

На правах рукописи

Кулов Михаил Андреевич

**ДИНАМИЧЕСКИЕ ЭФФЕКТЫ В ФОРМИРОВАНИИ
АВТОИОНИЗАЦИОННЫХ РЕЗОНАНСОВ**

Специальность 01.04.02 – теоретическая физика

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

Санкт-Петербург - 2005

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,
Козлов Михаил Геннадьевич

Ведущая организация:

Физико-технический институт им. Иоффе РАН

Защита состоится 16 ноября 2005 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 14 октября 2005 г.

Ученый секретарь

диссертационного совета Д 212.229.05
доктор физико-математических наук
профессор



Ю.Ф. Титовец

Актуальность работы

Большинство наших знаний о микромире почерпнуто из анализа взаимодействия электромагнитного излучения с веществом. Одним из фундаментальных процессов, изучение характеристик которого является важной научной задачей, является фотоэффект. Поскольку слабое электромагнитное поле не искажает сами волновые функции атома, а приводит лишь к переходу между состояниями, изучение фотоионизации дает возможность получить данные об атомных волновых функциях, а, значит, и об электронных процессах в атоме. Для этого необходимо комплексное исследование процесса: с одной стороны, экспериментальное изучение фотоионизации атомов и многоэлектронных систем, а с другой – теоретическое описание, объясняющее наблюдаемые экспериментальные особенности, следовательно, дающее правильное представление о поведении электронов в атоме.

Точное аналитическое решение уравнения Шредингера возможно только для атома водорода, поэтому для теоретического описания более сложных многоэлектронных объектов приходится пользоваться приближенными методами. Наилучшим приближением, в рамках которого сохраняется понятие о независимом движении электронов, является приближение Хартри – Фока (ХФ) [1]. В этом приближении электрон движется в среднем самосогласованном поле остальных электронов. Взаимодействие, не учтенное в среднем поле (остаточное взаимодействие), обусловлено многоэлектронными корреляциями. Эксперименты 1960-х годов показали, что многие экспериментальные результаты не могут быть описаны без учета корреляций. Разработанное в начале 1970-х приближение случайных фаз с обменом (ПСФО) [2, 3] позволило учесть ряд корреляционных процессов, связанных с динамической поляризуемостью электронных оболочек. Это приближение оказалось весьма успешным в ряде случаев [см. обзор 4], но усовершенствования экспериментальной техники привели к наблюдению

особенностей, не описываемых ПСФО.

При исследовании динамических корреляционных эффектов является важным выбор процесса, при котором роль малого остаточного взаимодействия велика. Примером такого процесса является автоионизационный резонанс, наблюдаемый в сечении фотоионизации открытого канала (из внешней оболочки) в диапазоне энергий дискретных возбуждений закрытого канала (из внутренней оболочки). В ряде работ по исследованию автоионизационных резонансов в аргоне [5, 6] было показано, что для описания резонансных особенностей помимо ПСФО необходимо учесть более сложные динамические процессы с взаимодействием "два электрона – две дырки" [5]. Включение данных процессов при построении базиса волновых функций приводит к учету динамической поляризации электронных состояний. Включение этих процессов в матричные элементы взаимодействия электрона с фотоном и с другими электронами учитывает динамическую экранировку электронного взаимодействия. При рассмотрении автоионизационных резонансов в изоэлектронной последовательности аргона [6] были включены выборочные возбуждения. Однако это исследование показало, что в случае аргона [5] и его изоэлектронных положительных ионов [6], именно процессы "два электрона – две дырки" определяют форму резонансов.

Поэтому создание метода, позволяющего последовательно учесть наряду с динамической поляризуемостью (ПСФО) эффекты динамической поляризации и экранировки для описания автоионизационных резонансов, является актуальной задачей современной физики атома.

Цель работы заключается в исследовании роли различных динамических многоэлектронных процессов в формировании автоионизационных резонансов в сечении фотоионизации атомов и положительных ионов.

Основные задачи

- Теоретическое исследование процесса фотоионизации внешних оболочек

атомов и положительных ионов в окрестности дискретных возбуждений внутренних оболочек.

- Выявление роли различных многоэлектронных динамических эффектов: динамической поляризуемости с учетом межоболочечного взаимодействия, динамической поляризации, динамической экранировки взаимодействия.
- Разработка модели, позволяющей учитывать все вышеперечисленные многоэлектронные процессы при исследовании фотоионизации в окрестности автоионизационных резонансов.
- Расчет сечения фотоионизации $4p$ электронов в окрестности дискретных возбуждений $4s^{-1}4p^6np$ ($n = 5, 6, 7, \dots$) в изоэлектронной последовательности криптона ($Kr^0, Rb^+, Sr^{2+}, Y^{3+}$).
- Расчет сечения фотоионизации наружных np электронов в окрестности дискретных возбуждений $ns^{-1}np^6(n+1)s^1mp$ ($m = n+1, n+2, n+3, \dots$) в последовательности атомов щелочных металлов (K^0, Rb^0, Cs^0).

Научная новизна работы

- 1) Разработана модель, основанная на многочастичной теории возмущений, позволяющая включить в теоретическое рассмотрение процесса резонансной фотоионизации внешней оболочки в окрестности дискретных возбуждений внутренних оболочек следующие процессы: динамическую поляризуемость (приближение случайных фаз с обменом [3, 4]) и динамическую поляризацию (метод уравнения Дайсона [7]), а также динамическую экранировку дипольного и межэлектронного взаимодействия. Методика включения в рассмотрение первых двух динамических процессов была разработана ранее без участия автора [7, 8], однако последовательное построение метода расчета динамической экранировки, играющей решающую роль при описании автоионизационных резонансов, создание программного комплекса и комбинация учета динамической экранировки с остальными динамическими процессами были проведены впервые.
- 2) Получены сечения фотоионизации $4p$ электронов в изоэлектронной

последовательности криптона с учетом динамической поляризуемости, динамической поляризации и динамической экранировки дипольного и межэлектронного взаимодействия. Рассчитаны параметры автоионизационных резонансов в парциальном сечении фотоионизации $4p$ электронов с учетом всех перечисленных динамических процессов. Полученные теоретические данные позволили удовлетворительно описать экспериментальные результаты [9], а также выявить роль различных корреляционных процессов в формировании резонансных профилей.

