

ВАРИАЦИОННЫЙ МЕТОД ДЛЯ РАСЧЕТА ДВУКРАТНОЙ ФОТОИОНИЗАЦИИ АТОМА ГЕЛИЯ

С. М. Варнавский и Л. Н. Лабзовский

Предложен вариационный принцип для расчета двукратной фотоионизации атома гелия. Этот принцип применен для расчета двукратной фотоионизации из основного состояния в припороговой области энергий налетающего фотона от 80 до 105 эВ. Результаты работы хорошо согласуются с расчетами, полученными ранее с помощью метода кулоновской функции Грина.

Введение

За последние годы появилось много работ как теоретических, так и экспериментальных, посвященных двукратной фотоионизации (ДФИ) атома гелия. Процесс ДФИ представляет существенный интерес с принципиальной точки зрения, поскольку является одним из немногих процессов, которые идут только за счет электронной корреляции, т. е. запрещены в одноэлектронном приближении.

Данные эксперимента по измерению сечения ДФИ атома гелия содержатся в работах [1, 2]. Теоретически сечение ДФИ рассчитывалось различными методами и для разных интервалов энергий налетающего фотона. В работах [3-5] при вычислении сечения электронная корреляция учитывалась только в волновой функции начального состояния, в конечном же состоянии взаимодействие между электронами не учитывалось. В работах [6, 7] расчет сечения ДФИ атома гелия проводился по теории возмущений с учетом корреляции электронов как в начальном, так и в конечном состоянии. Этот расчет проводился в пороговой области процесса ДФИ. В работе [8] аналогичные расчеты были проделаны для более высоких энергий.

В настоящей работе используется еще один метод расчета сечения ДФИ атома гелия — вариационный метод. Преимущество этого метода заключается в том, что он без существенных усложнений может быть распространен на многоэлектронные атомы. Этот метод позволяет также учитывать влияние электронной корреляции как в начальном, так и в конечном состояниях и, что особенно важно, позволяет получать результаты в пороговой области, наиболее трудной для расчетов. Расчет сечения ДФИ атома гелия является одновременно проверкой применимости вариационного метода.

Постановка задачи

В атомных единицах выражение для сечения имеет следующий вид:

$$\sigma^{++}(\omega) = 4\pi^2 d\omega \sum_{i_1 i_2} \int d\varepsilon_1 d\varepsilon_2 |S_{if}|^2 \delta(\varepsilon_1 + \varepsilon_2 - \omega + J). \quad (1)$$

Здесь S_{ij} — матричный элемент S -матрицы, описывающий взаимодействие атома с налетающим фотоном; $\varepsilon_1, \varepsilon_2$ — энергии фотоэлектронов;

Посвящается 80-летию С. Э. Фриша

J — потенциал двукратной ионизации (≈ 2.9 а. е.); α — постоянная тонкой структуры; ω — энергия налетающего фотона. Суммирование по моментам фотоэлектронов l_1, l_2 в (1) проводится с учетом закона сохранения момента: при фотоионизации из основного состояния $l_1 + l_2 = 1$.

Следуя работе [9], мы используем для вычисления матричных элементов S_{ij} двойную теорию возмущений: по межэлектронному взаимодействию и по взаимодействию атома со светом. Тогда процессу ДФИ гелиоподобного атома соответствуют две фейнмановские диаграммы 1 и 2, изображенные на рис. 1, где штриховой линией обозначено кулоновское взаимодействие, волнистой линией со стрелкой, указывающей на поглощение, — поперечные фотоны. Значки n_i и ν_i , поставленные у концов электронных линий, соответствуют начальным и конечным состояниям электронов.

