

РЕЗОНАНСНАЯ ФОТОИОНИЗАЦИЯ
МНОГОЗАРЯДНЫХ ГЕЛИЕПОДОБНЫХ ИОНОВ

У. И. Сафронова и В. С. Сенашенко

На примере автоионизационных состояний гелиеподобных ионов, сходящихся к ионизационному порогу $n=2$, проведено сравнение энергий возбуждения, собственных ширин и профильных индексов, вычисленных в нерелятивистском приближении диагонализационным методом и по теории возмущений. Для ионов с различными значениями Z обсуждаются условия сближения основных характеристик автоионизационных уровней, полученных этими методами. Показано, что наличие больших радиационных ширин Γ_r автоионизационных уровней многозарядных ионов приводит к качественному изменению поведения сечений фотоионизации в зависимости от энергии в окрестности резонансов.

Введение

В последние годы проведено детальное экспериментальное и теоретическое исследование резонансной фотоионизации атомов гелия. Основные теоретические результаты были получены методом сильной связи каналов [1], методом Фано [2] и в диагонализационном приближении [3].

Изучение резонансной фотоионизации гелиеподобных ионов практически только начинается [3, 4]. Для каждого иона решение задачи фотоионизации одним из указанных выше теоретических методов [1-3] связано с проведением большого объема численных расчетов. В то же время применение теории возмущений по $1/Z$ (Z — заряд ядра) может дать простые изоэлектронные зависимости, позволяющие на основе расчетов только для одного иона получить характеристики резонансной фотоионизации всего изоэлектронного ряда. Однако область применимости теории возмущений по $1/Z$ в задаче фотоионизации остается до настоящего времени практически невыясненной.

Теория возмущений используется для расчета энергий возбуждения и собственных ширин автоионизационных уровней уже давно [5, 6]. Первый же расчет по теории возмущений параметров Фано, характеризующих форму резонансов в сечениях фотоионизации ионов, появился лишь в самое последнее время [7]. Результаты этой работы относятся фактически к гелиеподобным ионам с асимптотически большими Z . Сравнение их с расчетами резонансной фотоионизации атомов гелия другими методами и имеющимися экспериментальными данными показывает, что возможные поправки порядка $1/Z$ и выше для атомных систем с малыми Z могут оказаться весьма большими.

В настоящей работе в нерелятивистском приближении проводится всестороннее сравнение диагонализационного метода и теории возмущений на примере резонансной фотоионизации гелиеподобных ионов в основном состоянии ($Z \leq 6$) с целью выявления условий сближения в зависимости от Z вычисленных этими методами энергий возбуждения, собственных ширин и профильных индексов различных автоионизационных уровней. В обоих случаях в качестве базисных функций берутся кулоновские одноэлектронные волновые функции в поле заряда Z . При этом в диагонализационном приближении на ограниченном базисе точно учи-

тываются эффекты наложения конфигураций, тогда как расчеты по теории возмущений последовательно включают вклад от высоковозбужденных уровней и состояний непрерывного спектра. Поэтому вопрос о количественном соотношении результатов, полученных этими методами, сводится к рассмотрению роли указанных эффектов для ионов с различными значениями Z .

Основные формулы

Рассмотрим процесс резонансной фотоионизации двухэлектронных систем при энергии фотонов, близкой к энергии возбуждения $1P^{(-)}$ автоионизационных уровней, сходящихся к ионизационному порогу $n=2$. Полная амплитуда фотопоглощения, согласно [8], имеет вид

$$T(E) = \langle \Psi_E(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) | H_\gamma | \Psi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \rangle. \quad (1)$$

Здесь $\Psi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ и $\Psi_E(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ — волновые функции основного и возбужденного с энергией E состояний двухэлектронной системы. В диагонализационном приближении, которое возникает как упрощение более фундаментальных методов решения задачи на связь закрытых и открытых каналов [8, 9], когда пренебрегают связью автоионизационных уровней через непрерывный спектр, волновая функция $\Psi_E(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ принимает вид [3]

$$\Psi_E(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \Phi_E(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) + \sum_{\mu} \frac{\langle \Phi_E(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) | \frac{1}{r_{12}} | \Phi_{\mu}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \rangle}{E - E_{\mu} + \frac{i}{2} \Gamma_{\mu}^a} \Phi_{\mu}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2), \quad (2)$$

