

ВЛИЯНИЕ ПОЛЯРИЗАЦИИ АТОМОВ НА ФОТОРАЗРУШЕНИЕ ИХ ОТРИЦАТЕЛЬНЫХ ИОНОВ

П. А. Головинский и Б. А. Зон

Получена аналитическая формула для расчета вероятности фоторазрушения отрицательных ионов с учетом поляризации атомов. Показано, что для отрицательных ионов щелочных металлов возможно возникновение минимума в зависимости вероятности от частоты.

При рассмотрении фоторазрушения отрицательных ионов обычно считается, что связанный с атомом электрон, поглощая фотон, переходит в непрерывный спектр, а возможностью виртуального возбуждения атома пренебрегают [1]. Роль поляризации атомного остатка в оптических переходах нейтральных атомов впервые была рассмотрена в [2]. В [3, 4] показано, что ее влияние на силу осциллятора резонансного перехода незначительно, но существенно в случае более высоких переходов в дискретном спектре и очень велико для вероятности фотоионизации атомов щелочных элементов. В случае фотоионизации атомов в конечном состоя-

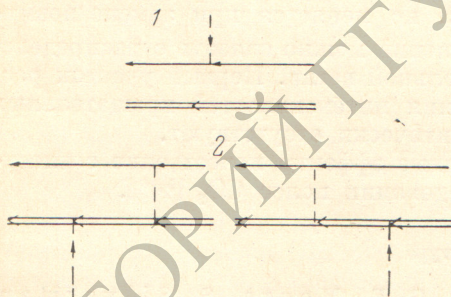


Рис. 1.

Диаграмма 1 соответствует прямому фотоотрыву электрона от отрицательного иона, 2 — диаграмма, соответствующая отрыву электрона, идущему через возбуждение атома, и «обменная» диаграмма.

нии непрерывного спектра необходимо учитывать кулоновское взаимодействие, поэтому расчеты в [3, 4] проводились численно.

В настоящей работе рассмотрен фотоотрыв s -электрона от отрицательного иона фотоном с энергией, меньше энергии возбуждения атома. При этом электрон в конечном состоянии можно описывать волновой функцией, соответствующей его свободному движению [1], и провести все вычисления аналитически.

Пусть $U(r)$ — центрально-симметричный потенциал оптического электрона в отрицательном ионе A^- . Тогда часть кулоновского взаимодействия, не сводящегося к $U(r)$, можно характеризовать оператором остаточного взаимодействия (используется атомная система единиц)

$$V = \sum_{j=1}^z \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_j|} - \frac{z}{r} - U(r),$$

где z — число электронов в атоме. Взаимодействие A^- с электромагнитным полем в дипольном приближении описывается оператором

$$V_{\gamma} = i \sum \sqrt{2\pi\omega} \operatorname{Re}_{\mathbf{k}\lambda} [a_{\mathbf{k}\lambda}^{\dagger} - a_{\mathbf{k}\lambda}], \quad \mathbf{R} = \mathbf{r} + \mathbf{d}, \quad \mathbf{d} = \sum_{j=1}^s r_j.$$

$a_{\mathbf{k}\lambda}^{\dagger}$, $a_{\mathbf{k}\lambda}$ — операторы рождения и уничтожения фотонов с импульсом \mathbf{k} , частотой ω и единичным вектором поляризации $\mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda}$. Для учета виртуального возбуждения атома-остова в первом порядке теории возмущений по каждому из операторов V , V_{γ} , кроме диаграммы 1, следует также учесть диаграмму 2 на рис. 1. Аналогично тому, как это сделано в [5], нетрудно получить вероятность фоторазрушения отрицательного иона. Если конечное состояние атома является основным, то

$$W = 4\pi^2 N_{\mathbf{k}\lambda\omega p} |\mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda} \mathbf{M}|^2 d\Omega_p, \quad (1)$$

$$\mathbf{M} = \langle \mathbf{p} | \mathbf{r} | 0 \rangle + \sum_m \left[\frac{\langle i \mathbf{p} | V | m 0 \rangle \langle m | \mathbf{d} | i \rangle}{E_i + \omega - E_m} - \frac{\langle i | \mathbf{d} | m \rangle \langle m \mathbf{p} | V | i 0 \rangle}{E_i - \omega - E_m} \right], \quad (2)$$