Выражение для матричного элемента S -матрицы имеет вид [9]

$$S_{ij} = -2\pi\alpha^2 V \sqrt{\frac{\omega}{2}} \sum_n \left\{ \frac{\langle \nu_1 \nu_2 | \frac{1}{r_{12}} | n_1 n_2 \rangle \langle n | (\mathbf{er}) | n_2 \rangle}{E_n - E_{n_2} - \omega} + \frac{\langle \nu_1 n | \frac{1}{r_{12}} | n_1 n_2 \rangle \langle \nu_2 | (\mathbf{er}) | n \rangle}{E_n - E_{\nu_2} + \omega} \right\} \delta(E_{\nu_1} + E_{\nu_2} - E_{n_1} - E_{n_2} - \omega). \quad (2)$$

Первый член в (2) (ему соответствует диаграмма 1) описывает корреляцию электронов в конечном состоянии, второй — (диаграмма 2) корреляцию в начальном состоянии. Матричные элементы в (2) вычисляются на кулоновских одноэлектронных функциях; E_n, E_{ν_i} — кулоновские одноэлектронные энергии.

В а р и а ц и о н н ы й п р и н ц и п

Для расчета матричных элементов S -матрицы в различных порядках теории возмущений в [10] был сформулирован вариационный принцип. Разновидность этого вариационного принципа мы применим здесь для расчета матричного элемента S_{ij} .

Рассмотрим вначале первый член выражения (2). Перепишем его в виде

$$\sum_n \frac{\langle \nu_2 | F_{\nu_1 n_1}(\mathbf{r}_2) | n \rangle \langle n | \mathbf{er}_2 | n_2 \rangle}{E_n - E_{n_2} - \omega} = \sum_n \langle \nu_2 | F_{\nu_1 n_1}(\mathbf{r}_2) | n \rangle \times \left\langle n \left| \frac{1}{H_2 - E_{n_2} - \omega} (\mathbf{er}_2) \right| n_2 \right\rangle = \left\langle \nu_2 | F_{\nu_1 n_1}(\mathbf{r}_2) \frac{1}{H_2 - E_{n_2} - \omega} (\mathbf{er}_2) \right| n_2 \rangle, \quad (3)$$

где $F_{\nu_1 n_1}(\mathbf{r}_2) \equiv \int \psi_{\nu_1}(\mathbf{r}_1) \frac{1}{r_{12}} \psi_{n_1}(\mathbf{r}_1) d\mathbf{r}_1$, $H_2 \equiv H(\mathbf{r}_2)$ — одноэлектронный гамильтониан. Построим функционал

$$I[u_1, u_2] = \langle \nu_2 | F_{\nu_1 n_1}(\mathbf{r}_2) | u_2 \rangle + \langle u_1 | (\mathbf{er}_2) | n_2 \rangle - \langle u_1 | (H_2 - E_{n_2} - \omega) | u_2 \rangle = \text{extr}, \quad (4)$$

где u_1, u_2 — варьируемые функции. Уравнения для экстремалей имеют вид

$$\left. \begin{aligned} F_{\nu_1 n_1}(\mathbf{r}_2) \psi_{\nu_2} - (H_2 - E_{n_2} - \omega) u_1 &= 0, \\ (\mathbf{er}_2) \psi_{n_2} - (H_2 - E_{n_2} - \omega) u_2 &= 0 \end{aligned} \right\} \quad (5)$$

Отсюда

$$\left. \begin{aligned} u_1 &= \frac{1}{H_2 - E_{n_2} - \omega} F_{\nu_1 n_1}(\mathbf{r}_2) \psi_{\nu_2}, \\ u_2 &= \frac{1}{H_2 - E_{n_2} - \omega} (\mathbf{er}_2) \psi_{n_2}. \end{aligned} \right\} \quad (6)$$

Экстремальное значение функционала равно

$$I [u_1^{\text{extr}}, u_2^{\text{extr}}] = \left\langle \nu_2 \left| F_{\nu_1 n_1}(\mathbf{r}_2) \frac{1}{H_2 - E_{n_2} - \omega} (\mathbf{e}_{\mathbf{r}_2}) \right| n_2 \right\rangle, \quad (7)$$

что и означает существование вариационного принципа.

