

Как мы уже сказали, при  $I \ll 1$  существенно вообще только первое слагаемое. Оценим другой предельный случай  $I \gg 1 + (\Delta/\gamma_{ab})^2$ . Из [4] следует при этом  $f = 1/\sqrt{2I}$ ,  $F = (1/\sqrt{2I})\sqrt{1 + (\Delta/\gamma_{ab})^2}$  и в результате оказывается, что  $g_2 \sim \eta \sqrt{I}/\varepsilon$ . В случае, когда  $I \sim 1$  и  $\Delta/\gamma_{ab} \sim 1$ , получим соответственно для  $f \simeq 1/2\sqrt{2}$  и  $F \simeq 1/\sqrt{2}$  и  $g_2 \sim \eta/\varepsilon$ .

Общий вывод, который может быть сделан из нашего рассмотрения, состоит в том, что пленение излучения вносит существенный вклад в ширину контура биений при  $I \geq 1$  и при условии, что  $\eta\sqrt{1+I}/\varepsilon \geq 1$ . В этих условиях пленение нельзя не учитывать, так как оно меняет зависимость  $\Delta\nu$  от  $I$ . Если в отсутствие пленения в этой зависимости наступает насыщение, то учет пленения приводит к тому, что  $\Delta\nu \sim \sqrt{I}$ .

#### Литература

- [1] В. А. Соколов, Э. Е. Фрадкин. Опт и спектр., 43, 555, 1977.  
 [2] M. O. Scully, W. E. Lamb. Phys. Rev., 159, 208, 1967.  
 [3] М. И. Дьяконов, В. И. Перель. ЖЭТФ, 47, 1483, 1964.  
 [4] Ю. Л. Климонтович, А. С. Ковалев, П. С. Ланда. Усп. физ. наук, 106, 279, 1972.

Поступило в Редакцию 8 июня 1981 г.

УДК 539.184.03

### ВЫЧИСЛЕНИЕ СЕЧЕНИЙ ФОТОИОНИЗАЦИИ ДЛЯ ИОНОВ ИЗОЭЛЕКТРОННОЙ ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТИ ЛИТИЯ МЕТОДОМ ДИРАКА—ФОКА

В. А. Зилитис

В последнее время, особенно в связи с развитием исследований процессов в астрофизической и термоядерной плазме, значительно возрос интерес к многозарядным ионам. В таких процессах участвуют ионы различной кратности ионизации, в том числе и литиеподобные ионы. С целью интерполяции или экстраполяции различных характеристик таких ионов важно исследовать изменения этих характеристик вдоль изоэлектронной последовательности. Для многозарядных ионов главным источником информации является теоретический расчет, при этом важно учесть релятивистские эффекты. Поведение значений сил осцилляторов вдоль изоэлектронной последовательности лития было изучено в ряде работ, например в [1], где использовался метод Дирака—Фока. Сечения фотоионизации до сих пор определялись главным образом для нейтральных атомов и ионов с малой кратностью ионизации или в нерелятивистском приближении [2, 3]. Изучение поведения сечений фотоионизации вдоль изоэлектронной последовательности представляет интерес и по той причине, что сечения фотоионизации в припороговой области связаны с соответствующими силами осцилляторов. В настоящей работе на основе релятивистского метода самосогласованного поля с корректным учетом обмена исследована фотоионизация литиеподобных ионов от  $S^{13+}$  до  $Yb^{67+}$ .

В релятивистской теории сечения фотоионизации электрического дипольного типа одного связанного электрона с квантовыми числами  $n_j$  сверх заполненных оболочек определяется формулой [4]

$$\sigma_{n_j}(E) = \frac{2\pi^2}{\alpha\omega} \left[ \frac{2j-1}{12j} |R_{j-1}|^2 + \frac{1}{12j(j+1)} |R_j|^2 + \frac{2j+3}{12(j+1)} |R_{j+1}|^2 \right], \quad (1)$$

где  $\omega = I_{n_j} + E$  — энергия фотона,  $I_{n_j}$  — энергия ионизации,  $E$  — энергия фотоэлектрона (без энергии покоя),  $\alpha$  — постоянная тонкой структуры. В фор-

