

О МЕХАНИЗМЕ ОБРАЗОВАНИЯ РЕЗОНАНСОВ ФОРМЫ ПРИ ВОЗБУЖДЕНИИ 2^3S -СОСТОЯНИЯ АТОМА ГЕЛИЯ ЭЛЕКТРОНАМИ

И. И. Фабрикант

Рассмотрено влияние 2^3S-2^3P -связи на сечения возбуждения 2^3S -уровня атома He и сечения рассеяния на возбужденном состоянии. Показано, что дальнедействующее дипольное взаимодействие между 2^3S - и 2^3P -уровнями приводит к образованию резонанса формы в P -волне. Резонанс исследуется, применяя формализм, разработанный для описания аналогичного явления при возбуждении полярных молекул. Результаты сравниваются с данными расчетов методом сильной связи.

Многочисленные экспериментальные данные [1-4] и результаты теоретических расчетов [5-8] указывают на существование резонансов формы в сечении возбуждения 2^3S -уровня атома He медленными электронами. Барком и соавторами [5] были высказаны соображения, поясняющие появление этих резонансов 2^3S-2^3P -связью и расщеплением между уровнями 2^3S и 2^3P , которые приводят к появлению полюсов S -матрицы на нефизическом листе римановой поверхности энергии. Настоящая работа посвящена выяснению роли дальнедействующего дипольного взаимодействия при образовании этих резонансов.

С этой целью разделим область взаимодействия между электроном и атомом He на две, границей между которыми является радиус r_0 . В области $r > r_0$ пренебрежем всеми взаимодействиями, кроме дипольного. Уравнения, описывающие связь 2^3S-2^3P при рассеянии, имеют в этой области вид (в матричной форме)

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] \psi = \frac{\beta}{r^2} \psi, \quad (1)$$

где k, l — диагональные матрицы волновых чисел и угловых моментов каналов, β — недиагональная матрица дипольного взаимодействия в представлении полного момента. Связь между 2^3S - и 2^3P -уровнями является очень сильной ввиду большой поляризуемости (314 ат. ед.) 2^3S -состояния, причем почти весь вклад в нее вносит 2^3S-2^3P -связь.

При отсутствии расщепления между 2^3S - и 2^3P -уровнями матрица k^2 пропорциональна единичной и уравнение (1) можно диагонализировать и решить аналитически [9]. Диагонализованная система имеет вид

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + k^2 - \frac{\lambda(\lambda+1)}{r^2} \right] \varphi = 0, \quad \varphi = A\psi, \quad (2)$$

где $\Lambda_i = \lambda_i(\lambda_i+1)$, $i=0, 1, \dots$ — собственные значения матрицы $\beta+l(l+1)$, A — матрица соответствующего унитарного преобразования.

S -матрицу можно получить, спшивая решения уравнения (1) с волновыми функциями при $r < r_0$. Вблизи порога возбуждения можно пренебречь энергетической зависимостью всех величин, зависящих от короткодействия, и изучить поведение S -матрицы. Это исследование, как и в слу-

чае рассеяния на атоме водорода [9], приводит к заключению, что если среди λ_i имеется комплексное λ_0 , то полюса S расположены на верхней мнимой полуоси комплексной плоскости k и соответствуют связанным состояниям электрона в поле притягивающего потенциала $-\lambda_0(\lambda_0+1)/r^2$. При включении 1^1S-2^3S - и 1^1S-2^3P -связи эти полюса дают резонансы Фешбаха ниже порога возбуждения. При этом существенно, что связь 1^1S-2^3S и 1^1S-2^3P является слабой.

Рассмотрим теперь, что происходит при постепенном расщеплении уровней 2^3S и 2^3P . В области r , в которой $\Delta\varepsilon \ll \beta/r^2$, где $\Delta\varepsilon$ — величина расщепления, уравнение (2) приближенно выполняется, и каналы рассеяния в этой области можно классифицировать по собственным значениям Δ_i (назовем эти каналы внутренними). Во внешней области r , в которой $\beta/r^2 \ll k^2$, каналы можно классифицировать по угловому моменту электрона l_i (внешние каналы). В общем случае эти две области не пересекаются. Область, промежуточная между ними, находится на расстоянии порядка $r_c \sim (\Delta\varepsilon)^{-1/2}$ от ядра.