3) Получены сечения фотоионизации внешних np электронов атомов щелочных металлов с учетом спин-зависимых динамических эффектов. Рассчитаны параметры автоионизационных резонансов. Полученные результаты находятся в хорошем согласии с экспериментальными данными [10].

Научная и практическая ценность работы

Созданы теоретическая модель, а также основанный на ней программный вычислительный комплекс, позволяющие учитывать процессы динамической поляризуемости, динамической поляризации и динамической экранировки при описании слабых автоионизационных резонансов в атомных системах. Особенностью данного метода является простота определения роли различных динамических процессов в формировании автоионизационного состояния. Подход, использованный при построении модели, обладает универсальностью, что позволяет использовать его в смежных областях физики (физике твердого тела, например). При помощи данного метода могут быть исследованы автоионизационные резонансы в широком классе атомов и ионов, а также в изолированных центрах в твердом теле.

Описаны экспериментальные зависимости сечения фотоионизации в окрестности автоионизационных резонансов в ряде объектов (Kr^0 , Rb^+ , Sr^{2+} , Y^{3+} ; K^0 , Rb^0 , Cs^0). В отличие от появившихся недавно теоретических данных по фотоионизации для ряда этих объектов [9], предложенный автором метод дает наглядную картину поведения многоэлектронной системы.

Положения, выносимые на защиту

- 1) Модель, основанная на последовательных приближениях многочастичной теории возмущений и учитывающая процессы динамической поляризуемости, динамической поляризации и динамической экранировки, позволяет адекватно описывать резонансные особенности сечения фотоионизации в окрестности автоионизационных резонансов.
- 2) Для автоионизационных резонансов, связанных со слабыми дискретными переходами из внутренних оболочек, решающую роль в формировании профиля резонанса играют процессы с динамической экранировкой электронного взаимодействия.
- 3) Форма контура слабых автоионизационных резонансов при увеличении заряда ядра в изоэлектронной последовательности положительных ионов меняется от "окна прозрачности" к обычному лоренцевскому типу резонансов.
- 4) Наличие дополнительного наружного s -электрона в атомах щелочных металлов приводит к ослаблению взаимодействия дискретного перехода с непрерывным спектром.

Апробация работы

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

- IV, V, VI, VII, VIII Международная конференция по неразрушающим методам контроля 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, 2001, 2002, 2003, 2004)
- 13-я и 14-я Международная конференция по физике вакуумного ультрафиолета (International Conference on Vacuum Ultraviolet Radiation Physics, VUV)(Trieste, Italy, 2001; Cairns, Australia, 2004)
- 34-я и 37-я Международная конференция Европейской группы по атомной

спектроскопии (European Group on Atomic Spectroscopy Conference, EGAS) (Sofia, Bulgaria, 2002; Dublin, Ireland, 2005)

- Международная конференция по фотоионизации (International Workshop on Photoionization, IWP) (Spring-8, Hyogo, Japan, 2002; Campinas, Brazil, 2005)
- 12-й Международный симпозиум по поляризационным и корреляционным процессам при электронных и атомных столкновениях (International Symposium on Polarization and Correlation in Electronic and Atomic Collisions, ISPCEAC) (Königstein, Germany, 2003)
- 8-я Европейская конференция по атомной и молекулярной физике (European Conference on Atomic and Molecular Physics, ECAMP) (Rennes, France, 2004)
- 24-я Международная конференция по фотонным, электронным и атомным столкновениям (International Conference on Photonic, Electronic and Atomic Collisions, ICPEAC) (Rosario, Argentina, 2005)

Результаты докладывались на научных семинарах Санкт-Петербургского Политехнического университета, неделе науки СПбГПУ.

Работа поддержана персональными грантами Министерства образования и науки №№А03-2.9-332, А04-2.9-466.

Объем и структура диссертации

Структура диссертации определена в соответствии с целью и задачами исследования и состоит из введения, 4 глав и заключения. Работа изложена на _____ страницах машинописного текста, включая _____ рисунков, _____ таблиц и библиографию из _____ наименований.

Основное содержание работы

Во **введении** формулируются цели диссертации, и обосновывается актуальность исследования фотоионизации в окрестности автоионизационных резонансов, 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 различных корреляционных процессов, 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 взаимодействие атома с электромагнитным полем; нулевое приближение – приближение Хартри – Фока (ХФ); диаграммная техника Фейнмана – Голдстоуна для построения дальнейших порядков многочастичной теории возмущений (МТВ); внутри- и межоболочечные корреляции, связанные с динамической поляризуемостью, в рамках приближения случайных фаз с обменом (ПСФО). Рассмотрено сечение фотоионизации в окрестности автоионизационного резонанса с введением для сечения параметризации Фано [11]:

$$\sigma(\varepsilon) = \sigma_0 \left(1 - \rho^2 + \rho^2 \frac{(\varepsilon + q)^2}{(\varepsilon^2 + 1)} \right) \quad (1)$$

Далее дано описание методов расчета резонансных параметров с корректировкой ПСФО при помощи учета более высоких порядков МТВ. Так, известно, что для получения правильных одночастичных энергий и волновых функций электронов в атоме необходим учет динамической поляризации электронного остова за счет парных корреляций электронов [7, 8]. Это динамическое влияние может быть эффективно учтено решением уравнения Дайсона для неприводимой собственно-энергетической части $\hat{\Sigma}(\vec{r}, \vec{r}', \omega)$ одночастичного пропагатора. Собственно-энергетическая часть вычисляется *ab initio* с точностью до процессов второго порядка МТВ, представляемого в диаграммном виде следующим образом:

$$\hat{\Sigma} = \text{Diagram 1} + \text{Diagram 2} + \text{Diagram 3} + \text{Diagram 4} \quad (2)$$

