

На правах рукописи

Лапкин Константин Владимирович

**ПОРОГОВЫЕ РЕЗОНАНСНЫЕ ЭФФЕКТЫ В ФОТОПОГЛОЩЕНИИ
ГЛУБОКИХ ОБОЛОЧЕК ОТРИЦАТЕЛЬНО ЗАРЯЖЕННЫХ
ЦЕНТРОВ**

Специальность 01.04.07 - физика конденсированного состояния

**АВТОРЕФЕРАТ диссертации на соискание ученой степени кандидата
физико-математических наук**

Санкт-Петербург - 2004

Работа выполнена в ГОУ ВПО “Санкт-Петербургский государственный
политехнический университет”

Научный руководитель:

доктор физико-математических наук,
профессор Иванов Вадим Константинович

Официальные оппоненты:

доктор физико-математических наук,
профессор Черепков Николай Алексеевич

доктор физико-математических наук,
старший научный сотрудник Шагинян Василий Робертович

Ведущая организация:

Санкт-Петербургский Государственный Университет

Защита состоится 17 ноября 2004 года в 16 часов 00 минут на заседании
диссертационного совета Д 212.229.05 при ГОУ ВПО “Санкт-Петербургский
государственный политехнический университет” по адресу:
195251, Санкт-Петербург, Политехническая ул. 29, кор. 2, ауд. 265.

С диссертацией можно ознакомиться в фундаментальной библиотеке ГОУ ВПО
“Санкт-Петербургский государственный политехнический университет”.

Автореферат разослан __ октября 2004 г.

Ученый секретарь

диссертационного совета Д 212.229.05
доктор физико-математических наук
профессор



Ю.Ф. Титовец

Актуальность работы

Исследования электронной структуры и спектральных характеристик атомов, ионов и молекул, находящихся как в свободном состоянии, так и в среде, имеют длительную историю, которая началась практически с момента появления квантовой механики. Однако в настоящее время большой интерес, как с фундаментальной, так и с практической точки зрения представляет изучение свойств различных центров и наноструктур в твердых телах, созданных при различных видах воздействия: легировании (введении легирующих примесей, путем тепловой диффузии, ионной имплантации или эпитаксии), облучении потоками частиц (электронами, нелегирующими ионами и другими). При этом часто происходит изменение зарядового состояния атомных и молекулярных центров. Появление различных заряженных центров приводит к существенному изменению электронной структуры окружения и, как следствие, к изменению основных характеристик фотопоглощения. Кроме того, в физике конденсированного состояния положительно и отрицательно заряженные центры играют очень важную роль в фотопроводимости.

Одним из фундаментальных процессов, изучение спектральных характеристик которого представляет собой важную научную задачу, является фотоэффект. Фотоны весьма слабо взаимодействуют с мишенью, не изменяя её основного и возбужденного состояний. Поглощение фотона приводит лишь к переходам между ними, а его энергия определяет, в какое именно из состояний может быть совершен переход из начального состояния вследствие поглощения фотона. Этим процесс фотопоглощения как источник информации о структуре мишени выгодно отличается от других процессов, таких как рассеяние (упругое и неупругое) электронов, протонов или других частиц, где налетающая частица заметно деформирует мишень. Благодаря локализованному характеру фотовозбуждения основных, в особенности глубоких, энергетических уровней можно выделить квазимолекулярные и квазиатомные особенности в спектрах фотопоглощения твердых тел, что существенно расширяет объем информации, извлекаемой из экспериментальных данных [1,2].

Обычно процесс взаимодействия квантов большой энергии с отдельными атомами твердых тел, когда фотопоглощение происходит на электронах внутренних оболочек, вполне адекватно может быть описан в рамках квазиатомной модели или даже модели свободного атома. Причем особенности в сечениях ионизации центров в среде и их отличия от атомных сечений в основном возникают при описании конечного состояния, когда фотоэлектрон движется в периодической структуре твердого тела. Эти процессы в нейтральных и положительно заряженных центрах многие годы привлекали внимание физиков и широко обсуждались в научной литературе [1,3].

Однако фотопоглощение квантов больших энергий отрицательно заряженными центрами было изучено существенно меньше, что прежде всего связано с большей ролью многоэлектронных эффектов в этих процессах по сравнению с нейтральными атомами. Причем роль многоэлектронных корреляций в них часто оказывается значительно большей, чем влияние окружения этих центров. Поэтому первым шагом к исследованию фотопоглощения отрицательных центров при энергиях фотонов, близких к порогам ионизации внутренних оболочек, является исследование с наиболее полным учетом многоэлектронных корреляций изолированных отрицательных ионов (ОИ), волновая функция конечного состояния которых еще не подвержена изменению за счет окружения. Кроме того, ОИ привлекают внимание как теоретиков, так и экспериментаторов сами по себе – они вовлечены во многие процессы в земной атмосфере, с их участием происходит электрический разряд и явление пробоя в электроотрицательных газах. Практически ОИ применяются в тандемных и циклических ускорителях заряженных частиц. С точки зрения теории структурные особенности и динамика процессов с участием этих частиц представляют прекрасный тест для различных теоретических подходов [4], рассматривающих многочастичные эффекты.

До настоящего времени экспериментально исследовались только процессы фотопоглощения внешних оболочек ОИ. Это было связано с невозможностью получить достаточно высокую концентрацию ионов в пучке для экспериментального исследования. Теоретические расчеты также в основном касались фотоотрыва электронов от наружных оболочек ОИ. Только в середине 90-х годов появилось несколько теоретических работ, где были получены особенности на порогах внутренних оболочек ряда ОИ [4,5]. Значительный прогресс, достигнутый в синхротронной технике в последние годы, сделал возможным изучение спектральных и угловых характеристик глубоких оболочек многоэлектронных систем (МС). Полученные экспериментальные данные свидетельствуют, что полное и дифференциальное фотопоглощение очень чувствительно к электронной структуре исследуемого объекта в области энергий $E \leq 100 \text{ эВ}$.

Таким образом, разработка подхода, позволяющего адекватно описывать вклад квазиатомных особенностей, в особенности многоэлектронного взаимодействия, в амплитуды фотопоглощения глубокими оболочками различных заряженных центров в твердом теле, является актуальной задачей.

