

ПРИБЛИЖЕННЫЙ МЕТОД РАСЧЕТА СЕЧЕНИЙ ФОТОИОНИЗАЦИИ АТОМОВ И ИОНОВ

Г. А. Кобзев и В. М. Сергеев

Рассмотрен приближенный метод расчета сечений фотоионизации атомов и ионов. В качестве волновой функции связанного состояния взята аналитическая волновая функция самосогласованного поля. Волновая функция непрерывного спектра — из метода квантового дефекта, которая при нулевом квантовом дефекте переходит в кулоновскую. Получены аналитические выражения для матричного элемента атомов и ионов радиус-вектора и скорости. Предложенный метод проверен на сечениях фотоионизации атомов и ионов ряда элементов. Результаты расчетов для атомов и некоторых ионов сравниваются с имеющимися в литературе расчетами по методу Хартри—Фока, а при боклопороговых энергиях с расчетом по методу Берджеса—Ситона. Для атомов производится также сравнение с экспериментальными данными. Проверка показывает надежность предлагаемой методики для внешних оболочек атомов и ионов легких и средних элементов в широкой области энергий от припороговых до борновских.

Введение

Процессы фотоионизации атомов и положительных ионов играют определяющую роль в образовании спектральных континуумов газов и плазмы при температурах порядка десятка тысяч °К и выше. Интерес же к оптическим свойствам плазмы, связанный с рядом прикладных задач, весьма велик. Оптические свойства азота, кислорода, углекислого газа, воздуха и ряда других смесей газов при температурах от 2000 до 20 000 °К за последнее время были рассчитаны и заатабулированы, например [1]. В этих работах коэффициент поглощения вычислялся в спектральном диапазоне до $150\,000\text{ см}^{-1}$ ($\sim 19\text{ эВ}$), поскольку именно в этом интервале переносится основная доля лучистой энергии при таких температурах. Основной вклад в континуум вносят припороговые области сечений фотоионизации (СФ) основных и возбужденных состояний, а также свободно-свободные переходы в полях ионов.

Для расчета СФ атомов в этих работах использовался полуэмпирический метод квантового дефекта (МКД), который при относительной простоте (вычисления проводятся по аналитическим формулам) довольно точно описывает припороговую часть сечений.

При рассмотрении оптических свойств плазмы с температурами от 20 000 °К и выше необходимо знание СФ атомов и ионов в спектральном интервале порядка сотен электрон-вольт. В связи с этим возникает вопрос о построении приближенного метода расчета СФ, который удовлетворял бы двум основным требованиям: был достаточно надежен в указанном выше спектральном интервале и чтобы сечение вычислялось по аналитическим формулам. Последовательное использование метода Хартри—Фока (МХФ) дает СФ, неплохо согласующиеся с экспериментом во всем интересующем нас спектральном диапазоне по крайней мере для не слишком тяжелых атомов (см. обзоры [2, 3],¹ работы [4–6]). Однако МХФ требует для вычис-

¹ Последовательное и точное решение задачи о СФ многоэлектронных атомов возможно лишь в рамках многочастичного подхода, который сделал большие успехи за последнее время [7]. В этих работах в качестве нулевого приближения используются

ления каждого СФ решения системы интегро-дифференциальных уравнений, что делает практически невозможным его применение при массовых вычислениях оптических свойств.

В настоящей работе предлагается приближенный метод расчета сечений фотоионизации, в основе которого лежит использование накопленных в литературе за последние годы аналитических волновых функций (ВФ), связанных состояний атомов и ионов [8-13], рассчитанных по методу самосогласованного поля.

Использование в качестве ВФ вырванного электрона кулоновской функции позволяет получить аналитические выражения для СФ как с матричным элементом радиус-вектора, так и скорости. Сравнение полученных результатов для СФ с расчетами по МХФ показывает, что точность предлагаемого метода не хуже, чем у МХФ для атомов с внешними p -оболочками. Это связано, по-видимому, с тем, что основной вклад в сечение дает переход в d -состояние непрерывного спектра, которое для очень тяжелых атомов не сильно отличается от водородоподобных. Исходным является выражение для СФ в одноэлектронном приближении.

