

МНОГОЧАСТИЧНЫЕ КОРРЕЛЯЦИИ ПРИ ОПИСАНИИ ФОТОПОГЛОЩЕНИЯ АТОМА НАТРИЯ

В работе исследуется роль многоэлектронных корреляций в процессах фотопоглощения многоэлектронных атомов. Приведены результаты численных расчетов сечений фотоионизации атома натрия в приближении случайных фаз с обменом. Вычисления проводились с учетом многочастичных эффектов, таких как межканальные корреляции, проявляющиеся в появлении пиков автоионизационных резонансов, а также взаимодействия, связанные с поляризацией электронного остова атома. Поляризационные поправки к энергиям и волновым функциям электронов учитывались с использованием статического и динамического поляризационного потенциала. Также исследовалось влияние корреляций на положение и форму резонансных пиков в сечении фотопоглощения. Учет поляризационных поправок позволил добиться лучшего согласия результатов расчета с экспериментальными данными в широком диапазоне энергий, в особенности при использовании динамического поляризационного потенциала на основе уравнения Дайсона.

ПСФО, АТОМ НАТРИЯ, УРАВНЕНИЕ ДАЙСОНА, СЕЧЕНИЕ ФОТОПОГЛОЩЕНИЯ.

Введение

Бурное развитие радиоастрономии, лазерной техники и методов оптической спектроскопии требуют надежного теоретического фундамента, на основе которого можно расшифровать экспериментально полученные оптические спектры атомов, молекул, атомных кластеров, включений, квантовых точек в твердых телах и т. п. В процессах взаимодействия с участием многочастичных систем существенную роль играют корреляционные эффекты, учет которых необходим при построении соответствующей теоретической модели.

В представленной работе исследуется влияние многоэлектронных корреляций на оптические свойства атомов. В качестве конкретного примера приведены результаты численных расчетов сечений фотопоглощения атома натрия. Вычисления проводи-

лись с учетом многочастичных эффектов, таких как межканальные корреляции, проявляющиеся в появлении пиков автоионизационных резонансов, и взаимодействия, связанные с поляризацией электронного остова атома.

Данные о спектрах фотопоглощения и излучения атомов дают ключ к пониманию их строения и процессов, происходящих при их взаимодействии с электромагнитным полем. При этом структуру электронных оболочек можно определить только в рамках теории, обеспечивающей адекватную трактовку экспериментальных данных. В свое время ключевым моментом к пониманию строения атомов и молекул стало создание квантовой механики, волнового уравнения Шредингера и его обобщения на многоэлектронные атомы в виде уравнений Хартри – Фока (ХФ) [1 – 3]. Одночастич-

ное приближение ХФ позволяет рассчитать волновые функции и энергии основного и возбужденных состояний многоэлектронных систем. Однако данный подход имеет существенные недостатки. Собственные значения хартри-фоковского гамильтониана имеют смысл энергий ионизации соответствующих электронных оболочек, но, как показывают результаты расчетов, данные энергии всегда существенно отличаются от соответствующих экспериментальных значений. Кроме того, расчет возбужденных состояний производится в суммарном поле «замороженного остова» и образовавшейся вакансии, т. е. вычисление волновой функции возбужденного электрона происходит без учета перестройки самосогласованного поля, связанной с появлением дырки в структуре электронного остова, а также с поляризацией электронного остова выбитым электроном. Следует отметить, что представленные в данной работе методы применимы к описанию оптических свойств не только отдельных многоэлектронных атомов, но и более сложных структур.

В работе используется атомная система единиц: $m_e = |e| = \hbar = 1$.

Теоретический подход

Сечение фотопоглощения атома определяется следующей формулой [2]:

$$\sigma(\omega) = \frac{4\pi^2}{\omega c} \sum_{i \leq F} \int |\langle v | \widehat{M}(\omega) | i \rangle|^2 \times \delta(\omega - E_v + E_i) dv, \quad (1)$$

где F – наивысший заполненный уровень (уровень Ферми) системы в основном состоянии, $\langle v | \widehat{M}(\omega) | i \rangle$ – матричный элемент перехода атомного электрона из состояния i в состояние v под воздействием внешнего электромагнитного поля в дипольном приближении.

Эти одночастичные амплитуды переходов учитывают изменение состояния только одного электрона, а именно взаимодействующего с электромагнитным полем. Расчеты с использованием дипольных амплитуд, учитывающих только взаимодействие электрон-дырка, показали, что дан-

ный подход дает адекватное качественное и количественное описание процессов фотопоглощения только в ограниченном ряде случаев. Так, методы, в основе которых лежит одночастичное приближение, не могут даже качественно объяснить ряд наблюдаемых явлений, в частности появление пиков автоионизационных резонансов в парциальных сечениях фотоионизации наружных оболочек атомов. В связи с этим возникла необходимость дальнейшего развития методов квантовой теории многих тел.

Одним из наиболее эффективных подходов к построению оператора взаимодействия атома с внешним полем, в рамках которого появилась возможность учета многоэлектронных корреляций, стало приближение случайных фаз с обменом (ПСФО), или по-английски – Random Phase Approximation with Exchange (RPAE) [2, 3, 5, 6]. В этом приближении впервые удалось рассчитать сечения фотопоглощения для значительного числа атомов, добившись хорошего соответствия между результатами расчетов и экспериментальными данными. В основе ПСФО лежит предположение о том, что возбуждаемый электрон не сразу переходит в конечное возбужденное состояние, а может проходить через ряд промежуточных короткоживущих (виртуальных) состояний. При этом виртуальные возбужденные состояния типа электрон-дырка взаимодействуют с рассматриваемым реальным возбуждением по кулоновскому закону с учетом обменного взаимодействия.