Настоящая работа посвящена теоретическому исследованию процессов фотоотрыва электронов от внутренних оболочек в окрестности порогов внутренних оболочек и роли многоэлектронных эффектов в описании резонансного поведения сечений фотопоглощения. В качестве основного объекта для рассмотрения выбираются отрицательные ионы с

заполненными и полузаполненными внешними оболочками Li^- , C^- , Si^- , Sn^- . Исследуются различные многоэлектронные процессы, происходящие при взаимодействии внешнего ВУФ излучения с ОИ, такие как внутрисканальное и межканальное взаимодействие, интерференционные, поляризационные и релаксационные эффекты. Основное внимание уделяется околопороговым резонансам в полных и парциальных сечениях фотоотрыва электронов вблизи порогов ионизации внутренних и промежуточных оболочек. Как правило, появление этих резонансов определяется квазистационарными состояниями вылетающего электрона в поляризационном поле атомного остатка. Однако в ряде ОИ, в частности ОИ лития, эти резонансы отсутствуют, поэтому задача состоит в определении физических причин их появления и отсутствия. Кроме того, значительная часть работы посвящена исследованию процесса фотопоглощения внутренними оболочками ОИ с одновременным возбуждением электронов наружной оболочки иона в дискретные состояния.

Цель работы заключается в исследовании роли различных многоэлектронных процессов при резонансном фотопоглощении в глубоких оболочках отрицательно заряженных центров и ОИ в области вакуумного ультрафиолета

Основные задачи работы

Выявление роли различных многоэлектронных эффектов: межоболочечного взаимодействия, статической перестройки, динамической поляризации в описании процессов фотоотрыва от глубоких оболочек отрицательно заряженных центров и ионов;

Теоретическое исследование резонансных особенностей процессов фотоотрыва электронов от глубоких оболочек отрицательных ионов;

Разработка квазиатомной теоретической модели, позволяющей учитывать многоэлектронные корреляции при исследовании фотопоглощения внутренних оболочек отрицательно заряженных МС;

Расчет сечений фотоотрыва от ОИ Li^- , C^- , Si^- , Sn^- в окрестности порогов ионизации глубоких и промежуточных оболочек;

Определение причин появления или отсутствия околопороговых резонансов в сечениях фотопоглощения в указанных ионах;

Разработка подхода, позволяющего в рамках теории многих тел (ТМТ) и многочастичной теории возмущений (МТВ) описать процесс фотоотрыва электрона от внутренней оболочки с одновременным возбуждением наружного электрона в дискретный спектр;

Расчет сечений фотопоглощения внутренними оболочками с возбуждением наружных электронов в дискретные состояния для ОИ Li^- ;

Научная новизна работы

Разработана эффективная теоретическая модель, позволяющая определять сечение фотопоглощения с учетом многоэлектронных корреляций: влияния поляризации на электроны в основном состоянии и на вылетающий электрон, статической перестройки электронных оболочек в результате фотопоглощения, эффектов межоболочечного (межканального) взаимодействия.

В рамках разработанной модели получены впервые:

(а) сечения фотоотрыва электронов из промежуточной $4d$ оболочки тяжелого ОИ Sn^- ,

(б) сечения фотопоглощения внутренней $2p$ оболочки иона Si^- ,

(в) сечения фотоотрыва электронов из внутренних $1s$ оболочек для ионов Li^- и C^- . Для последних ионов получено хорошее согласие с экспериментальными данными.

Показано, что появление околопороговых резонансов связано с незаполненными оболочками в отрицательно заряженных центрах.

Разработано теоретическое описание процесса ионизации внутренней оболочки с одновременным возбуждением электрона наружной оболочки в рамках ТМТ и МТВ.

Получено сечение фотопоглощения с возбуждением для ОИ Li^- , удовлетворительно описывающие имеющиеся экспериментальные данные.

Научная и практическая ценность работы

Создана простая эффективная модель, позволяющая наглядно учитывать основные многочастичные эффекты при фотоотрыве электронов от глубоких оболочек отрицательно заряженных МС в рамках ТМТ и МТВ. Разработанная модель может быть применена для расчетов параметров фотопоглощения других ОИ и отрицательно заряженных центров в твердом теле. Полученные результаты дают хорошее качественное и количественное представление о роли и вкладе различных многоэлектронных эффектов в процессы фотоотрыва электронов от глубоких оболочек ОИ. Сравнение получаемых результатов для изолированных ОИ с поглощением фотонов отрицательно заряженными центрами в твердом теле позволит выделить эффекты, связанные с влиянием окружения этих центров на амплитуду фотопоглощения. Разработанный метод описания фотопоглощения с возбуждением наружных электронов также может быть использован для расчета более сложных многоэлектронных систем как в физике атома, так и в физике твердого тела.

Положения, выносимые на защиту

1. Квазиатомная модель, позволяющая учитывать влияние динамической поляризации на вылетающий электрон путем введения параметрического поляризационного потенциала одновременно с интерференционными и релаксационными эффектами, описывает поведение сечения фотоотрыва электронов от отрицательно заряженных центров в окрестности порогов глубоких оболочек.

2. Перестройка электронных оболочек заряженных центров оказывает решающее влияние на поведение сечений фотоотрыва в окрестности порогов глубоких и промежуточных оболочек.

3. Поляризационное взаимодействие между фотоэлектроном и нейтральным остовом ответственно за формирование околопороговых резонансов в квазиатомных системах с открытой наружной оболочкой. В системах с замкнутой наружной оболочкой околопороговый резонанс, как правило, не проявляется.

4. Величины резонансных сечений фотоотрыва электронов от внутренних оболочек с возбуждением наружных электронов в дискретные состояния нейтрального атома существенно превышают аналогичные сечения в нейтральных атомах.