муле (1) и в дальнейшем в этой статье, где специально не указано, использованы атомные единицы. Матричный элемент  $|R_\beta|$  можно представить в виде [5]

$$|R_\beta| = M_{\alpha\beta}^{(l)} + G_1 M_{\alpha\beta}^{(l)}, \quad (2)$$

где

$$M_{\alpha\beta}^{(l)} = \frac{1}{\sqrt{2}} [(\alpha_\alpha - \alpha_\beta) I_{\frac{1}{2}}^\pm + 2I_{\frac{1}{2}}^\pm] - \sqrt{2} [(\alpha_\alpha - \alpha_\beta) I_0^\pm - I_0^\pm],$$

$$M_{\alpha\beta}^{(l)} = 3I + (\alpha_\alpha - \alpha_\beta) (I_{\frac{1}{2}}^\pm + I_0^\pm) - I_0^\pm + 2I_{\frac{1}{2}}^\pm,$$

$G_1$  — калибровочная постоянная. Квантовое число  $x = l$ , если  $j = l - 1/2$  и  $x = -(l + 1)$ , если  $j = l + 1/2$ . Через  $I_L^\pm$  и  $J$  обозначены интегралы

$$I_L^\pm = \int_0^\infty [P_\alpha Q_\beta \pm Q_\alpha P_\beta] j_L(\alpha\omega r) dr, \quad J = \int_0^\infty [P_\alpha P_\beta + Q_\alpha Q_\beta] j_1(\alpha\omega r) dr, \quad (3)$$

где  $P(r)$  и  $Q(r)$  — соответственно большая и малая компоненты релятивистской волновой функции электрона,  $j_L(x)$  — сферическая функция Бесселя. В длинноволновом приближении ( $\alpha\omega r \ll 1$ )  $j_L(x) \approx x^L / (2L + 1)!!$  и выражения для  $I_L^\pm$  и  $J$  (3) упрощаются.

Функции непрерывного спектра нормированы таким образом, чтобы при  $r \rightarrow \infty$  они имели асимптотику

$$\begin{cases} P_x(r) \\ Q_x(r) \end{cases}_{r \rightarrow \infty} \rightarrow \left( \frac{\varepsilon \pm 1}{\pi p} \right)^{1/2} \frac{\sin \left[ pr + y \ln 2pr + \xi - \arg \Gamma(\gamma + 1 + iy) - \frac{\pi\gamma}{2} + \delta_x(E) \right]}{\cos \left[ \frac{\pi\gamma}{2} + \delta_x(E) \right]}, \quad (4)$$

где

$$\gamma = \sqrt{z^2 - (\alpha z)^2}, \quad p = \sqrt{E(1 + \varepsilon)}, \quad \varepsilon = 1 + \alpha^2 E, \quad y = \frac{z\varepsilon}{p}, \quad e^{2i\xi} = \frac{z - i \frac{z}{p}}{\gamma - iy}, \quad (5)$$

$z$  — эффективный заряд (заряд острова), а  $\delta_x(E)$  — сдвиг фазы, обусловленный некулоновской частью потенциала и обменными членами.

Калибровочную постоянную  $G_1$  в (2) можно выбрать различными способами. Выбор  $G_1 = 0$  (кулоновская калибровка) в нерелятивистском приближении соответствует матричному элементу скорости, а выбор  $G_1 = \sqrt{2}$  — матричному элементу длины. Можно выбрать и другие значения  $G_1$ . Так как для точных волновых функций выбор  $G_1$  не должен влиять на результаты, то совпадение результатов при различных значениях  $G_1$  является необходимым, но не достаточным критерием точности используемого приближения.

Угловое распределение фотоэлектронов имеет следующий вид [6]:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\sigma}{4\pi} [1 + \beta(E) P_2(\cos \theta)], \quad (6)$$

где  $\sigma$  — полное сечение,  $P_2(x) = \frac{1}{2}(3x^2 - 1)$  — полином Лежандра,  $\theta$  — угол между направлением поляризации фотонов и направлением фотоэлектронов. Для неполяризованных фотонов  $\beta \rightarrow -\frac{1}{2}\beta$  и  $\theta$  представляет собой угол между направлениями фотона и фотоэлектрона. Параметр асимметрии  $\beta(E)$  может в принципе меняться в пределах от  $-1$  до  $2$ .