Таким образом, во внутренней области эффективно действует потенциал $-\lambda_0(\lambda_0+1)/r^2$, а во внешней — центробежный потенциал $l_i(l_i+1)/r^2$. Эти два обстоятельства приводят при $l_i \neq 0$ к образованию резонанса формы.

Движение полюсов S -матрицы при увеличении расщепления $\Delta\varepsilon$ можно количественно проследить, рассматривая модельную задачу рассеяния на потенциале, равном $-\lambda(\lambda+1)/r^2$ при $r < r_c$ и $l(l+1)/r^2$ при $r > r_c$, где $r_c \sim (\Delta\varepsilon)^{-1/2}$. Соответствующее исследование показывает, что при уменьшении r_c полюса переходят с верхней мнимой полуоси на нижнюю мнимую полуось k , если $l=0$, а при $l \neq 0$ — на III и IV квадранты комплексной k -плоскости.¹ Таким образом, при $l=0$ возможны резонансы Фешбаха ниже порога (если еще не все полюса успели перейти на нижнюю полуось), либо резонансное рассеяние на виртуальном уровне (также ниже порога). При $l \neq 0$ выше порога возможны резонансы формы.

Перейдем к применению сделанных выводов к проблеме возбуждения 2^3S -уровня. В общем случае система (1) содержит 3 уравнения, соответствующих каналам $(0, L)$, $(1, L-1)$, $(1, L+1)$. Здесь первое число в скобках является угловым моментом атома, а второе — угловым моментом рассеиваемого электрона, L — полный момент системы. При $L=0$ выпадает 2-й канал. Диагонализация матрицы $\beta+l(l+1)$ при $L=1$ приводит к $\lambda_0 = -0.5 + 1.645i$, т. е. при $\Delta\varepsilon = 0$ существуют связанные состояния, вызванные дальним действием. При $\Delta\varepsilon \neq 0$ движение полюсов должно приводить к резонансу формы. Существенно, что вклад в резонанс дает лишь тот полюс, для которого действительная часть энергии меньше порога возбуждения уровня 2^3P . В области выше этого порога открывается внешний канал с моментом $l=0$. Ввиду отсутствия центробежного барьера электрон с большой вероятностью будет переходить в этот канал и условие образования резонанса формы соблюдаться не будет. Поэтому резонанс наблюдается при энергии (отсчитываемой от порога 2^3S) порядка $\Delta\varepsilon = r_c^{-2}$. Согласно оценкам, следующим из анализа вышеупомянутой модели, ширина такого резонанса $\Gamma \sim r_c^{-2} \sim \Delta\varepsilon$, т. е. равна по порядку величины расщеплению между уровнями 2^3S и 2^3P , составляющему 1.1 эВ. Таким образом, резонанс является довольно узким для обычного резонанса формы, но все же его ширина гораздо больше ширины подпороговых резонансов Фешбаха (например, резонанса в S -волне).

При $L=2$ диагонализация матрицы $\beta+l(l+1)$ дает $\lambda_0 = -0.223$, т. е. связанные состояния, вызванные дальним действием, отсутствуют. Резонанс в D -волне, наблюдающийся вблизи порога возбуждения уровня 2^3P [7], вызван связью с уровнями 2^1S и 2^1P . Дипольная связь 2^1S-2^1P является более сильной, чем 2^3S-2^3P (поляризуемость 2^3S -состояния равна 802 ат. ед. при $\Delta\varepsilon = 0.60$ эВ). Эта связь приводит к образованию резонанса формы в канале рассеяния на 2^1S -состоянии. Связь 2^3S-2^1S и 2^3S-2^1P

¹ Или, что то же, на нефизический лист римановой поверхности энергии.

приводит к появлению резонанса также в канале рассеяния на 2^3S . Как мы видим, механизм образования этого резонанса является более сложным.

При $L=0$ в согласии с вышеприведенными рассуждениями ниже порога 2^3S наблюдается узкий ($\Gamma=0.015$ эВ) резонанс [7], обусловленный рассеянием либо на связанном, либо на виртуальном состоянии.

