

ДИНАМИЧЕСКАЯ ПОЛЯРИЗУЕМОСТЬ ОТРИЦАТЕЛЬНОГО ИОНА ВОДОРОДА

П. А. Головинский и Б. А. Зон

Рассчитана динамическая поляризуемость иона H^- , включая область частот, превышающих частоту фотоотрыва. Проанализирована зависимость результата от вида потенциала взаимодействия электрона с атомом.

Динамическая поляризуемость отрицательных ионов является важной характеристикой, определяющей сечение рассеяния ионами фотонов [1], резонансное рассеяние электронов на нейтральных атомах в поле лазерного излучения [2, 3], тормозное излучение и поглощение при столкновении электронов с ионами [4]. Теоретические расчеты динамической поляризуемости отрицательных ионов, в частности, иона H^- , проводились многими авторами [5, 6], где имеются дальнейшие ссылки. Однако все эти вычисления ограничивались частотами внешнего поля ω , меньшими потенциала фотоотрыва (~ 0.75 эВ). В данной работе расчеты проведены для любых частот. Особое внимание уделено анализу зависимости результатов от выбора потенциала взаимодействия электрона с нейтральным атомом.

Динамическая поляризуемость иона определяется выражением

$$\alpha(\omega) = \sum |\langle 0 | z | \nu \rangle|^2 \left(\frac{1}{\omega_{\nu 0} + \omega - i\lambda} + \frac{1}{\omega_{\nu 0} - \omega - i\lambda} \right), \quad \lambda \rightarrow +0. \quad (1)$$

где $|0\rangle$ — основное состояние иона, $|\nu\rangle$ — возбужденное состояние, принадлежащее непрерывному спектру, $\omega_{\nu 0} = E_{\nu} - E_0$, $\hbar = m = e = 1$.

Используя полноту функций $|\nu\rangle$, запишем $\alpha(\omega)$ в следующем виде [7]:

$$\left. \begin{aligned} \alpha(\omega) &= \alpha(E_0 + \omega) + \alpha(E_0 - \omega), \\ \alpha(E) &= \langle 0 | z | f_E \rangle, \\ (T + V(r) - E) | f_E \rangle &= z | 0 \rangle \end{aligned} \right\} \quad (2)$$

Здесь T и V — операторы кинетической и потенциальной энергии электрона в поле атома H . При этом пренебрегается вкладом в поляризуемость сильно связанного электрона, что допустимо вдали от характеристических частот нейтрального атома водорода [8].

Таким образом, для нахождения $\alpha(\omega)$ требуется знание волновой функции основного состояния и потенциала взаимодействия $V(r)$. Нами в качестве функции $|0\rangle$ была взята функция

$$|0\rangle = \frac{B}{r} \sqrt{\frac{\gamma}{2\pi}} (e^{-\gamma r} - e^{-\beta r}), \quad B = \frac{\sqrt{\beta(\beta + \gamma)}}{\beta - \gamma}, \quad \beta = 0.742 \text{ а. е.}, \quad \gamma = 0.234 \text{ а. е.},$$

являющаяся аналитической аппроксимацией результата численного решения уравнения Хартри—Фока для иона H^- [9].

Для $V(r)$ использовались следующие значения:

$$\begin{aligned} V_1(r) &= 0, \\ V_2(r) &= -\frac{\beta}{2(r + r_p)^4}, \end{aligned}$$

$$V_3(r) = -\left(1 + \frac{1}{r}\right)e^{2r} - \frac{\beta}{2r^4} \left\{ 1 - \left[1 + 2r + \frac{(2r)^2}{2} + \frac{(2r)^3}{6} + \frac{(2r)^4}{33} \right] e^{-2r} \right\}. \quad (3)$$

Потенциал V_1 соответствует полному пренебрежению взаимодействием электрона с атомом в состояниях непрерывного спектра иона H^- . Потенциал V_2 соответствует феноменологическому учету дальнедействующего поляризационного взаимодействия электрона с атомом $\beta=9/2$ а. е. — статическая поляризуемость атома H , $r_p=0.74$ а. е. — радиус обрезания, численное значение которого найдено из согласования фазы рассеяния электрона на потенциале V_2 с фазой синглетного рассеяния электрона на атоме H , полученной более строгими методами [9]. Потенциал V_3 получен аналитической аппроксимацией (с точностью $\sim 10\%$) потенциала взаимодействия электрона с атомом водорода, найденным во втором порядке теории возмущений способом, описанным в работе [10]. Второе слагаемое V_3 соот-

