой функции. Заметим также, что при энергии $E < 0,5$ а.е. метод гиперсферических координат (модель MCS) приводит к оценкам сечения такой же точности, как в предыдущей PRT - модели. В интервале энергии $0,1 < E < 1$ а.е. комбинация $CS|56H$ приводит почти к таким же оценкам, как и модель PRT . Таким образом, при энергиях фотоэлектрона $E \leq 1$ а.е. оценки, полученные в вышеназванных приближенных подходах, с достаточно хорошей точностью описывают эксперимент. Однако эти модели с ростом энергии ($E \geq 1$ а.е.) фотоэлектрона дают заметно заниженные оценки по сравнению с экспериментом, а также отклоняются друг от друга.

Остановимся теперь на обсуждении полученных нами результатов. Наши расчеты

Табл.1. Сечение прямой фотоионизации атома гелия из основного состояния (МБ)

Э, а.е.	0.	0.05	0.1	0.125	0.25	0.375	0.5	0.75	1.0	1.5
Эксп ¹	7.56	6.87	6.40		4.87		3.36		1.85	1.14
PS МСНГ ²		6.883	6.311	6.045	4.894	4.001	3.305	2.327	1.700	0.980
FCNF 6H ³	7.390	6.881	6.389	6.155	5.098	4.235	3.549	2.548	1.888	1.121
FCNF 20H ³	7.319	6.786	6.290		5.019		3.517		1.898	1.137
FCNF 50H ³	7.326	6.783	6.278		4.997		3.507		1.906	1.142
PLRB 6H ³	7.637	7.090	6.573	6.326	5.230	4.346	3.639	2.620	1.950	1.169
PLRB 20H ³	7.562	6.997	6.475	6.152	5.152		3.610		1.962	1.187
PLRB 50H ³	7.570	6.992	6.461		5.129		3.600		1.971	1.191
PRT ⁴	7.376	6.801	6.284	6.041	4.977	4.138	3.474	2.522	1.901	
CC 56H ⁵		6.32	6.041	4.973	4.137	3.482	2.548	1.939		
МНС ⁶	7.65	6.96	6.36		4.88		3.26			
РРА ⁷	7.55	7.00	6.45		5.18		3.75			

1-эксперимент Веста и Мара^[6]; 2-настоящий расчет; 3-теоретические оценки Белла и Кингстона^[8]; 4,5,6 и 7-результаты расчетов Стюарта^[12], Джакобса^[9], Миллера и Стэрсе^[13] и Вендена^[11] соответственно.

проведены в приближении только открытого канала, т.е. без учета влияния закрытых каналов, так как в этом случае открытый канал оказывается основным каналом. При энергии $E < 1$ а.е. наши оценки в модели PS|МСНГ описывают экспериментальные данные с отклонением в пределах от 0,3 до 2,9%. Хорошее согласие наших результатов в модели PS|МСНГ с экспериментом и оценками в моделях FCNF|6H, 20H и PRT и МНС для $E < 1$ а.е., видимо, говорит о том, что конфигурации $2s^2, 2p^2, 3s^2, 3p^2, 3d^2$, учитываемые в функции МСНГ, вносят доминирующий вклад в описание основного состояния гелия. Помимо того, следует сказать, что в этой области спектра процесс прямой фотоионизации весьма хорошо описывается функциями FCNF и PS. Для значений энергии $1 < E < 2$ а.е. наши результаты расходятся с экспериментом в пределах от 8 до 21%. В этой ситуации расхождение оценок, полученных в моделях FCNF|nH и PS|МСНГ, с экспериментом и результатами в моделях PLRB|nH, скорее всего, обусловлено неадекватностью функций FCNF и PS для описания континуума фотопроцесса в этой области спектра.

Прямая фотоионизация из возбужденных состояний гелия

Наши расчеты проведены с использованием волновой функции, в которой учтено влияние закрытых каналов (см. формулу (13)). Напомним, что квадрат модуля коэффициента $b_{\mu}(E)$ (формула (16)) характеризует вероятность пребывания электрона

в закрытом канале. На рисунке 1 показана зависимость вероятности пребывания электрона в закрытом канале, соответствующем $1p$ - уровню. Эта вероятность $|b_{\mu}(E)|^2$ имеет очень маленькую величину при малых ($E < 0,5$ а.е.) энергиях, но она становится заметной в области энергии $E > 0,5$ а.е. (рис.1).