где E_{μ} и Γ_{μ}^a — энергия возбуждения и автоионизационная ширина μ -го уровня, $\Phi_E(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ и $\Phi_{\mu}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ — волновые функции открытого и закрытого каналов, а

$$\bar{\Phi}_{\mu}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \Phi_{\mu}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) + i\pi \langle \Phi_E(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) | \frac{1}{r_{12}} | \Phi_{\mu}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \rangle \Phi_E(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) + \Delta\Phi_{\mu}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \quad (3)$$

волновая функция автоионизационного уровня, модифицированная его взаимодействием с открытым каналом.

$$\begin{aligned} \Delta\Phi_{\mu}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = & \sum_n \frac{\langle \Phi_{\mu}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) | \frac{1}{r_{12}} | \Phi_n(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \rangle}{E - E_n} \Phi_n(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) + \\ & + P \int dE' \frac{\langle \Phi_{E'}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) | \frac{1}{r_{12}} | \Phi_{\mu}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \rangle}{E - E'} \Phi_{E'}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \end{aligned} \quad (3a)$$

вещественная добавка к волновой функции (3), возникающая за счет дискретных уровней одноэлектронного возбуждения и состояний непрерывного спектра. После подстановки (2) и (3) в (1) амплитуда фотопоглощения преобразуется к виду

$$\begin{aligned} T(E) = & \langle \Phi_E(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) | H_\gamma | \Psi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \rangle + \sum_{\mu} \frac{\langle \Phi_E(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) | \frac{1}{r_{12}} | \Phi_{\mu}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \rangle}{E - E_{\mu} + \frac{i}{2} \Gamma_{\mu}} \times \\ & \times \left\{ \langle \Phi_{\mu}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) | H_\gamma | \Psi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \rangle + \Delta T_{\mu} + i\pi \langle \Phi_E(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) | \frac{1}{r_{12}} | \Phi_{\mu}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \rangle \times \right. \\ & \left. \times \langle \Phi_E(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) | H_\gamma | \Psi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \rangle \right\}. \end{aligned} \quad (4)$$

Первое слагаемое в (4) соответствует прямой фотоионизации, а второе включает возбуждение и последующий распад автоионизационных $1P^{(-)}$ -состояний. Выражение в фигурных скобках определяет амплитуду радиа-

ционного возбуждения автоионизационного уровня. Отношение ее действительной части к мнимой дает профильный индекс резонанса

$$q = \frac{\langle \Phi_{\mu}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) | H_{\gamma} | \Psi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \rangle + \Delta T_{\mu}}{\pi \left\langle \Phi_{\mu}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \left| \frac{1}{r_{12}} \right| \Phi_E(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \right\rangle \langle \Phi_E(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) | H_{\gamma} | \Psi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \rangle}. \quad (5)$$

Здесь ΔT_{μ} — вещественная добавка к амплитуде возбуждения автоионизационного уровня, возникающая в результате учета переходов в автоионизационное состояние через непрерывный спектр и уровни одноэлектронного возбуждения. Если волновую функцию основного состояния представить в первом порядке теории возмущений по межэлектронному взаимодействию, а волновые функции $\Phi_E(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ и $\Phi_{\mu}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ построить в виде антисимметризованных произведений кулоновских одноэлектронных волновых функций с зарядом Z , то в соответствии с работой [7] профильный индекс резонанса (5) не зависит от заряда ядра иона, оставаясь постоянным для всей изоэлектронной последовательности. Использование в расчетах профильных индексов резонансов гелиеподобных ионов вариационных волновых функций основного состояния и многокомпонентных волновых функций автоионизационных уровней, полученных диагонализационным методом, позволяет качественно оценить величину поправок к профильному индексу порядка $1/Z$ и исследовать влияние межэлектронных корреляций на форму резонансов в сечениях фотоионизации.

Если ввести относительное отклонение от резонанса $\varepsilon = \frac{E - E_{\mu}}{\Gamma_{\mu}/2}$, сечение фотопоглощения в отсутствие резонанса $\sigma_a = |\langle \Phi_E(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) | H_{\gamma} | \Psi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \rangle|^2$ и воспользоваться формулами (4), (5), то полное сечение фотопоглощения в окрестности изолированного автоионизационного уровня определяется хорошо известной формулой Фано [8]

$$\sigma(E) = |T(E)|^2 = \sigma_a \frac{(q + \varepsilon)^2}{\varepsilon^2 + 1}. \quad (6)$$