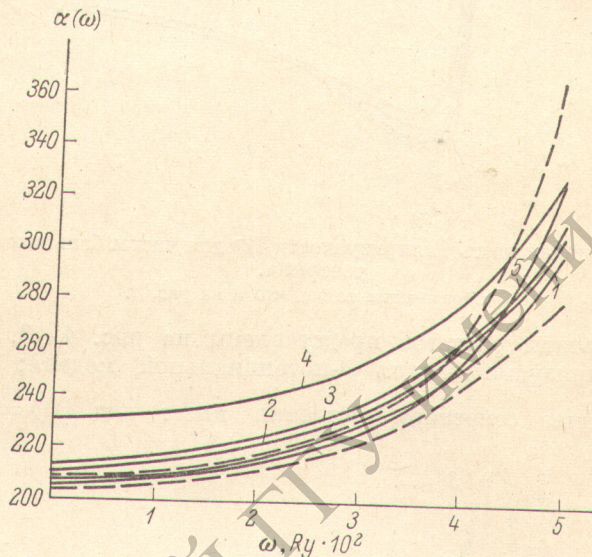


Рис. 1. Поляризуемость H^- для частот меньших потенциалов фотоотрыва. 1, 2, 3 — соответствуют потенциалам V_1, V_2, V_3 (3), 4 — модель δ -потенциала, 5 — результаты работы [6] с коридором ошибок (штриховые линии) [6].

ветствует поляризационному взаимодействию; аппроксимирующая функция такого типа использовалась в работе [11], отличие в последнем коэффициенте ($1/36$ вместо $1/24$) связано с учетом правильного поведения эффективного потенциала при $r=0$ [12].

Отделяя угловые части, запишем решение уравнения (2) в виде

$$\alpha(E) = \frac{2}{3k} \int_0^\infty \int_0^\infty \chi_0(r) r \chi_{k1}^{(+)}(r_>) \chi_{k1}(r_<) r' \chi_0(r') dr dr', \quad (4)$$

где $k = \sqrt{2|E|}$, $\chi_0(r) = r \sqrt{4\pi} |0\rangle$, $r_> (<)$ — большая (меньшая) из величин r, r' , $\chi_{k1}^{(+)}$ и χ_{k1} — соответственно нерегулярное и регулярное решения уравнения

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + 2E - 2V(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] \chi(r) = 0 \quad (5)$$

для $l=1$. Уравнение (5) решалось численно методом Нумерова. Для нахождения регулярного решения использовалось поведение в нуле $\chi \sim r^{l+1}$, для нерегулярного — асимптотика при $r \rightarrow \infty$

$$\left. \begin{aligned} \operatorname{Re} \chi_{k1}^{(+)}(r) &\sim -[\cos \delta_l n_l(kr) + \sin \delta_l j_l^{(kr)}] \\ \operatorname{Im} \chi_{k1}^{(+)}(r) &\sim \cos \delta_l j_l(kr) - \sin \delta_l n_l^{(kr)} \end{aligned} \right\}, \quad E > 0, \\ \chi_{k1}^{(+)} &\sim e^{-kr}, \quad E < 0,$$

j_l, n_l — сферические функции Бесселя и Неймана.

Динамическая поляризуемость при частотах, больших потенциала фотоотрыва, является комплексной величиной, действительная часть которой определяет сдвиг, а мнимая часть — ширину квазистационарного

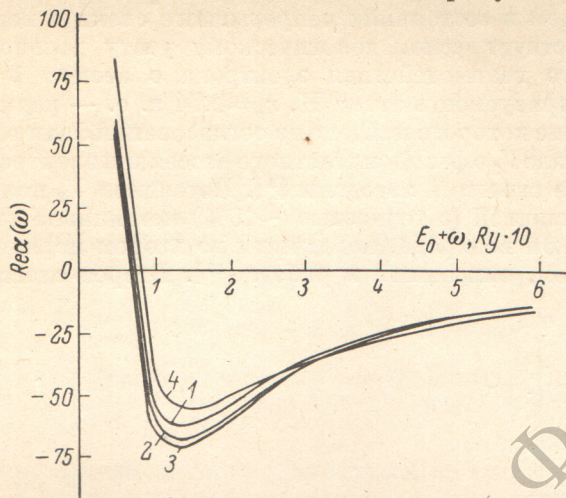


рис 2

Рис. 2. Действительная часть поляризуемости H^- для частот больших потенциала фотоотрыва.