Апробация работы

Результаты, изложенные в диссертации, докладывались и обсуждались на следующих конференциях:

4,6,7 и 8-й международных конференциях по неразрушающим методам и компьютерному моделированию в науке и технике (International Workshop on New Approaches to Hi-Tech: Nondestructive Testing and Computer Simulations in Science and Engineering, NDTCS, Санкт-Петербург, 2000, 2002, 2003, 2004), 13-й международной конференции по физике вакуумного ультрафиолета (International Conference on Vacuum Ultraviolet Radiation Physics, VUV-2001, Trieste, Italy, 2001), 5-й Всероссийской конференции по проблемам науки и высшей школы. Фундаментальные Исследования в Технических Университетах (Санкт-Петербург, 2001), 34-й международной конференции Европейской группы по атомной спектроскопии (European Group on Atomic Spectroscopy Conference, EGAS, Sofia, Bulgaria, 2002), международных конференциях по фотопоглощению (International Workshop on Photoionization, IWP)(Carrily-le-Rouet, France, 2000; Spring-8, Hyogo, Japan, 2002), 22-й и 23-й международных конференциях по физике электронных и атомных столкновений (International Conference on Photonic, Electronic and Atomic Collisions, ICPEAC, Santa-Fe, New Mexico, USA, 2001; Stockholm, Sweden, 2003), 8-ой Европейской конференции по атомной и

молекулярной физике (The eighth European Conference on Atomic and Molecular Physics” - ECAMP-8, Rennes, France, 6-10 July 2004).

Результаты докладывались на научных семинарах Физико-Технического института им. А.Ф. Иоффе РАН (Санкт-Петербург), Санкт-Петербургского Государственного Политехнического университета, Санкт-Петербургского Государственного университета, неделе науки СПбГПУ.

Публикации: основные результаты диссертации опубликованы в 6 научных работах, список которых приведен в конце автореферата.

Объем и структура диссертации. Диссертация состоит из введения, пяти глав, заключения и списка цитируемой литературы. Общий объем диссертации составляет 103 страницы, включая 29 рисунков, список литературы насчитывает 131 наименование.

Основное содержание работы

Во введении формулируются цели диссертации, и обосновывается актуальность исследования фотопоглощения глубоких оболочек отрицательно заряженных ионов и центров в твердом теле, объясняется научная новизна и практическая ценность работы, дается краткое содержание диссертации.

Первая глава носит обзорный характер. Она содержит обзор современной литературы по теме диссертационной работы. Кроме этого, в первой главе описываются основные механизмы образования отрицательных ионов, дается краткое описание современных экспериментальных методик и основных теоретических подходов, используемых в настоящее время.

Во второй главе кратко описываются основные теоретические подходы, используемые в данной работе. Описывается нулевое приближение – приближение Хартри-Фока (ХФ), внутри- и межоболочечные корреляции в рамках Приближения Случайных Фаз с Обменом (ПСФО). Кроме того, во второй главе содержится классификация основных многоэлектронных поправок, выходящих за рамки ПСФО, которые необходимо учитывать для корректного описания процесса фотоотрыва от глубоких и промежуточных оболочек. Описаны эффекты статической и динамической поляризации, которые учитывают тот факт, что фотозлектрон, дополнительный по отношению к нейтральному атому, при движении существенно деформирует нейтральный остов. Это влияние может быть учтено статически, путем введения модельного потенциала:

$$V(r) = -\frac{\alpha}{r^4} \left[1 - \exp \left(-\left(\frac{r}{r_c} \right)^6 \right) \right] \quad (1)$$

где r_c – параметр, определяющий дальность действия потенциала, α – дипольная поляризуемость остова. Статического подхода часто бывает достаточно для описания фотопоглощения глубоких оболочек. С другой стороны, эффекты поляризации могут быть учтены путем введения динамического нелокального поляризационного потенциала, учитывающего обмен, который в рамках ТМТ может быть записан как неприводимая собственно-энергетическая часть одночастичной функции Грина $\sum(r, r')$, которая вычисляется *ab initio*, с точностью до второго порядка МТВ.

В данной работе учитывалось влияние поляризационного потенциала на фазу вылетающего электрона. С учетом собственно-энергетической части поправка к фазе, вычисленной в приближении ХФ выглядит следующим образом:

$$\text{tg}\Delta\delta_l(E) = -\pi \langle El | \bar{\Sigma} | El \rangle \quad (2)$$

где $\bar{\Sigma}$ – приводимая собственно-энергетическая часть, которая является решением уравнения:

$$\langle El | \bar{\Sigma} | El \rangle = \langle El | \sum(r, r') | El \rangle + \int \langle El | \sum(r, r') | El \rangle \langle E'' | \bar{\Sigma} | E'' \rangle \frac{dE''}{\omega - E''} \quad (3)$$

где E – энергия электрона, l – орбитальный момент электрона, ω – частота фотона. Учет поляризационных поправок возможен как для вылетающего фотоэлектрона, так и для основного состояния рассматриваемого иона.

Рассматривается также эффект статической релаксации, который, как показали расчеты проведенные в последние годы, вносит определяющий вклад в поведение полных и парциальных сечений фотоотрыва от глубоких и промежуточных оболочек. Релаксация, или перестройка, – сложный динамический процесс, отражающий реакцию атомных электронов на появление вакансии в одной из оболочек. Из качественных соображений ясно, что влияние перестройки атома наиболее велико вблизи порога внутренней оболочки. В самом деле, за время, в течение которого медленный фотоэлектрон покидает атом, остальные электроны успевают "почувствовать" и "подстроиться" под изменение поля, вызванное рождением вакансии. Для медленных электронов можно ограничиться приближением, когда влиянием распада вакансии на процесс фотопоглощения можно пренебречь, а движение фотоэлектрона с момента его рождения можно рассматривать в статическом самосогласованном поле уже полностью перестроенного атомного остатка с дыркой в nl -оболочке. Такое приближение называется приближением "статической" перестройки. В данной работе статическая перестройка учтена в рамках так называемого обобщенного ПСФО (ОПСФО) [4,5]. Этот метод сводится к следующему. Во-первых, энергии дырочных состояний заменяются их более точными вычисленными или даже экспериментальными

значениями. Учет образования вакансии модифицирует уравнение, которое определяет волновую функцию возбужденного или вылетающего в результате ионизации электрона: из суммы по всем атомным электронам удаляется один член, представляющий вылетевший электрон. Результаты ОПСФО заметно отличаются от результатов ПСФО вблизи порогов промежуточных и глубоких оболочек, в особенности, если сечение ионизации данной оболочки сосредоточено в основном вблизи ее порога.

