

ВЛИЯНИЕ ПОЛЯРИЗАЦИИ АТОМНОГО ОСТАТКА НА СЕЧЕНИЯ ВОЗБУЖДЕНИЯ ОПТИЧЕСКИХ ПЕРЕХОДОВ АТОМОВ ЩЕЛОЧНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ

И. Л. Бейгман и В. П. Шевелько

Рассмотрено влияние поляризации атомного остатка падающим электроном на эффективные сечения возбуждения оптически разрешенных переходов атомов щелочных элементов. Показано, что при больших энергиях столкновения учет указанного эффекта приводит к уменьшению борновского сечения в 1.5–2 раза. Численные расчеты сечений возбуждения электронным ударом выполнены для переходов K (4s–7p), Rb (5s–6p), Cs (6s–8p).

1. Анализ влияния поляризации атомного остатка на значения сил осцилляторов щелочных элементов показал [1], что для нерезонансных переходов главной серии эффект может быть весьма значительным. Главным образом, это связано с тем, что для указанных переходов матричный элемент дипольного момента аномально мал из-за интерференции волновых функций начального и конечного состояний, поэтому учет даже небольшого дополнительного дипольного момента остова приводит к существенному изменению вероятностей переходов.

В настоящей работе исследовано влияние поляризации атомного остатка на эффективные сечения возбуждения оптически разрешенных переходов, в которых дипольное взаимодействие атома с внешней частицей играет существенную роль. Показано, что в борновском приближении учет эффекта приводит к уменьшению сечений в 1.5–2 раза. В отличие от другого эффекта — динамической поляризации валентного электрона полем внешнего электрона (см., например, введение поляризационного потенциала в [2]) — этот эффект является свойством атомной функции и поэтому не убывает с ростом энергии внешнего электрона. При малых и средних энергиях, разумеется, следует учитывать оба эффекта. Поскольку целью работы является исследование поляризации остова, мы будем проводить рассмотрение на основе борновского приближения. Совместное влияние обоих эффектов будет проиллюстрировано расчетами сечений в рамках модели Вайнштейна, Преснякова, Собельмана [3], учитывающей отталкивание налетающего и валентного электронов, т. е. эффект поляризации оптического электрона внешним.

Приведены эффективные сечения возбуждения электронным ударом атомов K (4s–7p), Rb (5s–6p) и Cs (6s–8p), вычисленные в приближении Борна и модели [3].

2. В борновском приближении сечение возбуждения перехода 0–1 электронным ударом имеет вид¹

$$\sigma = \frac{8\pi}{k_0^2} \int_{k_0-k_1}^{k_0+k_1} |f(q)|^2 \frac{dq}{q^3}, \quad (1)$$

$$f(q) = \int \psi_0^* \psi_1 \sum_{i=1}^N (e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_i} - 1) d\tau, \quad (2)$$

¹ Используется атомная система единиц.

где ψ_0, ψ_1 — атомные волновые функции начального и конечного состояний, $\mathbf{k}_0, \mathbf{k}_1$ — импульсы внешнего электрона до и после столкновения, $\mathbf{q} = \mathbf{k}_0 - \mathbf{k}_1$ — переданный импульс; суммирование проводится по всем электронам атома.

В первом приближении по взаимодействию остова с оптическим электроном для волновой функции системы имеем

$$\psi = \Phi + G V \Phi, \quad \Phi = \chi_0(\mathbf{R}) \varphi(\mathbf{r}), \quad (3)$$

где $\chi_0(\mathbf{R})$ — невозмущенная волновая функция остова, одинаковая для обоих состояний; $\varphi(\mathbf{r})$ — волновая функция оптического электрона, совершающего переход; G — функция Грина системы; V — возмущение, определяемое выражением

$$V = \sum_{i=1}^{N-1} \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}_i|} - U_c(r); \quad (4)$$

$U_c(r)$ — центрально-симметричный потенциал остова; Z — заряд ядра. Подставляя функции (3) в (2) и повторяя выкладки, аналогичные проделанным в работе [4] для оператора дипольного момента, получим

$$f(q) = \int \varphi_0(\mathbf{r}) \varphi_1(\mathbf{r}) (e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} - 1 - Q(\mathbf{q}, \mathbf{r})) d\mathbf{r}, \quad (5)$$

$$Q(\mathbf{q}, \mathbf{r}) = \sum_{n \neq 0} \frac{2 \langle \chi_0 | V | \chi_n \rangle \langle \chi_n | \left(\sum_{i=1}^{N-1} e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}_i} - 1 \right) | \chi_0 \rangle}{E_c^n - E_c^0 - \frac{(E_v^1 - E_v^0)^2}{E_c^n - E_c^0}}, \quad (6)$$

где E_c, E_v — энергии остова и валентного электрона соответственно, E_c^0 — энергия основного состояния остова; суммирование проводится по всем возбужденным состояниям остова.

