

РЕЗОНАНСЫ В СЕЧЕНИИ ФОТООТРЫВА 2p ЭЛЕКТРОНОВ ОТ ОТРИЦАТЕЛЬНОГО ИОНА Na<sup>-</sup>.

Целью работы является теоретическое исследование околопороговых резонансов в сечении фотоотрыва внутренних электронов от отрицательных ионов (ОИ). Ряд недавних теоретических и экспериментальных работ (см. обзор [1]) показал, что поведение сечения фотоионизации в окрестности порогов внутренних оболочек ОИ существенно отличается от его поведения в нейтральных атомах ввиду сильного влияния многоэлектронных взаимодействий. Основное отличие связано с появлением околопороговых резонансов, которые отсутствуют в нейтральных атомах.

В представленной работе приводятся результаты конкретных *ab initio* вычислений сечения фотоотрыва 2p электронов от отрицательного иона Na<sup>-</sup> ( $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 \ ^1S$ ), для которого эксперимент обнаружил ряд резонансов в окрестности порога ионизации 2p оболочки [2]. Вычисления сечения фотоотрыва 2p электронов проведено как в одночастичном приближении Хартри-Фока, так и с последовательным учетом многоэлектронных корреляций в рамках методов квантовой теории многих тел. Решение этой задачи осуществлялось с помощью комплекса вычислительных программ теоретической группы кафедры экспериментальной физики СПбГПУ.

Основное внимание уделено описанию двух экспериментально наблюдаемых резонансов в сечении фотоотрыва: резонанса на пороге 2p оболочки (~ 31–32 эВ) и широкого резонанса сразу за порогом в области 34–36 эВ (см. рис. 1). Как показывают наши расчеты, первый резонанс связан с возбуждением квазистационарного дискретного состояния “2p<sup>5</sup>3s<sup>2</sup>4s”, лежащего сразу за порогом ионизации 2p оболочки. Второй резонанс определяется двухэлектронным процессом: фотоотрыв 2p электрона и одновременное возбуждение наружного 3s электрона на дискретное состояние 2p<sup>5</sup>3s<sup>1</sup>3pεр (ε — энергия фотоэлектрона в сплошном спектре). Показана определяющая роль многоэлектронных корреляций в формировании резонансов в сечении. В частности, помимо внутриканального и межканального взаимодействия электронов, учитываемого в приближении случайных фаз с обменом (ПСФО), наиболее существенным оказывается влияние динамического поляризационного и релаксационного взаимодействия со стороны остова на вылетающий фотоэлектрон.

Вычисления проводились в несколько этапов. На первом этапе определялись энергии и волновые функции основного и возбужденных состояний ОИ Na<sup>-</sup> в приближении Хартри-Фока (ХФ), и проводился расчет сечения фотоотрыва как в одночастичном ХФ приближении, так и в ПСФО. При вычислении в рамках «замороженного» остова и с учетом релаксации было получено общее поведение сечения фотоотрыва 2p электрона в зависимости от энергии фотона, в котором, однако, не проявлены ни околопороговый, ни последующий резонансы.

Для резонанса в окрестности 31–32 эВ был проведен анализ поведения фазы вылетающего электрона с учетом поляризационного взаимодействия электрона с остовом. Эти вычисления проводились путем решения уравнения Дайсона с потенциалом, определенным во втором порядке теории возмущений [3]. Было показано, что учет поляризационного взаимодействия для фотоэлектрона из 2p оболочки приводит к скачку фазы на π, что свидетельствует о появлении квазистационарного связанного состояния на пороге ионизации. Для учета поляризационного взаимодействия в уравнения ХФ для определения волновых функций фотоэлектрона был введен дополнительный статический потенциал, параметры которого подбирались таким образом, чтобы воспроизвести поведение

фазы электрона в околороговой области. С новыми волновыми «поляризационными» функциями вычислялось сечение фотоотрыва с учетом внутриоболочечного и межоболочечного взаимодействия и статической перестройки остова. Результаты в околороговой области показывают резонансное поведение сечения и удовлетворительно согласуются с имеющимися экспериментальными данными [1] (рис. 1).