Третья глава посвящена изучению фотопоглощения промежуточной $4d$ оболочки тяжелого отрицательного иона Sn^- . Получены сечения фотоотрыва от этой оболочки в рамках приближений ХФ и ПСФО с учетом и без учета статической релаксации. Из основных результатов главы можно выделить следующие: в парциальном сечении фотоперехода $4d \rightarrow \epsilon f$ обнаружен гигантский резонанс, который предполагалось обнаружить на основе анализа результатов фотопоглощения на более легких отрицательных ионах Sr^- и Ge^- . Эти переходы дают основной вклад в сечение в области энергий выше 40 эВ. Максимум этих сечений не превышает 15 Мбарн, максимум в полном сечении, представленном на рисунке 1, меньше 25 Мбарн.

В то же время, парциальные сечения $4d\downarrow \rightarrow \epsilon p\downarrow$ и $4d\uparrow \rightarrow \epsilon p\uparrow$ фотопереходов в рамках ПСФО демонстрируют абсолютно аномальное поведение: наблюдается сильный максимум в сечении $4d\uparrow \rightarrow \epsilon p\uparrow$ переход (пик при 30 эВ на рисунке 1) и отсутствует ожидаемый резонанс в сечении $4d\downarrow \rightarrow \epsilon p\downarrow$ перехода. Учет статической релаксации в рамках подхода ОПСФО приводит к кардинальным изменениям в поведении сечений этих переходов: вместо очень

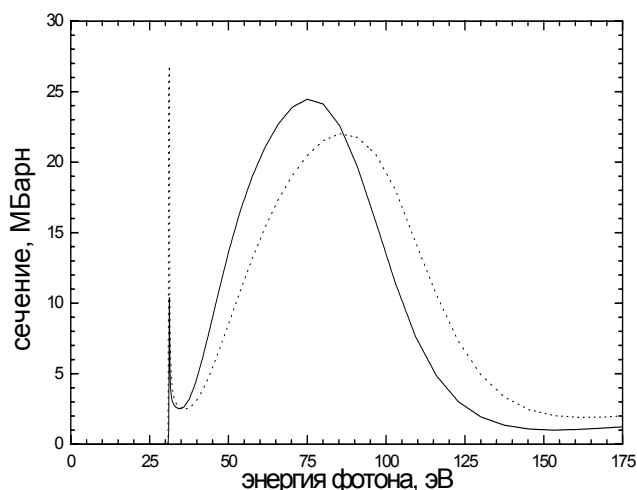


Рис.1. Полное сечение фотоотрыва от $4d$ оболочки иона Sn^- в рамках ПСФО (сплошная линия) и ОПСФО (пунктирная линия)

гладкого $4d\downarrow \rightarrow \epsilon p\downarrow$ сечения был получен узкий резонанс с шириной порядка 0.5 эВ и максимальным значением порядка 40 Мбарн (рисунок 1). Учет перестройки для $4d\uparrow \rightarrow \epsilon p\uparrow$ перехода приводит к исчезновению резонанса в парциальном сечении и вклад этого перехода в полное сечение становится очень слабым. Таким образом, показано, что роль статической релаксации при рассмотрении фотоотрыва от промежуточных оболочек является определяющей.

В четвертой главе рассмотрены пороговые эффекты, возникающие при фотопоглощении глубоких оболочек отрицательных ионов с заполненной и полузаполненной наружной оболочкой: Li^- , C^- , Si^- , Sn^- . В главе описан разработанный модельный подход, позволяющий адекватно учитывать вклад различных многоэлектронных поправок одновременно: динамической поляризации остова вылетающим электроном в сечение фотоотрыва, интерференционных и релаксационных эффектов. В рамках предложенной модели мы предполагаем, что основную информацию, позволяющую судить о поведении сечения фотоотрыва в окрестности порога фотопоглощения внутренней оболочки, несет в себе фаза вылетающего электрона. Анализируя вид фазы электрона можно судить как о наличии резонансов в сечении фотопоглощения, так и об их форме (ширине и амплитуде). Так, например, скачок фазы более чем на π свидетельствует, в соответствии с теоремой Левинсона, об образовании нового дискретного состояния, а существенный рост фазы говорит о формировании резонанса в сечении, причем по ширине фронта роста фазы можно судить о ширине резонанса в сечении. В этой работе вычисления проводились с точным учетом собственно-энергетической части одночастичной функции Грина. Фаза вылетающего электрона вычислялась в рамках приближения ХФ, поправка, учитывающая динамическую поляризацию, – по формуле (2), с точным учетом собственно-энергетической части.

Затем фаза электрона вычислялась в рамках приближения ХФ с дополнительным статическим поляризационным потенциалом (1). Далее, сравнивая поведение фаз, полученных с точным и приближенным учетом поляризации, подбирались параметры α и r_c . Дипольная поляризуемость α бралась близкой к табличному значению поляризуемости для нейтрального атома, соответствующего рассчитываемому ОИ. Основное внимание уделялось главным образом корректному описанию фронта роста фазы. Далее потенциал с подобранными параметрами подставлялся в уравнения ХФ. Полученные таким образом новые волновые функции основных и возбужденных состояний подставлялись в уравнения ПСФО и ОПСФО.

Преимущество выбранной модели в том, что она позволяет получать окончательное сечение фотопоглощения с учетом всех многоэлектронных поправок решая уравнения ПСФО (ОПСФО). В ПСФО справедливо правило сумм, а r - и ∇ -формы сечения совпадают. Таким образом, в ПСФО не встаёт вопрос внутренних теоретических противоречий. Совпадение r - и ∇ -формы сечения при численных расчётах служит доказательством аккуратности вычислений.