Следует, однако, иметь в виду, что в случае многозарядных ионов радиационная ширина автоионизационного уровня может оказаться сравнимой с автоионизационной шириной. Тогда с учетом радиационного уширения резонанса сечение фотопоглощения будет определяться выражением вида

$$\sigma(E) = \int g(E - E') \sigma(E') dE', \quad (7)$$

где

$$g(E - E') = \frac{1}{2\pi} \frac{\Gamma_{\mu}^r}{(E - E')^2 + \frac{1}{4}(\Gamma_{\mu}^r)^2} \quad (8)$$

распределение интенсивности излучения иона, находящегося в автоионизационном состоянии, Γ_{μ}^r — радиационная ширина уровня. Интегрирование выражения (7) с учетом (8) дает отличное от определяемого формулой (6) сечение фотопоглощения

$$\sigma(E) = \frac{\Gamma_{\mu}^r}{\Gamma_{\mu}} \sigma_a + \frac{\Gamma_{\mu}^a}{\Gamma_{\mu}} \sigma_a \frac{(q + \varepsilon)^2}{\varepsilon^2 + 1}, \quad (9)$$

где $\varepsilon = \frac{E - E_{\mu}}{\Gamma_{\mu}/2}$, а $\Gamma_{\mu} = \Gamma_{\mu}^a + \Gamma_{\mu}^r$ — полная ширина автоионизационного уровня. Легко видеть, что в пределе $\Gamma_{\mu}^r \rightarrow 0$ формула (9) снова переходит в обычную формулу Фано.

Сравнение сечений фотопоглощения (6) и (9) показывает, что учет радиационной ширины приводит к качественно отличному поведению

сечения фотопоглощения в окрестности резонанса в зависимости от энергии фотонов. Из формулы (9) видно, что при $\Gamma_p^r = 0$ сечение фотопоглощения в точке $\varepsilon = -|q|$ равно нулю [8], тогда как при $\Gamma_p^r \neq 0$ сечение не обращается в нуль, а проходит через минимум, положение которого определяется равенством $\tilde{\varepsilon} = -|q|$.

С увеличением атомного номера иона растет влияние релятивистских эффектов на структуру спектра автоионизационных состояний, что также приводит к изменениям в сечениях фотопоглощения ионов. В частности, форма сечения фотопоглощения в окрестности резонансов может оказаться чувствительной к типу связи моментов, свойственному той или иной атомной системе. Однако детальное рассмотрение этих вопросов выходит за пределы настоящей работы.

В заключение этого раздела кратко напомним основные формулы, которые используются для расчета энергий возбуждения и ширины автоионизационных состояний в диагонализационном приближении и по теории возмущений. В первом случае задача сводится к решению системы однородных алгебраических уравнений

$$\sum_{n=1}^N \{ (E_n^0 + V_{mn}) \delta_{mn} - E \} a_n = 0. \quad (10)$$

Условие разрешимости этой системы приводит к уравнению

$$\| (E_n^0 + V_{mn}) \delta_{mn} - E \| = 0, \quad (11)$$

корни которого определяют энергии автоионизационных уровней, а набор коэффициентов a_n , соответствующих каждому значению энергии E_p , волновую функцию атома или иона

$$\Phi_p(r_1, r_2) = \sum_{n=1}^N a_n^p \varphi_n(r_1, r_2), \quad (12)$$

где $\varphi_n(r_1, r_2)$ — антисимметризованные произведения кулоновских функций.

При этом автоионизационные уровни рассматриваются как стационарные, а их ширина определяется выражением

$$\Gamma_p^2 = 2\pi \left| \sum_{n=1}^N a_n^p \left\langle \varphi_n(r_1, r_2) \left| \frac{1}{\Gamma_{12}} \right| \Phi_E(r_1, r_2) \right\rangle \right|^2. \quad (13)$$

Во втором случае энергия автоионизационных уровней разлагается в ряд по $1/Z$

$$E_p = E_p^0 Z^2 + E_p^1 Z + E_p^2 + E_p^3 \frac{1}{Z}, \quad (14)$$

где E_p^0 , E_p^1 , E_p^2 и E_p^3 вычисляются с водородными функциями в заряде $Z=1$, а их ширина вычисляется по формуле (13), полагая $a_n^p = \delta_{np}$,

$$\Gamma_p^2 = 2\pi \left| \left\langle \varphi_p(r_1, r_2) \left| \frac{1}{\Gamma_{12}} \right| \Phi_E(r_1, r_2) \right\rangle \right|^2. \quad (15)$$

В обоих случаях волновая функция свободного электрона определяется в поле заряда $Z=1$. В пределе больших Z величина Γ_p^2 , вычисляемая по формуле (15), приближается к асимптотическому значению, которое получается из расчета с кулоновскими волновыми функциями начального и конечного состояний, взятыми в поле одинакового заряда Z .