Уместно далее задаться вопросом, возможно ли, имея информацию лишь о дальнедействующей части дипольного взаимодействия (т. е. зная матрицу β), дать количественное описание рассмотренным резонансам. Метод, позволяющий реализовать такую возможность, описан в работе [10], где речь идет о возбуждении полярных молекул. В этом случае расщепление вызвано вращательной структурой молекулярных уровней, дипольная связь между которыми ведет к образованию резонансов. Ситуация здесь аналогична рассматриваемому нами случаю возбуждения He: имеется три уровня (0, 1, 2), два из которых (1 и 2) связаны сильной ди-

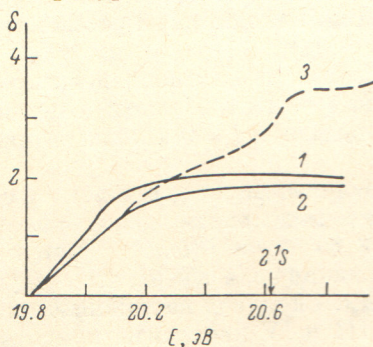


Рис. 1. Фаза упругого P -рассеяния на 2^3S -состоянии.

1, 2 — наш расчет с параметром $\eta=0.15$ (1) и $\eta=0.31$ (2); 3 — расчет в приближении сильной связи 1^1S -, 2^3S -, 2^1S -, 2^3P -, 2^1P -состояний [7]. Стрелкой указан порог возбуждения 2^1S -уровня.

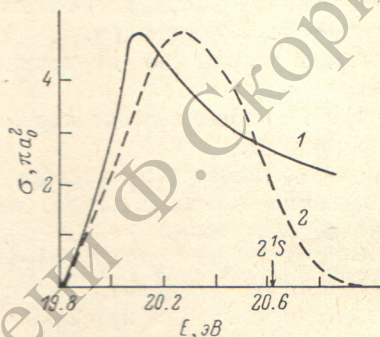


Рис. 2. Парциальное ($L=1$) сечение возбуждения 2^3S -уровня.

1 — наш расчет ($\eta=0.31$); 2 — расчет методом сильной связи [8]. Кривая 1 нормирована на 2 в максимуме. Ширина резонанса равна соответственно 0.75 и 0.55 эВ.

польной связью, а один из них (0), из которого происходит возбуждение, слабо связан с остальными. Формулы для матрицы реактанса K , полученные в [10], имеют в нашем случае вид

$$K_{0i} = \frac{\nu x_i}{\eta - y}, \quad K_{ij} = x_{ij} + \frac{x_i x_j}{\eta - y},$$

где 0 означает индекс канала рассеяния на 1^1S -состоянии, а i, j нумеруют каналы рассеяния на возбужденных состояниях. x_{ij}, x_i, y зависят только от дальнедействия (т. е. от β) и определены в [10]. x_i характеризует проникновение из нулевого внутреннего канала (с эффективным потенциалом $-\lambda_0(\lambda_0+1)/r^2$) в i -й внешний канал. Параметры ν и η зависят также от короткодействия, но в первом приближении не зависят от энергии. Смысл параметра ν заключается в том, что он описывает слабую короткодействующую связь между основным и возбужденными уровнями. Параметр η содержит информацию о короткодействии в возбужденных каналах. Вследствие этого параметры ν и η в нашей модели неизвестны и должны считаться подгоночными.

Резонансной ситуации соответствует равенство $\eta=y$. При рассмотрении дипольных резонансов следует зафиксировать η и исследовать зависимость параметров y, x_i от энергии. Резонанс получается достаточно узким при достаточно малом коэффициенте проникновения x_i , что и имеет место при наличии центробежного барьера.

В настоящей работе с помощью численного решения уравнения (1) исследовалась зависимость параметров x_i, y, x_{ij} от энергии для P -рассеяния на He с учетом двух возбужденных каналов: (0,1) и (1,0). Таким

образом, пренебрегается связь с каналом (1, 2), которая является несущественной ввиду малой вероятности проникновения в него.