Здесь стрелка вправо (влево) обозначает частицу (дырку), волнистая линия – кулоновское взаимодействие; ось времени направлена вправо. Поправки к одночастичной энергии рассчитываются итерационным решением следующего секулярного уравнения:

$$\langle i | \varepsilon_i - \varepsilon_{i_{\text{пол}}} + \Sigma(\varepsilon_{i_{\text{пол}}}) | j \rangle C_j = 0 \quad (3)$$

где C_j – коэффициенты разложения исправленной поляризованной волновой функции по собственным функциям базиса ХФ. Подобным образом исправляются энергии и волновые функции квазидискретных автоионизационных состояний. При конкретных вычислениях учитывается вклад дальнейших порядков для динамического нелокального поляризационного потенциала $\hat{\Sigma}(\vec{r}, \vec{r}', \omega)$ путем введения ослабляющих коэффициентов для второго порядка МТВ. Полученная таким образом энергия одночастичных состояний совпадает с экспериментальной, что необходимо для прецизионного вычисления резонансных параметров.

Далее рассматривается динамическая экранировка дипольного и межэлектронного взаимодействия для слабого автоионизационного состояния за счет возбуждения второй промежуточной электрон-дырочной пары. Диаграммы, соответствующие некоторым таким процессам, приведены ниже:

(4)

Здесь пунктирной линией обозначен фотон, двойной стрелкой – автоионизационное состояние; круг в фотонной вершине означает учет динамической поляризуемости для дипольной амплитуды в ПСФО без учета возбуждения выделенного автоионизационного состояния; лента во второй диаграмме соответствует эффективному межэлектронному взаимодействию в ПСФО без учета возбуждения выделенного автоионизационного состояния.

Весь набор диаграмм данного порядка как для поправки к дипольной амплитуде, так и для матричного элемента взаимодействия, представляет бесконечный ряд, который может быть просуммирован. Аналитическое выражение для данных поправок после выделения угловой части принимает следующий вид:

$$\begin{aligned}
\hat{a)} \quad \langle \tilde{k} | \Delta \hat{D}(\omega) | i \rangle &= \sum_{\mu, \mu_k, \mu_i} (-1)^{\mu_k} \begin{pmatrix} l_k & 1 & l_i \\ -\mu_k & \mu & \mu_i \end{pmatrix} \frac{\langle n_2 l_2 \| \hat{D}(\omega) \| n_1 l_1 \rangle}{[\omega - (\varepsilon_{n_2 l_2} - \varepsilon_{n_1 l_1}) + i\delta]} \times \\
&\quad \times \langle n_k l_k, n_1 l_1 \| \hat{G}_1 \| n_i l_i, n_2 l_2 \rangle; \\
\hat{a)} \quad \langle \tilde{k} j | \Delta \hat{\Gamma}(\omega) | i \tilde{m} \rangle &= \sum_{\substack{\mu_k, \mu_i \\ \mu_j, \mu_m \\ \mu}} (-1)^{\mu_k + \mu_j + \mu} \begin{pmatrix} l_k & 1 & l_i \\ -\mu_k & \mu & \mu_i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_j & 1 & l_m \\ -\mu_j & \mu & \mu_m \end{pmatrix} \times \\
&\quad \times \left\{ \langle n_2 l_2, n_j l_j \| \hat{\Gamma}(\omega) \| n_1 l_1, n_m l_m \rangle \langle n_k l_k, n_1 l_1 \| \hat{G}_1 \| n_i l_i, n_2 l_2 \rangle / \right. \\
&\quad \left. / [\omega - (\varepsilon_{n_2 l_2} - \varepsilon_{n_1 l_1}) + i\delta] + 3 \langle n_k l_k, n_j l_j \| \hat{G}_1 \| n_i l_i, n_m l_m \rangle \right\} \\
\hat{a)} \quad \langle n_k l_k, n_1 l_1 \| \hat{G}_1 \| n_i l_i, n_2 l_2 \rangle &= \\
&= \sum_{q, h} \left\{ \frac{\delta_{qh} (-1)^q}{(2q+1)} \begin{Bmatrix} l_i & l_1 & q \\ l_2 & l_k & 1 \end{Bmatrix} \left(\frac{\langle n_k l_k, n_4 l_4 \| \hat{V}_q \| n_2 l_2, n_3 l_3 \rangle \langle n_3 l_3, n_1 l_1 \| \hat{U}_h \| n_4 l_4, n_i l_i \rangle}{[\omega - (\varepsilon_{n_k l_k} + \varepsilon_{n_4 l_4} - \varepsilon_{n_1 l_1} - \varepsilon_{n_3 l_3}) + i\delta]} + \right. \right. \\
&+ \left. \frac{\langle n_1 l_1, n_4 l_4 \| \hat{V}_q \| n_i l_i, n_3 l_3 \rangle \langle n_k l_k, n_3 l_3 \| \hat{U}_h \| n_2 l_2, n_4 l_4 \rangle}{[\omega - (\varepsilon_{n_2 l_2} + \varepsilon_{n_4 l_4} - \varepsilon_{n_1 l_1} - \varepsilon_{n_3 l_3}) + i\delta]} \right) + (-1)^{l_1 + l_i} \times \\
&\times \left(\begin{Bmatrix} l_1 & l_2 & 1 \\ h & q & l_3 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} l_i & l_k & 1 \\ h & q & l_4 \end{Bmatrix} \frac{\langle n_1 l_1, n_4 l_4 \| \hat{V}_q \| n_3 l_3, n_i l_i \rangle \langle n_3 l_3, n_k l_k \| \hat{U}_h \| n_2 l_2, n_4 l_4 \rangle}{[\omega - (\varepsilon_{n_2 l_2} + \varepsilon_{n_4 l_4} - \varepsilon_{n_1 l_1} - \varepsilon_{n_3 l_3}) + i\delta]} + \right. \\
&+ \begin{Bmatrix} l_1 & l_2 & 1 \\ q & h & l_3 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} l_i & l_k & 1 \\ h & q & l_4 \end{Bmatrix} \frac{\langle n_3 l_3, n_4 l_4 \| \hat{V}_q \| n_2 l_2, n_i l_i \rangle \langle n_1 l_1, n_k l_k \| \hat{U}_h \| n_3 l_3, n_4 l_4 \rangle}{[\omega - (\varepsilon_{n_3 l_3} + \varepsilon_{n_4 l_4} - \varepsilon_{n_1 l_1} - \varepsilon_{n_i l_i}) + i\delta]} + \\
&+ \begin{Bmatrix} l_1 & l_2 & 1 \\ q & h & l_3 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} l_i & l_k & 1 \\ q & h & l_4 \end{Bmatrix} \frac{\langle n_3 l_3, n_k l_k \| \hat{V}_q \| n_2 l_2, n_4 l_4 \rangle \langle n_1 l_1, n_4 l_4 \| \hat{U}_h \| n_3 l_3, n_i l_i \rangle}{[\omega - (\varepsilon_{n_3 l_3} + \varepsilon_{n_k l_k} - \varepsilon_{n_1 l_1} - \varepsilon_{n_4 l_4}) + i\delta]} + \\
&+ \left. \left. \begin{Bmatrix} l_1 & l_2 & 1 \\ h & q & l_3 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} l_i & l_k & 1 \\ q & h & l_4 \end{Bmatrix} \frac{\langle n_1 l_1, n_k l_k \| \hat{V}_q \| n_3 l_3, n_4 l_4 \rangle \langle n_3 l_3, n_4 l_4 \| \hat{U}_h \| n_2 l_2, n_i l_i \rangle}{[\omega - (\varepsilon_{n_2 l_2} + \varepsilon_{n_k l_k} - \varepsilon_{n_3 l_3} - \varepsilon_{n_4 l_4}) + i\delta]} \right) \right\}
\end{aligned} \tag{5}$$