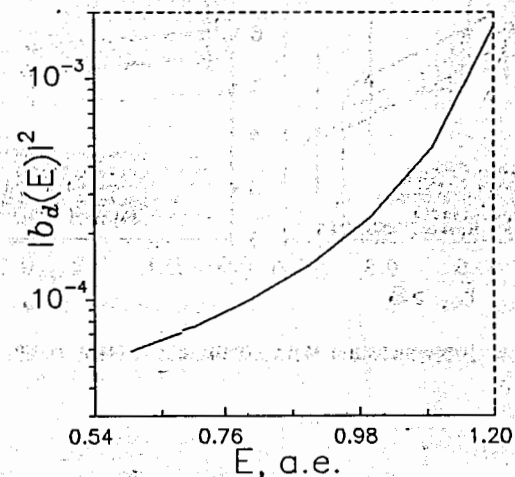


Рис.1. Вероятность пребывания электрона (d -волна) в закрытом канале $|b_d(E)|^2$ как функция от энергии фотоэлектрона

Наши основные результаты, сосчитанные в комбинациях PS|СНГ и PS|МСНГ, приведены на рис.2-6 и в табл.2 - 5 в сравнении с экспериментами^[17,18] и теоретическими оценками^[19-28]. Учитывая особенности поведения характеристик фотопроцесса, анализ результатов удобно проводить в трех энергетических областях: припороговой ($0 < E < 0,05$ а.е.), области энергий $0,05 < E < 0,5$ а.е. и $0,5 < E < 1,2$ а.е.

На рис.2 и 3 проиллюстрировано поведение сечений ионизации $He(2^1,3s)$ и $He(3^1,3p)$ атомов как функции от энергии фотоэлектрона в припороговой области. Видно, что наши и почти все другие теоретические оценки^[20,21,22-24] в целом находятся в согласии с экспериментом в пределах ошибок. При описании реакции $He(2^1s) + \gamma \rightarrow He^+(1s) + e$ наши результаты в моделях PS|СНГ, PS|МСНГ заметно отличаются между собой, причем оценки в последней комбинации оказываются несколько завышенными по отношению к эксперименту и данным других авторов (рис.2а). А в случае реакции $He(2^3s) + \gamma \rightarrow He^+(1s) + e$ к хорошему согласию с экспериментом приводят расчеты, выполненные в модели PS|МСНГ (рис.2б). Заметные отличия в абсолютных значениях сечений демонстрируют сильную чувствительность сечений фотоионизации $He(2^1s)$ и $He(2^3s)$ атомов в припороговой области к выбору модели структуры. Для $He(3^1,3p)$ атомов, возбужденных линейно поляризованными фотонами и ионизуемых теми же фотонами, наши результаты по сечениям ионизации

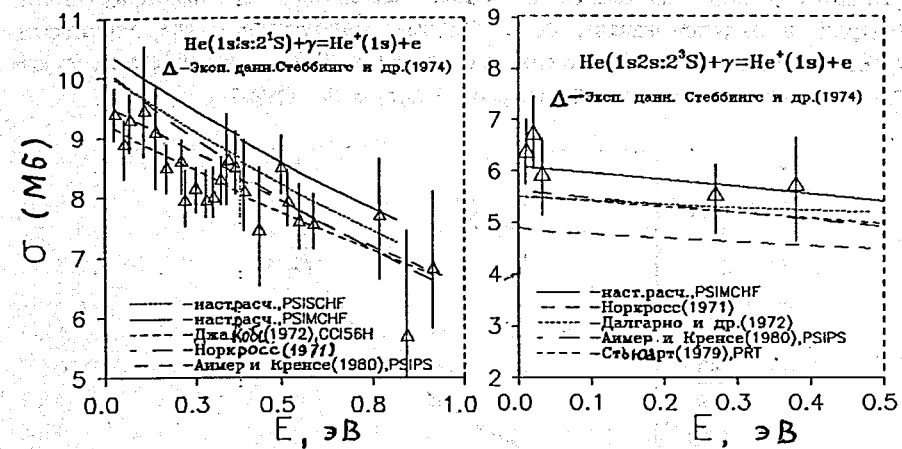


Рис.2. Полные сечения фотоионизации метастабильных атомов гелия как функция от энергии фотоэлектрона

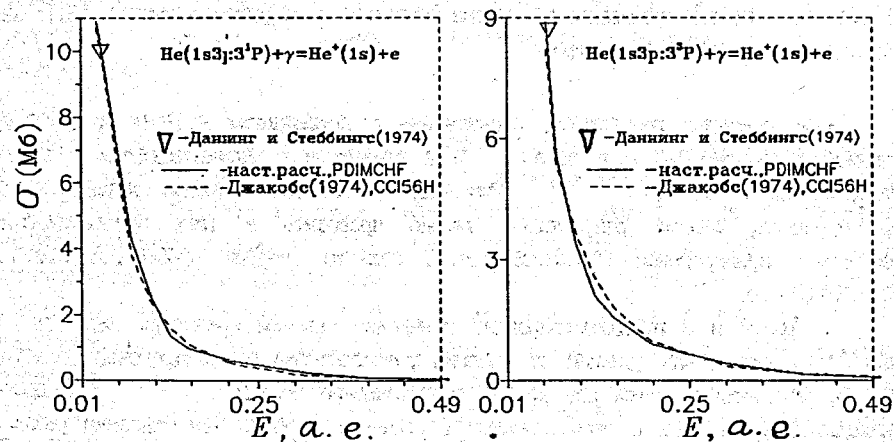


Рис.3. Полные сечения фотоионизации атомов $He(3^1, 3^3P)$, возбужденных линейно поляризованным светом и ионизованных тем же излучением