Для анализа результатов расчетов по формулам (11) и (14), (13) и (15) решение уравнения (11) и ширину (13) удобно представить в виде разложения по $1/Z$

$$E_p = E_p^0 Z^2 + E_p^1 Z + A + B \frac{1}{Z} \quad (16)$$

$$\Gamma_{\mu}^a = \Gamma_{\mu}^0 + \Gamma_{\mu}^1 \frac{1}{Z}, \quad (17)$$

где A , B и Γ_{μ}^1 могут быть получены из рассмотрения выполненных в диагонализационном приближении расчетов энергий возбуждения и ширины автоионизационных уровней ионов с асимптотически большими Z .

Результаты расчетов и их обсуждение

1. Энергия возбуждения. Энергии возбуждения $2s2p\ ^1P$, $2p^2\ ^1S$, 1D и $2s^2\ ^1S$ автоионизационных уровней гелиеподобных ионов в диагонализационном приближении [3, 10] и во втором порядке теории возмущений [5] показаны в табл. 1. В табл. 2 для примера приведены коэффициенты разложения в ряд по $1/Z$ энергии связи $2s2p\ ^1P$ -уровня, полученной в результате диагонализации матрицы десятого порядка [3] и вычисленной в третьем порядке теории возмущений. Последний столбец табл. 2 содержит поправку к энергии $2s2p\ ^1P$ -уровня порядка $1/Z$ и выше. Из табл. 2 видно, что с увеличением заряда ядра иона Z часть поправки, зависящая от Z сильнее чем $1/Z$, быстро убывает (аномально большое значение имеется для Li), а разность между энергией связи, полученной в диагонализационном подходе и вычисленной во втором порядке теории возмущений, стремится к постоянной величине, равной части поправки второго порядка, включающей суммирование по связанным состояниям и интегрирование по непрерывному спектру, которые не были учтены в диагонализационном расчете. Такое поведение коэффициентов разложения диагонализационной энергии связи $2s2p\ ^1P$ -уровня в ряд по $1/Z$ указывает на то, что поправки, возникающие от наложения конфигураций, весьма быстро убывают с увеличением Z . Несколько иначе обстоит дело с энергией связи вырожденных в нулевом приближении автоионизационных уровней (см., например, $2s^2\ ^1S$ и $2p^2\ ^1S$). В этом случае, как показывает аналогичное рассмотрение, даже при больших Z сохраняются поправки к энергии связи, возникающие от наложения конфигураций.

Таблица 1

Энергии возбуждения низших автоионизационных состояний гелиеподобных ионов

Автоионизационные состояния	Ионы					
	He		Li ⁺		C ⁴⁺	
	диагонализационный расчет [3, 10]	теория возмущений [5]	диагонализационный расчет [3, 10]	теория возмущений [5]	диагонализационный расчет [3]	теория возмущений [5]
$2s2p\ ^1P$	60.35	59.58	150.59	149.93	666.43	665.53
$2s2p\ ^3P$	58.41	58.39	147.08	147.03	658.05	657.85
$2p^2\ ^1D$	60.11	59.69	150.20	149.76	665.56	664.86
$2p^2\ ^1S$	62.81	61.95	154.20	153.63	674.62	673.55
$2s^2\ ^1S$	57.93	57.83	146.32	146.20	656.47	656.22

2. Ширина автоионизационных уровней. Поправки первого порядка к собственным ширинам низших автоионизационных уровней гелиеподобных ионов, полученные путем сравнения собственных ширин, вычисленных по формуле (15) и в диагонализационном приближении [3, 10], с их асимптотическими значениями ($Z \rightarrow \infty$), показаны в табл. 3. Можно видеть, что учет наложения конфигураций (замена однокомпонентной функции на функцию (12) и эффектов экранировки в волновой функции свободного электрона (замена Z на $Z-1$) существенно влияют на ширину автоионизационных уровней. Из формулы (17) и результатов расчетов (табл. 3) можно видеть, что поправка первого порядка $(1/Z) \Gamma_{\mu}^{(1)}$ медленно убывает с увеличением Z , а ширины