При фотоионизации основных состояний литиеподобных ионов в начальном состоянии сверх заполненной оболочки находится один  $2s$ -электрон. В нерелятивистском приближении разрешен только переход  $ns \rightarrow Ep$  и согласно теории Купера—Заре [7]  $\beta(E) \equiv 2$ . В релятивистской теории имеются два канала  $ns_{1/2} \rightarrow Ep_{1/2}$  и  $ns_{1/2} \rightarrow Ep_{3/2}$ , взаимодействие между которыми приводит к зависимости  $\beta(E)$  от  $E$ . Соответствующие формулы, а также формулы для определения поляризации фотоэлектронов и функции Фано приведены, например, в [8]. Проведенные нами расчеты по этим формулам показали, что для всех рассматриваемых литиеподобных ионов параметр асимметрии  $\beta(E) \approx 2$  (с точностью 0.01%), а степень поляризации  $|p(E)| < 0.01$ . Это объясняется тем, что минимум Купера для этих ионов не находится в непрерывном спектре.

В данной работе одноэлектронные волновые функции как начального, так и конечного состояний определялись по методу Дирака—Фока. Методика определения функций связанных электронов изложена в [9]. По этой методике были определены состояния  $1s^2 2s_{1/2}$ ,  $1s 2p_{1/2}$  и  $1s^2 2p_{3/2}$  для всех упомянутых ионов. В табл. 1 приведены полученные значения энергий одноэлектронных состоя-

Таблица 1

Одноэлектронные уровни энергии для ионов изоэлектронной последовательности лития

Ион	$I_{nlj} = -E_{nlj}$ , ат. ед.			
	$1s_{1/2}$	$2s_{1/2}$	$2p_{1/2}$	$2p_{3/2}$
$S^{13+}$	115.276	25.9839	24.9576	24.8850
$Ca^{17+}$	186.861	42.5555	41.2290	41.0345
$Fe^{23+}$	321.264	75.2119	73.4207	72.8139
$Zn^{27+}$	430.077	102.2924	100.1785	99.0571
$Zr^{37+}$	789.172	189.2980	186.3094	182.4763
$Sn^{47+}$	1250.394	305.6068	301.6193	291.6413
$Yb^{67+}$	2568.751	639.2645	632.6745	589.1289

ний. Функции непрерывного спектра ( $E \geq 0$ ) вычислялись методом Дирака—Фока в приближении замороженного остова [10]. Для сравнения был проведен ряд вычислений и без учета обмена. Нормировка и определение сдвига фазы  $\delta_x(E)$  проводились по методике [11, 12].

Сечения фотоионизации были вычислены в одноэлектронном приближении по формуле (4). Влияние автоионизации и корреляции не учитывалось. Можно ожидать, что корреляции для многозарядных ионов невелики [3].

Нами было исследовано влияние обмена (для функции непрерывного спектра), запаздывания и выбора калибровки на значения сечений фотоионизации. Для  $LiI$  значения  $\sigma(0)$ , вычисленные с обменом и без обмена, отличаются на 36% и с ростом заряда ядра  $Z$  это отличие уменьшается (начиная с  $S^{13+}$  примерно как  $Z^{-1}$ ) и для  $Yb^{67+}$  составляет только 0.2%. Как  $Z^{-1}$  уменьшается и разность значений  $\sigma_L$  и  $\sigma_V$  (для  $LiI$  — 10%, для  $S^{13+}$  — 2%, а для  $Yb^{67+}$  — 0.4%). Роль запаздывания, напротив, растет пропорционально  $Z^2$ , составляя 0.06% для  $S^{13+}$  и 1.5% — для  $Yb^{67+}$ . Из этого следует, что для ионов с малой кратностью ионизации можно пренебречь запаздыванием, а для высокозарядных ионов — обменом и проблемой выбора калибровки. Роль обмена, конечно, будет больше для ионов других изоэлектронных последовательностей, имеющих большее число электронов.

Вычисленные значения сечений фотоионизации для основных состояний  $1s^2 2s_{1/2}$  литиеподобных ионов даны в табл. 2. Эти значения вычислены в калибровке «длины» с учетом запаздывания и обмена и приводятся в килобарнах ( $1 \text{ Кб} = 10^{-21} \text{ см}^2$ ). Нами были вычислены сечения фотоионизации только для

Таблица 2

Сечения фотоионизации для ионов изоэлектронной последовательности лития в килобарнах ( $10^{-21} \text{ см}^2$ )

$E$ , а. е.	$\sigma(E)$ , Кб						
	$S^{13+}$	$Ca^{17+}$	$Fe^{23+}$	$Zn^{27+}$	$Zr^{37+}$	$Sn^{47+}$	$Yb^{67}$
0.0	69.1	42.4	24.1	17.7	9.46	5.79	2.64
2.5	57.6	37.9	22.5	16.8	9.22	5.70	2.62
5.0	48.6	34.0	21.1	16.0	8.98	5.61	2.60
12.5	31.0	25.1	17.6	14.0	8.31	5.34	2.54
25.0	16.9	16.3	13.3	11.3	7.35	4.94	2.44
37.5	10.3	11.2	10.4	9.25	6.53	4.58	2.35
50.0	6.77	8.09	8.24	7.70	5.84	4.25	2.27
75.0	3.42	4.65	5.49	5.52	4.72	3.69	2.11
100.0	1.98	2.93	3.86	4.10	3.88	3.22	1.97

2s-подоболочки, так как в рассматриваемом интервале энергии (кроме  $Si^{13+}$ ,  $E > 90$ ) они совпадают с полными сечениями (1s-подоболочка не ионизируется).