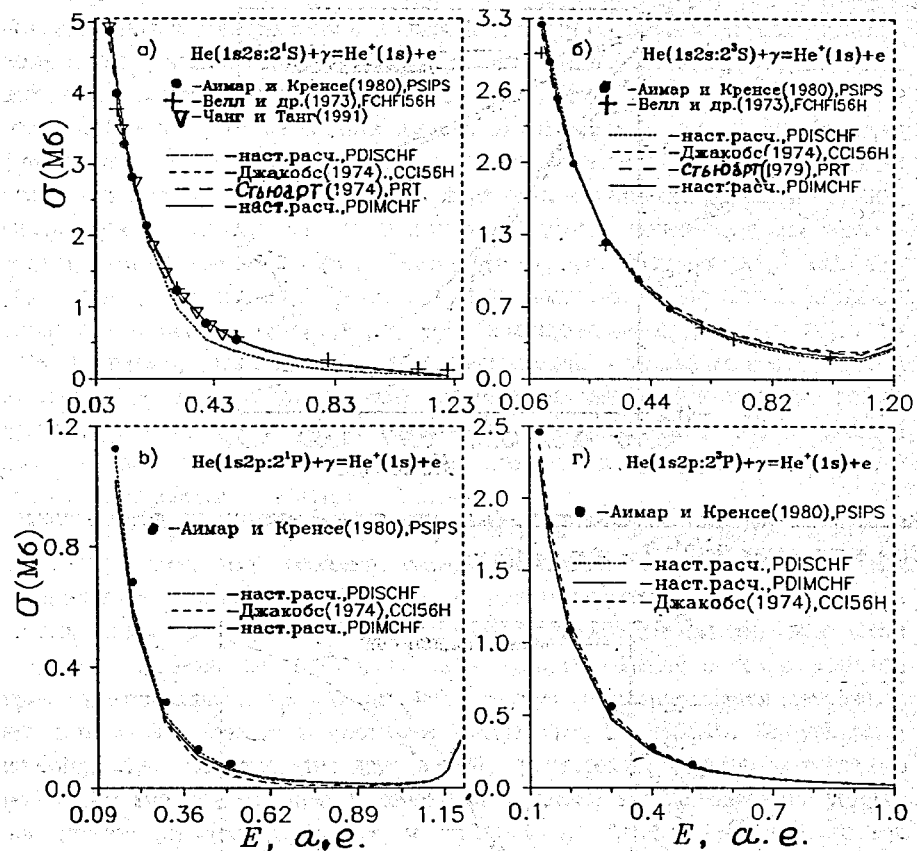


Рис.4. Полные сечения фотоионизации атомов $He(2^1, 3s)$ и $He(2^1, 3P)$ как функция от энергии фотоэлектрона

Табл.2*. Вклады первых $1D$ и $1S$ закрытых каналов в частичном сечении фотоионизации $He(2^1P)$ атома (Mb)

E, a.u.	$\Gamma(E), \text{эВ}$	$1D$			$1S$			
		σ_0	$\Delta\sigma$	$\eta(\%)$	$\Gamma(E), \text{эВ}$	σ_0	$\Delta\sigma$	$\eta(\%)$
0.5	0.15	$3.7 \cdot 10^{-2}$	$-8.1 \cdot 10^{-3}$	21.9	0.23	$2.8 \cdot 10^{-2}$	$2.6 \cdot 10^{-3}$	9.3
0.6	0.14	$2.0 \cdot 10^{-2}$	$-6.8 \cdot 10^{-3}$	34.0	0.22	$2.0 \cdot 10^{-2}$	$2.7 \cdot 10^{-3}$	13.4
0.7	0.13	$1.1 \cdot 10^{-2}$	$-5.8 \cdot 10^{-3}$	51.3	0.21	$1.5 \cdot 10^{-2}$	$3.0 \cdot 10^{-3}$	19.4
0.8	0.12	$6.8 \cdot 10^{-3}$	$-4.9 \cdot 10^{-3}$	72.8	0.20	$1.2 \cdot 10^{-2}$	$3.5 \cdot 10^{-3}$	28.4
0.9	0.11	$4.3 \cdot 10^{-3}$	$-4.0 \cdot 10^{-3}$	93.8	0.19	$9.9 \cdot 10^{-3}$	$4.3 \cdot 10^{-3}$	43.4
1.0	0.10	$2.8 \cdot 10^{-3}$	$-2.6 \cdot 10^{-3}$	91.2	0.19	$8.2 \cdot 10^{-3}$	$6.2 \cdot 10^{-3}$	75.6
1.1	0.09	$1.8 \cdot 10^{-3}$	$1.4 \cdot 10^{-3}$	80.2				

* В таблицах 2 и 3 для краткости принято обозначение $a \cdot 10^{-b} = a \cdot 10^{-b}$.