Для фотоионизации внешней оболочки с N эквивалентными электронами оно имеет вид

$$\sigma_r = \frac{4\pi}{3} \alpha \frac{E}{2} a_0^2 N |G_{n'l_1s_1L_1}^{nlSL}|^2 \frac{1}{2l+1} \sum_{l'=l\pm 1}^{l_{\max}} l_{\max} W_r^2, \quad (1)$$

с матричным элементом радиус-вектора W_r

$$W_r = \int_0^{\infty} R_{n'lL}(r) r R_{k'l'}(r) r^2 dr. \quad (2)$$

Выражение для СФ с матричным элементом скорости W_v

$$W_v = \int_0^{\infty} R_{n'lL}(r) \left[\frac{d}{dr} (r R_{k'l'}(r)) \pm \frac{2l+1 \pm 1}{2} R_{k'l'}(r) \right] dr \quad (3)$$

имеет вид

$$\sigma_v = \frac{4\pi}{3} \alpha \frac{a_0^2 |G|^2}{E} \frac{1}{2l+1} \sum_{l'=l\pm 1}^{l_{\max}} l_{\max} W_v^2. \quad (4)$$

Знак плюс в квадратных скобках (3) берется при $l' = l + 1$, минус при $l' = l - 1$. Здесь обозначим L, L', L_1 — момент количества движения атома в начальном и конечном состояниях и остова, G — генеалогический коэффициент. Коэффициенты G затабулированы, величины E_{nl} неоднократно определены экспериментально, данные для большинства атомов ионов приведены в [14]. Таким образом, задача расчета сечения фотоионизации сводится к вычислению матричных элементов $W_{r,v}$.

В качестве радиальных ВФ связанного состояния выберем аналитические ВФ самосогласованного поля. Их стандартный вид

$$R_{n'lL}(r) = \sum_i C_i r^{\beta_i} e^{-\xi_i r}, \quad (5)$$

где C_i, β_i, ξ_i — затабулированные коэффициенты, причем β_i — целые.

Данное состояние атомной частицы $n'lL$ характеризуется выбором чисел C_i, β_i, ξ_i . Например, каждое данное $2p$ -состояние в [8] характеризуется 7 параметрами, по три значения C_i и ξ_i и одно β_i . Для $2s$ -, $3s$ -, $3d$ -состояний таких параметров несколько больше. Функции $R_{n'lL}$ нормированы следующим образом:

$$\int_0^{\infty} R_{n'lL}^2(r) r^2 dr = 1.$$

хартри-фоковские решения. Ввиду большой громоздкости численных расчетов эти методы пока не могут быть непосредственно применены для вычисления оптических свойств.

Представляется целесообразным провести поиск подходящей свободной ВФ в два этапа. Сначала пренебрежем в уравнении Шредингера некулоновской частью потенциала и рассмотрим решение для чисто кулоновского случая. Очевидно, что для водородоподобных и близких к водородоподобным конечных состояний такая чисто кулоновская ВФ является хорошим приближением к истинной, а для неводородоподобных состояний такая функция может служить довольно удобным первым приближением. Вычислим на этом этапе матричный элемент с чисто кулоновской свободной ВФ и связанной функцией, рассчитанной по методу самосогласованного поля. На втором этапе учтем некулоновскую часть потенциала, представляя ее в модельном виде. ВФ непрерывного спектра выразим при этом в виде линейной комбинации двух линейно-независимых решений уравнения Шредингера для чисто кулоновского случая: регулярной и нерегулярной кулоновских функций. Способ вычисления коэффициентов в этой линейной комбинации частично рассматривался ранее Ситомом в [15] и кратко обсуждается несколько ниже. Вычислим матричный элемент с прежней ВФ дискретного спектра и модифицированной кулоновской функцией непрерывного спектра.

Метод «кулон — самосогласованное поле» (МКС)

В качестве ВФ непрерывного спектра берется кулоновская, нормированная на энергию функция R_{1W}

$$R_{1W}(r) = (-1)^{l'+1} \frac{2\sqrt{z} \prod_{s=1}^{l'} \sqrt{s^2 + \frac{z^2}{k^2}}}{\sqrt{1 - e^{-2\pi z/k}}} (2kr)^{-(l'+1)} \frac{1}{2\pi} \times \\ \times \oint e^{-\rho\eta} (\eta + 1/2)^{-\frac{iz}{k} - l' - 1} (\eta - 1/2)^{\frac{z}{k} - l' - 1} d\eta, \quad (6)$$

где $\rho = 2ikr$.

Для матричного элемента радиус-вектора получается следующее выражение:

$$W_r(k) = \frac{2^{l'+1} \sqrt{z} \prod_{s=1}^{l'} \sqrt{s^2 k^2 + z^2}}{\sqrt{1 - e^{-2\pi z/k}}} \sum_i C_i (-1)^{\beta_i - l'} \frac{\partial^{\beta_i - l' + 2}}{\partial \xi_i^{\beta_i - l' + 2}} e^{-\frac{z}{k} \arctg \frac{k}{\xi_i}} \frac{1}{(\xi_i^2 + k^2)^{l'+1}}. \quad (7)$$

Этот результат был получен в [16].