В операторной форме выражение для амплитуды взаимодействия в ПСФО записывается в виде [5]:

$$\widehat{D}(\omega) = \frac{\widehat{d}}{1 - \widehat{\chi}(\omega)\widehat{U}}. \quad (2)$$

В матричном виде это выражение может быть также записано в форме

$$\langle k | \widehat{D}(\omega) | i \rangle = \langle k | \widehat{d} | i \rangle + \left(\sum_{\substack{k' > F \\ i' \leq F}} - \sum_{\substack{i' > F \\ k' \leq F}} \right) D_{k'i'} U_{i'kk'i} \chi(\omega)_{k'i'}, \quad (3)$$

где

$$D_{k'i'} = \langle k | \widehat{D}(\omega) | i \rangle,$$

$$U_{i'kk'i} = \langle i'k | \hat{U}(\omega) | ik \rangle,$$

$$\chi(\omega)_{k'i'} = \frac{1}{\omega - E_{k'} + E_{i'} + i\delta}.$$

Это же выражение можно представить на языке диаграммной техники, как показано на рис. 1 [5, 6]. Если убрать из суммы выражения (3) обменные члены, то получится приближение случайных фаз (ПСФ, или RPA), широко используемое в теории электронного газа [7].

Следует отметить важную особенность ПФСО – появление в операторном описании так называемого эффективного взаимодействия, которое отличается от чисто кулоновского взаимодействия с электронами остова введением поправок, связанных с появлением виртуальных электрон-дырочных возбуждений [2]:

$$\hat{\Gamma} = \frac{\hat{U}}{1 - \hat{\chi}(\omega)\hat{U}}. \quad (4)$$

В матричной форме выражение для элементов эффективного взаимодействия может быть получено из (3) путем замены дипольной одночастичной амплитуды кулоновским взаимодействием [8, 9]:

$$\langle kk' | \hat{\Gamma}(\omega) | ii' \rangle = U_{kk'ii'} + \left(\sum_{\substack{k'' > F \\ i'' \leq F}} - \sum_{\substack{i'' > F \\ k'' \leq F}} \right) \Gamma_{kk''ii''} U_{i''k'k''k'} \chi(\omega)_{k''i''}, \quad (5)$$

где

$$U_{kk'ii'} = \langle kk' | \hat{U} | ii' \rangle,$$

$$\Gamma_{kk''ii''} = \langle kk'' | \hat{\Gamma}(\omega) | ii'' \rangle,$$

$$U_{i''k'k''k'} = \langle i''k' | \hat{U} | k''i' \rangle,$$

$$\chi(\omega)_{k''i''} = (\omega - E_{k''} + E_{i''} + i\delta)^{-1}.$$

Как уже упоминалось, ПСФО позволяет описать профили линий автоионизационных резонансов в спектрах фотопоглощения. Эти явления обусловлены межканальными корреляциями и проявляются в сплошном спектре фотоионизации внешних оболочек в областях энергий, близких к энергиям дискретных переходов из внутренних оболочек. Форма контура пика может быть описана формулой Фано [3, 4]:

$$\sigma = \sigma_0 \left(1 - \rho^2 + \rho^2 \frac{(\epsilon + q)^2}{\epsilon^2 + 1} \right), \quad (6)$$

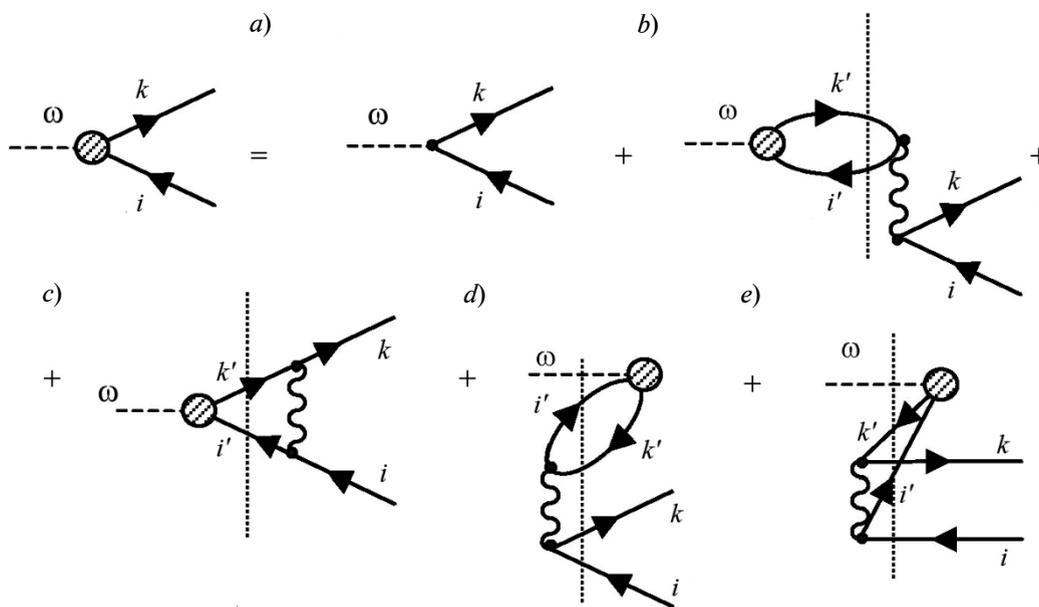


Рис. 1. Диаграммное представление амплитуды взаимодействия в ПСФО: *a* – одночастичная дипольная амплитуда; *b, c* – прямое и обменное взаимодействия для процессов «вперед во времени»; *d, e* – прямое и обменное взаимодействия для процессов «назад во времени»; ω – частота фотона; k', i' – состояния промежуточных (виртуальных) электрона и дырки; k, i – состояния электрона и дырки, образующихся в результате процесса фотопоглощения

где σ_0 – сечение фотопоглощения в окрестности пика; ρ^2 – индекс интерференции, показывающий, насколько сильно каналы вовлечены в резонанс; q – индекс формы, определяющий профиль резонансной линии.

Безразмерная величина ε определяется соотношением

$$\varepsilon = \frac{2(E - E_F)}{\gamma}, \quad (7)$$

где γ – ширина резонансной линии; E_F – энергия дискретного перехода, взаимодействие с которым учитывается в процессе ионизации внешней оболочки.

