

АВТОИОНИЗАЦИОННЫЕ РЕЗОНАНСЫ В СПЕКТРАХ ФОТОПОГЛОЩЕНИЯ ИОНОВ ЖЕЛЕЗА Fe^{n+}

А. В. Коновалов*, А. Н. Ипатов**

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого
195251, Санкт-Петербург, Россия

Поступила в редакцию 20 апреля 2016 г.

В рамках релятивистского приближения случайных фаз с обменом проведены расчеты сечений фотопоглощения нейтрального атома железа, а также положительных ионов Fe^+ и Fe^{2+} в интервале энергий 20–160 эВ. Волновые функции основного и возбужденных состояний были рассчитаны в одноконфигурационном приближении Хартри–Фока–Дирака. Проведено сравнение полученных спектров фотопоглощения с экспериментальными данными, а также с результатами расчетов, выполненными на основе нерелятивистской спин-поляризованной версии приближения случайных фаз с обменом. В сечениях фотопоглощения отчетливо наблюдаются серии пиков автоионизационных резонансов, а также линии гигантских автоионизационных резонансов, соответствующие дискретным переходам $3p \rightarrow 3d$. Дополнительный учет корреляционного межэлектронного взаимодействия в рамках модели динамического поляризованного потенциала позволил существенно улучшить согласие положения расчетных пиков гигантских автоионизационных резонансов с экспериментальными данными.

DOI: 10.7868/S0044451016110031

1. ВВЕДЕНИЕ

Одним из фундаментальных процессов, изучение которого позволяет расширить понимание физики микромира, в частности конечных многочастичных ферми-систем, является атомный фотоэффект [1]. Исследование процессов фотоионизации дает возможность получить данные об электронной структуре атомов и внутриатомных межчастичных взаимодействиях. При взаимодействии многоэлектронных атомов с электромагнитным полем возникает ряд явлений, которые обусловлены многоэлектронными корреляциями, в частности динамической поляризуемостью электронных оболочек, и не могут быть объяснены в рамках приближения среднего поля [2]. Приближение случайных фаз с обменом [3–5], которое позволяет учесть ряд корреляционных процессов [6–9], успешно применялось для описания процессов фотоионизации ряда атомов, в частности ионизации атомов внешних оболочек благородных газов, в спектрах которых были обнаружены автоионизационные резонансные пики [10]. При

расчетах спектров фотопоглощения более тяжелых элементов оказывается необходимым учитывать релятивистские эффекты, используя релятивистское обобщение приближения случайных фаз с обменом (РПСФО) [11–13]. Кроме того, на форму сечения фотоионизации могут оказывать влияние эффекты, связанные с динамической поляризацией остова, учет которых вне рамок приближения среднего поля может быть осуществлен с помощью динамического поляризованного потенциала [14–18]. Это подтвердили недавно проведенные теоретические исследования автоионизационных резонансов в спектрах атомов щелочных металлов [19].

Оптические свойства ионов железа представляют интерес для астрофизических исследований, поскольку спектральные линии железа присутствуют в спектрах излучения большинства астрономических объектов. Актуальность теоретического подхода к описанию оптических спектров ионов железа обусловлена объективными проблемами при получении точных экспериментальных данных, в первую очередь, высокой температурой парообразования и недостаточной плотностью пучка ионов железа в процессе экспериментальных измерений. Целью данной работы является исследование влияния релятивистских и поляризованных эффектов на сечение фотоионизации атома железа и его положи-

* E-mail: alkonvit@yandex.ru

** E-mail: andrei_ipatov@mail.ru

тельных ионов в окрестности гигантского автоионизационного резонанса (ГАР) [5], обусловленного корреляционным взаимодействием вылетающего электрона с дискретным возбуждением с низколежащих оболочек на незаполненную оболочку основного состояния. В качестве объекта исследований были выбраны Fe^+ и Fe^{2+} , а также нейтральный атом железа, обладающие достаточно высокой поляризуемостью электронной системы по сравнению с более высокозаряженными ионами, для которых вклад поляризационных поправок пренебрежимо мал.

Используется атомная система единиц: $\hbar = |e| = m_e = 1$.