Здесь \hat{V}_q соответствует прямому кулоновскому взаимодействию с передачей орбитального момента q ; \hat{U}_q – прямому и обменному кулоновскому взаимодействию; $\hat{D}(\omega)$ – эффективному дипольному взаимодействию в ПСФО;

$\hat{\Gamma}(\omega)$ – эффективному межэлектронному взаимодействию в ПСФО. Включение данных поправок играет значительную роль в том случае, когда амплитуда дискретного возбуждения внутренней оболочки в ПСФО мала по сравнению с амплитудой возбуждения внешней оболочки. При этом включение экранировочных поправок приводит к кардинальному изменению резонансных параметров, т.е. наблюдаемых резонансных профилей сечения.

В третьей главе исследуется фотоионизация внешней $4p$ оболочки в изоэлектронной последовательности криптона (Kr^0 , Rb^+ , Sr^{2+} , Y^{3+}). Получены сечения фотоионизации внешних оболочек $3d$, $4s$, $4p$ для этих объектов в приближениях ХФ, ПСФО, ПСФО + уравнение Дайсона (УД). В области энергий под порогом ионизации $4s$ электронов обнаружены резонансные особенности поведения сечения, связанные с автоионизационными возбуждениями $4s^{-1}4p^6np$ ($n = 5, 6, 7, \dots$). Однако полученные в ПСФО и ПСФО + УД резонансные профили не описывают даже приблизительно экспериментально наблюдаемые факты [9]: эксперимент показывает, что, например, для криптона резонансы носят форму "окон прозрачности", а ПСФО и ПСФО + УД приводят к антисимметричным пикам в сечении. Аналогично, для положительных ионов изоэлектронной последовательности наблюдается рассогласование теории и эксперимента. На следующем этапе производится дальнейший выход за рамки ПСФО + УД в виде учета процессов (4) и вычисления поправок (5). Результат расчета в ПСФО + УД и ПСФО + УД + динамическая экранировка для первого автоионизационного резонанса в криптоне представлен на Рис. 1. На Рис. 2 представлены экспериментальные данные для фотоионизации $4p$ электронов в криптоне и расчет в приближении ПСФО + УД + экранировка.

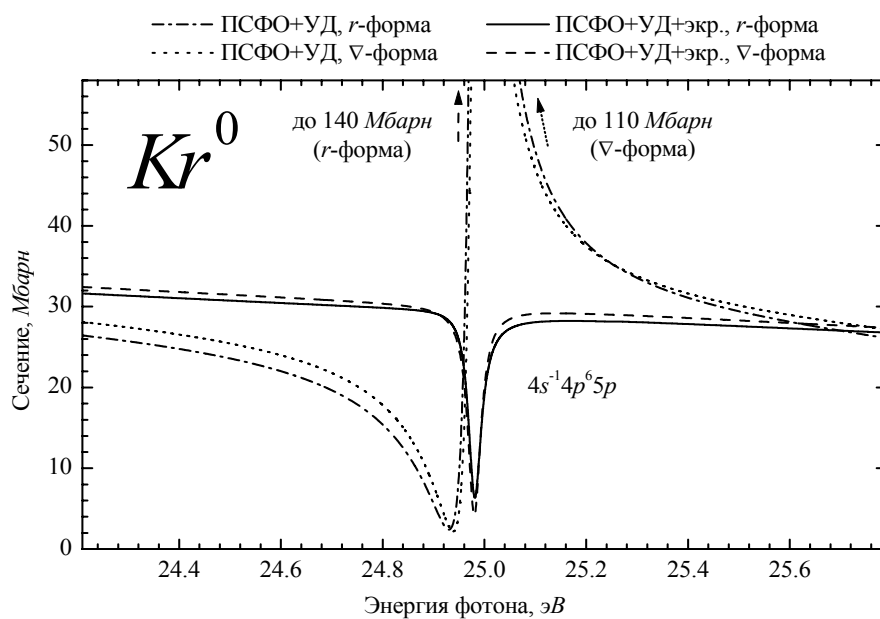


Рис. 1. Автоионизационный резонанс $4s^{-1}4p^65p$ в криптоне.