При описании формы пиков автоионизационных резонансов в рамках ПСФО значения γ , E_F , ρ^2 , ε и q выражаются через действительные и мнимые части матричных элементов операторов \hat{D} и \hat{G} и их линейные комбинации [3].

Соответствие расчетных и экспериментальных данных также можно улучшить путем включения дополнительных эффектов, обусловленных поляризацией электронного остова системы. Возбужденный электрон создает собственное поле, которое искажает самосогласованное поле атомного остова и порождает виртуальные электрон-дырочные пары, взаимодействующие с электроном.

Один из методов учета поляризации атомного остова и, соответственно, ее влияния на волновые функции основного и возбужденных состояний, основан на использовании статического эффективного поляризационного потенциала в следующей форме [3]:

$$V(r) = -\frac{\alpha}{(b^2 + r^2)^2}, \quad (8)$$

где α – статическая дипольная поляризуемость атома; b – феноменологический параметр, позволяющий избежать расходимости на малых расстояниях от атома. При этом значение дипольной поляризуемости берется, как правило, из экспериментальных данных, а параметр b подбирается таким образом, чтобы энергия наружной оболочки основного состояния наиболее точно соответствовала экспериментальной энергии ионизации.

Другой подход, позволяющий учесть поляризационные поправки, был ранее широко использован при теоретическом изучении процессов рассеяния медленных электронов на многоэлектронных атомах [8]. Динамический поляризационный потенциал описывается собственно-энергетической частью функции Грина возбужденного электрона $\Sigma(E, \mathbf{r}, \mathbf{r}')$, зависящей от энергии налетающего электрона и двух координат, т. е., в отличие от статического потенциала (8), является нелокальным. Во втором порядке теории возмущений по межэлектронному взаимодействию выражение для матричного элемента $\Sigma(E, \mathbf{r}, \mathbf{r}')$ может быть представлено в виде

$$\langle i | \Sigma_E | i' \rangle = \left(\sum_{\substack{k_1 > F \\ k_2 > F \\ k_3 \leq F}} \sum_{\substack{k_1 \leq F \\ k_2 \leq F \\ k_3 > F}} + \sum_{\substack{k_1 \leq F \\ k_2 \leq F \\ k_3 > F}} \right) U_{ik_3k_2k_1} \times \\ \times V_{k_1k_2k_3i'} \chi(\omega)_{k_1k_2k_3}, \quad (9)$$

где

$$U_{ik_3k_2k_1} = \langle ik_3 | \hat{U} | k_2k_1 \rangle,$$

$$V_{k_1k_2k_3i'} = \langle k_1k_2 | \hat{V} | k_3i' \rangle,$$

$$\chi(\omega)_{k_1k_2k_3} =$$

$$= (\omega - E_{k_1} - E_{k_2} + E_{k_3} + i\delta(1 - 2n_{k_1}))^{-1}.$$

Здесь первое слагаемое в скобках соответствует диаграммам «вперед во времени», а второе – «назад во времени» [3, 5, 6].

На языке диаграмм выражение (9) схематически изображено на рис. 2. Для нахождения новой волновой функции электрона, движущегося в поле поляризованного остова, используется уравнение Дайсона:

$$(\hat{H}^{HF} - E)\Psi_E(\mathbf{r}) = \int \Sigma(E, \mathbf{r}, \mathbf{r}')\Psi_E(\mathbf{r}')d\mathbf{r}', \quad (10)$$

где E – энергия фотоэлектрона (дырки), $\Psi_E(\mathbf{r})$ – его волновая функция, $\Sigma(E, \mathbf{r}, \mathbf{r}')$ – неприводимая собственно-энергетическая часть функции Грина [3, 5, 6].

Уравнение (10) можно переписать в форме

$$\Psi_E(\mathbf{r}) = \psi_E(\mathbf{r}) + \iint d\mathbf{r}' d\mathbf{r}'' \frac{\Psi_\gamma(\mathbf{r})\Psi_\gamma^*(\mathbf{r}')}{E - \xi_\gamma + i0} \times \\ \times \Sigma_E(\mathbf{r}', \mathbf{r}'')\Psi_E(\mathbf{r}'')d\xi_\gamma, \quad (11)$$

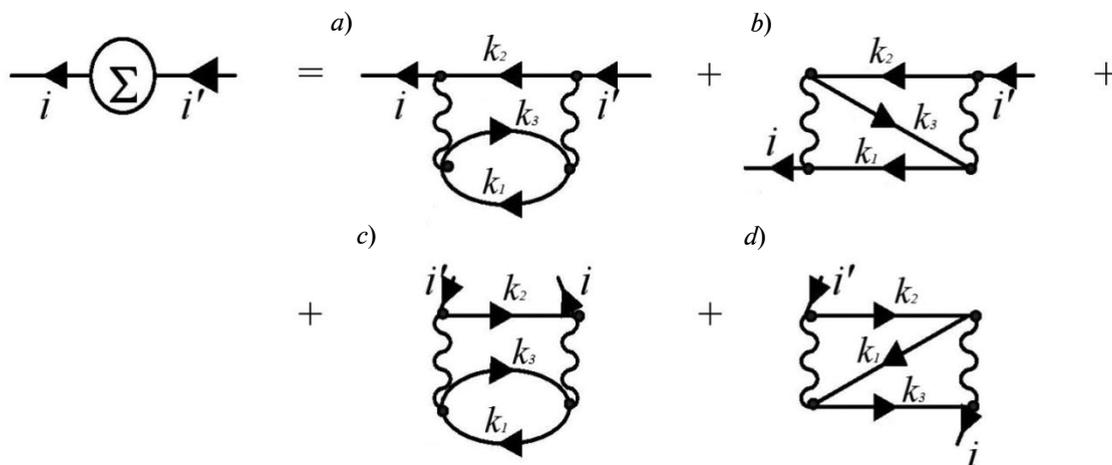


Рис. 2. Диаграммное представление матричного элемента собственно-энергетической части функции Грина: *a, b* – прямое и обменное взаимодействия для процессов «вперед во времени»; *c, d* – прямое и обменное взаимодействия для процессов «назад во времени»

где $\psi_\gamma(\mathbf{r})$ – одночастичные волновые функции в приближении ХФ, соответствующие гамильтониану \hat{H}^{HF} и образующие полный набор волновых функций, по которому производится интегрирование, включая все заполненные и возбужденные состояния.