Первым объектом, к которому была применена разработанная модель, был ранее исследованный в главе 3 ион Sn^- . В рамках предложенной модели были вычислены фазы вылетающего электрона с точным учетом динамической поляризации и с модельным

потенциалом. Анализ поведения фаз дал следующие значения параметров потенциала (1): $\alpha = 4.5$, $r_c = 2.5$. Кроме поляризации была с самого начала учтена статическая релаксация. Были рассчитаны основные состояния иона в рамках приближения ХФ с вакансиями в

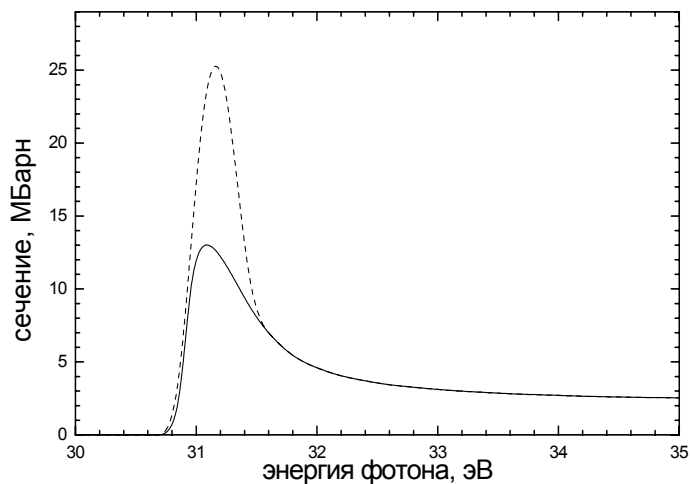
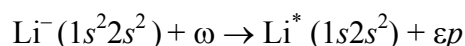


Рис.2. Полное сечение фотоотрыва от 4d оболочки иона Sn⁻ в рамках квазиатомной модели (сплошная линия) и ОПСФО (пунктирная линия)

квазиатомной модели приведено на рисунке 2. Видно, что резонанс на пороге сохраняется, но его амплитуда существенно уменьшается. Однако отсутствие экспериментальных данных для иона Sn⁻ не позволяет с уверенностью говорить о применимости предложенной модели.

В то же время, за последние годы был опубликован ряд как теоретических, так и экспериментальных работ, посвященных фотоотрыву от отрицательного иона лития, который и стал следующим объектом, выбранным нами для рассмотрения. Ранее, в работе [6] было предсказано наличие сильного резонанса, порядка 40 МБарн, сразу за порогом ионизации 1s оболочки Li⁻. Однако экспериментальные данные [7,8] не подтвердили столь необычного поведения сечения в окрестности порога ионизации. В настоящей работе исследовался следующий фотопереход:



При вычислении амплитуд и матричных элементов в качестве базисных используются ХФ волновые функции. Были получены следующие одноэлектронные ХФ энергии для основного состояния отрицательного иона лития : $E_{1s} = -63.21$ эВ, $E_{2s} = -0.40$ эВ. Однако эти энергии существенно отличаются от экспериментальных энергий связи [7,8]: $E_{\text{exp}1s} = -56.9$ эВ, $E_{\text{exp}2s} = -0.618$ эВ. Для того чтобы подправить энергии связи и соответствующие волновые функции основного состояния, был использован метод уравнения Дайсона (УД).

соответствующих оболочках (то есть основные состояния возбужденного нейтрального Sn). Потенциал (1) с выбранными параметрами подставлялся в уравнения ХФ, решая которые, были рассчитаны волновые функции возбужденных состояний соответствующие вылетающим электронам. На следующем этапе эти волновые функции были подставлены в уравнения ОПСФО. Сечение, полученное с одновременным учетом всех корреляций в рамках

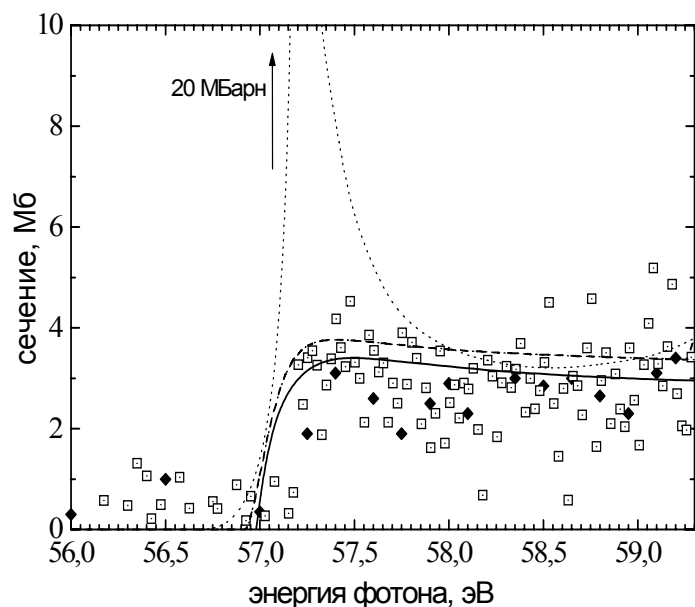


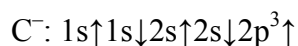
Рис. 3. Сечение фотопоглощения ОИ Li^- в окрестности порога $1s$ оболочки. Пунктирная линия – приближение R -матрицы [4], точки – эксперименты [4,5], штриховая линия – расчет ПСФО, сплошная кривая – квазиатомная модель

предсказанного в [6] аномального максимума на пороге, сечение фотоотрыва ведет себя самым типичным для ОИ образом: начинается с нуля, затем небольшой максимум около 4 МБарн, после чего сечение плавно спадает до нуля. Полученные в результате сечения приведены на рисунке 3 в сравнении с ПСФО расчетами и экспериментальными данными. Видно, что результат вычислений находится в хорошем согласии с экспериментом. Анализ полученных результатов позволяет говорить о применимости предложенного подхода и разработанной модели к расчетам фотопоглощения глубоких оболочек в ОИ, однако для получения точных результатов необходим одновременный учет влияния всех многоэлектронных эффектов на вылетающий электрон, в то время как влияние динамической поляризации на основное состояние существенным образом не сказывается на профиле сечения фотоотрыва в околороговой области.