В общем случае сумма (6) не допускает дальнейших упрощений. Однако в адиабатической области энергий ($E_v^1 - E_v^0 \ll E_c^1 - E_c^0$) оператор $Q(\mathbf{q}, \mathbf{r})$ можно приближенно представить в виде

$$\begin{aligned} Q &= \sum_{n \neq 0} \frac{2 \langle \chi_0 | V | \chi_n \rangle \langle \chi_n | \left(\sum_{i=1}^{N-1} e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}_i} - 1 \right) | \chi_0 \rangle}{E_c^n - E_c^0} \approx \\ &\approx 2 \frac{\mathbf{r}}{r^3} \left\langle \chi_0 \left| \sum \mathbf{R}_i (H_c - E_c)^{-1} (e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}_i} - 1) \right| \chi_0 \right\rangle = \\ &= 2 \frac{\mathbf{r}}{r^3} \left\langle \chi_0 \left| \sum \mathbf{R}_i (H_c - E_c)^{-1} (\mathbf{q}\mathbf{R}_i) \right| \chi_0 \right\rangle \frac{\langle \chi_0 | \sum \mathbf{R}_i (H_c - E_c)^{-1} (e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}_i} - 1) | \chi_0 \rangle}{\langle \chi_0 | \sum \mathbf{R}_i (H_c - E_c)^{-1} (\mathbf{q}\mathbf{R}_i) | \chi_0 \rangle}. \quad (7) \end{aligned}$$

В выражении (7) оставлен только дипольный член в V , так как рассматриваются оптически разрешенные переходы, и взаимодействие происходит в основном при больших расстояниях оптического электрона от остова $r > r_0$, где r_0 — радиус атомного остатка.

Пользуясь теоремой о среднем, можно оператор $(H_c - E_c)^{-1}$ заменить на $(\bar{E}_c - E_c^0)^{-1}$, где $\bar{E}_c$ — средняя энергия возбужденных состояний остова. Значения $\bar{E}_c$ разные для операторов $(e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}} - 1)$ и $\mathbf{q}\mathbf{R}$, однако для спектра остова щелочного элемента разность в значениях невелика по сравнению с разностью энергий основного и первого возбужденного состояний. Кроме того, дробь в (7) отличается от единицы лишь при больших значениях q , которые дают малый вклад в сечение (см. (1), (2)). Пренебрегая с учетом сказанного разностью в значениях $\bar{E}_c$, оператор Q можно записать в виде

$$Q = 3 \frac{\mathbf{r}}{r^3} \alpha \frac{\left\langle \chi_0 \left| \sum_{i=1}^{N-1} \mathbf{R}_i (e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}_i} - 1) \right| \chi_0 \right\rangle}{\left\langle \chi_0 \left| \left(\sum_{i=1}^{N-1} \mathbf{R}_i \right)^2 \right| \chi_0 \right\rangle}, \quad (8)$$

$$\alpha = 2 \sum_{n \neq 0} \frac{\left\langle \chi_0 \left| \sum_{i=1}^{N-1} R_i \right| \chi_n \right\rangle \left\langle \chi_n \left| \sum_{i=1}^{N-1} R_i \right| \chi_0 \right\rangle}{E_c^n - E_c^0},$$

α — поляризуемость остова.

Учитывая свойство сферической симметрии атомного остатка щелочных атомов, для оператора Q имеем

$$Q = 3\alpha \frac{iqr}{qr^3} \int_0^\infty R_c^2(r) r^3 j_1(qr) dr \left[\int_0^\infty R_c^2(r) r^4 dr \right]^{-1}, \quad (9)$$

где $R_c(r)$ — радиальная функция электрона атомного остатка, $j_1(r)$ — сферическая функция Бесселя.

Диагональные матричные элементы в (7) и (9) слабо зависят от выбора радиальных функций, поэтому в качестве $R_c(r)$ можно использовать функции $\sim \exp(-\sqrt{E_c^0}r)$. В результате из (9) получим

$$Q = \alpha \frac{iqr}{r^3 (1 + q^2/8E_c^0)^3}, \quad (10)$$

где E_c^0 — энергия связи внутренней оболочки.