С помощью формул (10) и (11) выражение для матричного элемента дипольного оператора \hat{d} можно представить в виде

$$\langle \Psi_E | \hat{d} | \Psi_n \rangle = \frac{1}{1 + i\pi \langle \Psi_E | \tilde{\Sigma}_E | \Psi_E \rangle} \times \left(d_{En} + \int \frac{\tilde{\Sigma}_{E\gamma}}{E - \xi_\gamma} d\xi_\gamma \right), \quad (12)$$

где

$$d_{En} = \langle \Psi_E | \hat{d} | \Psi_n \rangle, \\ \tilde{\Sigma}_{E\gamma} = \langle \Psi_E | \tilde{\Sigma}_E | \Psi_\gamma \rangle, \\ d_{\gamma n} = \langle \Psi_\gamma | \hat{d} | \Psi_n \rangle.$$

Здесь $\tilde{\Sigma}_E$ – приводимая собственно-энергетическая часть функции Грина; интегрирование вновь ведется по всему набору состояний ХФ.

Таким образом, с помощью уравнения (12) можно найти амплитуды дипольных переходов с учетом поляризационных поправок в рамках модели динамического поляризационного потенциала.

Следует отметить, что данный подход применим для нахождения возмущенных

состояний как фотоэлектрона, так и дырки, т. е. позволяет уточнить энергии электронных оболочек основного состояния системы по сравнению с их хартри-фоковскими значениями.

Положение пиков автоионизационных резонансов в спектре фотопоглощения зависит от энергий дискретных переходов из внутренних оболочек атома. Эти энергии, в свою очередь, обычно зависят от спинового состояния возбужденной системы. Так, в случае атома натрия, линия автоионизационного резонанса, обусловленного дискретным переходом $2s \rightarrow 3p$, расщепляется на два пика, положение которых соответствует конечным триплетному и синглетному состояниям. Учет этого расщепления можно осуществить в так называемой спин-поляризованной версии ХФ и ПСФО – СПХФ и СППСФО (SPHF, SPR-PAE) соответственно, где каждая атомная оболочка разделяется на две подоболочки, которые заполняются электронами с одинаковыми проекциями спина [10].

Обсуждение результатов численных расчетов

Перечисленные выше методики использовались для расчета сечений фотопоглощения атома натрия. Волновые функции и энергии основного и возбужденных состояний были вычислены в рамках нерелятивистского приближения ХФ. В табл. 1 приведены значения энергий ионизации

Таблица 1

Сравнение расчетных значений энергий ионизации атома натрия с экспериментальными данными

| Электронная оболочка | Энергия, эВ | | | |
|----------------------|-----------------------|--------------|--------------|------------------|
| | без учета поляризации | с учетом СПП | с учетом ДПП | Эксперимент [11] |
| 1s | -1101,48 | - 1101,66 | – | -1079 |
| 2s | - 76,11 | - 76,30 | -71,95 | -70,90 |
| 2p | - 41,31 | - 41,50 | -38,70 | -38,46 |
| 3s | - 4,955 | - 5,14 | -5,14 | -5,14 |

Принятые сокращения: СПП – статистический поляризационный потенциал, ДПП – динамический поляризационный потенциал.

атомных оболочек, рассчитанные без учета поляризационных поправок и с их учетом, а также соответствующие экспериментальные значения [11].

Для построения эффективного статического поляризационного потенциала (8) было использовано экспериментальное значение статической дипольной поляризуемости основного состояния атома натрия, 162 а.е. Параметр $b = 11,687$ а.е. подбирался таким образом, чтобы расчетный потенциал ионизации оболочки 3s с высокой точностью совпадал с экспериментальным значением, равным $-5,14$ эВ.

Были вычислены парциальные и полные сечения фотопоглощения для энергий фотонов до 100 эВ. При этом были обнаружены ярко выраженные автоионизационные пики, что показало оправданность учета межканальных корреляций при проведении расчетов сечений фотоионизации наружных оболочек. При численном моделировании процесса фотовозбуждения атома натрия учитывалось четыре парциальных канала ионизации: $2s \rightarrow np$, $2p \rightarrow ns$, $2p \rightarrow nd$ и $3s \rightarrow np$ (канал $1s \rightarrow np$ не принимался в расчет, так как энергия ионизации 1s-оболочки выпадает из рассматриваемого диапазона энергий).

Амплитуды переходов и парциальные сечения вычислялись в рамках ПСФО для энергий фотонов до 100 эВ. Для уточнения численных результатов были также проведены расчеты амплитуд и сечений с использованием волновых функций, полученных с

учетом поляризационных поправок. Расчет формы и точного положения автоионизационных пиков, обусловленных дискретными переходами $2s \rightarrow 3p(^2P)$, $2s \rightarrow 3p(^1P)$, $2s \rightarrow 4p(^2P)$ и $2s \rightarrow 4p(^1P)$ производился в рамках подхода СППСФО.

Одним из критериев достоверности расчета является степень совпадения расчетного и экспериментального положений куперовских минимумов [3]. На рис. 3 представлены зависимости сечений фотопоглощения атома натрия от энергии фотоэлектронов. Из приведенных зависимостей видно, что учет поляризационных поправок позволяет улучшить соответствие расчетного и экспериментального [12, 13] положений куперовских минимумов. Однако существенное улучшение соответствия экспериментальных и расчетных сечений фотопоглощения было достигнуто лишь при использовании модели динамического поляризационного потенциала.