Следующим объектом исследований был выбран ОИ C^- . Этот ОИ хорошо известен как экспериментаторам, так и теоретикам благодаря резонансным особенностям, проявляющимся при фотопоглощении наружных оболочек [9]. Ион C^- имеет 5 электронов на внешнем энергетическом уровне, и, в соответствие с правилом Хунда, три электрона, находящиеся на $2p$ уровне, имеют одинаковые проекции спина. Таким образом, благодаря

Полученные при помощи метода УД энергии значительно лучше согласуются с экспериментальными: $E_{D1s} = -57.5$ эВ, $E_{D2s} = -0.59$ эВ. На этом базисе функций были вычислены сечения фотоотрыва от $1s$ оболочки Li^- в рамках методов ХФ, ПСФО и в рамках квазиатомной модели. Модельный расчет дал следующие значения параметров потенциала: $\alpha = 165.5$, $r_c = 2.1$. Результаты расчетов приведены на рисунке 3. Надо заметить, что в сечениях не наблюдается

обменному взаимодействию каждая электронная оболочка иона C^- расщепляется на две подоболочки с противоположными проекциями спина и ион имеет структуру:



Это приводит к тому, что для расчетов сечений фотопоглощения этого иона необходимо применять спин-поляризованные версии приближений ХФ, ПСФО и ОПСФО.

Проведенные в [10] экспериментальное и теоретическое исследования фотоотрыва от внутренней $1s$ оболочки снова обнаружили довольно сильный резонанс в окрестности порога ионизации. Первый этап расчетов был проведен в рамках СП-ПСФО. На построенном базисе ХФ функций с учетом межоболочечных корреляций было получено сечение фотопоглощения в рамках СП-ПСФО в двух каналах. Результаты расчетов вновь, как и для иона лития, демонстрировали обычное для ОИ околопороговое поведение. Более того, максимум на пороге оказался даже более слабым, чем для иона Li^- .

Однако учет статической релаксации и поляризации в рамках разработанной модели привел к кардинальным качественным изменениям в сечении. Сравнение модельных расчетов и точного расчета фазы дало следующие параметры: $\alpha = 14.5$, $r_c = 2.5$ для поляризационного потенциала (1). В таком поле были рассчитаны волновые функции основных и возбужденных состояний. Полученные сечения с учетом всех многоэлектронных

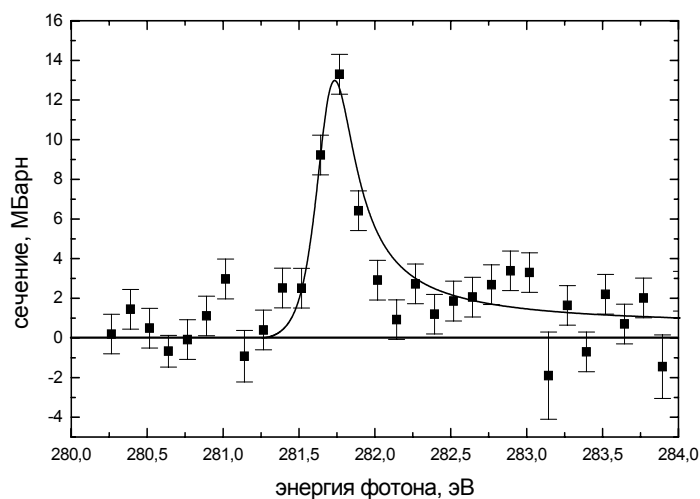


Рис. 4. Сечения фотопоглощения иона C^- в окрестности порога $1s$ оболочки. Точки – эксперимент [10], сплошная кривая – расчет в рамках квазиатомной модели

на пороге. Такое околопороговое поведение сечения иона C^- связано главным образом с образованием квазисвязанного состояния " $1s2s^22p^4$ ", аналогичного хорошо известному

поправок имеют вид, представленный на рисунке 4.

Обнаружено, что на пороге ионизации сечение фотоотрыва внутренних оболочек ОИ с полузаполненной оболочкой C^- ведет себя иным образом по сравнению с наружными оболочками ОИ и внутренними оболочками ионов с замкнутой конфигурацией (Li^-). Обнаружен существенно более высокий пик в сечении на пороге $1s$ оболочки C^- почти в 4 раза превышающий значение сечения $1s$ оболочки Li^-

состоянию " $1s^2 2s 2p^4$ " [11], наблюдающемуся при фотопоглощении наружной $2s$ оболочки. Полученный результат хорошо согласуется с данными относительного эксперимента.

Кроме того, в четвертой главе проведен расчет сечений фотопоглощения для ОИ Si^- в окрестности порога глубоких $2s$ и $2p$ оболочек. Расчет проведен в рамках предложенной и хорошо зарекомендовавшей себя для ионов Li^- , C^- и Sn^- модели, учитывающей поляризацию и релаксацию одновременно. Для этого иона были получены следующие параметры потенциала: $\alpha = 6.8$, $r_c = 2.3$

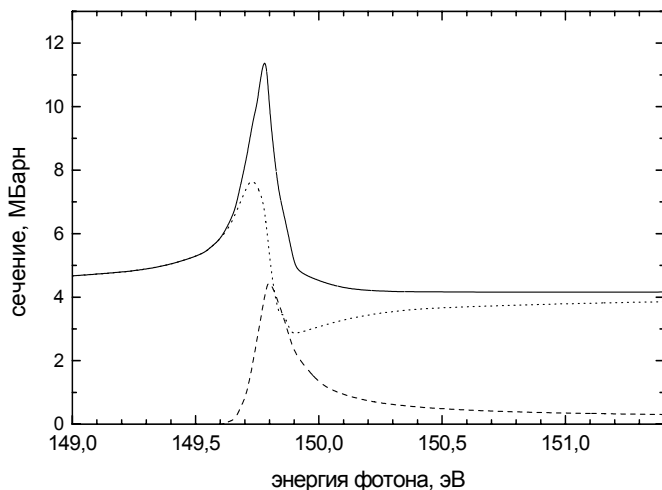
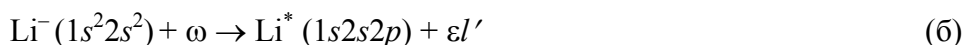


Рис. 5. Сечение фотопоглощения Si^- в окрестности порога $2s$ оболочки. Модельный расчет. Штриховая линия – парциальное сечение $2s$ оболочки, пунктирная линия – парциальное сечение $2p$ оболочки, сплошная линия – полное сечение