где m — энергия основного и возбужденного состояний атома, 0 обозначает связанное состояние электрона, \mathbf{p} — импульс электрона, вылетевшего в телесный угол $d\Omega_p$. Как отмечалось выше, конечное состояние электрона можно считать плосковолновым. Мы можем также пренебречь обменными эффектами, если характерные импульсы электрона в начальном состоянии и импульс вылетающего электрона малы по сравнению с характерными импульсами атомных электронов.

Переходя в волновой функции связанного электрона к импульсному представлению,

$$\varphi_0(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int b_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} d\mathbf{k},$$

из (2) нетрудно получить

$$\begin{aligned} \mathbf{M} = & \langle \mathbf{p} | \mathbf{r} | 0 \rangle + \\ & + \frac{1}{2\pi^2} \int \sum \left[\frac{F_{im}(\mathbf{q}) \langle m | \mathbf{d} | i \rangle}{E_i + \omega - E_m} + \right. \\ & \left. + \frac{\langle i | \mathbf{d} | m \rangle F_{mi}(\mathbf{q})}{E_i - \omega - E_m} \right] \frac{b_{\mathbf{k}}}{q^2} d\mathbf{k}, \end{aligned}$$

где $\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{p}$, $F_{im}(\mathbf{q}) = \langle i | \sum \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}_j) | m \rangle$ — атомный формфактор. В силу малости импульсов электрона в начальном и конечном состоянии мал и переданный импульс \mathbf{q} . Поэтому в выражении для формфактора можно ограничиться двумя первыми членами разложения в ряд экспоненты $e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} \approx 1 + i\mathbf{q}\mathbf{r}$ [5]. Следовательно,

$$\mathbf{M} = \langle \mathbf{p} | \mathbf{r} | 0 \rangle - \frac{i\alpha(\omega)}{2\pi^2} \int \frac{\mathbf{q} b_{\mathbf{k}}}{q^2} d\mathbf{k}, \quad (3)$$

где $\alpha(\omega)$ — динамическая поляризуемость атома.

Если в качестве волновой функции φ_0 взять функцию, соответствующую модели короткодействующего потенциала [6]

$$\varphi_0(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{\gamma}{2\pi}} \frac{e^{-\gamma r}}{r}, \quad (4)$$

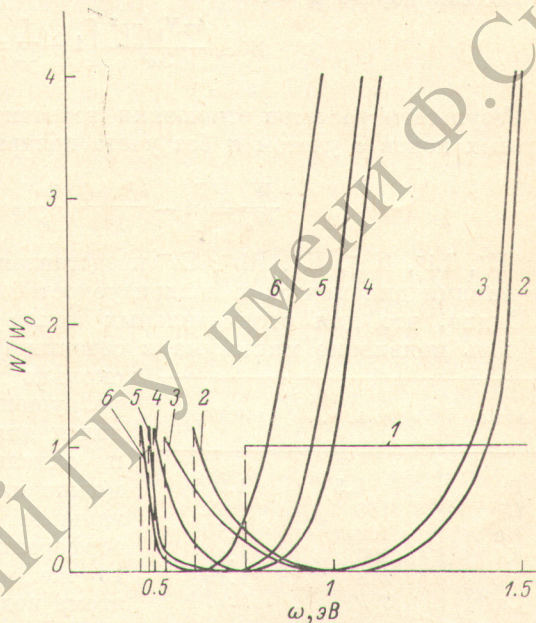


Рис. 2.