При $q \rightarrow 0$ из формулы (10) получается оператор для матричного элемента силы осциллятора с учетом поляризации остова, который совпадает с выражением, приведенным в работах [1, 4],

$$e^{iqr} - 1 - Q \simeq iqr (1 - \alpha/r^3). \quad (11)$$

Окончательно из формул (5), (10) для сечения возбуждения перехода $n_0s - n_1p$ атома щелочного элемента с учетом поляризации остова получим

$$\sigma = \pi a_0^2 \frac{24}{k_0^2} \int_{k_0 - k_1}^{k_0 + k_1} |F(q)|^2 \frac{dq}{q^3}, \quad (12)$$

$$F(q) = \int_0^\infty R_{n_0s}(r) R_{n_1p}(r) r^2 \left[j_1(qr) - \frac{\alpha q}{3(r^2 + r_0^2)(1 + q^2/8E_c^0)^3} \right] dr, \quad (13)$$

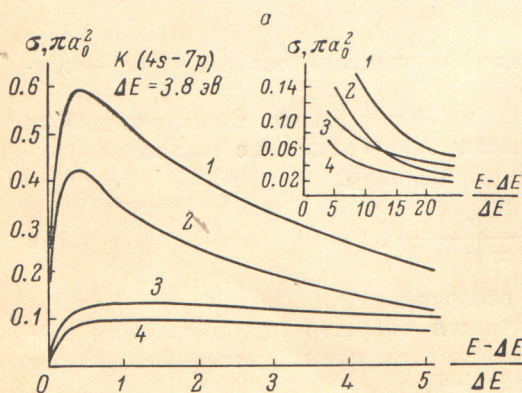
a_0 — боровский радиус. При этом величина α/r^2 в (13) заменена на $\alpha/(r^2 + r_0^2)$, чтобы исключить полюсную особенность и распространить интеграл на всю область интегрирования.

3. Расчет сечений возбуждения σ проводился по формулам (12), (13) для атомов K (4s—7p), Rb (5s—6p) и Cs (6s—8p). Волновые функции оптического электрона $R_{nl}(r)$ получались путем численного решения радиального уравнения Шредингера с экспериментальным значением энергии [5, 6]; величина r_0 находилась как средний радиус атомного остатка. При расчетах использовались экспериментальные значения поляризуемостей остова [7]: $\alpha(K^+) = 6a_0^3$, $\alpha(Rb^+) = 10a_0^3$, $\alpha(Cs^+) = 17a_0^3$.

Результаты расчетов сечений возбуждения указанных атомов представлены на рисунке. На рисунке а для сравнения приведены сечения возбуждения перехода 4s—7p в атоме K, вычисленные в «чистом» борновском приближении (формулы (12), (13) с $\alpha = 0$), в борновском приближении ($\alpha = 0$) с учетом отталкивания электронов [3], с учетом поляризации остова (формулы (12), (13) с $\alpha \neq 0$) и с учетом поляризации и отталкивания электронов. Из рисунка а видно, что учет эффекта поляризации остова приводит к уменьшению сечений в максимуме в 1.5÷2 раза и к несколько меньшему изменению сечений в асимптотической области. Аналогичная ситуация имеет место и для сечений возбуждения нерезонансных переходов атомов Rb и Cs. На рисунках б, в приведены сечения возбуждения переходов 5s—6p и 6s—8p в атомах Rb и Cs, вы-

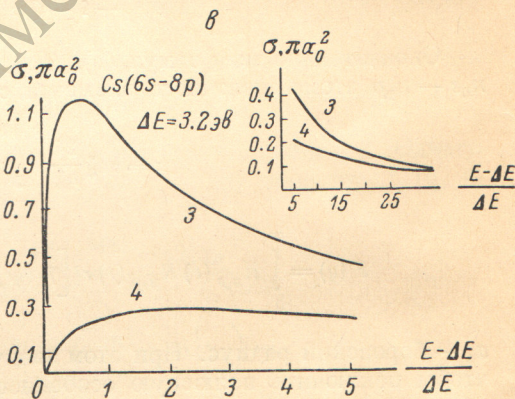
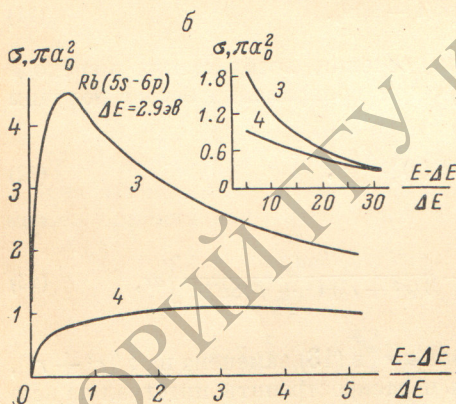
численные по формулам (12), (13) и с учетом отталкивания электронов. Для атомов Li и Na рассматриваемый эффект не существует.

