

ВЛИЯНИЕ ДИПОЛЬНОЙ ПОЛЯРИЗАЦИИ 5p-ЭЛЕКТРОНОВ НА ФОТОИОНИЗАЦИЮ 5s-ОБОЛОЧКИ Xe

Сухоруков В. Л., Петров И. Д., Демехин В. Ф.

Учет межоболочечных корреляций при описании фотоионизации 5s-оболочки Xe принципиально изменяет зависимость сечения ионизации σ_{5s} от энергии фотона ω [1]. Это видно из рисунка, где сопоставлены $\sigma_{5s}(\omega)$, рассчитанные в приближении Хартри–Фока (ХФ) и в приближении случайных фаз с обменом (ПСФО).

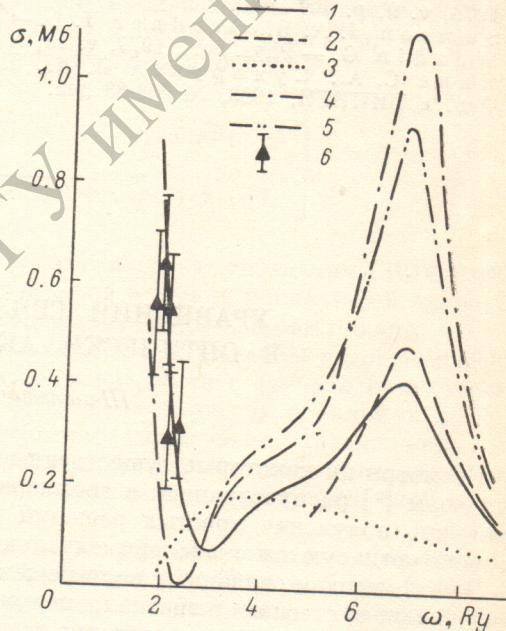
На языке метода наложения конфигураций сильное влияние межоболочечных корреляций на процесс фотоионизации 5s-оболочки можно понять, если учесть, что функция конечного состояния $|f(\varepsilon)\rangle$ представляет собой следующую суперпозицию:

$$|f(\varepsilon)\rangle = \sum_{\varepsilon'} a_{5s}(\varepsilon) |5s^{-1}\varepsilon p\rangle + \sum_{\varepsilon'} S a_{5p}(\varepsilon, \varepsilon') |5p^{-1}\varepsilon' d\rangle + \sum_{\varepsilon'} a_{4d}(\varepsilon \varepsilon') |4d^{-1}\varepsilon' f\rangle, \quad (1)$$

где S обозначает суммирование по функциям дискретного и интегрирование по функциям сплошного спектров; в векторе состояния указаны квантовые числа электронов, недостающих и дополнительных, относительно конфигурации атома Xe. Небольшая величина амплитуд $\langle 5s|r|_{ep}\rangle$ по сравнению с $\langle 5p|r|_{ed}\rangle$ и $\langle 4d|r|_{ef}\rangle$ приводит к тому, что даже при небольших коэффициентах $a_{nl}(\varepsilon \varepsilon')$ 2-й и 3-й члены дают большой вклад в величину $\sigma_{5s}^{\text{ПСФО}}(\omega)$ в области порогов ионизации 5s- и 4d-оболочек соответственно.

Экспериментальные и теоретические спектры поглощения 5s-оболочки Xe.

1 — расчет с учетом межоболочечных корреляций и дипольной поляризации 5p-электронов, 2 — эксперимент [2], 3 — приближение ХФ, 4 — ПСФО [1], 5 — ПСФО — данная работа, 6 — эксперимент [3]. Небольшие отличия кривых 4 и 5 могут быть связаны с тем, что в данной работе учтен только второй порядок теории возмущений.



Учет многоэлектронных корреляций в рамках ПСФО качественно объяснил ход зависимости $\sigma_{5s}^{\text{эксп}}(\omega)$. Вместе с тем остались отличия теории и эксперимента, которые заключаются в том, что в области порога $\sigma_{5s}^{\text{ПСФО}}(\omega)$ несколько меньше $\sigma_{5s}^{\text{эксп}}(\omega)$, а при $\omega > 5 \text{ Ry}$ $\sigma_{5s}^{\text{ПСФО}}(\omega)/\sigma_{5s}^{\text{эксп}}(\omega) \approx 2 \div 3$ (см. рисунок). Для исследования причин этих расхождений в данной работе рассмотрено влияние дипольной поляризации 5p-оболочки на $\sigma_{5s}^{\text{теор}}(\omega)$.