При использовании вариационного метода важно удачно выбрать пробные функции. Наиболее простой и естественный выбор в данном случае таков

$$\begin{aligned} u_1 &= c_1 F_{\nu_1 n_1}(\mathbf{r}_2) \psi_{\nu_2}(\mathbf{r}_2), \\ u_2 &= c_2 (\mathbf{e}_{\mathbf{r}_2}) \psi_{n_2}(\mathbf{r}_2). \end{aligned} \quad (8)$$

При этом действие оператора резольвенты заменяется умножением на число и это число является вариационным параметром. Подстановка функций (8) в вариационное начало (4) дает

$$\begin{aligned} I(c_1, c_2) &= (c_2 + c_1) \left\langle \nu_2 \left| F_{\nu_1 n_1}(\mathbf{r}_2) (\mathbf{e}_{\mathbf{r}_2}) \right| n_2 \right\rangle - \\ &- c_1 c_2 \left\langle \nu_2 \left| F_{\nu_1 n_1} \frac{(\mathbf{e}_{\mathbf{r}_2})}{(H_2 - E_{n_2} - \omega)} \right| n_2 \right\rangle. \end{aligned} \quad (9)$$

Параметры c_1 и c_2 определяются теперь из условия экстремума функционала I . Экстремальное значение на функциях (8) имеет вид

$$I = \frac{|\langle \nu_2 | F_{\nu_1 n_1}(\mathbf{r}_2) (\mathbf{e}_{\mathbf{r}_2}) | n_2 \rangle|^2}{\langle \nu_2 | F_{\nu_1 n_1}(\mathbf{r}_2) (H_2 - E_{n_2} - \omega) (\mathbf{e}_{\mathbf{r}_2}) | n_2 \rangle} \quad (10)$$

Аналогичный вариационный принцип можно применить и для второго члена (2). Используя явное выражение для функций $F_{\nu n}$, мы приходим к следующему окончательному выражению для матричного элемента S_{if} :

$$\begin{aligned} S_{if_{1,2}} &= -2\pi\alpha^{3/2} \sqrt{\frac{\omega}{2}} \left\{ \frac{|\langle \nu_1 \nu_2 | \frac{1}{r_{12}} (\mathbf{e}_{\mathbf{r}_2}) | n_1 n_2 \rangle|^2}{\langle \nu_1 \nu_2 | \frac{1}{r_{12}} (H_2 - E_{n_2} - \omega) (\mathbf{e}_{\mathbf{r}_2}) | n_1 n_2 \rangle} + \right. \\ &+ \left. \frac{|\langle \nu_1 \nu_2 | \frac{1}{r_{12}} (\mathbf{e}_{\mathbf{r}_2}) | n_1 n_2 \rangle|^2}{\langle \nu_1 \nu_2 | \frac{1}{r_{12}} (H_2 - E_{n_2} + \omega) (\mathbf{e}_{\mathbf{r}_2}) | n_1 n_2 \rangle} \right\} \delta(E_{\nu_1} + E_{\nu_2} - E_{n_1} - E_{n_2} - \omega). \end{aligned} \quad (11)$$

Проведем в (11) суммирование по спиновым и интегрирование по угловым переменным. Для этого представим волновую функцию $\psi_n(r)$ в виде

$$\psi_n(r) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\Omega) \eta_{ms}(\sigma) \quad (12)$$

и введем обозначения $\nu_1 \equiv n_3$, $\nu_2 \equiv n_4$. Разложим $1/r_{12}$ по сферическим функциям

$$\frac{1}{r_{12}} = \sum_{\lambda\mu} \frac{4\pi}{2\lambda+1} u_\lambda(r_1, r_2) Y_{\lambda\mu}^*(\Omega_1) Y_{\lambda\mu}(\Omega_2), \quad (13)$$

где $u_\lambda(r_1, r_2) = r_{<}^\lambda / r_{>}^{\lambda+1}$. Проводя интегрирование по угловым переменным, применим соотношение для сферических функций

$$\begin{aligned} \int Y_{l_1 m_1}(\Omega) Y_{l_2 m_2}(\Omega) Y_{l_3 m_3}(\Omega) d\Omega &= \sqrt{\frac{(2l_1+1)(2l_2+1)(2l_3+1)}{4\pi}} \times \\ &\times \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (14)$$

