

причем для извлечения корня из комплексного выражения в (7) берется значение, лежащее в нижней полуплоскости, а в (8) — в верхней. На рис. 1 приведено сравнение результатов экспериментального измерения и теоретического расчета энергетических зависимостей дифференциального сечения (по углу χ) возбуждения метастабильных состояний He ($2^3, 1S$), а на рис. 2 — сравнение экспериментальных и расчетных кривых дифференциальных сечений возбуждения. Кроме того, рис. 2 позволяет судить о точности различных расчетов сечений $d\sigma/d\chi$. В целом сравнение расчетных данных с экспериментальными показывает, что более правильный учет как геометрии эксперимента, так и немонокинетичности нейтрального пучка приводит к более хорошему согласию теории с экспериментом как в общем виде зависимостей дифференциальных сечений, так и в положении особенностей дифференциальных сечений по сравнению с данными [1-3].

Авторы признательны А. К. Казанскому, указавшему на необходимость пересмотра результатов [1, 3].

Литература

- [1] Фабрикант И. И., Шпенник О. Б., Завилопуло А. Н., Снегурский А. В. — *Опт. и спектр.*, 1983, т. 55, в. 4, с. 625.
- [2] Фабрикант И. И., Шпенник О. Б., Снегурский А. В., Завилопуло А. Н. — *Опт. и спектр.*, 1984, т. 56, в. 1, с. 743.
- [3] Shpenik O. B., Zavilopulo A. N., Snegursky A. V., Fabrikant I. I. — *J. Phys. B*, 1984, v. 17, p. 887.
- [4] Helbing R. K. — *J. Chem. Phys.*, 1968, v. 48, p. 472.
- [5] Bhadra K., Callaway J., Henry R. J. W. — *Phys. Rev.*, 1979, v. A29, p. 1841.
- [6] Fon W. C., Berrington K. A., Burke P. G., Kingston A. E. — *J. Phys. B*, 1979, v. 12, p. 1861.
- [7] Fon W. C., Berrington K. A., Kingston A. E. — *J. Phys. B*, 1980, v. 31, p. 2309.
- [8] Fon W. C., Berrington K. A., Burke P. G., Kingston A. E. — *J. Phys. B*, 1978, v. 11, p. 325.
- [9] Fon W. C., Berrington K. A., Burke P. G., Kingston A. E. — *J. Phys. B*, 1981, v. 14, p. 2921.

Поступило в Редакцию 7 апреля 1986 г.

ВЕРОЯТНОСТЬ АВТОИОНИЗАЦИИ АТОМОВ

Грейсер А. И., Павлов А. Н.

Вероятность автоионизации атомов рассчитывается по известной формуле нестационарной теории возмущений

$$W = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \Psi_f^{(0)} | \hat{V} | \Psi^+ \rangle|^2. \quad (1)$$

Формула (1) предполагает выполнение следующих условий: во-первых, невозмущенная волновая функция $\Psi_f^{(0)}$ и точная волновая функция Ψ^+ удовлетворяют уравнениям

$$\hat{H}_0 \Psi_f^{(0)} = E \Psi_f^{(0)}, \quad \hat{H} \Psi^+ = E \Psi^+, \quad (2)$$

где $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$ — полный гамильтониан. Во-вторых, асимптотика $\Psi_f^{(0)}$ должна быть адекватной реальной ситуации в конечном состоянии [1], что в свою очередь ограничивает возможности разбиения гамильтониана \hat{H} на нулевой гамильтониан \hat{H}_0 и на возмущение \hat{V} требованием, чтобы \hat{H}_0 обеспечивал асимптотически правильное поведение $\Psi_f^{(0)}$ на бесконечности, а потенциал \hat{V} был локальным.