Для первых резонансов наблюдается качественное согласие данных. Дальнейшая картина усложнена за счет появления резонансов, связанных с двойными возбуждениями.

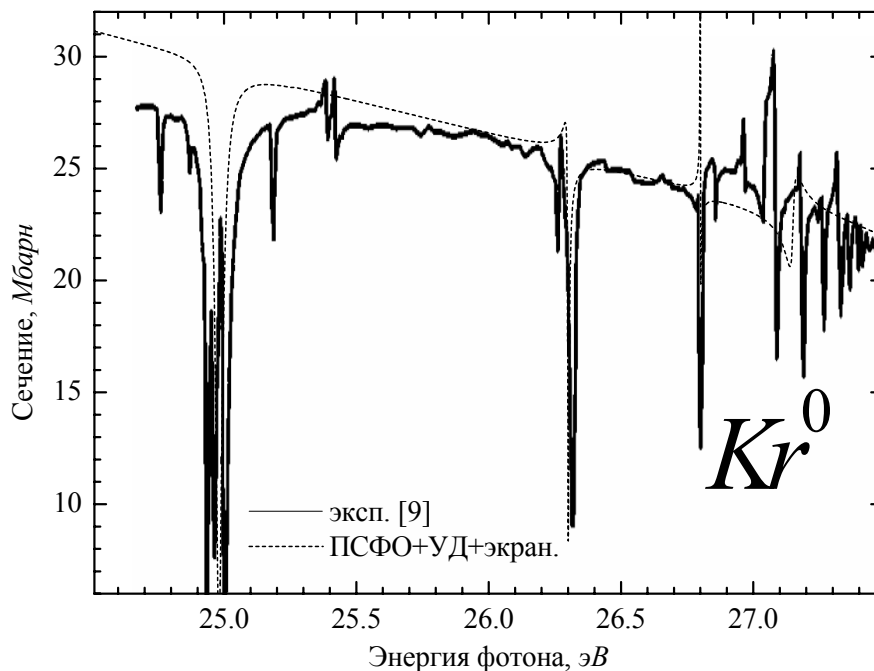


Рис. 2. Автоионизационные резонансы $4s^{-1}4p^6np$ в криптоне.

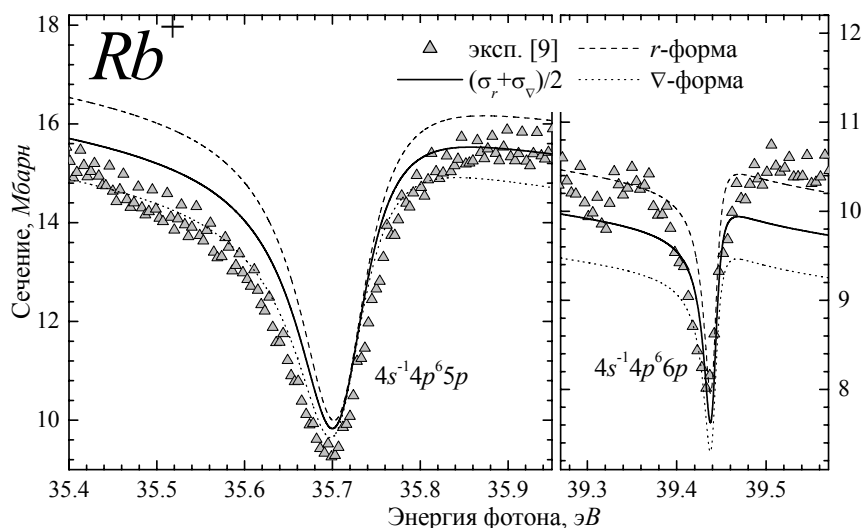


Рис. 3. Автоионизационные резонансы $4s^{-1}4p^6np$ в рубидии (II).

На Рис. 3 и Рис. 4 представлены результаты расчета и экспериментальные данные для первых резонансов в рубидии (II) и стронции (III), соответственно. Учет динамической экранировки приводит к хорошему согласию с экспериментом. Таким образом, показано, что именно динамическая экранировка играет определяющую роль в формировании профиля автоионизационного резонанса.

Форма резонансов вдоль изоэлектронной серии меняется: для Rb^+ первый резонанс носит форму практически симметричного провала, второй резонанс имеет более выраженный максимум, которому предшествует минимум; для Sr^{2+}