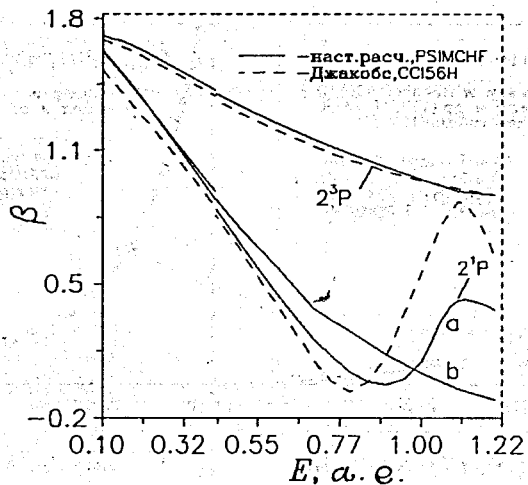


Рис.5. Энергетическая зависимость коэффициента угловой анизотропии фотоэлектрона $\beta(E)$ в процессах $\text{He}(2^{1,3}\text{P}) + \gamma \Rightarrow \text{He}^+(1\text{s}) + e$.

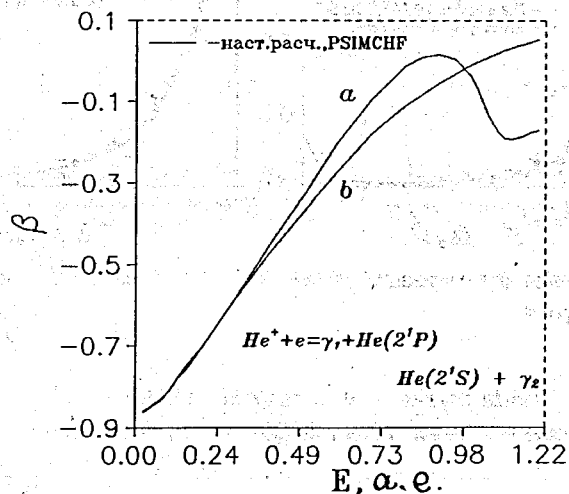


Рис.6. Энергетическая зависимость коэффициента угловой анизотропии вторичных фотонов $\beta_2^\gamma(E)$ из атома $\text{He}(2^1\text{P})$ в рекомбинации $(e + \text{He}^+)$.

приведены на рис.3 в сравнении с экспериментом [18] и оценками [25]. Наши расчеты, проведенные в модели PS|MCNF (рис.2 и 3), показывают, что PS|MCNF -модель может достаточно хорошо описывать процесс прямой фотоионизации в припороговой области. Заметим, что в области энергии $0,05 < E < 0,5$ а.е. оценки характеристик фотоионизации почти во всех моделях структуры оказываются достаточно близкими (рис.3,4,5 и табл.5). Мы видим, что результаты, сосчитанные в модели PS|SCNF , оказываются значительно ниже по сравнению с другими оценками, в том числе в модели PS|MCNF (рис.2а и 4а). Таким образом, при энергиях $E < 1,2$ а.е. все структурные комбинации за исключением PS|SCNF допускают весьма близкое описание фотоионизации $\text{He}(2^1\text{S})$ атома (рис.2а, 4а). Расхождение оценок в моделях PS|SCNF и PS|MCNF , видимо, указывает на важность корреляций, учитываемых конфигурациями $1s^2, 2s^2, 2p^2$ в волновой функции MCNF для метастабильного 2^1S -состояния гелия, причем в этом случае корреляции, вносимые примесью конфигурации $1s^2$, оказываются существенными, особенно сильно их вклад проявляется при переходе в открытый канал в фотопроцессе $\text{He}(2^1\text{S}) + \gamma \Rightarrow \text{He}^+(1\text{s}) + e$.