После этого выражение (11) принимает вид

$$S_{if} = -2\pi\alpha^{3/2} \sqrt{\frac{\omega}{2}} \sum_{\substack{\lambda\mu \\ \lambda_1\mu_1}} (2\lambda_1 + 1) \sqrt{(2l_1 + 1)(2l_2 + 1)(2l_3 + 1)(2l_4 + 1)} \begin{pmatrix} 1 & l_2 & \lambda_1 \\ 0 & m_2 & \mu_1 \end{pmatrix} \times \\ \times \begin{pmatrix} l_3 & \lambda & l_1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_3 & \lambda & l_1 \\ m_3 & \mu & m_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & l_2 & \lambda_1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_4 & \lambda & \lambda_1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_4 & \lambda & \lambda_1 \\ m_4 & \mu & \mu_1 \end{pmatrix} (R_{\lambda}^{n_3 l_3; n_4 l_4})^2 \times \\ \times \left\{ \frac{1}{T_{\omega}^{n_3 l_3; n_4 l_4}} + \frac{1}{T_{(E_{n_2} - E_{n_4} + \omega)}^{n_3 l_3; n_4 l_4}} \right\} \delta(E_{n_3} + E_{n_4} - E_{n_1} - E_{n_2} - \omega), \quad (15)$$

где введены обозначения

$$\left. \begin{aligned} R_{\lambda}^{n_3 l_3; n_4 l_4} &\equiv \langle R_{n_3 l_3}(r_1) R_{n_4 l_4}(r_2) u_{\lambda}(r_1, r_2) R_{10}(r_1) R_{n_2 l_2}(r_2) \rangle, \\ T_{\omega}^{n_3 l_3; n_4 l_4} &\equiv \left\langle R_{n_3 l_3}(r_1) R_{n_4 l_4}(r_2) u_{\lambda}(r_1, r_2) R_{n_1 l_1}(r_1) \times \right. \\ &\times \left. \left[-\frac{d}{dr_2} - \frac{1}{r_2} + (E_{n_2} - E_{n_4} + \omega) \right] R_{n_2 l_2}(r_2) \right\rangle. \end{aligned} \right\} \quad (16)$$

Перейдем теперь непосредственно к процессу ДФИ атома гелия. В этом случае $n_1 = n_2 = 1$, $l_1 = m_1 = l_2 = m_2 = 0$, а функции $R_{n_3 l_3}(r_1)$, $R_{n_4 l_4}(r_2)$ принадлежат непрерывному спектру. Подставляя выражение (15) в (1) и производя суммирование по проекциям моментов, для сечения двукратной ионизации получаем следующую окончательную формулу:

$$\sigma^{++}(\omega) = 4\pi^2\alpha\omega \sum_{l_3 l_4} \frac{(2l_4 + 1)}{3(l_3 + 1)} \begin{pmatrix} l_4 & l_3 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 \iint dE_{n_3} dE_{n_4} \times \\ \times \left\{ (R_{\lambda}^{n_3 l_3; n_4 l_4})^2 \left[\frac{1}{T_{\omega}^{n_3 l_3; n_4 l_4}} + \frac{1}{T_{(E_{n_2} - E_{n_4} + \omega)}^{n_3 l_3; n_4 l_4}} \right]^2 \delta(E_{n_3} + E_{n_4} - E_{n_1} - E_{n_2} - \omega) \right\}. \quad (17)$$

Результаты и их обсуждение

По формуле (17) нами было рассчитано полное сечение ДФИ атома гелия как функции энергии налетающего фотона $\varepsilon = \omega - J$ в припороговой

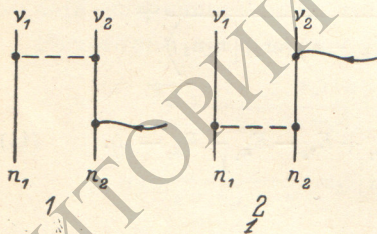


Рис. 1.

