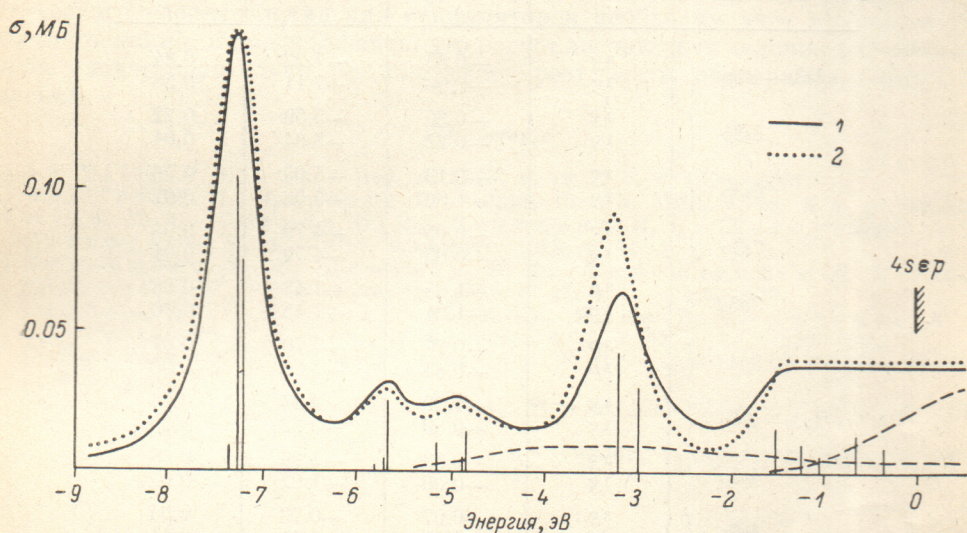


К-СПЕКТР ФОТОПОГЛОЩЕНИЯ Na В ОБЛАСТИ ДВОЙНОГО ВОЗБУЖДЕНИЯ

Яена В. А., Хоперский А. Н., Демехина Л. А.,
Сухоруков В. Л.

1. Впервые К-спектр фотопоглощения атомарного Na в области порога ионизации ($1070 \leq \omega \leq 1090$ эВ) был получен в [1] с использованием тормозного излучения. В этой же работе основные элементы тонкой структуры связаны с $1s3s-nln'l'$ -переходами на основе оптических данных по энергиям $3s^2-$



Теоретический (1) и экспериментальный (2) спектры фотопоглощения Na в области двойного возбуждения

Экспериментальное и теоретическое значение энергии $1s^{-1}3s^{-1}4s$ -конфигурации совмещены. Штриховой линией показаны сечения фотоионизации в состоянии $1s^{-1}3p_{3/2}$ и $1s^{-1}4s_{3/2}$.

$nln'l'$ -возбуждений Mg. Использование синхротронного излучения позволило в [2] получить К-спектр поглощения Na с лучшим разрешением и дать его интерпретацию, которая несколько отличается от [1]. Неэмпирический расчет энергий и вероятностей $1s-\left\{ \begin{matrix} n \\ \varepsilon \end{matrix} \right\} p$ -переходов, выполненный с учетом монополюлярной перестройки электронных оболочек и угловых корреляций в конечном состоянии, позволил в [3] получить хорошее количественное согласие основных элементов тонкой структуры рассчитанного и измеренного спектров в области однократной фотоионизации ($1070 \leq \omega \leq 1080$ эВ). При этом интерпретация спектра, данная в [2], была уточнена. Данная работа посвящена теоретическому исследованию К-спектра фотопоглощения в области $\omega > 1080$ эВ и преследует главным образом две цели. Первая заключается в том, чтобы дать интерпретацию спектра в области двойного фотовозбуждения, а вторая — протестировать методику расчета энергий и вероятностей, развитую для однократных возбуждений, на примере расчета соответствующих характеристик двукратных возбуждений.

2. Влияние монополюлярной перестройки электронных оболочек на амплитуды электрических дипольных переходов учтено по методике [4, 5]. В соответствии с этой методикой амплитуда $1s3s-n'snp$ -перехода имеет вид

$$\langle 1s^{-1}n's(LS)np(2P) \| D \| 3s^1(2S) \rangle = A(LS) \frac{\langle n's^+ | 3s \rangle \prod_i \langle n_i l_i^+ | n_i l_i \rangle^{N_i}}{\langle 1s^+ | 1s \rangle} \times \\ \times \left(\langle np^+ | r | 1s \rangle - \frac{\langle np^+ | 2p \rangle \langle 2p^+ | r | 1s \rangle}{\langle 2p^+ | 2p \rangle} \right), \quad (1)$$

где N_i — число электронов в i -й оболочке, $A(LS)$ — зависящая от терма угловая часть, индекс плюс означает, что атомные орбитали получены при решении усредненных по соответствующей конфигурации хартри—фоковских (ХФ) уравнений с учетом релаксации остовных электронов при образовании $1s$ -вакансии.