Теперь перейдем к рассмотрению фотопроцесса в области энергии $0,5 < E < 1,2$ а.е., где происходят особенно сильные изменения в поведении различных характеристик фотопроцесса. При этом с ростом энергии быстро уменьшаются сечения прямого фотоперехода в открытый канал, особенно сильный спад имеет место в случае процесса $\text{He}(2^1\text{P}) + \gamma \Rightarrow \text{He}^+(1\text{s}) + e$ (рис.4в). Вместе с тем в сечении прямой фотоионизации вклад перехода через закрытые каналы становится заметным, и его доля увеличивается с возрастанием энергии (рис.4 и табл.2). Конкуренция и интерференция амплитуд этих двух ветвей фотоперехода приводят к появлению некоторого широкого минимума в сечении и в зависимости коэффициента угловой анизотропии фотопроцесса (рис.4 и табл.3,4). Рис.4 показывает, что в представленном интервале энергии эффект закрытого канала проявляется во всех случаях за исключением фотопроцесса $\text{He}(2^3\text{P}) + \gamma \Rightarrow \text{He}^+(1\text{s}) + e$. Заметим, что особенно сильное проявление эффекта наблюдается в процессе $\text{He}(2^1\text{P}) + \gamma \Rightarrow \text{He}^+(1\text{s}) + e$ (рис.4в). В табл.2 приведены значения парциальных сечений ионизации из 2^1P -состояния для s- и d- волн, сосчитанные без учета влияния закрытого канала (см.(27)), и отличия $\Delta\sigma$ (см. формулу (29)) сечений $\sigma_L^{(0)}$ от сечений, полученных с учетом закрытого канала при разных энергиях фотоэлектрона. В таблице 2 приведены значения величины η в процентах. При $E=1$ а.е. (на расстояниях 6,1 и 8,24 эВ от положений первых 1s - и 1d -резонансов) η составляет 75,6 % для s-волны, а для d-волны 91,2 % (табл.2).

Видно, что при энергиях $0,5 < E < 1$ а.е. для d-волны сдвиг $\Delta\sigma$ имеет отрицательный, а при 1,1 а.е.—положительный знак, в то же время для s-волн $\Delta\sigma$ является положительным (табл.2). Значит, интерференция вкладов амплитуды переходов в открытый и через закрытые каналы может привести к $\Delta\sigma$ разного знака в зависимости от природы перехода (табл.2). Сумма вкладов этих сечений процесса в открытые и через закрытые каналы приводит к особенностям (опускание или

подъем) в области минимума полного сечения по отношению к сечению прямого фотоперехода в открытый канал (рис.4в). В энергетической зависимости коэффициента угловой анизотропии β_2 (форм.(32)) эта особенность проявляется гораздо сильнее, нежели в полном сечении фотоионизации (рис.5, кривые а и б). В случае ионизации из 2^1P -состояния при энергии 0,9 а.е. доля вклада закрытого канала в β_2 -коэффициенте составляет 131,7%, в то же время эта доля в полном сечении равна 2,1% (см. также табл.4).

Наши расчеты показывают, что для одного и того же прямого фотоперехода сильнее проявляется закрытый канал, соответствующий уровню, для которого величина $\Gamma_\mu(E)$ принимает сравнительно большие значения. Когда Γ_μ мала, эффект становится существенно слабым. Это хорошо видно на примерах вклада первого и второго $1D$ - и $1S$ -уровней соответственно в энергетическую зависимость величин $\Delta\sigma$ и Γ_μ для процесса ионизации $He(2^1P)$ атома (табл.2 и 3). Такая особенность проявления эффекта закрытого канала в сечении прямой фотоионизации также хорошо видна из формул (28) и (29). Физический смысл этого явления, по-видимому, состоит в том, что чем больше величина Γ_μ , тем интенсивнее происходит вход электрона в закрытый канал, а также и его уход в открытый канал из-за межэлектронных корреляций.

Вышерассмотренный эффект закрытых каналов также проявляется при фоторекомбинации - в обратном процессе прямой фотоионизации при энергиях электрона ниже резонансной области. В таблице 4 дана энергетическая зависимость вклада закрытого канала в сечение фоторекомбинации. Как уже отмечалось выше, эффект может проявиться сильнее в коэффициенте угловой анизотропии. Нами рассчитан коэффициент угловой анизотропии $^{[29]}$ вторичного фотона γ_2 в процессе фоторекомбинации $He^+(1s) + e \rightarrow \gamma_1 + (He(2^1P) \Rightarrow He(2^1S) + \gamma_2)$ (рис.6). Нам представляется возможным экспериментально обнаружить проявление закрытых каналов измерением коэффициента анизотропии вторичного фотона γ_2 в процессе фоторекомбинации $He^+(1s) + e \rightarrow \gamma_1 + (He(2^1P) \Rightarrow He(2^1S) + \gamma_2)$.