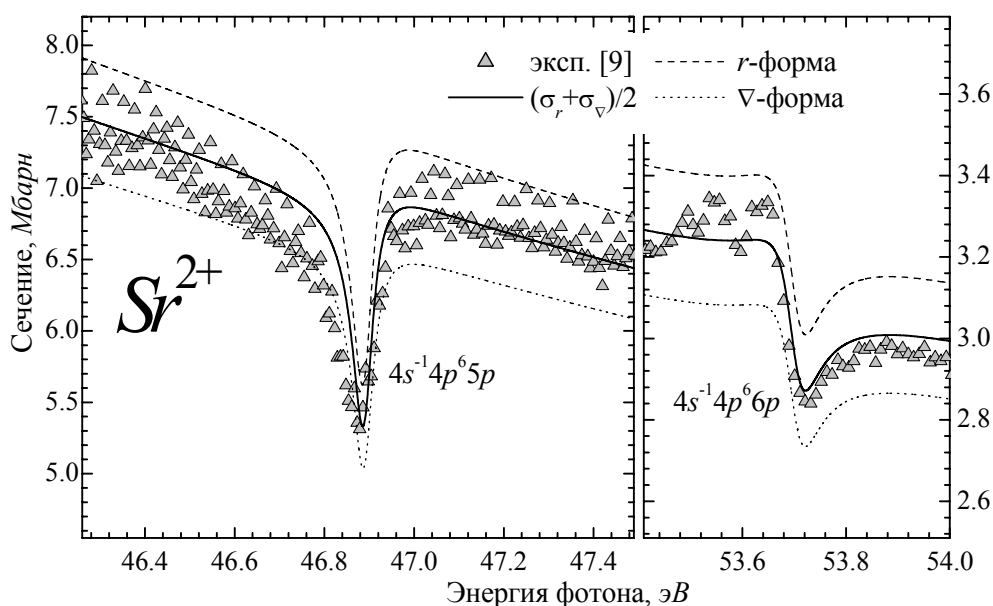


Рис. 4. Автоионизационные резонансы $4s^{-1}4p^6np$ в стронции (III).

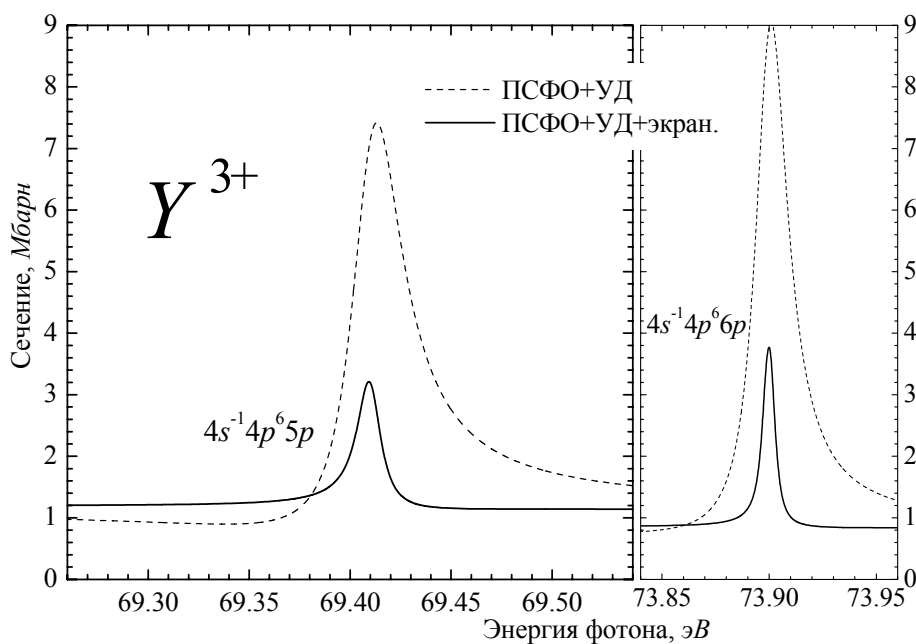


Рис. 5. Автоионизационные резонансы $4s^{-1}4p^6np$ в иттрии (IV).

первый резонанс имеет такую же форму, как второй резонанс в рубидии (II), а во втором резонансе максимум опережает минимум и становится более выраженным. При переходе к иону Y^{3+} резонансы меняют форму на лоренцевские пики (Рис. 5). Такая эволюция формы резонансов связана с перемещением особенностей зависимости действительной и мнимой части амплитуды дискретного возбуждения (экстремумов и точек обращения в ноль) под действием дополнительного поля ядра в сторону порога ионизации, что и приводит к последовательному превращению "окон прозрачности" в пики.

Четвертая глава посвящена исследованию автоионизационных резонансов $ns^{-1}np^6(n+1)s^1mp^1$ ($m = n+1, n+2, n+3, \dots$) в сечении фотоионизации внешней np^6 оболочки в атомах щелочных металлов (K^0, Rb^0, Cs^0). Теоретическое исследование этих объектов сталкивается с дополнительными трудностями, связанными с появлением внешнего неспаренного электрона $(n+1)s$, которое приводит к ненулевому полному спину атома. Поэтому в теоретическое рассмотрение приходится включать и спиновые переменные. В связи с этим каждая оболочка расщепляется на две подоболочки с противоположными проекциями спина электрона. Так, для калия приходится рассматривать взаимодействие 7 каналов фотоионизации:

- $3s\uparrow 3s\downarrow 3p^3\uparrow 3p^3\downarrow 4s\uparrow \rightarrow 3s\downarrow 3p^3\uparrow 3p^3\downarrow 4s\uparrow \epsilon p\uparrow$
- $3s\uparrow 3s\downarrow 3p^3\uparrow 3p^3\downarrow 4s\uparrow \rightarrow 3s\uparrow 3p^3\uparrow 3p^3\downarrow 4s\uparrow \epsilon p\downarrow$
- $3s\uparrow 3s\downarrow 3p^3\uparrow 3p^3\downarrow 4s\uparrow \rightarrow 3s\uparrow 3s\downarrow 3p^2\uparrow 3p^3\downarrow 4s\uparrow \epsilon d\uparrow$
- $3s\uparrow 3s\downarrow 3p^3\uparrow 3p^3\downarrow 4s\uparrow \rightarrow 3s\uparrow 3s\downarrow 3p^3\uparrow 3p^2\downarrow 4s\uparrow \epsilon d\downarrow$
- $3s\uparrow 3s\downarrow 3p^3\uparrow 3p^3\downarrow 4s\uparrow \rightarrow 3s\uparrow 3s\downarrow 3p^2\uparrow 3p^3\downarrow 4s\uparrow \epsilon s\uparrow$
- $3s\uparrow 3s\downarrow 3p^3\uparrow 3p^3\downarrow 4s\uparrow \rightarrow 3s\uparrow 3s\downarrow 3p^3\uparrow 3p^2\downarrow 4s\uparrow \epsilon s\downarrow$
- $3s\uparrow 3s\downarrow 3p^3\uparrow 3p^3\downarrow 4s\uparrow \rightarrow 3s\uparrow 3s\downarrow 3p^3\uparrow 3p^3\downarrow \epsilon p\uparrow$