Для матричного элемента скорости получается после аналогичной процедуры интегрирования сначала по r , а потом по η выражение

$$W_v(k) = \frac{2^{l'+1} \sqrt{z} \prod_{s=1}^{l'} \sqrt{s^2 k^2 + z^2}}{\sqrt{1 - e^{-2\pi z/k}}} \sum_i C_i (-1)^{\beta_i - l' + 1} \frac{\partial^{\beta_i - l' + 1}}{\partial \xi_i^{\beta_i - l' + 1}} \xi_i A_n \quad (8a)$$

при $l' = l + 1$;

$$W_v(k) = \frac{2^{l'+1} \sqrt{z} \prod_{s=1}^{l'} \sqrt{s^2 k^2 + z^2}}{\sqrt{1 - e^{-2\pi z/k}}} \sum_i C_i (-1)^{\beta_i - l' + 1} \times \\ \times \left[(2l' + 1) \frac{\partial^{\beta_i - l'}}{\partial \xi_i^{\beta_i - l'}} A_n + \frac{\partial^{\beta_i - l' + 1}}{\partial \xi_i^{\beta_i - l' + 1}} \xi_i A_n \right] \quad (8b)$$

при $l' = l - 1$.

В выражениях (7), (8) входят производные A_n

$$A_n = \frac{e^{-(2z/k) \arctg k/\xi_i}}{(\xi_i^2 + k^2)^{l'+1}}. \quad (9)$$

Вычисление производных порядка выше двух—трех весьма громоздко, поэтому удобно воспользоваться в практических расчетах рекуррентной формулой для n -й производной. Введем обозначения

$$F = e^{-(2z/k) \operatorname{arctg} k/\xi_i}, \quad g = k^2 + \xi_i^2. \quad (10)$$

Имеем для n -производной соотношения

$$A_n = Fg^{-n-l'-1} L_n, \quad L_n = 2[z - (l' + n)\xi_i] L_{n-1} - g(n-1)(2l' + n)L_{n-2}. \quad (11)$$

При этом

$$L_0 = 1, \quad L_1 = 2[z - (l' + 1)\xi_i].$$

Учет некулоновости потенциала. Модифицированный метод «кулон—самосогласованное поле» (ММКС)

В качестве ВФ непрерывного спектра возьмем теперь функцию

$$R_{kl'}(r) = R_{1kl'}(r) \cos \delta_{l'}(k^2) + R_{2kl'}(r) \sin \delta_{l'}(k^2), \quad (12)$$

являющуюся решением уравнения Шредингера с потенциалом, отличным от кулоновского на малых расстояниях. Эта функция рассматривается в МКД и имеет правильную асимптотику

$$R_{kl'}(r) \sim \cos \left[kr - \frac{\pi}{2}(l' - 1) + (z/k) \ln 2kr - \arg \Gamma \left(l' + 1 - \frac{iz}{k} \right) + \delta_{l'} \left(\frac{z^2}{k^2} \right) \right].$$

$\delta_{l'}$ характеризует в асимптотике функции отклонения потенциала от кулоновского. Здесь R_1 и R_2 — два линейно независимых решения радиального уравнения Шредингера для чисто кулоновского потенциала, R_1 ведет себя в начале координат как $r^{l'+1}$, R_2 — как $r^{-l'}$. Для исправления этого решения в начале координат в [15] вводится множитель $[1 - \exp(-\tau_l r)]^{2l'+1}$, константу τ_l находят из условия $\tau_l \approx \frac{10}{l'(l'+1)}$. При этом и второе решение ведет себя при малых r как $r^{l'+1}$. Асимптотическое выражение для $R_{kl'}$, нормированной на энергию,² имеет вид

$$R^A(r) \equiv R_{kl'}(r) = \sqrt{\frac{2}{\pi k}} \frac{1}{r} \cos \left[kr + \frac{z}{k} \ln kr - \frac{\pi}{2}(l' - 1) - \arg \Gamma \left(l' + 1 + \left(\frac{iz}{k} \right) + \delta_{l'} \right) \right]. \quad (13)$$

При $\delta_{l'}(k) = 0$ ВФ (9) переходит в обычную кулоновскую функцию $R_1(r)$.