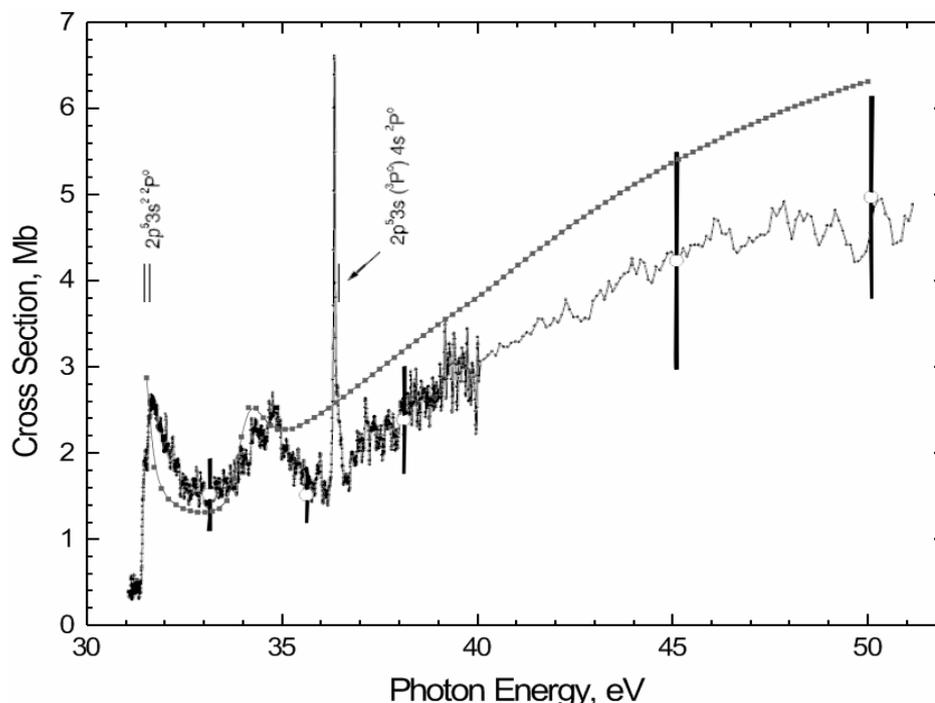


Рис. 1. Расчетное и экспериментальное сечение фотоионизации 2p оболочки иона  $\text{Na}^+$  в области энергий фотона 30–50 эВ

Для описания резонанса в области 34–36 эВ помимо вышеназванных эффектов при фотоотрыве 2p электрона необходимо учитывать возбуждение наружного 3s электрона на дискретное состояние. Оказалось, что за его формирование ответственно состояние остова с конфигурацией  $2p^5 3s^1 3p$ . В работе рассчитывались амплитуды фотоионизации с возбуждением второго электрона в дискретное состояние по теории возмущений. Однако, без учета поляризационного взаимодействия сечение фотоотрыва 2p электрона имеет вид ступеньки, как при открытии нового канала. Аналогичные результаты были получены ранее при фотоотрыве 1s электронов от ОИ лития [1]. Только учет влияния динамического поляризационного взаимодействия остова на вылетающий электрон формирует резонансное поведение сечения фотоотрыва в окрестности 34–36 эВ и удовлетворительно описывает экспериментальное поведение сечения.

#### ЛИТЕРАТУРА:

1. V.K.Ivanov. Radiation Physics and Chemistry, 2004. V. 70 (1-3), pp. 345-370.
2. Covington A.M.; Aguilar A.; Davis V.T.; Alvarez I.; Bryant H.C.; Cisneros, C., Halka, M., Hanstorp, D., Hinojosa, G., Schlachter, A.S., Thompson, J.S., Pegg, D.J. J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 2002. 34 №22, L735-L740.
3. V.K.Ivanov, G.Yu.Kashenock, G.F.Gribakin, A.A.Gribakina. J.Phys.B: At.Mol.Opt.Phys. **29** (1996) 2669-2687.