При практических расчетах Оже-процесса, как правило, в качестве возмущения берут межэлектронное взаимодействие r_{ij}^{-1} , а волновую функцию $\Psi_f^{(0)}$ подбирают таким образом, чтобы она или как можно полнее учитывала это взаимодействие (в классической работе [2], например, для гелия в качестве $\Psi_f^{(0)}$ берется хартри-фоковская волновая функция конечного состояния), или в конечном состоянии вообще не учитывается взаимодействие r_{ij}^{-1} . В первом случае нарушается требование, чтобы $\Psi_f^{(0)}$ удовлетворяла гамильтониану $\hat{H}_0 = \hat{H} - \hat{V}$, а во втором — требование точной асимптотики у $\Psi_f^{(0)}$.

В настоящей работе на примере атомов He, Li, Be оцениваются возникающие при этом погрешности. Как показано в [1], формулой для вероятности автоионизации, свободной от указанных неточностей, является

$$W = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \left\langle \Psi_f^{(0)} \left| \sum_{i=1}^{N-1} \left(\frac{1}{r_{iN}} - \frac{1}{r_N} \right) \right| \Psi^+ \right\rangle \right|^2, \quad (3)$$

где $\Psi_f^{(0)} = \psi_{sl}(r_N) \psi_f(r_1, r_2, \dots, r_{N-1})$, ψ_f — симметризованная функция атома (или иона) в конечном состоянии, а ψ_{sl} — волновая функция непрерывного спектра для электрона в экранированном кулоновском поле ядра с эффективным зарядом $Z_0 = Z - (N - 1)$, N — общее число электронов в начальном состоянии. Ψ^+ определяется интегральным уравнением для квазистационарного состояния [3].

Атом, состояние	Данные настоящей работы			Данные [4]	
	W_e', c^{-1}	W_e, c^{-1}	E, Ry	W_e, c^{-1}	E, Ry
He $(2s^2)1S$	$9.16 \cdot 10^{13}$	$7.31 \cdot 10^{13}$	-1.439	$3.51 \cdot 10^{14}$	-1.544
Li $(1s2s^2)2S$	$1.41 \cdot 10^{13}$	$6.01 \cdot 10^{13}$	-10.701	$8.03 \cdot 10^{14}$	-10.692
Be ⁺ $(1s2s^2)2S$	$3.10 \cdot 10^{13}$	$9.20 \cdot 10^{13}$	-22.372	—	—

В третьем столбце таблицы сведены результаты расчетов по формуле (3). В качестве Ψ^+ бралась хартри-фоковская волновая функция для конфигурации начального состояния атома. Во втором столбце таблицы приведены значения вероятности (скорости распада), рассчитанные по формуле с возмущением в виде нелокального потенциала $\sum_{i=1}^{N-1} 1/r_{iN}$ и с теми же, что и в [3], волновыми функциями. В пятом и шестом столбцах — данные работы [4], в которой брались параметрические волновые функции и расчет вероятности проводился «традиционным» образом.

Сравнение величин во втором и третьем столбцах таблицы показывает, что уточнение формулы для расчета вероятности автоионизации весьма существенно по крайней мере для легчайших атомов. Сравнение величин из второго столбца с приведенными в пятом столбце указывает на сильную зависимость расчетных значений от вида используемой волновой функции. Так, расчет по формуле (3) вероятности автоионизации Be⁺ с использованием кулоновских волновых функций, взятых в поле ядра с эффективным зарядом, дает $W_e = 1.73 \cdot 10^{11} \text{c}^{-1}$ [5], что значительно отличается от рассчитанного с хартри-фоковскими волновыми функциями.

Литература

- [1] Грейсер А. И. — Изв. вузов СССР. Физика, 1974, № 1, с. 130.
- [2] Та You Wu. — Phys. Rev., 1944, v. 66, p. 291.
- [3] Грейсер А. И. — Изв. вузов СССР. Физика, 1976, № 1, с. 152.
- [4] Процин Р. X. — Опт. и спектр., 1960, т. 8, в. 3, с. 300.
- [5] Грейсер А. И. — Опт. и спектр., 1984, т. 56, в. 4, с. 754.

Поступило в Редакцию 21 апреля 1986 г.