Рассмотрим теперь матричный элемент W_r . Подставляя ВФ непрерывного спектра (12) и ВФ связанного состояния (5), имеем для матричного элемента радиуса

$$W_r(k) = \sum_i C_i W_i(k), \quad (14)$$

$$W_i(k) = W_{ri}(k) [\cos \delta_{l'}(k) + \Theta_{\beta_i l'}(k, \xi_i) \sin \delta_{l'}(k)]. \quad (15)$$

Здесь $W_{ri}(k)$ есть i -тый член суммы (4). Функция $\Theta_{\beta_i l'}(k, \xi_i)$ определяется выражением

$$\Theta_{\beta_i l'}(k, \xi_i) = \frac{1}{W_{ri}(k)} \int_0^\infty R_{nlR}(r) r R_2(r) dr \quad (16)$$

и сравнительно просто вычисляется лишь в припороговой области энергии (см. Приложение).

² В дальнейшем нас будут интересовать только нормированные на энергию ВФ непрерывного спектра, поэтому для сокращения записи индекс W будем опускать, не будем писать также и индексы k и l' , асимптотические ВФ будем отличать от прочих индексом w .

Выражение для матричного элемента (15) содержит фазы упругого рассеяния электрона на некулоновской части потенциала остова. В припороговой области фазу можно определить по экстраполированному квантовому дефекту, используя соотношение [15]

$$\delta_{l\sigma}(k^2) = \pi\mu_{l\sigma}(k^2). \quad (17)$$

Это выражение является более точным, чем результаты возможных расчетов фаз упругого рассеяния на модельных потенциалах или по методу Хартри-Фока, так как явным образом учитывает реальный потенциал остатка.

Попытки распространить ММКС на широкий интервал энергий существенно и неоправданно усложняют получаемые формулы, не увеличивая надежности результатов по сравнению с МКС, поскольку приходится пользоваться либо разложением по k^2 , либо какой-либо интерполяционной процедурой, сшивая решение при малых k^2 с борновским решением, которое нетрудно получить.

Таким образом, при расчетах СФ в широком интервале энергий следует пользоваться МКС, а если требуется уточнение в припороговой области, то можно воспользоваться ММКС.

Обсуждение результатов

В приближениях МКС и ММКС были рассчитаны СФ основных конфигураций ряда атомов, а также ионов азота и кислорода. Часть полученных результатов представлена на рис. 1—7. Известные в литературе экспериментальные данные по СФ относятся к атомам [2, 3], экспериментальные

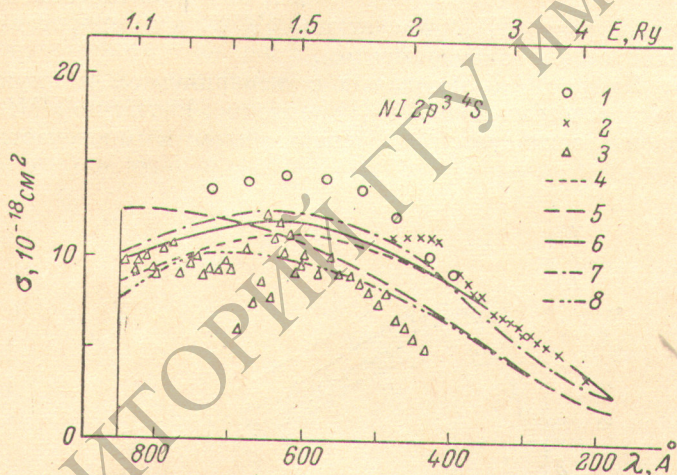


Рис. 1. Сечение фотоионизации основного состояния атома азота.

Экспериментальные точки: 1 — [17], 2 — $1/2\sigma(N_2)$ [18], 3 — [19].
Расчет: 4 — МКС, σ_r , 5 — МКС, σ_g , 6 — ММКС, 7 — [23] с матричным элементом радиус-вектора, 8 — [23] с матричным элементом скорости.

данные для атомов азота [17-19] и кислорода [20, 21] неона, аргона и криптона [22] приведены на рис. 1—5.

На рис. 1 приведены данные наших расчетов по МКС и ММКС, расчетов по МХФ [23] и экспериментальные данные [17-19] для атома азота. Во всей области рассматриваемых энергий расчеты в приближении МКС и ММКС удовлетворительно согласуются с экспериментом и расчетами по МХФ.