Для перечисленных атомов рассчитывается сечение в окрестности резонансов в ПСФО с учетом спина, В ПСФО + УД с учетом спина. На данном этапе влияние дополнительного (по отношению к замкнутой электронной оболочке инертного газа) наружного s электрона проявляется в виде второй серии резонансов, связанной с энергетическим расщеплением $ns\uparrow \rightarrow mp\uparrow$ и $ns\downarrow \rightarrow mp\downarrow$ переходов. Кроме того, по сравнению с предшествующими инертными газами (Ar^0 , Kr^0 , Xe^0), а также с положительными однократными ионами данных щелочных металлов (K^+ , Rb^+), величина отклонения сечения от фонового значения в нейтральных атомах K^0 , Rb^0 , Cs^0 оказывается гораздо меньше. Это говорит о сильном влиянии внешнего $(n+1)s$ электрона на корреляции между соседними ns и np электронами, которое проявляется в ослаблении этого корреляционного взаимодействия.

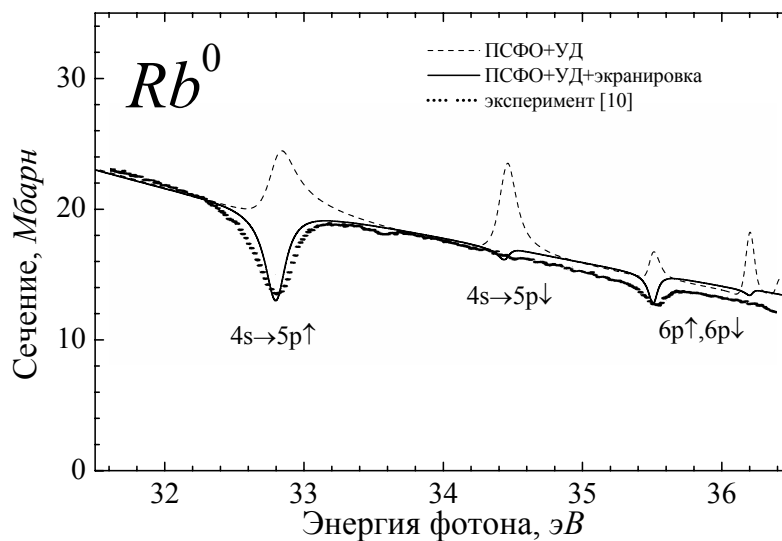


Рис. 6. Автоионизационные резонансы $4s^{-1}4p^65s^1mp$ в рубидии (I).

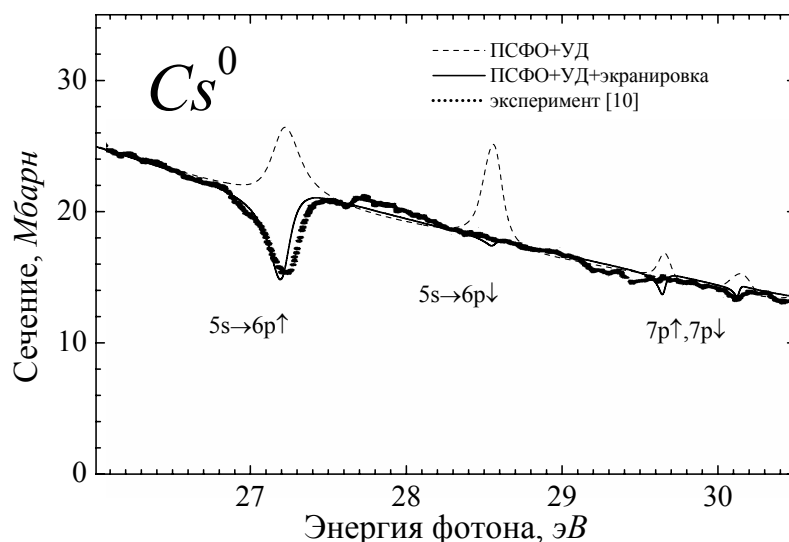


Рис. 7. Автоионизационные резонансы $5s^{-1}5p^66s^1mp$ в цезии (I).

Тем не менее, несмотря на то что корреляции между оболочками ns и np малы, динамических процессов ПСФО + УД все равно оказывается недостаточно для правильного описания экспериментальных особенностей сечения в резонансе. В ПСФО + УД резонансы имеют форму небольших пиков в сечении, в то время как экспериментально наблюдаются небольшие провалы. Поэтому и для этих объектов необходим учет поправок (5), связанных с динамической экранировкой электронного взаимодействия. Результаты расчета в ПСФО + УД и в ПСФО + УД + экранировка для рубидия и цезия приведены на Рис. 6 и Рис. 7, соответственно. Первая серия резонансов, связанная с переходами в состояния $ns\downarrow np^6(n+1)s\uparrow mp\uparrow$ имеет более ярко выраженный характер, чем серия $ns\uparrow np^6(n+1)s\uparrow mp\downarrow$, что можно объяснить дополнительным влиянием внешнего $(n+1)s\uparrow$ электрона.

Таким образом, для адекватного описания слабых автоионизационных резонансов в атомах щелочных металлов также необходимо учесть помимо динамической поляризуемости и поляризации процессы динамической экранировки.

В **заключении** сформулированы основные выводы и результаты работы:

- Разработана модель учета влияния динамической экранировки на дипольную амплитуду дискретных возбуждений и на матричные элементы межэлектронного взаимодействия. Создан метод, позволяющий

комбинировать вклад динамической поляризуемости, динамической поляризации и экранировки при расчете сечения фотоионизации в окрестности автоионизационного резонанса.