На языке метода наложения конфигураций дипольная поляризация 5p-оболочки описывается смешиванием конфигурации $5s^{-1}$ с каналом $5p^{-2} \left\{ \begin{matrix} n \\ \varepsilon \end{matrix} \right\} d$ [4, 5]. Учет этого смешивания объясняет, почему фотоэлектронный спектр 5s-оболочки Xe представляет собой не одиночную линию, а сложный мультиплет. При этом оказывается, что основная линия спектра 5s-оболочки, которая используется

для экспериментального измерения $\sigma_{5s}(\omega)$, определяется переходом на уровень, описываемый в двухканальном приближении следующей функцией [5]:

$$|\Phi\rangle = 0.680 |5s^{-1}\rangle + 0.666 |5p^{-2}(^1D) 5d\rangle + \dots \quad (2)$$

Учет этого обстоятельства приводит к тому, что для расчета $\sigma_{5s}(\omega)$, измеренного по основной линии, в (1) необходимо заменить функцию $|5s^{-1}\rangle$ на $|\Phi\rangle$. Легко видеть, что это более чем в 2 раза ($1/(0.680)^2$ в двухканальном приближении) уменьшает величину сечения при больших ω . При малых ω уменьшение с избытком компенсируется увеличением вклада второго слагаемого (1) за счет взаимодействия конфигураций $|5p^{-2}(^1D) 5d\rangle$ и $|5p^{-1}e'd\rangle$.

Для сокращения объема вычислений в данной работе вместо сложной функции вида (2) при расчете взята функция $|\tilde{\Phi}\rangle$ вида

$$|\tilde{\Phi}\rangle = 0.707 |5s^{-1}\rangle + 0.707 |5p^{-2}(^1D) 5d\rangle. \quad (3)$$

Орбитали e^p -канала получены в электростатическом поле состояния $|\Phi\rangle$. Результаты расчета представлены на рисунке, из которого видно, что учет дипольной поляризации $5p$ -оболочки дополнительно к ПСФО устраняет в основном расхождения между $\sigma_{5s}^{\text{эксп}}(\omega)$ и $\sigma_{5s}^{\text{теор}}(\omega)$.

Литература

- [1] Amusia M. Ya., Cherepkov N. A. — Case Studies in Atomic Physic., 1975, v. 5, N 2, p. 47—179.
- [2] West J. B., Woodruff P. R., Codling K., Houlgate K. G. — J. Phys. B, 1976, v. 9, p. 407—410.
- [3] Samson J. A. R., Gardner J. L. — Phys. Rev. Lett., 1974, v. 33, p. 671—673.
- [4] Wendin G. — Phys. Scr., 1977, v. 16, N 2, p. 296—298.
- [5] Явна С. А., Сухоруков В. Л., Петров И. Д., Демехин В. Ф. — Деп. в ВИНИТИ, 1983, № 558-83 деп.

Поступило в Редакцию 3 мая 1984 г.

УДК 535.317.1

Оптика и спектроскопия, т. 58, в. 6, 1985

УРАВНЕНИЯ СВЯЗАННЫХ ВОЛН В ОПТИЧЕСКИ АКТИВНОЙ СРЕДЕ

Шепелевич В. В.

Несмотря на некоторые существенные недостатки [1], приближение связанных волн [2] распространено в трехмерной голограммии, так как в его рамках возможно получение простых решений ряда голографических задач, которые хорошо согласуются с экспериментальными данными.

В [3, 4] методом связанных волн решены задачи о дифракции света на объемных голографических решетках, полученных при «включении» гиротропии. В этом случае влияние гиротропии сводилось к пространственной модуляции видности интерференционной картины при регистрации. Тем не менее во многих экспериментальных ситуациях оптическая активность является существенной и на стадии восстановления записанных волновых полей.

Настоящая работа посвящена получению системы уравнений связанных волн в изотропной прозрачной оптически активной среде в режиме Брэгга и нахождению решений этих уравнений на примере одного из простейших частных случаев геометрии записи.

Исключая из системы уравнений Максвелла и материальных уравнений $D = \epsilon E + i\gamma H$, $B = H - i\gamma E$, где γ — параметр гирации [5, 6], векторы D , B и H , получаем уравнение для определения напряженности электрического поля E

$$\operatorname{rot} \operatorname{rot} E + \frac{\epsilon}{c^2} \frac{\partial^2 E}{\partial t^2} - \frac{2i\gamma}{c} \frac{\partial}{\partial t} \operatorname{rot} E - \frac{\gamma^2}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} E = 0. \quad (1)$$