На рис. 2 приведены данные наших расчетов по МКС и ММКС, а также данные экспериментов [20, 21] для атома кислорода. Расчет по МХФ согласуется с МКС не хуже, чем в случае азота. Это сравнение проводилось

нами ранее [16] и потому не приведено здесь. Расчет по МКС с матричным элементом скорости наилучшим образом согласуется с экспериментом в припороговой области, а при больших энергиях лучшее согласие с экспериментом имеет σ_r МКС. Проверка по правилу сумм для азота и кислорода

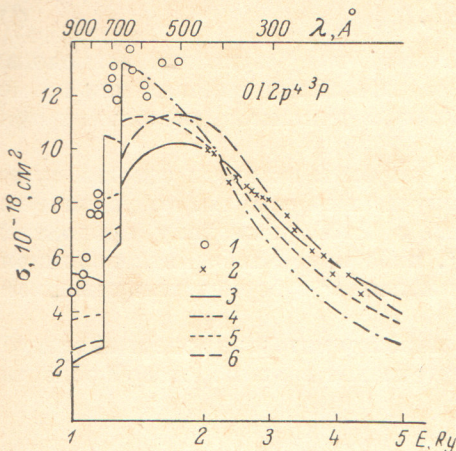


Рис. 2. Сечение фотоионизации основного состояния атома кислорода.

Экспериментальные точки: 1 — [21], 2 — 1/2 $\sigma(O_2)$ [20]. Расчет: 3 — МКС, σ_r , 4 — МКС, σ_v , 5 — МКС, $\sigma = 1/2 (\sigma_r + \sigma_v)$, 6 — ММКС.

проводилась нами ранее [16]. Она также показала хорошее согласие между собой экспериментальных данных и наших расчетов.

Азот и кислород имеют 7 и 8 электронов и внешние оболочки $2p^3$ и $2p^4$ соответственно. Для проверки методики были рассчитаны СФ значительно более тяжелых атомов неона, аргона и криптона с 10, 18 и 36 электронами и внешними оболочками $2p^6$, $3p^6$ и $4p^6$ соответственно. Для СФ этих атомов имеются надежные экспериментальные данные и данные хартри-фоксовских расчетов в широком интервале энергий. В случае Ne (рис. 3) почти во всей области энергий, кроме припорогового участка, сечения σ_r и σ_v МКС согласуются с экспериментом [22] даже лучше, чем расчет [7] по МХФ, и практически не хуже, чем многочастичный расчет [7]. Расчет по ММКС в припороговой области хорошо согласуется с экспериментом.

Для Ar и Kr (рис. 4 и 5) согласие с экспериментом [22] хуже, чем для Ne, согласие с расчетами по МХФ [7] неплохое. Расчет по ММКС у порога сечений хорошо согласуется с экспериментом и многочастичным расчетом [7].

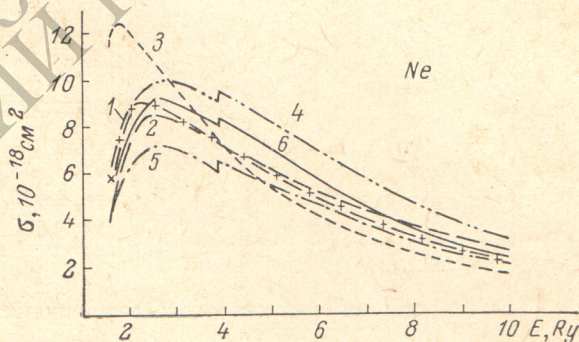


Рис. 3. Сечение фотоионизации основного состояния атома неона.

1 — эксперимент [22]; расчет: 2 — МКС, σ_r , 3 — МКС, σ_v , 4 — МХФ [7], σ_r , 5 — МХФ [7], σ_v , 6 — многочастичный расчет [7]; крестиком отмечен результат ММКС.

Таким образом, проверка для легких и средних атомов показывает, что МКС дает для СФ атомов с внешними p -оболочками результаты не худшие, чем расчет по МХФ. Отметим, что, помимо приведенных на рис. 1—5 атомов, проверка проводилась и для ряда других атомов. В частности, для Al (внешняя оболочка $3p^4$) расчет СФ у порога дает значения $(1.5 \div 1.8) \cdot 10^{-17} \text{ см}^2$, что находится в соответствии с экспериментальными данными [24, 25] и расчетом по МКД [26]. Сравнение с экспериментом в более широком интервале энергий для Al затруднено ввиду отсутствия

данных. Имеется согласие с расчетом по МХФ с потенциалом Хермана—Скиллмана [5]. Все эти факты свидетельствуют о том, что главный вклад в СФ дает переход в d -континуум, который, по-видимому, довольно близок к водородоподобному. Для атомов же с внешними s -оболочками согласие значительно хуже, что также неудивительно ввиду неводородоподобия p -континуума.