Обозначения те же, что и на рис. 1.

уровня. Результаты расчетов представлены на рис. 1—3. Даны также значения поляризуемости для δ -потенциальной модели; когда $V=0$, волновая функция основного состояния имеет вид $|0\rangle = \frac{B}{r} \sqrt{\frac{\gamma}{2\pi}} e^{-\gamma r}$,

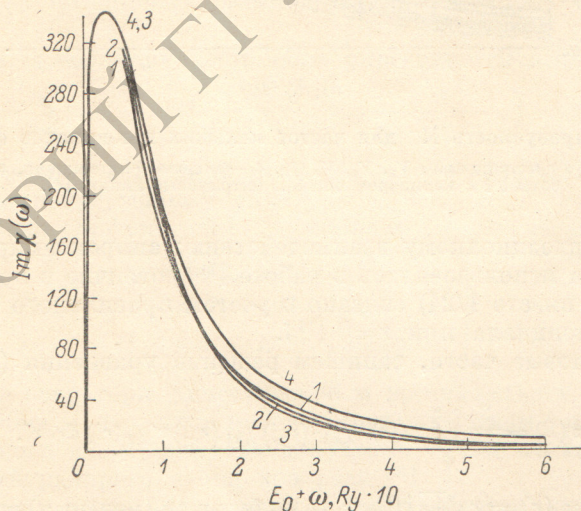


Рис. 3. Мнимая часть поляризуемости H^- для частот больших потенциала фотоотрыва.

Обозначения те же, что и на рис. 1.

а коэффициент B определяется сравнением с асимптотическим поведением точной функции $B^2=2.8$. При этом нетрудно получить аналитическое выражение для поляризуемости.

$$\alpha(\omega) = B^2 \left[-\frac{8\varepsilon^2}{3\omega^4} - \frac{1}{\omega^2} + \frac{4(\omega + \varepsilon)^{3/2} \sqrt{\varepsilon}}{3\omega^4} \right] + iB^2 \frac{4(\omega - \varepsilon)^{3/2} \sqrt{\varepsilon}}{3\omega^4} \quad \omega > \varepsilon,$$

$$\alpha(\omega) = \alpha^{(+)}(\omega) + \alpha^{(-)}(\omega),$$

$$\alpha^{(\pm)}(\omega) = \frac{B^2}{12\omega^4 \varepsilon} [16(\varepsilon \pm \omega)^{3/2} \varepsilon^{3/2} + 2\varepsilon^3 - 9\varepsilon^2(\varepsilon \pm \omega) - 9(\varepsilon \pm \omega)^2 \varepsilon + (\varepsilon \pm \omega)^3], \quad \omega < \varepsilon,$$

где ε — энергия связи отрицательного иона.

Динамическая поляризуемость является простейшим многофотонным параметром отрицательного иона. Полученные данные позволяют сделать вывод, что сечения многофотонных процессов на S -состояниях отрицательных ионов малочувствительны к конкретному выбору потенциала взаимодействия электрона с атомом, обладают удовлетворительной точностью при полном пренебрежении этим потенциалом, и определяются в основном волновой функцией отрицательного иона.

Литература

- [1] F. W. King. *Can. J. Phys.*, *53*, 2502, 1975.
- [2] I. J. Berson, *J. Phys. B*, *8*, 3078, 1975.
- [3] Б. А. Зон. *ЖТФ*, *46*, 875, 1976.
- [4] Б. А. Зон. *ЖЭТФ*, *73*, 128, 1977.
- [5] K. T. Chung. *Phys. Rev.*, *A4*, 7, 1971.
- [6] R. M. Glover, F. Weinhold. *J. Chem. Phys.*, *65*, 4913, 1976.
- [7] A. Dalgarno. in: *Perturbation Theory*, 145, N.-Y., 1966.
- [8] M. P. Ajmera, K. T. Chung. *Phys. Rev.*, *12A*, 475, 1975.
- [9] Б. М. Смирнов. *Атомные столкновения и элементарные процессы в плазме*. Атомиздат, М., 1968.
- [10] В. А. Зон. *J. Phys.*, *B7*, L483, 1974.
- [11] И. И. Гутман. *Опт. и спектр.*, *39*, 1001, 1975.
- [12] M. H. Mittleman, K. M. Watson. *Phys. Rev.*, *113*, 198, 1959.

Поступило в Редакцию 7 апреля 1978 г.

РЕПОЗИТОРИЙ ГГУ имени Ф.Скорины