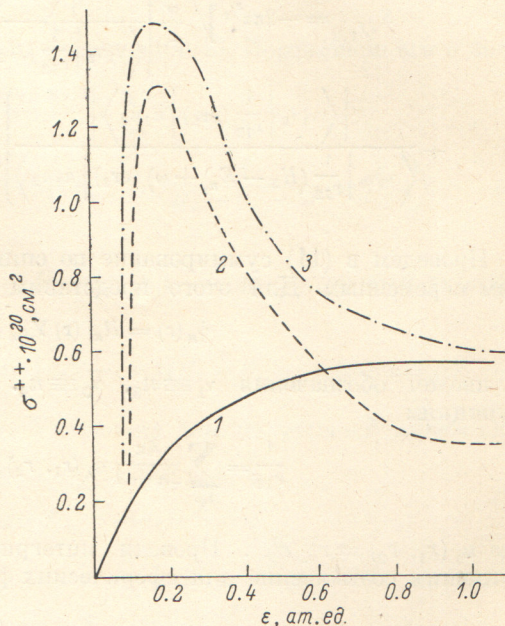


Рис. 2. Зависимость полного сечения двукратной фотоионизации атома гелия σ^{++} от энергии $\varepsilon = \omega - J$.

1 — результат расчетов Байрона и Иохайна [4, 5], 2 — результат расчета Юрьева [6], 3 — настоящий расчет.

области. Расчет матричных элементов в (17) и последующее интегрирование по E_{n_3} , E_{n_4} фактически приводит к появлению тройных интегралов. Интегрирование проводилось численно на ЭВМ. При суммировании по l

мы ограничились, как и в [6], учетом двух членов, т. е. рассматривались фотоэлектроны с моментами $l_1=0, l_2=1$ и $l_1=1, l_2=0,2$. Результаты приведены на рис. 2. На этом же рисунке для сравнения приводятся результаты, полученные Юрьевым [6] с помощью кулоновской функции Грина, и результаты Байрона и Йохайна [4, 5].

Как видно из рис. 2, наши расчеты хорошо согласуются с расчетами Юрьева, что указывает на применимость вариационного метода и говорит о том, что выбор пробных функций в виде (8) является удачным. Вместе с тем наблюдается расхождение как наших результатов, так и результатов Юрьева с расчетами Байрона и Йохайна. С одной стороны, в [4, 5] не учитывается корреляция электронов в конечном состоянии, что особенно важно для припороговой области, когда скорости вылетающих электронов малы. С другой стороны, такое расхождение может быть следствием недостаточности теории возмущений в низшем порядке. Отметим, однако, что учет следующих порядков можно провести без существенных усложнений также в рамках вариационного метода [10].

Литература

- [1] T. A. Carlson. Phys. Rev., 156, 142, 1967.
- [2] M. J. van der Wiel, G. Wiebes. Physica, 77, 411, 1974.
- [3] R. L. Brown. Phys. Rev., A1, 586, 1970.
- [4] F. W. Byron, C. J. Jochnain. Phys. Rev., 164, 1, 1967.
- [5] F. W. Byron, C. J. Jochnain. Phys. Rev., A24, 11, 1967.
- [6] М. С. Юрьев. Опт. и спектр., 38, 9, 1975.
- [7] М. С. Юрьев. Тез. докл. Всесоюз. конференции «Современная теория атомов и атомных спектров». 45. Л., 1977.
- [8] M. Ya. Amusia et al. J. Phys. B, 8, 1248, 1975.
- [9] Ю. Ю. Дмитриев, Л. Н. Лабзовский. Вестн. ЛГУ, № 22, 5, 1974.
- [10] Л. Н. Лабзовский. ТМФ, 16, 2, 1973.

Поступило в Редакцию 13 декабря 1978 г.