Хорошее согласие ММКС с экспериментом у порога, где, казалось бы, у атомов середины таблицы Менделеева должны проявляться многочастич-

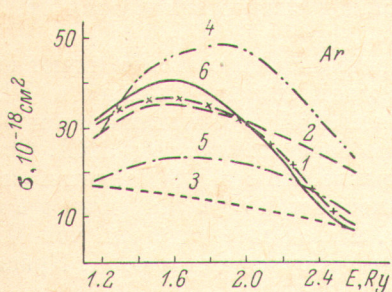


Рис. 4. Сечение фотоионизации основного состояния атома аргона. 1 — эксперимент [22]; расчет: 2 — МКС, σ_r , 3 — МКС, σ_v , 4 — МХФ [7], σ_r , 5 — МХФ [7], σ_v , 6 — многочастичный расчет [7].

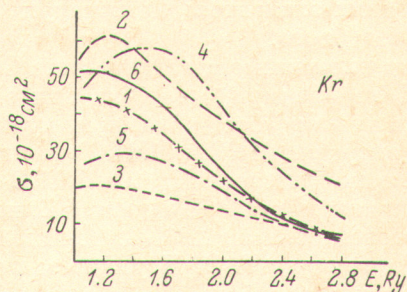


Рис. 5. Сечение фотоионизации основного состояния атома криптона. 1 — эксперимент [22]; расчет: 2 — МКС, σ_r , 3 — МКС, σ_v , 4 — МХФ [7], σ_r , 5 — МХФ [7], σ_v , 6 — многочастичный расчет [7]; крестиком отмечен результат ММКС.

ные эффекты, также неудивительно, поскольку используемый в волновой функции непрерывного спектра ММКС квантовый дефект находится из экспериментальных данных по спектру атома и тем самым неявно учитывает часть многочастичных эффектов. Это подтверждается и результатами [27], где для определения СФ $4d^{10}$ оболочечки Хе использовался квантовый дефект и было получено хорошее согласие с экспериментом.

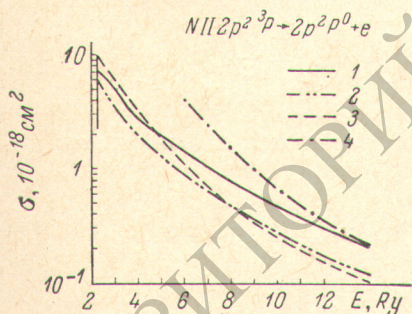


Рис. 6. Сечение фотоионизации основного состояния однократного иона азота. 1 — расчет по МКС, σ_r , 2 — ММКС, 3 — МКД, 4 — [29].

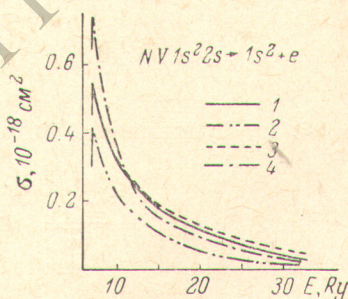


Рис. 7. Сечение фотоионизации иона N^{+4} . 1 — расчет по ММКС, 2 — МКС, σ_r , 3 — [28], 4 — МКД.

Предложенный метод может быть, вообще говоря, распространен и для определения СФ внутренних оболочек атома.

На рис. 6 приведены данные наших расчетов для иона N^+ по МКС и ММКС, а также по МКД. В припороговой области результаты этих расчетов очень близки между собой и это является некоторым критерием точности МКС и ММКС в этой области. Для этого иона нам не известны экспериментальные данные по СФ и результаты расчетов по МХФ. Из общих соображений ясно, что МКС и ММКС должны давать близкие между собой и к истине результаты с увеличением заряда иона для одинаковой

конфигурации начального состояния. Напомним, что основные конфигурации OI , NI и NIH есть $2p^n$. Для атомов, как уже отмечалось выше, МКС, ММКС дают хорошие результаты, для фотоионизации $2p$ -состояний ионов результаты должны быть еще более надежными.

На рис. 7 приведены данные наших расчетов по МКС и ММКС, а также по МКД и данные хартри-фоковского расчета Ивановой [28] для иона N^{+4} , основное состояние которого есть $2s$. Хороший результат, полученный в этом случае, неудивителен, так как для высокократных ионов легких и средних элементов p -континуум не должен сильно отличаться от водородоподобного.