На рис. 4 показаны зависимости полного сечения от энергии фотоэлектрона. Как видно из экспериментальной зависимости, опубликованной в работе [14], для энергий фотона ниже 38,5 эВ интенсивность фотоионизации мала, поскольку в этом диапазоне энергий в процессе ионизации задействован только электрон с наружной 3s-оболочки. Исключением являются области энергий, в которых расположены пики автоионизационных резонансов. Так, при энергии 31 эВ наблюдается очень интенсивный пик, обусловленный резонансным взаимодействием

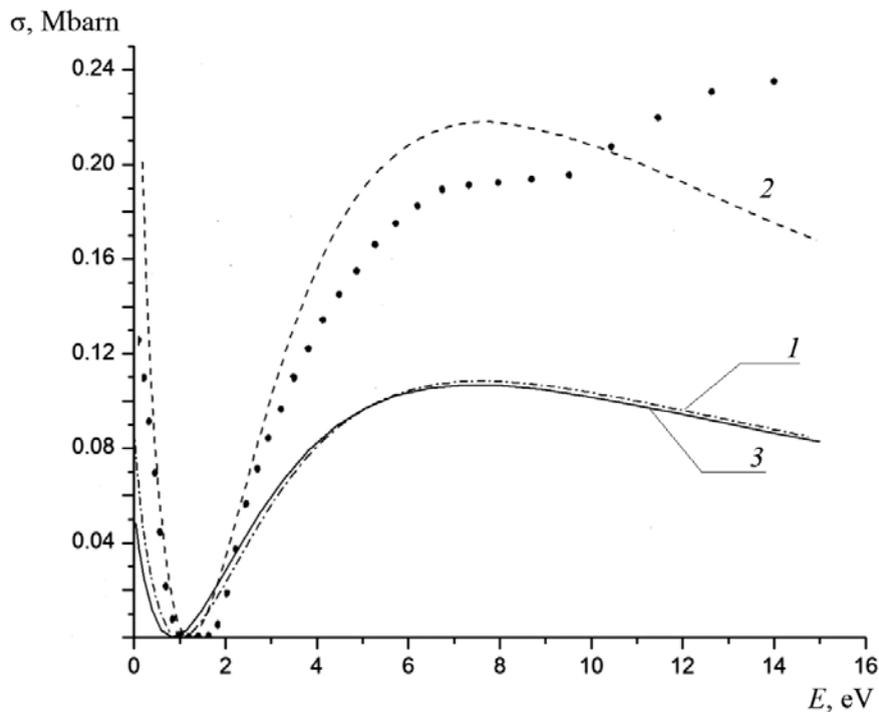


Рис. 3. Расчетные (линии) и экспериментальная (точки) зависимости полного сечения фотопоглощения атома натрия от энергии фотоэлектрона. Используются различные приближения: ПФСО с учетом статического поляризационного потенциала (1), СППСФО с учетом динамического поляризационного потенциала (2), ПСФО без поляризации (3)

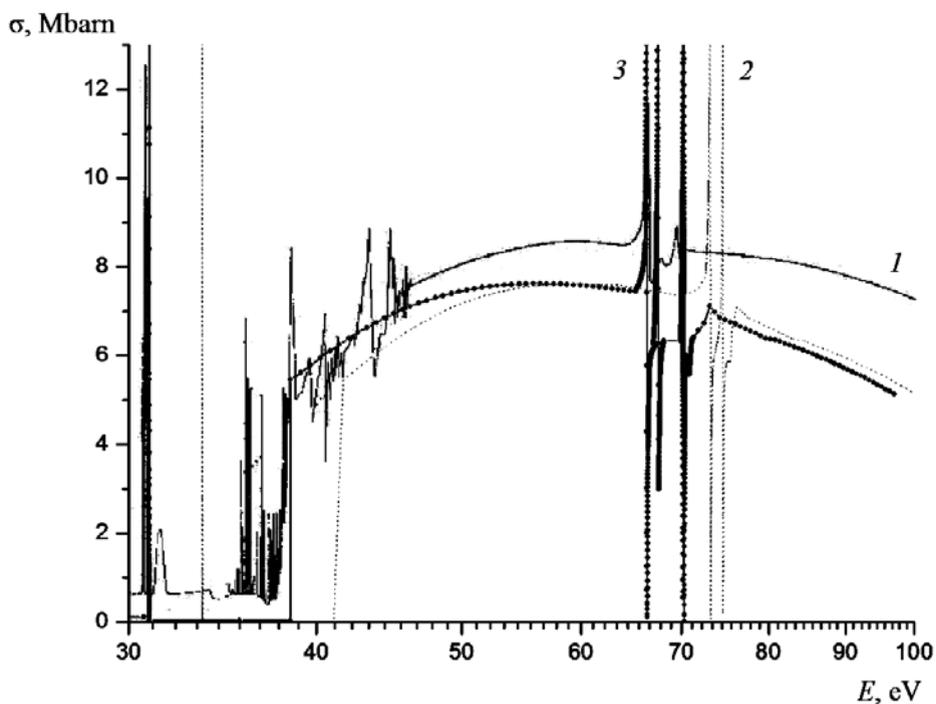


Рис. 4. Экспериментальная [14] (1) и расчетные зависимости полного сечения фотопоглощения атома натрия от энергии фотона. Используются различные приближения: ПФСО без поляризации (2) и СППСФО с учетом динамического поляризационного потенциала (3)

Таблица 2

Рассчитанные параметры для построения контуров Фано

| Электронный переход | Энергия перехода E_p , эВ | Ширина линии γ , 10^{-3} эВ | Параметр асимметрии q |
|--------------------------|-----------------------------|--------------------------------------|-------------------------|
| $2p \rightarrow 3s$ | 30,96 | 0,14 | -754,34 |
| $2s \rightarrow 3p(^2P)$ | 66,37 | 34,4 | -1,60 |
| $2s \rightarrow 3p(^1P)$ | 67,59 | 39,6 | -1,64 |
| $2s \rightarrow 4p(^2P)$ | 70,29 | 8,2 | -1,80 |
| $2s \rightarrow 4p(^1P)$ | 70,18 | 6,1 | -1,70 |

с дискретным возбуждением $2p \rightarrow 3s$.

Были исследованы форма и положение этого пика, а также вычислены параметры, необходимые для построения контура Фано (6) (табл. 2).