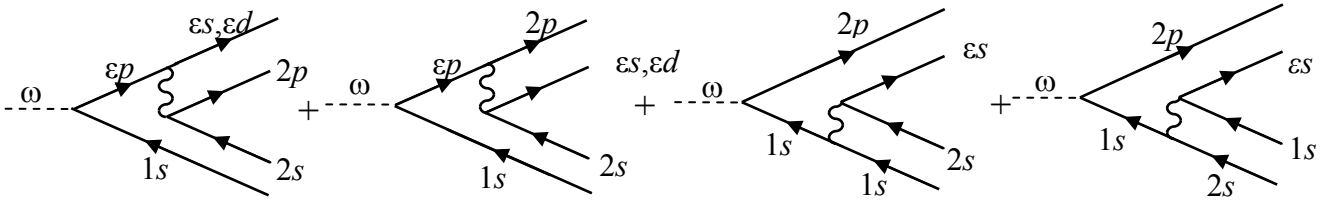
Результаты расчетов приведены на рисунке 5. Основной вклад в сечение фотопоглощения иона олова вносит интерференция между двумя исследуемыми каналами реакции: $2s \rightarrow \epsilon p$ и $2p \rightarrow \epsilon s(d)$ фотопереходами. Этот эффект проявляется в виде образования хорошо известной оконной структуры в парциальном сечении $2p$ перехода и в полном сечении.

В пятой главе исследуется роль явлений, связанных с возбуждением наружной электронной оболочки при отрыве электрона из внутренней оболочки ОИ. Процесс рассмотрен на примере иона Li^- . Рассматриваются следующие два канала реакции в дипольном приближении:



Первый фотопереход – прямое фотопоглощения $1s$ оболочки, описанное в четвертой главе, второй канал представляет собой процесс фотоотрыва от $1s$ оболочки с одновременным возбуждением наружного $2s$ электрона в дискретное состояние. Был разработан подход, в рамках ТМТ и МТВ позволяющий описывать этот процесс.

Для рассмотрения процесса фотоотрыва (б) с возбуждением $2s \rightarrow 2p$ учитывались следующие диаграммы теории возмущений:



На диаграмме пунктирная линия соответствует налетающему фотону, блок при вершине учитывает корреляции ПСФО для амплитуды фотоэффекта. Первые две амплитуды описывают процесс ионизации, при котором фотоэлектрон выбивает (возбуждает) второй электрон, другие две – процесс “встряски”[7,8].

Вычисление амплитуд проводилось с использованием Дайсоновских волновых функций для дырочных $1s$ и $2s$ состояний и с различным выбором волновых функций возбужденных состояний. Волновая функция электрона в возбужденном состоянии $2p$ не может быть получена в рамках приближения ХФ в замороженном остове Li^- . Поэтому $2p$ функция выбиралась из возбужденного состояния $1s2s2p$ нейтрального Li , вычисленного в самосогласованном приближении ХФ.

Волновые функции вылетающего ϵ_p электрона в промежуточном состоянии амплитуд были вычислены в рамках ХФ в двух случаях: в поле замороженного остова основного

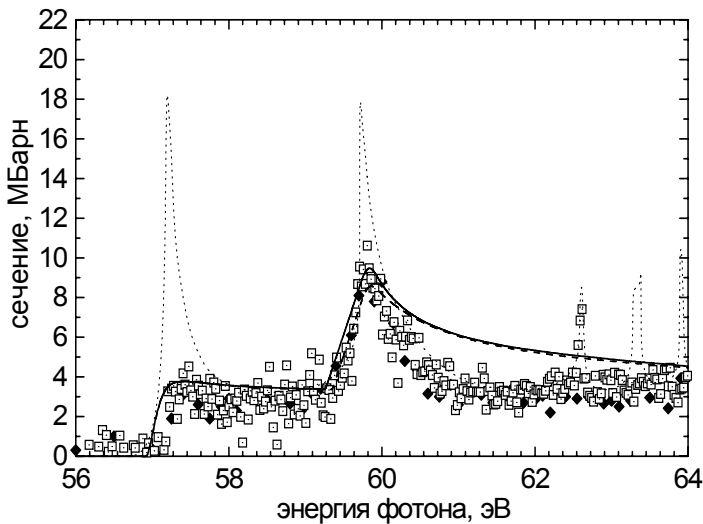


Рис. 6. Сечение фотоотрыва $1s$ оболочки Li^- . Точки – эксперимент [7,8]. Пунктирная линия – приближение R-матрицы [7], штриховая линия – квазиатомная модель, сплошная линия – квазиатомная модель + внешний электрон в перестроенном поле.

состояния Li с дыркой в $1s$ -оболочке (в поле Дайсоновского остова $1s2s^2$) и в поле полностью перестроенного $1s2s^2$ остова. В последнем случае вначале вычислялось самосогласованно в рамках ХФ возбужденное состояние $1s2s^2$, а затем в его поле находились ϵ_p функции.

Волновые функции конечных ϵ_s, ϵ_d состояний также определялись двумя способами. В первом случае ϵ_s, ϵ_d функции были получены в поле Дайсоновского замороженного остова с дыркой

в $1s$ оболочке. Другой подход заключался в рассмотрении этих волновых функций как

волновых функций внешнего электрона, движущегося в поле конечного состояния $1s2s2p$ – полностью перестроенного остова. Полное сечение фотопоглощения представляет собой сумму двух парциальных сечений прямого и резонансного возбуждения $1s$ оболочки.

Результаты вычислений полных сечений фотоотрыва $1s$ электронов с различными волновыми функциями ϵs , ϵp , ϵd электронов представлены на рисунке 6. Все вычисления демонстрируют резонансное поведение сечения при энергиях фотона, соответствующих открытию канала (б): $1s^2 2s^2 \rightarrow 1s 2s 2p \epsilon l$. Полученные нами сечения имеют в максимуме существенно меньшее значение, чем предсказано в работах [6,7] и численно лучше согласуются с экспериментом. Наилучшее согласие достигается при использовании волновых функций, полученных в рамках Дайсоновского замороженного остова. Однако отметим, что эксперимент дает более острое и симметричное резонансное поведение сечения в окрестности возбуждения $2p$ состояния, в то время как расчет дает результат ближе к обычной пороговой ступеньке в сечении. Очевидно, что для улучшения согласия с экспериментом необходимо выйти за рамки первого порядка теории возмущений и учесть влияние динамической поляризации остова на вылетающие фотоэлектроны, как это было сделано для основного состояния. Отметим также, что в целом многоэлектронные эффекты во внутренних оболочках отрицательных ионов проявляются сильнее, чем в нейтральных атомах.