Предложенные методы расчета СФ легких и средних атомов имеют перед МКД то преимущество, что при одинаковой степени сложности ММКС дает в припороговой области не худшие, чем МКД, результаты, а при больших энергиях МКС и ММКС значительно более точны, чем МКД. Основным преимуществом МКС и ММКС по сравнению с МХФ является значительная простота при одинаковой надежности при всех энергиях, а в припороговой области ММКС, по-видимому, даже более надежен, чем МХФ.

Благодарим Е. Э. Нормана за полезные обсуждения и В. И. Краснова за помощь в работе.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Вычислим функцию $\theta_{\beta l, l'}(k, \xi_i)$ в припороговой области. Воспользуемся разложением ВФ $R_2(r)$ в ряд по параметру $\varepsilon = k^2/z^2$ [5].

$$R_{2kl}(r) = \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{zr}} \sum_{q=0}^{\infty} \left(-\frac{k^2}{z^2} \right)^q \sum_{2=2q}^{3q} a_{qp} (2zr)^{\frac{p+1}{2}} Y_{2l+1+p}(\sqrt{8zr}), \quad (\text{П. 1})$$

где Y_i — функция Бесселя 2-го рода.

Подставляя (П. 1) в (13) и ограничиваясь первыми двумя членами разложения по ε , имеем

$$\theta_{\beta l, l'}(\varepsilon, \xi_i) W_{1i}(\varepsilon) = z^{-\beta l - 3} \left[a_{\beta l, l'}(\alpha_i) + \frac{\varepsilon}{2} b_{\beta l, l'}(\alpha_i) \right], \quad (\text{П. 2})$$

где $\alpha_i = \xi_i/2z$, функции $a_{\beta l, l'}$ и $b_{\beta l, l'}$ определяются выражениями

$$a_{\beta l}(x) = \frac{2^{-\beta-2}}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} e^{-ax^2} x^{2\beta+5.5} Y_{2l+1}(2x) M_l(x) dx, \quad (\text{П. 3})$$

$$b_{\beta l} = \frac{1}{12} l(l+1)(l+2) a_{\beta l}(x) - \frac{2^{-\beta-4}}{\sqrt{\pi}} (l+1) \int_0^{\infty} e^{-ax^2} x^{2\beta+7.5} Y_{2l+3}(2x) M_l(x) dx + \\ + \frac{2^{-\beta-4}}{3\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} e^{-ax^2} x^{2\beta+8.5} Y_{2l+4}(2x) M_l(x) dx, \quad (\text{П. 4})$$

где $M_l(x) = (1 - e^{-\tau l x^2})^{2l+1}$, $\tau \simeq \frac{5}{l(l+1)}$ для $l > 0$, для $l = 0, M_l = 1$.

Необходимый для расчетов набор коэффициентов $a_{\beta l}$ и $b_{\beta l}$ определяется видом хартри-фоковских аналитических волновых функций. Например, для расчета фотоионизации из $2p$ -состояний требуется знание коэффициентов a_{10} , b_{10} , a_{12} и b_{12} ; для переходов из $2s$ -состояний нужны a_{01} , b_{01} , a_{21} и b_{21} , параметры α_i меняются при этом от 0.1 до 3.

В таблице приводятся значения этих коэффициентов.

Коэффициенты $a_{\beta_i l'}$

α	a_{10}	a_{12}	a_{01}	a_{21}
0.5				
0.6	-2.411 ⁻¹	-4.865 ⁻¹	-2.760 ⁻¹	8.309
0.7	3.998 ⁻¹	+2.256 ⁻¹	-3.276 ⁻¹	2.436
0.8	4.445 ⁻¹	3.198 ⁻¹	-2.801 ⁻¹	2.471 ⁻¹
0.9	3.559 ⁻¹	2.657 ⁻¹	-2.181 ⁻¹	-2.409 ⁻¹
1.0	2.599 ⁻¹	1.942 ⁻¹	-1.649 ⁻¹	-3.076 ⁻¹
1.1	1.841 ⁻¹	1.358 ⁻¹	-1.2353 ⁻¹	-2.634 ⁻¹
1.2	1.239 ⁻¹	9.366 ⁻²	-9.256 ⁻²	-2.021 ⁻¹
1.3	9.082 ⁻²	6.448 ⁻²	-6.975 ⁻²	-1.4746 ⁻¹
1.4	6.439 ⁻¹	-4.459 ⁻²	-5.288 ⁻²	-1.272 ⁻¹
1.5	4.591 ⁻²	3.105 ⁻²	-4.044 ⁻²	-9.231 ⁻²
1.6	3.330 ⁻²	2.180 ⁻²	-3.115 ⁻²	-6.706 ⁻²
1.7	2.291 ⁻²	1.545 ⁻²		
1.8	1.745 ⁻²	1.104 ⁻²		
1.9	1.291 ⁻²	7.962 ⁻³		
2.0	9.459 ⁻³	5.789 ⁻³		
2.1	1.701 ⁻³	4.243 ⁻³		
2.2	5.216 ⁻³	3.133 ⁻³		
2.3	3.885 ⁻³	2.329 ⁻³		
2.4	2.893 ⁻³	1.743 ⁻³		
2.5	2.150 ⁻³	1.313 ⁻³		
2.6	1.559 ⁻³	1.945 ⁻⁴		
2.7	1.168 ⁻³	7.574 ⁻⁴		
2.8	8.476 ⁻⁴	5.797 ⁻⁴		
2.9	6.039 ⁻⁴	4.458 ⁻⁴		
3.0	4.184 ⁻⁴	3.456 ⁻⁴		
		2.682 ⁻⁴		