3. Получено, что форма интенсивной белой линии в области $\omega \sim -3$ эВ (см. рисунок) плохо описывается в одноконфигурационном приближении. Так, расчет дает две линии, которые отстоят друг от друга на 1.07 эВ и связаны с переходами в термы 2P конфигураций $1s^{-1}4s^1 ({}^1S) 4p^1$ и $1s^{-1}4s^1 ({}^3S) 4p^1$. Эти

| Переход | LS^1 | ΔE^2 | E^3 | $f \cdot 10^3$ |
|---------------|---------|--------------|-------|----------------|
| $1s3s-4s3p$ { | 3S | -0.85 | -7.22 | 0.84 |
| | 1S | -0.60 | -7.11 | 0.58 |
| $5s3p$ { | 3S | -0.30 | -5.59 | 0.22 |
| | 1S | -0.22 | -5.64 | 0.01 |
| $6s3p$ { | 3S | -0.13 | -5.09 | 0.06 |
| | 1S | -1.00 | -5.06 | 0.02 |
| $7s3p$ { | 3S | -0.05 | -4.79 | 0.03 |
| | 1S | -0.05 | -4.79 | 0.01 |
| $3p3d$ { | 3P | -1.85 | -7.43 | 0.08 |
| | 1P | -1.24 | -7.45 | 0.00 |
| $3p4d$ { | 3P | -0.70 | -5.70 | 0.01 |
| | 1P | -0.45 | -5.82 | 0.00 |
| $1s3s-4s4p$ { | 3S | -1.39 | 2.95 | 0.24 |
| | 1S | -0.59 | -3.22 | 0.33 |
| $4s5p$ { | 3S | -0.33 | -1.26 | 0.08 |
| | 1S | -0.09 | -1.02 | 0.04 |
| $4s6p$ { | 3S | -0.07 | -0.70 | 0.04 |
| | 1S | -0.03 | -0.65 | 0.11 |
| $4p3d$ { | 3P | -3.12 | -4.81 | 0.12 |
| | 1P | -1.63 | -3.79 | 0.00 |
| $4p4d$ { | 3P | -0.40 | -0.90 | 0.00 |
| | 1P | -0.28 | -1.31 | 0.03 |
| $5p3d$ { | 3P | -0.74 | -1.52 | 0.12 |
| | 1P | -0.45 | -1.40 | 0.03 |

Примечание. 1L и S — квантовые числа в конфигурации $1s^{-1}nl$ (LS) n_1l_1 (2P); 2 поправка (в эВ) к диагональным матричным элементам оператора энергии; 3 энергия фотона (в эВ), отсчитанная от $\omega_0 = E(1s^{-1}4s) - E(0) = 1087.2$ эВ, $E(K)$ — полная ХФ энергия состояния K . Учтена релятивистская поправка к энергии $1s$ -электрона, равная 2.4 эВ [7]. Экспериментальное значение $\omega_0 = 1087 \pm 0.3$ эВ.

переходы имеют силы осцилляторов $0.52 \cdot 10^{-3}$ и $0.16 \cdot 10^{-3}$ соответственно и должны были бы проявляться в виде дублета, в то время как на эксперименте при $\omega \sim -3$ эВ зарегистрирована одиночная линия.

Для уточнения расчета выбран метод наложения конфигураций. Выбор метода обусловлен тем, что структура спектра в исследуемой области определяется большим числом состояний, величина взаимодействия между которыми сравнима с разностью энергий этих состояний. Список базисных состояний, включенных в матрицу векового уравнения, содержится в таблице. Состояния, приведенные в таблице, делятся на две группы. Первая группа состояний $1s^{-1}ns^1 ({}^1, {}^3S) np^1 ({}^2P)$ характеризуется тем, что для них отличен от нуля матричный элемент (1). Для второй группы матричный элемент (1) равен нулю, и они проявляются в спектре только за счет кулоновского смешивания с первой группой состояний.

Диагональные матричные элементы оператора энергии вычислены с учетом влияния на них возбужденных состояний вида $1s^{-1} \{n\varepsilon\} l^1 ({}^1, {}^3L) \{n_1\varepsilon_1\} l_1^1 ({}^2P)$. Для этой цели использован второй порядок теории возмущений и методика

вычисления матричных элементов, описанная в [6]. Поправки, полученные при расчете, приведены в таблице.

4. Результаты расчета спектра приведены в таблице и на рисунке. В таблице содержатся энергии компонентов, полученные после решения векового уравнения, и соответствующие силы осцилляторов (f). Высота вертикальных линий на рисунке равна амплитуде лорентцевых кривых с площадью $\sigma = 2\pi^2 \alpha a_0^2 f$ и с шириной на половине высоты $\gamma = 0.55$ эВ. Контур рассчитанного спектра представляет собой сумму указанных дисперсионных кривых и арктангенсоид, описывающих поглощение в $1s^{-1}3p\epsilon s$ - и $1s^{-1}4s\epsilon p$ -состояния сплошного спектра и также нанесенных на рисунок.

Из рисунка видно, что форма рассчитанного и измеренного спектров хорошо согласуется. Это позволяет утверждать, что для правильного описания энергетического распределения сил осцилляторов необходим учет многоэлектронных корреляций, и предположить, что расчет абсолютных величин сил осцилляторов удовлетворительно предсказывает результаты экспериментальных измерений.

Литература

- [1] La Villa P. E. — Phys. Rev. A, 1979, v. 19, N 5, p. 1999—2001.
- [2] Tuilier M. H., Laporte D. — Phys. Rev. A, 1982, v. 26, N 1, p. 372—378.
- [3] Явна В. А., Петров И. Д., Демехина Л. А., Хоперский А. Н., Сухоруков В. Л. — Опт. и спектр., 1986, т. 61, в. 4.
- [4] Сухоруков В. Л., Демехин В. Ф., Тимошевская В. В., Лаврентьев С. В. — Опт. и спектр., 1979, т. 47, в. 2, с. 407—409.
- [5] Сухоруков В. Л., Демехин В. Ф., Явна В. А., Дуденко А. И., Тимошевская В. В. — Опт. и спектр., 1983, т. 55, в. 2, с. 229—233.
- [6] Богданович П. О., Визбарайте Я. И. — Деп. в ВИНТИ 28.02.72, № 4222-72 деп.
- [7] Herman F., Skillman S. Atomic Structure Calculations. New Jersey, 1963.

Поступило в Редакцию 24 февраля 1986 г.