Расчетное положение пика находится в хорошем согласии с экспериментом, однако, к сожалению, из-за его узости и высокой интенсивности нельзя что-либо конкретно утверждать относительно совпадения высоты и формы. Рассчитанные резонансные линии и соответствующие им контуры Фано представлены на рис. 5.

В области 33,0 – 38,5 эВ наблюдаются очень узкие и тесно расположенные пики, обусловленные резонансом канала $3s \rightarrow np$ с дискретными переходами $2p \rightarrow ns$ и $2p \rightarrow nd$. Выше энергии 38,5 эВ, соответствующей энергии связи $2p$ -оболочки, начинается ее ионизация, которая происходит по двум каналам: $2p \rightarrow ns$ и $2p \rightarrow nd$. В области энергий 38,5 – 45,5 эВ в экспериментальном сечении наблюдается ряд пиков, наличие которых может быть объяснено двухэлектронными возбуждениями, при которых одновременно с электронами $2p$ -оболочки возбуждается электрон $3s$ -оболочки [14].

Далее, после 70,9 эВ начинается фотоионизация $2s$ -оболочки. При этом возбуждения $2s$ -электронов в область непрерывного спектра дают незначительный вклад в общее сечение фотоионизации, однако дискретные переходы $2s \rightarrow 3p$ и $2s \rightarrow 4p$ приводят к появлению пиков автоионизационных резонансов в диапазоне энергий 63 – 71 эВ.

Были проведены численные расчеты и исследованы формы и положения пиков автоионизационных резонансов, обусловленных взаимодействием с дискретными переходами $2s \rightarrow 3p$ и $2s \rightarrow 4p$. На экспериментальной кривой [14] видно, что каждый из этих пиков в свою очередь расщеплен на две линии, соответствующие определенному спиновому состоянию – триплетному и синглетному. В связи с этим расчет положения этих пиков проводился в рамках СППСФО. Вычисления, проведенные в этом приближении, показали, что энергии дискретных переходов $2s \rightarrow 3p(^2P)$, $2s \rightarrow 3p(^1P)$, $2s \rightarrow 4p(^2P)$ и $2s \rightarrow 4p(^1P)$ равны 70,53, 71,75, 74,45 и 74,34 эВ, соответственно. Последующий учет динамического поляризационного потенциала позволил сдвинуть положение $2s$ -уровня с энергии -76,11 на -71,95 эВ, т. е. энергии переходов уменьшились на 4,16 эВ и стали равными 66,37, 67,59, 70,29 и 70,175 эВ, соответственно.

Примечательно, что, согласно проведенным расчетам, для перехода $2s \rightarrow 4p$ энергия синглетного состояния оказалась ниже, чем триплетного. Этот факт требует перепроверки с использованием многоконфигурационного приближения Хартри – Фока. В экспериментальных и расчетных формах пиков есть несоответствия. Рассчитанные получились более интенсивными, и после каждого пика наблюдается характерный провал в сечениях фотопоглощения. Возможно, это связано с тем, что при проведении эксперимента в данном энергетическом диапазоне был взят недостаточно