Литература

- [1] И. В. Авилова, Л. М. Биберман, В. С. Воробьев, В. М. Замалин, Г. А. Кобзев, А. Н. Лагарьков, А. Х. Мнацаканян, Г. Э. Норман. Оптические свойства горячего воздуха. Изд. «Наука», М., 1970; Теплофиз. выс. температур, 8, 1, 1970.
- [2] Л. М. Биберман, Г. Э. Норман. Усп. физ. наук 91, 193, 1970.
- [3] U. Fano, J. W. Cooper. Rev. Mod. Phys., 40, 441, 1968.
- [4] R. J. W. Henry. J. Chem. Phys., 48, 3635, 1968.
- [5] E. J. McGuire. Phys. Rev., 175, 21, 1969.
- [6] G. M. Thomas, T. M. Helliwell. J. Quant. Spectr. Rad. Trans., 10, 423, 1970.
- [7] М. Я. Амусья, Н. А. Черепков, Л. В. Чернышева. ЖЭТФ, 60, 160, 1971.
- [8] C. C. S. Roothaan, P. S. Kelly. Phys. Rev., 131, 1177, 1963.
- [9] P. S. Kelly. Astrophys. J., 140, 1247, 1964.
- [10] U. Pfennig, R. Steele, E. Treffitz. J. Quant. Spectr. Rad. Trans., 5, 335, 1965.
- [11] E. Clementi. Tables of Atomic Functions, Suppl. to IBMJ Res. and Dev. № 1, 1965.
- [12] C. C. S. Roothaan et al. Rev. Modern Phys., 32, 186, 1960.
- [13] E. Clementi, C. C. S. Roothaan. Phys. Rev., 127, 1618, 1962.
- [14] Ch. Moore. Atom. En. Lev., NBS, Washington, 1949, 1961.
- [15] M. J. Seaton. Month. Not. Roy. Astr. Soc., 118, 504, 1958.
- [16] Г. А. Кобзев, В. М. Сергеев. Теплофиз. выс. температур, 7, 566, 1969.
- [17] A. W. Ehler, G. L. Weissler, J. Opt. Soc. Am., 45, 1035, 1955.
- [18] J. A. R. Samson, R. B. Cairns. J. Opt. Soc. Am., 55, 1035, 1965.
- [19] E. J. Connes, A. E. Elzer. Z. Naturf., 23A 133, 1968.
- [20] R. B. Cairns. S. A. R. Samson. Phys. Rev., 139A, 403, 1965.
- [21] R. E. Huffman, S. C. Larabee, Y. Tanaka. J. Chem. Phys., 46, 2213, 1967.
- [22] J. A. R. Samson. Adv. Atomic Mol. Phys., 2 178, 1966.
- [23] R. J. W. Henry. J. Chem. Phys., 44, 4357, 1966.
- [24] М. Г. Козлов, Г. П. Старцев. Опт. и спектр., 27, 704, 1969.
- [25] Л. Д. Горшкова, В. А. Горшков, И. В. Подмошенский. Ж. прикл. спектр., 14, 605, 1971.
- [26] Г. А. Кобзев, Г. Э. Норман, К. Н. Серяков. Теплофиз. выс. температур, 4, 1966.
- [27] E. McGuire. Phys. Rev., 161, 51, 1967.
- [28] А. В. Иванова. Опт. и спектр., 16, 925, 1964.
- [29] R. R. Johnston. Phys. Rev., 136, A958, 1964.

Поступило в Редакцию 12 января 1971 г.