В заключении сформулированы основные выводы и результаты работы:

разработана квазиатомная модель учета влияния динамической поляризации остова на вылетающий электрон одновременно с интерференционными и релаксационными эффектами путем введения параметрического поляризационного потенциала. Параметры потенциала выбираются из анализа поведения фазы вылетающего электрона в околупороговой области;

проведено исследование фотоотрыва от промежуточных оболочек ОИ олова. Обнаружены гигантские резонансы в сечении фотопоглощения, вносящие основной вклад в сечение при энергиях выше 40 эВ. Показано, что эффекты статической перестройки играют определяющую роль в процессе фотоотрыва от промежуточных оболочек и их учет кардинальным образом меняет сечение фотопоглощения в околупороговой области;

в рамках разработанной модели получены сечения фотоотрыва от глубоких оболочек ОИ Li^- , C^- , Si^- , Sn^- . Показано, что поляризационное взаимодействие между фотоэлектроном и нейтральным остовом ответственно за формирование околупороговых резонансов в ОИ с открытой наружной оболочкой C^- , Si^- , Sn^- . В ОИ с замкнутой наружной оболочкой (Li^-) околупороговый резонанс, как правило, не проявляется;

разработан подход, позволяющий в рамках ТМТ и МТВ описывать процесс фотоотрыва электрона от внутренней оболочки с одновременным возбуждением наружного электрона в дискретный спектр;

в рамках разработанного подхода получены сечения фотопоглощения с возбуждением для ОИ лития. Показано, что роль таких процессов в ОИ существенно выше, чем для нейтральных атомов.

Список цитируемой литературы

1. Hoshino M., Tanaka T., Kitajima M., Tanaka H., De Fanis A., Pavlychev A.A., Ueda K. The excitation mechanism of the lowest-energy satellite bands in the C 1s core level photoemission of CO₂. // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 2003. 36. №21. P. L381-L386
2. Saito N, De Fanis A., Kubozuka K, Machida M., Takahashi M., Yoshida H., Suzuki I. H., Cassimi A., Czasch A., Schmidt L., Dörner L., Wang K., Zimmermann B., McKoy V., Koyano I. Carbon K-shell photoelectron angular distribution from fixed-in-space CO₂ molecules. // J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys. 2003. 36. L25
3. Kirfel A., Grybos J., Dmitrienko V.E., Photon-electron interaction and vibration correlations in germanium within broad temperature interval. // Phys. Rev B 2001. 64. 165202
4. Ivanov V.K. Theoretical studies of photodetachment // Radiation Physics and Chemistry. 2004. 70. P. 345–370
5. Ivanov V.K., Krukovskaya L.P., Kashenock G.Yu. The evidence of giant “3p⁵3d⁶4s²” resonance in Cr⁻ photodetachment. // J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys. 1998. 31. №2. P.239-247
6. Zhou H.-L., Manson S. T., VoKy L., Feautrier N., Hibbert A. Dramatic structure in the photodetachment of inner shells of negative ions: Li⁻ // Phys. Rev. Lett. 2001. 87. 023001-1/4.
7. Berrah N., Bozek J.D., Wills A.A., Turri G., Zhou H.-L., Manson S.T., Akerman G., Rude B., Gibson N.D., Walter C.W., VoKy L., Hibbert A., Ferguson S.M. K-shell photodetachment of Li⁻: experiment and theory // Phys. Rev. Lett. 2001. 87. 253002-1/4.
8. Kjeldsen H., Andersen P., Folkmann F., Kristensen B., Andersen T. Inner-shell photodetachment of Li⁻ // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 2001. 34. №10. L353-L357.
9. Gribakin G.F., Gribakina A.A., Gul'tsev B.V., Ivanov V.K. Correlational autodetachment of the low-lying shape resonances in C⁻, Si⁻ and Ge⁻ photodetachment. // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 1992. 25. №8. 1757-1772.
10. Gibson N.D., Walter C.W., Zatsarinny O., Gorczyca T.W., Akerman G.D., Bozek J.D., Martins M., McLaughlin B.M., Berrah N. K-shell photodetachment from C⁻: Experiment and theory // Phys. Rev. A. 2003. 67. 030703 (R) – 1/4.
11. Kashenock G.Yu., Ivanov V.K. The 2s¹2p⁴ autodetachment resonance in the C⁻ negative ion. // Phys. Lett. A. 1998. 245. P. 110-116.

Основные результаты диссертации опубликованы в следующих работах:

1. Иванов В.К.; Кашенок Г.Ю.; Лапкин К.В. Резонансы коллективной природы в процессах фотоотрыва от отрицательных ионов с полузаполненной наружной оболочкой // Научно-технические ведомости СПбГТУ. 2001. т 4. №26. С. 103-111.
2. Ivanov V.K.; Kashenock G.Yu.; Lapkin K.V. Rearrangement effects in inner-shell photodetachment from Sn- negative ion // Proc. SPIE. 2001. 4348, P. 92-97.
3. Lapkin C.V.; Ivanov V.K.; Kulov M.A. Inner-shell Photodetachment of Lithium Negative Ion with Excitation // Proc. SPIE. 2003. 5127. P. 37-41.
4. Иванов В.К.; Лапкин К.В.; Кулов М.А. Фотоотрыв электронов из 1s оболочки отрицательного иона лития // Письма в Журнал Технической Физики. 2003. т.29. № 15. С. 9-17.
5. Lapkin C.V; Ivanov V.K. Inner-shell Photodetachment of negative ions // Proc. SPIE. 2004. 5400. P. 42-46.
6. Lapkin C.V.; Ivanov V.K. Photodetachment of Si⁻ negative ion in the vicinity of 2s threshold // Proc. SPAS. 2004. 8. P. 19-20