Таблица 2

Численные значения коэффициентов разложения энергии $2s2p\ ^1P$ -уровня при степенях $Z(E = E^{(0)}Z^2 + E^{(1)}Z + E^{(2)} + E^{(3)}\frac{1}{Z})$

Коэффициенты разложения	Диагонализационный расчет				Теория возмущений
	He	Li ⁺	Be ²⁺	C ⁴⁺	Z произвольное
$E^{(0)}$	-0.25	-0.25	-0.25	-0.25	-0.25
$E^{(1)}$	0.1915	0.1915	0.1915	0.1915	0.1915
$E^{(2)} \left\{ \begin{array}{l} \sum E^{(2)} \\ \sum \int E^{(2)} \\ \iint E^{(2)} \end{array} \right.$	-0.0639	-0.0639	-0.0639	-0.0639	-0.0657
	0	0	0	0	-0.0235
	0	0	0	0	-0.0077
$\frac{1}{Z}E^{(3)}$	-0.0046	-0.0189	-0.0023	-0.0001	-0.0030

автоионизационных уровней, вычисленные по формулам (43) и (45), приближаются к значениям, которые получаются в пределе асимптотически больших Z . Особенно медленно происходит убывание поправки к ширинам, возникающей от замены Z на $Z-1$ в волновой функции непрерывного спектра. Из сравнения расчетов [3, 5] с экспериментальными данными для атомов гелия и ионов лития следует, что автоионизационные ширины, вычисленные в диагонализационном приближении, оказываются более близкими к эксперименту.

Таблица 3

Собственные ширины низших автоионизационных состояний гелиеподобных систем

$$(\Gamma_p = \Gamma_p^{(0)} + \frac{1}{Z} \Gamma_p^{(1)})$$

Автоионизационные состояния	He		Li ⁺		C ⁴⁺		
	диагонализационный расчет	$Z-1$	диагонализационный расчет	$Z-1$	диагонализационный расчет	$Z-1$	$Z \rightarrow \infty$
$2s2p\ ^1P \left\{ \begin{array}{l} \Gamma^{(0)} \\ \Gamma^{(1)} \end{array} \right.$	0.133 -0.194	0.133 -0.210	0.133 -0.219	0.133 -0.249	0.133 -0.204	0.133 -0.140	0.133 0
$2s2p\ ^3P \left\{ \begin{array}{l} \Gamma^{(0)} \\ \Gamma^{(1)} \end{array} \right.$	0.0089 0.0262	0.0089 0.0570	0.0089 0.0318	0.0089 0.0609	0.0089 0.0342	0.0089 0.0552	0.0089 0
$2p^2\ ^1D \left\{ \begin{array}{l} \Gamma^{(0)} \\ \Gamma^{(1)} \end{array} \right.$	0.249 -0.326	0.249 -0.656	0.249 -0.333	0.249 -0.141	0.249 -0.294	0.249 -0.084	0.249 0
$2p^2\ ^1S \left\{ \begin{array}{l} \Gamma^{(0)} \\ \Gamma^{(1)} \end{array} \right.$	0.0115 -0.0208	0.0115 -0.0224	0.0115 -0.0306	0.0115 -0.0327	0.0115 -0.0312	0.0115 -0.0168	0.0115 0
$2s^2\ ^1S \left\{ \begin{array}{l} \Gamma^{(0)} \\ \Gamma^{(1)} \end{array} \right.$	0.226 -0.172	0.226 -0.204	0.226 -0.093	0.226 -0.168	0.226 0.012	0.226 0.012	0.226 0

Следует отметить, что собственные ширины автоионизационных уровней, вырожденных в нулевом приближении, особенно чувствительны к эффектам наложения конфигураций. Поэтому последовательное описание таких состояний на основе теории возмущений с самого начала должно включать наложение конфигураций [11] и в качестве функций нулевого приближения использовать диагонализационные волновые функции.

3. Параметры формы $^1P^{(-)}$ -резонансов. Численные расчеты параметров формы $^1P^{(-)}$ автоионизационных состояний гелиеподобных ионов представлены в табл. 4. Расчеты в диагонализационном

приближении проведены в тех же предположениях, что и в работе [3]. Наряду с шестипараметрической функцией основного состояния использовалась волновая функция с тремя параметрами [12]. Волновая функция автоионизационного уровня также бралась в двух вариантах: десятикомпонентная с учетом наложения конфигураций [3] и однокомпонентная, определяемая в поле заряда Z . В табл. 4 приведены также асимптотические значения q ($Z \rightarrow \infty$), вычисленные по формуле (5) и совпадающие с полученными в работе [7].