Представляется интересным некоторый анализ наших результатов в сравнении с другими теоретическими оценками с целью получения информации о качестве волновых функций атома в исходных состояниях и континууме. В интервале энергии $0,1 < E < 1,2$ а.е. наши расчеты по сечениям реакции $He(2^3P) + \gamma = He^+(1s) + e$ в моделях PS|SCHF и PS|MSCHF хорошо согласуются с оценками, полученными в структурной комбинации CC|56h (рис.4г). Видимо, это связано со слабым проявлением корреляции электронов в процессе фотоионизации $He(2^3P)$ атома гелия. Для процесса $He(2^1S) + \gamma \Rightarrow He^+(1s) + e$ наши результаты в модели PS|MSCHF находятся в хорошем согласии с оценками в моделях CC|56h и PRT (рис. 4а). А при энергиях $E > 0,6$ а.е. оценки в моделях PS|SCHF, PS|MSCHF достаточно близки между собой, но они несколько ниже данных, полученных в комбинациях CC|56h и PRT (рис.3б). Эти расхождения, вероятно, обусловлены отсутствием или разной степенью учета влияния закрытых каналов. Некоторые отклонения оценок Белла и Кингстона $^{[27]}$ от

Табл.3. Вклады вторых $1D$ и $1S$ закрытых каналов в парциальном сечении фотоионизации $He(2^1P)$ атома (Мб)

E, а.е.	$\Gamma(E), \text{эВ}$	$1D$			$1S$			
		σ_0	$\Delta\sigma$	$\eta(\%)$	σ_0	$\Delta\sigma$	$\eta(\%)$	
0.5	0.032	$3.7 \cdot 10^{-2}$	$2.6 \cdot 10^{-4}$	0.7	0.013	$2.8 \cdot 10^{-2}$	$7.6 \cdot 10^{-4}$	2.7
0.6	0.031	$2.0 \cdot 10^{-2}$	$2.2 \cdot 10^{-4}$	1.1	0.012	$2.0 \cdot 10^{-2}$	$7.2 \cdot 10^{-4}$	3.6
0.7	0.029	$1.1 \cdot 10^{-2}$	$1.9 \cdot 10^{-4}$	1.7	0.010	$1.5 \cdot 10^{-2}$	$7.1 \cdot 10^{-4}$	4.7
0.8	0.027	$6.8 \cdot 10^{-3}$	$1.8 \cdot 10^{-4}$	2.6	$8.8 \cdot 10^{-3}$	$1.2 \cdot 10^{-2}$	$7.3 \cdot 10^{-4}$	6.1
0.9	0.026	$4.3 \cdot 10^{-3}$	$1.7 \cdot 10^{-4}$	4.0	$7.7 \cdot 10^{-3}$	$9.9 \cdot 10^{-3}$	$8.0 \cdot 10^{-4}$	8.1
1.0	0.024	$2.8 \cdot 10^{-3}$	$1.8 \cdot 10^{-4}$	6.3	$6.8 \cdot 10^{-3}$	$8.2 \cdot 10^{-3}$	$9.1 \cdot 10^{-4}$	11.1
1.1	0.023	$1.8 \cdot 10^{-3}$	$1.8 \cdot 10^{-4}$	10.2				

Табл.4. Вклады закрытого канала в полном сечении рекомбинации $He^+(1s) + e \Rightarrow He(2^1P) + \gamma_1$ (Мб)

E, а.е.	$\sigma^r \cdot 10^{-5}$	$\Delta\sigma$	$\eta(\%)$
0.4	0.20	-0.007	6.1
0.5	0.12	-0.005	7.8
0.6	0.08	-0.004	10.0
0.7	0.06	-0.003	11.0
0.8	0.05	-0.001	5.2
0.9	0.04	0.0003	2.1
1.0	0.05	0.004	32.7
1.1	0.08	0.013	154.0

Табл.5. $1S$ и $1D$ парциальные сечения ионизации из 2^1P -состояния гелия (Мб)

E, а.е.	$1S$		$1D$	
	σ_a	σ_b	σ_a	σ_b
0.025	0.71386		6.75957	
0.075	0.36895	0.27944	2.54070	2.70010
0.1	0.28144	0.21125	1.68302	1.77000
0.125	0.22137	0.16386	1.15773	1.24120
0.15	0.17815	0.13106	0.81977	0.89224
0.2	0.12196	0.08837	0.44146	0.48578
0.3	0.06738	0.04534	0.15525	0.16804
0.4	0.04305	0.02647	0.06391	0.06400
0.5	0.03031	0.01704	0.02844	0.02580
0.6	0.02293	0.01198	0.01289	0.01005
0.7	0.01842	0.00914	0.00551	0.00320
0.8	0.01567	0.00763	0.00187	0.00047
0.9	0.01424	0.00708	0.00024	0.00011
1.0	0.01439	0.00772	0.00020	0.00201
1.1	0.01882	0.01179	0.00328	0.00879
1.2	0.02236	0.01574	0.02608	0.04304

а - Настоящий расчет, PS|MSCHF
 б - Джакобс (1974), CC|56h

других результатов, вероятно, связаны с тем, что они получены без учета влияния закрытого канала (рис. 4а, б). Наблюдаются некоторые расхождения наших и полученных в модели $CS|56N$ оценок для сечения ионизации гелия из 2^1P -состояния (рис. 4в), а также коэффициента угловой анизотропии фотоэлектрона $\beta_2(E)$ (рис. 5). В этих случаях отличия наших результатов от оценок, полученных в модели $CS|56N$ (рис. 4в и 5), по нашему мнению, связаны с различной точностью описания континуума (табл. 5) для прямого перехода $2^1P \rightarrow E^1D$. Легко заметить, что в этих случаях отличия в β_2 -коэффициенте (рис. 5) обусловлены различием парциальных сечений из 2^1P -состояния в E^1D -континуум (табл. 5).