2. ТЕОРЕТИЧЕСКИЙ ПОДХОД

Релятивистский гамильтониан Хартри–Фока, описывающий систему из N взаимодействующих электронов в поле ядра с зарядом Z , имеет вид [20]

$$\hat{H}_{RHF} = \sum_{i=1}^N \left(c(\boldsymbol{\alpha}_i \cdot \mathbf{p}_i) + \beta_i c^2 + \frac{Z}{r_i} \right) + \sum_{i=1}^N \sum_{j<i}^N \left(\frac{1}{r_{ij}} - \frac{\boldsymbol{\alpha}_i \cdot \boldsymbol{\alpha}_j}{r_{ij}} \right). \quad (1)$$

Здесь первое слагаемое представляет собой сумму операторов кинетической энергии и электростатического притяжения к ядру, а второе — сумму членов, отвечающих за кулоновское и магнитное взаимодействия, $\boldsymbol{\alpha}$ и β — матрицы Дирака, выражающиеся через матрицы Паули $\boldsymbol{\sigma}$ и единичную матрицу I :

$$\boldsymbol{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma} \\ \boldsymbol{\sigma} & 0 \end{pmatrix}, \quad \beta = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix}.$$

Релятивистская двухкомпонентная волновая функция, описывающая стационарное состояние электрона в центральном поле, имеет вид [21]

$$\varphi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\sigma}) = \frac{1}{r} \begin{pmatrix} F_{n\kappa}(r)\Omega_{ljm_j}(\theta, \varphi) \\ i\alpha_0 G_{n\kappa}(r)\Omega_{l'jm_j}(\theta, \varphi) \end{pmatrix}, \quad (2)$$

где $F_{n\kappa}(r)$ и $G_{n\kappa}(r)$ — радиальные волновые функции большой и малой компонент биспинора Дирака, $\alpha_0 \approx 1/137$ — постоянная тонкой структуры, n, l, j, m_j — квантовые числа, описывающие стационарное состояние частицы (n и l — главное и орбитальное квантовые числа, j — квантовое число полного момента, m_j — проекция полного момента), κ — эффективный угловой момент,

$$\kappa = \begin{cases} -(j + 1/2) = -(l + 1), & l = j - 1/2, \\ j + 1/2 = l, & l = j + 1/2, \end{cases}$$

и

$$l' = 2j - l.$$

Функции Ω_{ljm_j} представляют собой шаровые спиноры, получаемые связыванием сферической функции Y_{lm_l} со спиновой функцией χ_{sm_s} в приближении jj -связи [22].

Так же как и в нерелятивистском приближении Хартри–Фока [2], в случае центрального поля при фиксированных угловых частях волновых функций после аналитического интегрирования по угловым переменным задача нахождения собственных функций гамильтониана (1) сводится к нахождению радиальных компонент волновых функций (2). Таким образом, для расчета одночастичных спектров основного и возбужденных состояний необходимо провести численное интегрирование системы радиальных уравнений [6]

$$F'_i(r) + \frac{\kappa_i}{r} F_i(r) - [2 + \alpha_0^2 (\varepsilon_i - U_i(r))] G_i(r) = -\frac{\alpha_0^2}{r} \sum_{j,k(j \neq i)}^s D(ijk) Y_{ij}^k(r) G_j(r), \quad (3)$$

$$G'_i(r) + \frac{\kappa_i}{r} G_i(r) - [\varepsilon_i - U_i(r)] F_i(r) = \frac{1}{r} \sum_{j,k(j \neq i)}^s D(ijk) Y_{ij}^k(r) F_j(r). \quad (4)$$

Здесь ε_i — одноэлектронная энергия i -й оболочки ($i = 1, 2, \dots, s$), $D(ijk)$ — угловые коэффициенты Слейтера для двухэлектронных интегралов, определенных как [2]

$$Y_{ij}^k(r) = r \int_0^\infty \frac{r'^k}{r'^{k+1}} \times [F_i(r') F_j(r') + \alpha_0^2 G_i(r') G_j(r')] dr',$$

$U_i(r)$ — полный самосогласованный потенциал, в поле которого движутся электроны. В данной работе численные расчеты выполнялись без учета обмена в малых компонентах, т. е. предполагалось, что слагаемые в правой части уравнения (3) дают пренебрежимо малый вклад в конечный результат.

Расчет амплитуд переходов в возбужденные состояния и сечений фотопоглощений проводился с использованием приближения случайных фаз с обменом (ПСФО) в двух версиях: спин-поляризованной (СПСФО) [7–9] и релятивистской (РПСФО) [11–13]. В рамках данного приближения

дипольная амплитуда перехода в операторной форме записывается в виде [1]

$$\hat{D}(\omega) = \frac{\hat{d}}{1 - \hat{\chi}(\omega)\hat{V}}, \quad (5)$$

где \hat{V} — оператор кулоновского парного межчастичного взаимодействия. При проведении численных расчетов дипольные и кулоновские матричные элементы вычислялись с учетом обеих компонент биспинора (2).