Расчет K -матрицы и сечений по полученным параметрам показал, что резонанс в P -волне наблюдается между порогами 2^3S и 2^3P для широкой области значений η . На рис. 1—3 приведены фазы и сечения упругого рассеяния на 2^3S -состоянии и сечения возбуждения. Полного согласия с расчетами методом сильной связи варьированием параметра η добиться не удается. Это вызвано тем, что наш формализм не учитывает 2^3S-2^1S - и 2^3S-2^1P -связь. Учет ее должен, согласно принципу минимума [11], привести к росту фазы и улучшению согласия.

Количественное описание резонанса в D -волне требует знания гораздо большего числа короткодействующих параметров, так как, как было показано выше, механизм образования этого резонанса является более сложным и вызван связью пяти уровней: 1^1S , 2^3S , 2^1S , 2^3P , 2^1P .

Изложенный метод позволяет, имея информацию только о дальнедей-

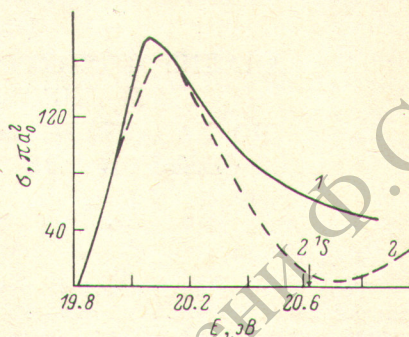


Рис. 3. Парциальное сечение упругого рассеяния на 2^3S -уровне.

1 — наш расчет ($\eta=0.31$); 2 — расчет методом сильной связи [7]. Ширина резонанса равна соответственно 0.47 и 0.40 эВ.

ствующей части взаимодействия, выделить и изучить качественно и количественно те резонансы, которые вызваны дальнедействующей дипольной связью между двумя уровнями. Преимущество нашего подхода состоит в том, что при расчетах методом сильной связи нет рецепта, который давал бы однозначную интерпретацию получившегося при вычислении резонанса. Кроме того, метод сильной связи требует гораздо более трудоемких расчетов, чем изложенная выше процедура.

Можно ожидать, что описанная ситуация является достаточно универсальной и резонансы формы должны наблюдаться при возбуждении любого атома, если соблюдаются следующие условия:

1) сильная дипольная связь между возбужденными уровнями (так что среди собственных значений λ_i есть хотя бы одно комплексное);

2) малая величина расщепления $\Delta\epsilon$, так что величина «переходного радиуса» $r_c \sim (\Delta\epsilon)^{-1/2}$ гораздо больше размеров атома;

3) слабая связь возбужденных уровней с остальными, в том числе с теми, из которых происходит возбуждение. Например, при возбуждении атома Cs уровни $6p$ и $5d$ удовлетворяют условиям 1) и 2), но из-за сильной связи $6s-6p$ резонансы в сечении возбуждения не возникают [12].

Литература

- [1] H. Ehrhardt, K. Willmann. Z. Phys., 203, 1, 1967.
- [2] A. G. Zajonc, G. Weinreich, J. C. Zorn. J. Phys., B, 10, L43, 1977.
- [3] J. N. H. Brunt, G. C. King, F. H. Read. J. Phys., B, 10, 433, 1977.
- [4] A. G. Zajonc, G. Weinreich, J. C. Pearl, J. C. Zorn. Phys. Rev. A, 18, 1408, 1978.
- [5] P. G. Burke, J. W. Cooper, S. Ormonde. Phys. Rev., 183, 245, 1969.
- [6] R. K. Nesbet. Phys. Rev., A12, 444, 1975.
- [7] K. A. Berrington, P. G. Burke, A. L. Sinfailam. J. Phys., B, 8, 1459, 1975.
- [8] W. C. Fon, K. A. Berrington, P. G. Burke, A. E. Kingston. J. Phys., B, 11, 325, 1978.
- [9] М. Гайлитис, Р. Дамбург. ЖЭТФ, 44, 1644, 1963.
- [10] I. I. Fabrikant. J. Phys., B, 11, 3621, 1978.
- [11] Y. Hahn, T. F. O'Malley, L. Spruch. Phys. Rev., 134, B911, 1964.
- [12] И. И. Фабрикант. Опт. и спектр., 41, 180, 1976.