Таким образом, в целом наши расчеты показывают, что модель $Ps|MSHF$ может с хорошей точностью описать прямой процесс фотоионизации основного и возбужденных состояний гелия. В области энергии $0 < E < 1,2$ а.е. типы корреляций, приведенные в (38) и учитываемые в волновых функциях $2^1,^3S$ - и $2^1,^3P$ -состояний гелия, вносят доминирующий вклад при описании фотоионизации этих состояний. Также видно, что использование решения уравнения Шредингера с эффективным центральным потенциалом^[22] в качестве волновой функции открытого канала в диагонализационном приближении может описывать процесс фотоионизации возбужденного гелия с такой же точностью, как многоканальный и другие более сложные методы.

Заключение

В работе исследуется чувствительность характеристик прямой фотоионизации возбужденного гелия к учету влияния закрытых каналов и выбору модели структуры континуума и исходных возбужденных состояний в широкой области спектра.

Структура континуума атома описывалась функцией, являющейся суперпозицией решения уравнения Шредингера в эффективном центральном потенциале^[22] для описания прямого фотоперехода и L^2 -функции для закрытого канала в диагонализационном приближении^[32] (функция PS). Волновые функции исходных состояний рассчитывались с использованием одно- и многоконфигурационных методов Хартри-Фока ($MSHF$). Проведен также комплексный анализ имеющихся экспериментальных данных и теоретических оценок.

Наши исследования показывают, что в области энергии $E > 0,5$ а.е., где малы сечения прямого фотоперехода из возбужденного состояния гелия, заметно проявляются закрытые каналы в процессе прямой фотоионизации. Применение диагонализационного метода к описанию фотоионизации возбужденного гелия позволяет разделить вклады открытого и закрытого каналов в характеристиках процесса.

Конкуренция и интерференция амплитуд фотоперехода в открытый и через закрытые каналы приводят к особенностям в сечении фотопроцесса, проявляющимся, в частности, в виде широкого минимума в сечении ионизации. При энергии $E=1$ а.е. доли вкладов через закрытый канал в сечение фотоионизации из 2^1P -состояния гелия на расстояниях 6,1 и 8,2 эВ от положений первых 1s - и 1D -резонансных

уровней составляют 75,6 и 91,2% по отношению к соответствующим парциальным сечениям без учета закрытого канала. С ростом энергии величина вклада закрытого канала в сечение ионизации сильно зависит от величины вероятности перехода электрона из закрытого канала в открытый. Чем больше такая вероятность, тем сильнее становится вклад закрытого канала в сечение фотоионизации. В энергетической зависимости безразмерных величин, в том числе коэффициента угловой анизотропии β_2 в угловом распределении, эффект закрытого канала проявляется гораздо сильнее, нежели в полном сечении фотоионизации (рис. 5, кривые а и в). В случае ионизации из 2^1P -состояния при энергии 0,9 а.е. доля вклада закрытого канала в β_2 -коэффициенте равна 131,7%, в то же время эта доля в полном сечении составляет лишь 2,1%.

Влияние закрытого канала сильно проявляется также в характеристиках фоторекомбинации. В этой связи нам представляется возможным экспериментально изучить эффект закрытых каналов измерением коэффициента анизотропии вторичного фотона γ_2 в процессе фоторекомбинации $He^+(1s)+e \rightarrow \gamma_1 + (He(2^1P) \rightarrow He(2^1S)+\gamma_2)$ (табл. 4).

Наши расчеты показывают, что в области энергии $0 < E < 0,5$ а.е. вышеупомянутая волновая функция континуума атома в диагонализационном приближении^[32] PS обеспечивает описание процесса фотоионизации возбужденного гелия с такой же точностью, как и многоканальный и другие более сложные методы. Сочетание волновой функции PS с функцией $MSHF$ хорошо описывает имеющиеся экспериментальные данные и дает результаты, согласующиеся с теоретическими оценками других авторов по характеристикам фотоионизации $He(2^1,^3S)$ и $He(n^1,^3P)$ ($n=2,3$) атомов в широкой области спектра ($0 < E < 1,2$ а.е.) (рис. 2-5). Многоконфигурационный метод Хартри-Фока обеспечивает возможность гибко варьировать типы корреляций электронов, играющих доминирующую роль в конкретных процессах фотоионизации возбужденных состояний гелия (38). При этом стандартизация расчетов на ЭВМ может быть обеспечена в большей степени, нежели это можно сделать при использовании многопараметрических вариационных функций.