Одним из проявлений межканальных корреляций при многоканальных процессах фотопоглощения является появление пиков автоионизационных резонансов в спектрах фотопоглощения [1, 5]. Они наблюдаются 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 [1]

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

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, ε — безразмерная величина, определяемая соотношением $\varepsilon = 2(E - E_f)/\gamma$, γ — ширина резонансной линии, E_f — энергия дискретного перехода, взаимодействие с которым учитывается в процессе ионизации внешней оболочки.

Среди автоионизационных пиков выделяются линии ГАР [5], которые соответствуют дискретным переходам с низколежащих оболочек на незаполненную оболочку основного состояния. Пики ГАР отличаются высокой интенсивностью и значительной шириной линии.

Для уточнения энергий ионизации оболочек и положений пиков автоионизационных резонансов использовался метод динамического поляризационного потенциала, основанный на уравнении Дайсона [14–18]. Динамический поляризационный потенциал описывается собственно-энергетической частью функции Грина возбужденного электрона [18]. Для нахождения новой волновой функции электрона, движущегося в поле поляризованного остова, используется уравнение Дайсона

$$\left(\hat{H}_{RHF} - E \right) \varphi_E(\mathbf{r}) = \int \Sigma(E, \mathbf{r}, \mathbf{r}') \varphi_E(\mathbf{r}') d\mathbf{r}', \quad (7)$$

где E — энергия фотоэлектрона (дырки), $\varphi_E(\mathbf{r})$ — его волновая функция, $\Sigma(E, \mathbf{r}, \mathbf{r}')$ — неприводимая собственно-энергетическая часть функции Грина [1].

3. РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННЫХ РАСЧЕТОВ

3.1. Ион Fe⁺

Расчет сечения фотопоглощения однократно ионизованного атома железа проводился в двух приближениях — СПФСФО и РПСФО — в диапазоне энергий фотона от 15 до 160 эВ, т.е. в интервале энергий, в который попадают пороги ионизации наружных оболочек.

В нерелятивистском СПФСФО была выбрана конфигурация основного состояния однократно ионизованного атома железа с полностью заполненными подоболочками, обладающая минимальной полной энергией,

$$1s\uparrow 1s\uparrow 2s\uparrow 2s\uparrow 2p\uparrow^3 2p\downarrow^3 3s\uparrow^3 3s\downarrow^3 3p\uparrow^3 3p\downarrow^3 4s\uparrow^1 4s\downarrow^1.$$

В релятивистской версии для основного состояния иона железа Fe⁺ было рассмотрено несколько конфигураций основного состояния, энергии которых приведены в табл. 1.

Расчеты, проведенные в приближении Хартри–Фока–Дирака (ХФД), показали, что существуют как минимум три конфигурации с близкими энергиями, ... $3d_{(5/2)}^6 4s_{(1/2)}^1$, ... $3d_{(3/2)}^4 3d_{(5/2)}^3$ и ... $3d_{(3/2)}^4 3d_{(5/2)}^2 4s_{(1/2)}^1$. Для расчетов сечений фотоионизации в качестве основного состояния была выбрана первая конфигурация, обладающая наименьшей энергией. Ее выбор был также обусловлен возможностью включить дискретные переходы, $3p_{(1/2)} \rightarrow 3d_{(3/2)}$, $3p_{(3/2)} \rightarrow 3d_{(3/2)}$.

На рис. 1 приведены расчетные полные сечения фотоионизации, полученные в рамках обоих приближений, а также экспериментальная зависимость [23]. Видно, что РПСФО обеспечивает существенно лучшее качественное согласие результатов расчетов с экспериментальными данными, чем СПФСФО. Это касается как общего профиля кривой полного сечения фотоионизации, так и положений порогов ионизации оболочек и пиков автоионизационных резонансов.

Для улучшения согласия расчетных и экспериментальных результатов были дополнительно учтены поляризационные поправки к электронным энергиям и амплитудам дипольных переходов в рамках метода, основанного на уравнении Дайсона (УД) [19]. Для сравнения в табл. 2 приведены значения