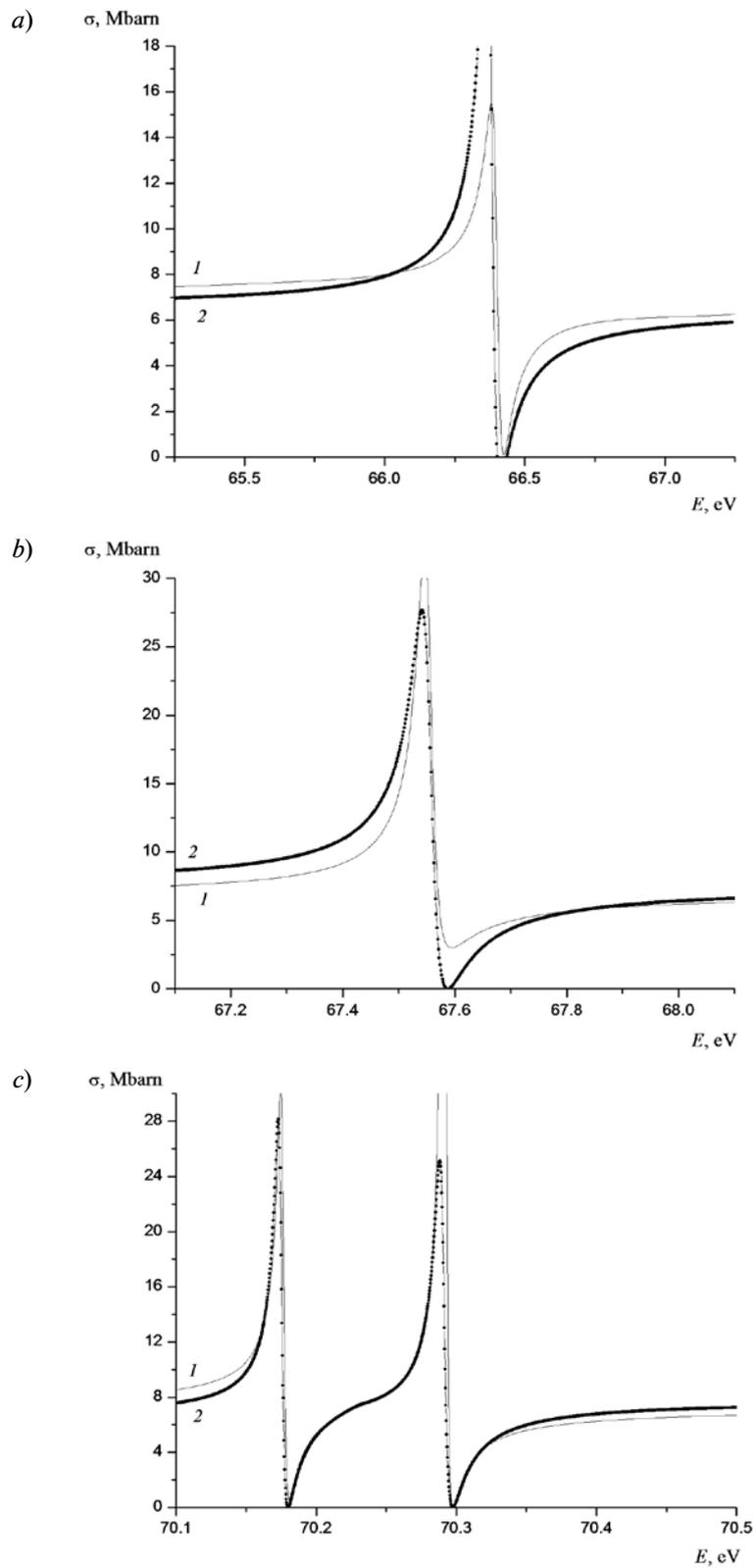


Рис. 5. Рассчитанный спектр автоионизационных резонансов (1) и соответствующие контуры Фано (2). Представлены резонансные пики, соответствующие переходам $2s \rightarrow 3p(^2P)$ (a), $2s \rightarrow 3p(^1P)$ (b), $2s \rightarrow 4p(^1P)$ и $2s \rightarrow 4p(^2P)$ (c)



малый шаг по энергии. В частности, это объясняет отсутствие на экспериментальной кривой пиков автоионизационных резонансов, обусловленных дискретными переходами $2s \rightarrow 5p$, $2s \rightarrow 6p$ и т. д.

Следует отметить, что учет поляризационных поправок не приводит к существенному улучшению соответствия экспериментальных и расчетных сечений в диапазоне энергий 30 – 100 эВ, однако позволяет уточнить положение пиков автоионизационных резонансов и пороги ионизации оболочек. В диапазоне 5,14 – 20,14 эВ включение поляризационных поправок с использованием динамического поляризационного потенциала оказалось вполне оправданным с точки зрения достигнутого улучшения соответствия расчетных и экспериментальных сечений. Таким образом, можно заключить, что эффекты, связанные с поляризацией атомного остова, оказывают заметное влияние на амплитуды переходов лишь при малых энергиях фотоэлектронов. К сожалению, полученное расчетное сечение фотопоглощения отличается от экспериментального, причем величина расхождения увеличивается с ростом энергии фотона. В диапазоне энергий 45 – 64 эВ соответствие сечений составляет 80 – 90 %, а в диапазоне энергий 70 – 100 эВ снижается до 70 %. Предположительно это может быть связано с тем, что расчет проводился в нерелятивистском приближении. Возможно, использование приближения Хартри – Фока – Дирака для расчета электронных волновых функций позволит улучшить соответствие расчета с экспериментом.

Заключение

Для нахождения волновых функций и одноэлектронных энергий атома натрия в основном и возбужденных состояниях использовался метод Хартри – Фока. Расчет амплитуд фотоионизации и сечений фотопоглощения для указанного атома произ-

водился в рамках ПСФО, учитывающего межканальные корреляции и объясняющего появление экспериментально наблюдаемых пиков автоионизационных резонансов. Для уточнения энергий и волновых функций основного и возбужденных состояний атома были использованы различные методы учета поляризационных поправок, в частности модель эффективного статического поляризационного потенциала и модель, использующая динамический поляризационный потенциал. Сравнение расчетных данных с экспериментальными показывает необходимость учета межэлектронных корреляций для качественного описания оптических свойств атомов и полезность учета поляризационных поправок при уточнении сечений фотопоглощения и энергий основного состояния. В частности, включение динамического поляризационного потенциала позволило существенно улучшить совпадение положения пиков автоионизационных резонансов с экспериментальными данными, однако для корректировки сечений фотопоглощения использование данной методики оказалось оправданным только для случая низких энергий. Предположительно, улучшить соответствие расчетных и экспериментальных сечений в областях высоких энергий можно при использовании релятивистского базиса. Также для дальнейшего уточнения положения пиков автоионизационных резонансов требуется выход за рамки метода Хартри – Фока, в частности, путем использования многоконфигурационного приближения Хартри – Фока и его релятивистского обобщения. Метод ПСФО может применяться при описании не только атомов, но и молекул, кластеров и других наноструктур [14 – 17].

Авторы выражают благодарность доктору физико-математических наук, профессору В.К. Иванову за оказанную помощь в подготовке статьи и полезное обсуждение полученных результатов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

[1] Хартри Д. Расчеты атомных структур. М.: Изд-во ИЛ, 1960.
[2] Amusia M.Ya., Chernysheva L.V. Computation of atomic processes. Bristol – Philadelphia: Institute

of Physics Publishing, 1997.

[3] Амусья М.Я. Атомный фотоэффект. М.: Наука, 1987.

[4] Фано У., Фано Л. Физика атомов и моле-

кул. М.: Наука, 1980.

[5] **Амусья М.Я., Иванов В.К., Черепков Н.А., Чернышева Л.В.** Процессы в многоэлектронных атомах. СПб.: Наука, 2006.

[6] **Иванов В.К., Ипатов А.Н., Полозков Р.Г.** Квантовая теория многих тел. СПб.: Изд-во Политехн. ун-та, 2013.

[7] **Lundquist S., March N.H.** (Eds.). Theory of the Inhomogeneous Electron Gas. New York – London: Plenum Press, 1983.

[8] **Amus'ya M.Ya., Cherepkov N.A., Chernysheva L.V.** Cross section for the photoionization of noble-gas atoms with allowance for multielectron correlations // JETP. 1971. Vol. 33. No. 1. Pp. 90 – 96.

[9] **Амусья М.Я., Иванов В.К.** Межоболочечное взаимодействие в атомах // УФН. 1987. Т. 152. Вып. 6. С. 185–230.

[10] **Амусья М.Я., Долматов В.К., Иванов В.К.** Фотоионизация атомов с полузаполненными оболочками // ЖЭТФ. 1983. Т. 85. Вып. 1. С. 115–123.

[11] **Радциг А.А., Смирнов Б.М.** Параметры атомов и атомных ионов. М.: Энергоатомиздат, 1986.