К сожалению, в настоящее время отсутствуют экспериментальные данные о сечениях возбуждения нерезонансных p -уровней из основного состояния атомов K, Rb, Cs. Систематические измерения функций возбуждения Q линий атомов K, Rb, Cs до энергии $E \sim 30$ эв приведены в работах [8]. Зная функции возбуждения линий и коэффициенты ветвления соответствующих p -уровней $\gamma_{n,p} = A_{n,p-n_0} \left(\sum_{n' \leq n, l'=0,2} A_{n,p-n'l'} \right)^{-1}$, где A — вероятность перехода, можно оценить верхнюю границу эффективных сечений возбуждения. Вычисление факторов ветвления уровней с помощью сил



Сечения возбуждения атомов K (a), Rb (б) и Cs (в) в зависимости от энергии E налетающего электрона (в пороговых единицах).

Кривая 1 — борновское приближение без учета эффектов поляризации (формулы (12), (13) с $\alpha=0$); 2 — с учетом поляризуемости остова (формулы (12), (13)); 3 — с учетом отталкивания электронов по модели [3]; 4 — с учетом поляризуемости остова и отталкивания электронов по модели [3].



осцилляторов [1] дает значения: $\gamma_{7p}(K)=0.029$, $\gamma_{6p}(Rb)=0.20$ и $\gamma_{8p}(Cs)=0.14$. Оцененные таким образом сечения имеют величину, примерно в 1.5 раза большую, чем сечения, вычисленные по формулам (12), (13) с учетом отталкивания электронов (кривая 4 на рисунке). Это расхождение, по-видимому, связано с каскадными переходами, вклад которых в экспериментальное сечение оценить трудно.

Следует отметить, что сечения возбуждения σ уровней тонкой структуры с $j = 1/2$ и $j = 3/2$ пропорциональны их статвесу, т. е. относятся как 1 : 2. Вероятности же переходов из соответствующих уровней в основное состояние из-за большого влияния поляризации остова могут сильно отличаться от единицы, например, в случае атома Cs отношение $A(8p_{3/2} - 6s_{1/2})/A(8p_{1/2} - 6s_{1/2}) \simeq 3$ [1]. Поэтому функции возбуждения линий $Q = \sigma \gamma$ уровней тонкой структуры не пропорциональны их статвесу, а относятся как $Q(n_0 s_{1/2} - n_1 p_{3/2})/Q(n_0 s_{1/2} - n_1 p_{1/2}) \simeq 2A(n_1 p_{3/2} - n_0 p_{1/2})/A(n_1 p_{1/2} - n_0 s_{1/2})$.

Исследование влияния эффекта поляризации остова на сечения ионизации щелочных атомов из основного состояния показало, что в случае образования выбитого электрона в p -состоянии сечение ионизации, так

же как и сечение возбуждения атомов K, Rb, Cs, уменьшается в $1.5 \div 2$ раза. Однако изменение суммарного сечения ионизации оказывается незначительным из-за большого вклада ионизации с образованием электронов в s -, d -, f -состояниях.

Авторы благодарны Л. А. Вайнштейну и Л. Л. Шимону за обсуждение работы.

Литература

- [1] И. Л. Бейгман, Л. А. Вайнштейн, В. П. Шевелько. Опт. и спектр., 28, 425, 1970.
- [2] Л. А. Вайнштейн. Сб. «Атомные столкновения». 67. Изд. АН ЛатССР, Рига, 1963.
- [3] Л. А. Вайнштейн, Л. П. Пресняков, И. И. Собельман. ЖЭТФ, 45, 2015, 1963.
- [4] S. Naeed, A. Herzberg, M. G. Games. J. Phys. B, 1, 822, 1968.
- [5] Л. А. Вайнштейн. Опт. и спектр., 3, 313, 1957.
- [6] Л. А. Вайнштейн, В. П. Шевелько. Препринт ФИАН, № 87, 1970.
- [7] K. Fajans, G. Joose. Zs. f. Phys., 23, 1, 1924.
- [8] И. П. Запесочный, Л. Л. Шимон, А. К. Сошников. Опт. и спектр., 29, 864, 1965; И. П. Запесочный, Л. Л. Шимон. Опт. и спектр., 20, 753, 1966; Опт. и спектр., 20, 944, 1966.

Поступило в Редакцию 15 января 1973 г.