- Проведено исследование фотоионизации внешней $4p$ оболочки в изоэлектронной последовательности криптона ($Kr^0, Rb^+, Sr^{2+}, Y^{3+}$). Показано, что динамическая экранировка, будучи процессом более высокого порядка многочастичной теории возмущений по сравнению с процессами динамической поляризуемости и поляризации, играет решающую роль в формировании резонансных профилей, связанных с возбуждениями $4s^{-1}4p^6np$. Рассчитаны параметры данных автоионизационных резонансов. Выявлено влияние изменения внешнего параметра (заряда ядра) на коллективное поведение многоэлектронной системы.
- Исследованы автоионизационные резонансы $ns^{-1}np^6(n+1)s^1mp^1$ в сечении фотоионизации np оболочки в атомах щелочных металлов (K^0, Rb^0, Cs^0). Определено, что несмотря на слабое взаимодействие прямого канала ионизации с резонансным, динамическая экранировка для резонансов в щелочных металлах играет значительную роль. Рассчитаны параметры данных автоионизационных резонансов. Выявлено влияние дополнительных неспаренных s электронов, проявляющееся в расщеплении резонансной серии на две последовательности (для каждой проекции спина возбужденного электрона), а также в ослаблении корреляционного влияния резонансных возбуждений на фотоионизацию np оболочки.

Список цитируемой литературы

1. Собельман И.И. Введение в теорию атомных спектров. - М.: Физматгиз, 1963. - 640 с.
2. Амусья М.Я., Черепков Н.А., Чернышева Л.В. Сечение фотоионизации атомов благородных газов с учетом многоэлектронных корреляций. // ЖЭТФ, 1971, т.60, в.1, с.160-174.
3. Amusia M.Ya., Cherepkov N.A. Many-electron correlations in scattering processes // Case Studies in Atomic Physics, 1975, Vol.5, No.2, P.47-179.
4. Амусья М.Я., Иванов В.К. Межоболочечное взаимодействие в атомах. // Успехи Физических Наук, 1987, т.152, в.8, с.185-230.

5. Amusia M.Ya., Kheifets A.S. The influence of "two-electron – two-hole" excitations on the $3s^{-1}4p$ autoionization profile in Ar atoms // Phys.Lett., 1981, Vol.82A, No.8, P.407-411.
6. van Kampen P., O'Sullivan G., Ivanov V.K., Ipatov A.N., Costello J.T., Kennedy E.T. Dramatic changes in the 3s autoionization process at the beginning of the ArI sequence // Phys.Rev.Lett., 1997, Vol.78, No.16, P.3082-3085.
7. Ivanov V.K., Kashenock G.Yu., Gribakin G.F., Gribakina A.A., 2s, 2p photodetachment from the $\text{He}^{-}(^4P^0)$ negative ion within the Dyson Equation method // J.Phys.B: At.Mol.Opt.Phys., 1996, Vol.29, No.13, P.2669-2687.
8. 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, Vol.25, No.8, P.1757-1772.
9. Neogi A., Kennedy E.T., Mosnier J.-P., van Kampen P., Costello J.T., O'Sullivan G., Mansfield M.W.D., Demekhin Ph.V., Lagutin B.M., Sukhorukov V.L. Trends in autoionization of Rydberg states converging to the 4s threshold in the $\text{Kr-Rb}^{+}\text{-Sr}^{2+}$ isoelectronic sequence: Theory and experiment // Phys.Rev.A, 2003, Vol.67, P.042707-1 - 042707-10.
10. Koide M., Koike F., Nagata T., Levin J.C., Fritzsche S., Wehlitz R., Huang M.-T., DePaola B.D., Ohtani S., Azuma.Y., Common Window Resonance Features in K and Heavier Alkaline Atoms Rb and Cs // J.Phys.Soc.Jpn., 2002, Vol.71, No.11, P.1-12.
11. Fano U. Effects of configuration interaction on intensities and phase shifts // Phys.Rev., 1961, Vol.124, No.6, P.1866-1878.

Публикации по материалам диссертации:

основные результаты диссертации опубликованы в 6 научных работах

- 1) V.K.Ivanov, M.A.Koulov. Photoionization cross section of $4s^24p^6$ shells in the vicinities of the $4s4p^6np$ autoionizing resonances in Kr isoelectronic sequence // Proceedings of SPIE (Editor A.I.Melker), Vol.4627, P.93-98 (2002).
- 2) V.K.Ivanov, M.A.Koulov. Double-electron excitation effects in the $4s4p^6np$ autoionizing resonances in Kr and its isoelectronic ions sequence // Proceedings of SPIE (Editor A.I.Melker), Vol.5127, P.31-36 (2003).
- 3) M.A.Koulov, N.O.Vasetskaya and V.K.Ivanov. Autoionizing $3s \rightarrow np$ Resonances in Neutral Potassium and Calcium // Proceedings of SPIE (Editor A.I.Melker), Vol.5400, P.50-53 (2004).
- 4) M.A. Kulov, N.O.Vasetskaya and V.K. Ivanov. Autoionizing rydberg series in alkali atoms // Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena, Jnl. of Electron Spectroscopy and Related Phen., **144-147C**, 1219-1221 (2005).
- 5) M.A.Кулов, Н.О.Васецкая и В.К.Иванов. Автоионизационные резонансы в сечении фотоионизации внешних р-электронов атомов щелочных металлов // Письма в ЖТФ, т.31, вып.9, с.83-88 (2005).
- 6) M.A.Kulov, N.O.Vasetskaya and V.K.Ivanov. Autoionizing Rydberg series in photoionization cross section of alkali atoms // Proceedings of SPIE (Editor A.I.Melker), Vol.5831, P.22-25 (2004).