[12] **Dasgupta A., Bhatia A.K.** Photoionization

of sodium atoms and electron scattering from ionized sodium // Phys. Rev. A . 1985. Vol. 31. Iss. 2. Pp. 759–771.

[13] **Jwei-Jun Chang, Hugh P. Kelly.** Photoabsorption of the neutral sodium atom: A many-body calculation // Phys. Rev. A. 1975. Vol. 12. Iss. 1. Pp. 92 – 98.

[14] **Wolff H.W., Radler K., Sonntag B., Haensel R.** Photoabsorption of Atomic Sodium in the VUV // Z. Physik. A. 1972. Vol. 257. Iss. 4. Pp. 353 – 368.

[15] **Semenov S.K., Cherepkov N.A.** Generalization of the atomic RPA method for diatomic molecules: H₂ photoionization cross-section calculation // Chem. Phys. Lett. 1998. Vol. 291. Iss. 3–4. Pp. 375–380.

[16] **Semenov S.K., Cherepkov N.A.** Photoionization of the H₂ molecule in the random phase approximation // J. Phys. B. 2003. Vol. 36. No. 7. Pp. 1409–1422.

[17] **Semenov S.K., Cherepkov N.A., Fecher G.H., Schunhense G.** Generalization of the atomic random-phase-approximation method for diatomic molecules: N₂ photoionization cross-section calculations // Phys. Rev. A. 2000. Vol. 61. Iss. 3. P. 032704.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

КОНОВАЛОВ Алексей Витальевич – студент Института физики, нанотехнологий и телекоммуникаций Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого.

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
alkonvit@yandex.ru

ИПАТОВ Андрей Николаевич – доктор физико-математических наук, профессор кафедры экспериментальной физики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого.

195251, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
andrei_ipatov@mail.ru

Kononov A.V., Ipatov A.N. MANY-ELECTRON CORRELATIONS IN CALCULATIONS OF SODIUM ATOM PHOTOABSORPTION.

The role of many-electron correlations in photoabsorption processes has been investigated. The results of numerical calculations of photoionization cross sections of sodium atom are presented. The many-body effects such as interchannel correlations resulting in autoionization resonance peaks, as well as effects of atomic core polarization were taken into account in the calculations in terms of RPAE. Polarization corrections were accounted for using both static and dynamic polarization potentials. The influence of correlations on the position and the form of resonance peaks was studied. The obtained results demonstrate necessity of taking into account polarization effects, especially for clarification of autoionization resonance peaks position and the cross-section magnitudes in the low energy range. The best agreement with experimental data was reached with the model of dynamic polarization potential based on Dyson equation.

RPAE, SODIUM ATOM, DYSON EQUATION, PHOTOABSORPTION CROSS SECTION.

REFERENCES

[1] **D. Hartree**, The calculation of atomic structures, London, Chapman A. HALL, LTD, 1957.

[2] **M.Ya. Amusia, L.V. Chernysheva**, Computation of atomic processes, Bristol – Philadelphia, Institute of Physics Publishing, 1997.

- [3] **M.Ya. Amusya**, Atomic photoeffect, New-York, Plenum Press, 1990.
- [4] **U. Fano, L. Fano**. Physics of atoms and molecules: An Introduction to the structure of matter. Chicago: Chicago University Press, 1972.
- [5] **M.Ya. Amusya, V.K. Ivanov, N.A. Cherepkov, L.V. Chernysheva**, Processes in multielectron atoms, SPb., Nauka, 2006.
- [6] **V.K. Ivanov, A.N. Ipatov, R.G. Polozkov**, Many-body quantum theory, SPb.: Polytechnic university edition, 2013.
- [7] **S. Lundquist, N.H. March** (Eds.), Theory of the Inhomogeneous Electron Gas, Plenum Press, New York-London, 1983.
- [8] **M.Ya. Amus'ya, N.A. Cherepkov, L.V. Chernysheva**, Cross section for the photoionization of noble-gas atoms with allowance for multielectron correlations, JETP. 33 (1) (1971) 90 – 96.
- [9] **M.Ya. Amusya, V.K. Ivanov**, Intershell interaction in atoms, Physics-Uspekhi (Advances in Physical Sciences) 152 (6) (1987) 185–230.
- [10] **M.Ya. Amusya, V.K. Dolmatov, V.K. Ivanov**, Photoionization of atoms with half-filled shells, Zh. Eksp. Teor. Fiz. 85 (1) (1983) 115–123.
- [11] **A.A. Radtsig, B.M. Smirnov**, Parameters of atoms and atomic ions, Moscow, Energoatomizdat, 1986.
- [12] **A. Dasgupta, A.K. Bhatia**, Photoionization of sodium atoms and electron scattering from ionized sodium, Phys. Rev. A. 31 (2) (1985) 759–771.
- [13] **Jwei-Jun Chang, Hugh P. Kelly**, Photoabsorption of the neutral sodium atom: A many-body calculation, Phys. Rev. A. 12 (1) (1974) 92 – 98.
- [14] **H.F. Wolff, K. Radler, B. Sonntag, R. Haensel**, Photoabsorption of Atomic Sodium in the VUV, Z. Physik A. 257 (4) (1972) 353 – 368.
- [15] **S.K. Semenov, N.A. Cherepkov**, Generalization of the atomic RPA method for diatomic molecules: H_2 photoionization cross-section calculation, Chem. Phys. Lett. 291 (3-4) (1998) 375–380.
- [16] **S.K. Semenov, N.A. Cherepkov**, Photoionization of the H_2 molecule in the random phase approximation, J. Phys. B. 36 (7) (2003) 1409–1422.
- [17] **S.K. Semenov, N.A. Cherepkov, G.H. Fecher, G. Schunhense**, Generalization of the atomic random-phase-approximation method for diatomic molecules: N_2 photoionization cross-section calculations, Phys. Rev. A. 61 (3) (2000) 032704.

THE AUTHORS

KONOVALOV Aleksey V.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University

29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
alkonvit@yandex.ru

IPATOV Andrey N.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University

29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
andrei_ipatov@mail.ru