Таблица 4

Параметры формы 1P -автоионизационных состояний гелиеподобных ионов (основное состояние — три параметра)

Ионы	Автоионизационный уровень — одна компонента	Автоионизационный уровень — десять компонент			
	$2s2p\ ^1P$	$2s2p\ ^1P$	$23 - ^1P$	$23 + ^1P$	$24 + ^1P$
Li^+	-3.32	-2.06	-2.67	-1.81	-2.30
Be^{+2}	-1.92	-2.19	-0.29	-2.15	-1.53
B^{+3}	-3.08	-1.70	-1.41	-1.55	-0.78
C^{+4}	-1.83	-1.61	-2.86	-1.43	-1.36
$Z \rightarrow \infty$	-1.46	-1.46	-1.73	-1.47	-1.48

Выше отмечалось, что профильный индекс резонансов, вычисленный в первом исчезающем порядке по $1/Z$ теории возмущений, не зависит от заряда ядра. Расчеты в диагонализационном приближении, выполненные в настоящей работе для гелиеподобных ионов с $Z \leq 6$, обнаруживают значительные отклонения от одночастичных расчетов и приводят в ряде случаев к немонотонному изменению q -индексов в зависимости от Z . Как показывают полученные результаты, это связано прежде всего с сильным влиянием межэлектронных корреляций в основном (расчет с 6 и 3 параметрами в волновой функции основного состояния) и автоионизационном (расчет с десяти- и однокомпонентной функциями автоионизационного уровня) состояниях на форму линии фотопоглощения. Дополнительные различия между диагонализационным расчетом параметров формы $^1P^{(-)}$ -резонансов и расчетами по теории возмущений вызваны тем, что в последнем случае наряду с прямым возбуждением автоионизационных состояний учитываются также переходы через непрерывный спектр и уровни одноэлектронного возбуждения. Так, например, для ионов с асимптотически большими Z учет вещественной добавки к амплитуде возбуждения $2s2p\ ^1P$ -резонанса приводит к увеличению q -индекса на 20%. На основе сравнения диагонализационных расчетов и асимптотических значений q -индекса легко оценить поправку порядка $1/Z$ к профильному индексу $^1P^{(-)}$ -уровней различных гелиеподобных ионов (табл. 4). Расчеты, выполненные в настоящей работе, показывают, что по мере увеличения заряда ядра иона резонансы становятся более асимметричными, что соответствует усилению интерференции амплитуд прямых и резонансных переходов. Начиная с $Z \geq 5$, форма $^1P^{(-)}$ -резонансов весьма медленно изменяется с увеличением Z , приближаясь к асимптотическому пределу.

В заключение отметим, что более последовательное количественное рассмотрение соотношения между диагонализационным подходом и теорией возмущений можно провести в том случае, если при построении ряда теории возмущений в качестве базисных использовать диагонализационные волновые функции.

Литература

- [1] P. G. Burke, D. McVicar. Proc. Phys. Soc., 86, 989, 1965.
- [2] P. L. Altick, E. N. Moore. Phys. Rev., 147, 59, 1966.
- [3] В. В. Балашов, С. И. Гришанова, И. М. Круглова, В. С. Сенашенко. Опт. и спектр., 28, 859, 1970.

- [4] U. I. Safronova, V. S. Senashenko. IX ICPEAC Abstract of papers, 1127. Seattle, USA, 1975.
- [5] А. Ю. Матулис, У. И. Сафронова. Опт. и спектр., 28, 1076, 1970.
- [6] У. И. Сафронова, В. Н. Харитонова. Опт. и спектр., 27, 550, 1969.
- [7] С. В. Христенко. Опт. и спектр., 39, 443, 1975.
- [8] M. Fano. Phys. Rev., 124, 1866, 1961.
- [9] G. Feschbach. Ann. of Phys., 5, 357, 1958; 19, 287, 1962.
- [10] В. В. Балашов, С. С. Липовецкий, А. В. Павличенков, А. Н. Полюдов, В. С. Сенашенко. Вестн. МГУ, физ. и астр., 1, 65, 1971.
- [11] А. С. Давыдов. Квантовая механика, 198. М., 1963.
- [12] П. У. Арифов, В. М. Мальян, А. Пайзиев, Р. М. Гатаулин. Матер. всесоюз. сем. по теории атомов и атомных спектров, 1, 40. Рига, 1974.

Поступило в Редакцию 14 февраля 1977 г.