Для всех ионов  $\sigma(E)$  с ростом  $E$  убывает, притом тем быстрее, чем меньше кратность ионизации. Пороговые значения  $\sigma(0)$  вдоль изоэлектронной последовательности изменяются примерно как  $Z^{-2}$ . Это можно использовать для интерполяции по  $Z$ .

Сравнение с нерелятивистским расчетом [3] показывает, что релятивистские эффекты для  $Z \leq 30$  невелики.

При составлении программы для вычисления сечений фотоионизации использовалась система макрокоманд для релятивистских расчетов атомных структур [13]. Автор выражает благодарность А. С. Корхонен за проведенные по программе [9] вычисления функций дискретного спектра. Автор благодарен также Э. М. Андерсону, Э. К. Андерсон, В. Ф. Трусову и М. О. Эглайсу за ценные советы.

### Литература

- [1] Y.-K. Kim, J. P. Desclaux. Phys. Rev. Lett., 36, 139, 1976.
- [2] I. Martin, G. Simons. J. Chem. Phys., 62, 4799, 1975.
- [3] R. F. Reilman, S. T. Manson. Astrophys. J., Suppl. Series, 40, 815, 1979.
- [4] T. E. H. Walker, J. T. Waber. J. Phys. B., 7, 674, 1974.
- [5] I. P. Grant. J. Phys. B, 7, 1458, 1974.
- [6] C. N. Yang. Phys. Rev., 74, 764, 1948.
- [7] J. Cooper, R. N. Zare. J. Chem. Phys., 48, 942, 1968.
- [8] W. Ong, S. T. Manson. Phys. Rev., A20, 2364, 1979.
- [9] М. О. Эглайс, Э. К. Андерсон, Э. М. Андерсон, В. Ф. Трусов. В сб.: Расчеты атомных и ядерных констант, вып. 3, 3. Учен. зап. ЛГУ им. П. Стучки, т. 243, Рига, 1975.
- [10] В. А. Зилитис, В. Ф. Трусов, М. О. Эглайс. Изв. АН СССР, сер. физ., 45, 690, 1981.
- [11] В. А. Зилитис. В сб.: Расчеты атомных и ядерных констант, вып. 3, 121. Учен. зап. ЛГУ им. П. Стучки, 243, Рига, 1975.
- [12] В. А. Зилитис. Опт. и спектр., 50, 419, 1981.
- [13] М. О. Эглайс. В сб.: Теория атомов и атомных спектров, II, стр. 110, ЛГУ, Рига, 1974.

Поступило в Редакцию 1 июня 1981 г.

УДК 539.194.01

## ПРИМЕНЕНИЕ МОДИФИЦИРОВАННОГО АДИАБАТИЧЕСКОГО ПРИБЛИЖЕНИЯ К МЕЗОМОЛЕКУЛАМ $pp\mu$ , $dd\mu$ , $tt\mu$

М. Н. Адамов и А. В. Филинский

Для уточнения расчетов спектров атомов и молекул было предложено [1] модифицированное адиабатическое приближение (МАП), предполагающее возможность не вполне жесткой связи между состояниями быстрой подсистемы и мгновенной конфигурацией медленной подсистемы.

Рассмотрим квантовомеханическую систему, состоящую из «медленной» и «быстрой» подсистем, которые описываются соответственно совокупностями координат  $x$  и  $y$ . Гамильтониан системы имеет вид

$$H = H_0 + T_x + G(x), \quad (1)$$

$$H_0 = T_y + g(y) + V(x, y), \quad (2)$$

здесь  $T_x$  и  $T_y$ ,  $G(x)$  и  $g(y)$  — операторы кинетической и потенциальной энергии подсистем,  $V(x, y)$  — оператор энергии взаимодействия подсистем.

Пусть

$$\psi(x, y) = \chi(x) \varphi(x, y), \quad (3)$$