Отношение вероятностей фоторазрушения отрицательных ионов с учетом и без учета поляризации атомов.

Кривые 1-6 соответствуют ионам H^- , Li^- , Na^- , K^- , Rb^- , Cs^- .

то преобразование Фурье (4) дает

$$b_k = \frac{\sqrt{\gamma}}{\pi(\gamma^2 + k^2)}. \quad (5)$$

Используя (5), можно с помощью теоремы о вычетах вычислить интеграл в формуле (3)

$$M = -\frac{i2\sqrt{\gamma}p}{\pi} \left[\frac{1}{(\gamma^2 + p^2)^2} - \frac{\alpha(\omega)}{4p^2} \left(\frac{\gamma^2 + p^2}{p} \arctg \frac{p}{\gamma} - \gamma \right) \right]. \quad (6)$$

Подставляя (6) в (1) и интегрируя по углам вылета электрона, получим вероятность фоторазрушения отрицательного иона в единицу времени

$$W = \frac{4\pi}{3} N_{k\lambda} \omega \gamma p^3 \left[\frac{1}{\omega^2} - \frac{\alpha(\omega)}{p^2} \left(\frac{2\omega}{p} \arctg \frac{p}{\gamma} - \gamma \right) \right]^2, \quad (7)$$

$$\omega = \frac{\gamma^2 + p^2}{2}.$$

Вблизи порога $p \rightarrow 0$

$$W \simeq \frac{4\pi N_{k\lambda} \gamma p^3}{3\omega^3} \left[1 + \frac{1}{12} \alpha(\omega) \gamma^3 \right]^2. \quad (8)$$

Результаты расчетов отношения вероятностей фоторазрушения отрицательных ионов с учетом и без учета поляризации атомов

$$\frac{W}{W_0} = \left[1 - \frac{\omega^2 \alpha(\omega)}{p^2} \left(\frac{2\omega}{p} \arctg \frac{p}{\gamma} - \gamma \right) \right]^2 \quad (9)$$

для H^- , Li^- , Na^- , K^- , Rb^- , Cs^- представлены на рис. 2. Мы пользовались значениями динамических поляризуемостей из [7].

Видно, что для отрицательных ионов щелочных металлов следует ожидать появление минимума в сечении фотоотрыва при частотах, несколько превышающих порог фоторазрушения. Подобный эффект наблюдался для атомов щелочных металлов и описан теоретически в [4], где можно найти ссылки на экспериментальные работы. Он вызывается интерференцией членов в формуле (7). В то же время малая поляризуемость атома водорода слабо влияет на сечение фоторазрушения H^- . В таблице приведены пороговые значения W/W_0 . С ростом динамической поляризуемости атомов увеличивается и рассматриваемое нами отношение для ионов H^- — Cs^- .

Атом	$\alpha(0)$, а. е.	W/W_0
H	4.5	1.005
Li	166	1.17
Na	162	1.10
K	290	1.18
Rb	318	1.19
Cs	396	1.21

Литература

- [1] Б. М. Смирнов. Отрицательные ионы. Атомиздат, М., 1978.
- [2] И. Б. Берсукер. Опт. и спектр., 3, 97, 1957.
- [3] М. Г. Веселов, А. В. Штофф. Опт. и спектр., 26, 321, 1969.
- [4] И. Л. Бейгман, Л. А. Вайнштейн, В. П. Шевелько. Опт. и спектр., 28, 425, 1970.
- [5] В. А. Зон. ЖЭТФ, 73, 128, 1977.
- [6] Ю. Н. Демков, В. Н. Островский. Метод потенциалов нулевого радиуса в атомной физике, ЛГУ, Л., 1975.
- [7] В. А. Давыдкин, Б. А. Зон, Н. Л. Манакон, Л. П. Рапопорт. ЖЭТФ, 60, 124, 1971.

Поступило в Редакцию 27 марта 1980 г.