Для тяжелых атомов влияние закрытого канала может существенно заметнее проявиться не только при их фотоионизации, но и в других неупругих процессах. Поэтому изучение этого эффекта имеет важное значение в атомной физике. Авторы благодарят проф. В.В. Балашова, а также Л. Ханмэдэха за постоянный интерес и стимулирующие обсуждения.

Литература

1. Samson J.A.R.: Atomic photoionization. In: Handbuch Der Physik, Mehlhorn W. (ed), pp.123-213, Springer-Verlag, 1982.
2. Starace A.F.: Theory of Atomic-Photoionization, *ibid.* pp.1-121.
3. Schmidt V.: Rep. Prog. Phys. 55, 1992, 1483-1659
4. Lowry J.F., Tomboulion D.H. and Ederer D.L.: Phys. Rev. (1965), 137, A1054-7
5. Samson J.A.R.: Phys. Rep. 28, 1976, 303
6. West J.B. and Mar G.V.: Proc. R. Soc. Lond. A349, 1976, 397-421

7. Stewart A.L. and Webb T.G.: Proc. Phys. Soc. V82. 1963 ,532
8. Bell K.L. and Kingston A.E.: Proc. Phys. Soc. 90. 1967 ,31;
b. J. Phys.B3, 1970 ,1433 c. J.Phys B4. 1971 ,1308
9. Jacobs V.L.: Phys. Rev. A3, 1971 , 289
10. Amusia M.Ya., Cherepkov N.A., Radojevič V and Zivanovic Dj.:
J. Phys B9(1976),L469.
11. Wendin G.: Phys. Letters 33A. 1970 ,16; J. Phys B4(1971),1080
12. Stewart A.L.: J. Phys.B11, 1978 ,2449
13. Miller D.L. and Starace J. Phys. B13, 1980 , L525
14. Sánchez I. and Martin F.: J. Phys. B23, 1990 ,4263
15. Froesse Fischer C. and Idrees M.: J. Phys. B23, 1990 ,679
16. Wuilleumier F.J., Edrer D.L. and Picque J.L.: Adv. at. Phys.23. 1988 ,197
17. Stebbings R.F., Dunning F.B., Tittel F.K. and Rundel R.D.:
Phys. Rev. Lett. 30(1973), 815, Phys. Rev. A8,(1973)665
18. Dunning F.B. and Stelbings R.F.: Phys. Rev. Lett. 32(1974),1286
19. Burgess A. and Seaton M.J.: Mon. Notic. Astron. Soc. 120. 1960 ,121
20. Jacobs V.L.: Phys. Rev. A4, 1971 , 939
21. Dalgarno A., Doyle H. and Oppenheimer M.: Phys. Rev. Lett. 29. 1972 ,1051
22. Aymar M. and Crance M.: J. Phys. B13. 1980 , 2527
23. Stewart A.L.: J. Phys.B11, 1978 ,L431. ibid12. 1979 ,401
24. Norcross D.W.: J.Phys. B4, 1971 , 652
25. Jacobs V.L.: Phys. Rev. Lett.32, 1974 , 1399
26. Jacobs V.L.: Phys. Rev. A9. 1974 , 1938
27. Bell K.L., Kingston A.E. and Taylor I.R.: J. Phys. B6. 1973 , 2271
28. Chang T.N and Tang X Phys. Rev.A44. 1991 ,232
29. Grum-Grzhimailo A.N. Danzan S. Lhagva O. and
Strakhova S.I. Z. Phys.D18, 1991 ,147
30. Fano U.: Phys. Rev.124, 1961 ,1866
31. Балашов В.В. и др. Ядерная физика, Том 2, 1965 ,643
32. Балашов В.В., Гришанова С.И., Круглова И.М., Сенашенко В.С.:
Оптика и спектроскопия, 28. 1970 , 859; Балашов В.В. и др. Вестник
Московского Университета. N1. 1971 , 65
33. Froese Fischer C.: Comput. Phys. Commun.14, 1978 ,145-53
34. Теоретический практикум по ядерной и атомной физике под. ред.
Балашова В.В.: Москва: Энергоиздат, 1984 , 5.1
35. Lhagva Oidovyn Z. Phys D23, 1992 ,321
Lhagva O. Badamdandin R, Strakhova S.I and Hehmedeh L
J. Phys. B24, 1991 ,4249
36. Tweed, R.J., Langlois.J.: J. Phys. B20,5213,1987,
37. Accad Y., Pekeris C.L and Schiff B.: Phys. Rev. A4. 1971 , 516

Рукопись поступила в издательский отдел

1 июня 1993 года.