Таблица 1. Полные энергии иона Fe⁺ с различными электронными конфигурациями

Электронная конфигурация	Полная энергия ХФД, эВ
$1s^2_{(1/2)}2s^2_{(1/2)}2p^2_{(1/2)}2p^4_{(3/2)}3s^2_{(1/2)}3p^2_{(1/2)}3p^4_{(3/2)}3d^6_{(5/2)}4s^1_{(1/2)}$	-34588.5
$1s^2_{(1/2)}2s^2_{(1/2)}2p^2_{(1/2)}2p^4_{(3/2)}3s^2_{(1/2)}3p^2_{(1/2)}3p^4_{(3/2)}3d^4_{(3/2)}3d^3_{(5/2)}$	-34588.39
$1s^2_{(1/2)}2s^2_{(1/2)}2p^2_{(1/2)}2p^4_{(3/2)}3s^2_{(1/2)}3p^2_{(1/2)}3p^4_{(3/2)}3d^4_{(3/2)}3d^1_{(5/2)}4s^2_{(1/2)}$	-34583.95
$1s^2_{(1/2)}2s^2_{(1/2)}2p^2_{(1/2)}2p^4_{(3/2)}3s^2_{(1/2)}3p^2_{(1/2)}3p^4_{(3/2)}3d^4_{(3/2)}3d^2_{(5/2)}4s^1_{(1/2)}$	-34588.47
$1s^2_{(1/2)}2s^2_{(1/2)}2p^2_{(1/2)}2p^4_{(3/2)}3s^2_{(1/2)}3p^2_{(1/2)}3p^4_{(3/2)}3d^5_{(5/2)}4s^2_{(1/2)}$	-34583.31

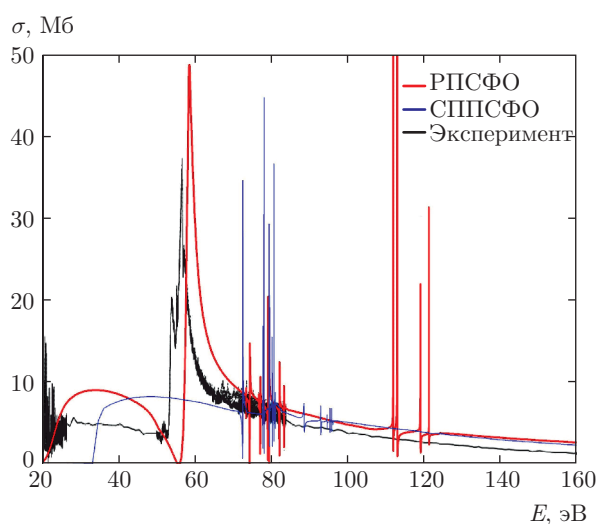


Рис. 1. (В цвете онлайн) Расчетные зависимости полного сечения фотопоглощения иона Fe⁺ от энергии фотона, полученные в рамках релятивистского (РПСФО) и спин-поляризованного (СППСФО) приближений случайных фаз с обменом. Для сравнения приведено экспериментальное сечение фотопоглощения [23]

Таблица 2. Энергии наружных оболочек основного состояния иона Fe⁺

Оболочка	ХФД, эВ	ХФД + УД, эВ
$3s^2_{(1/2)}$	-124.34	-124.42
$3p^2_{(1/2)}$	-80.404	-76.59
$3p^4_{(3/2)}$	-85.478	-81.664
$3d^6_{(5/2)}$	-24.765	-25.108
$4s^1_{(1/2)}$	-14.984	-16.08

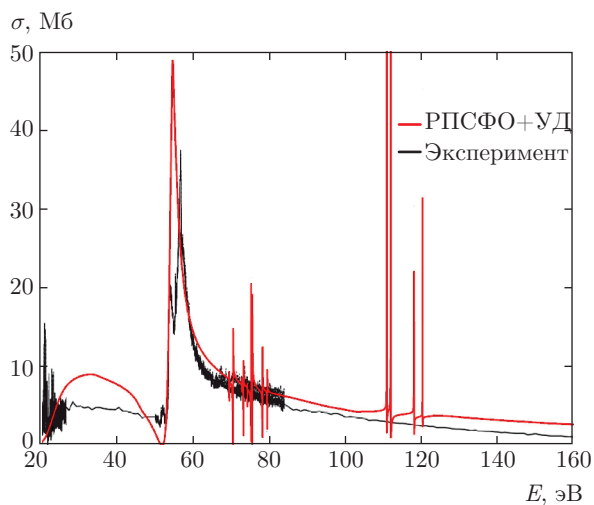


Рис. 2. (В цвете онлайн) Сравнение результатов расчета полного сечения фотопоглощения иона Fe⁺, проведенного в рамках РПСФО с использованием поляризационных поправок на основе уравнения Дайсона (УД), с экспериментальными данными [23]

энергий наружных оболочек основного состояния. На рис. 2 изображено полное сечение, рассчитанное в релятивистском приближении с учетом поляризационных поправок. Профили пиков автоионизационных резонансов приведены на рис. 3.

3.2. Ион Fe²⁺

Для иона Fe²⁺ также была выбрана конфигурация основного состояния с наиболее низкой энергией. Было рассмотрено пять возможных конфигураций, энергии которых приведены в табл. 3. Для проведения расчетов сечения фотопоглощения была выбрана конфигурация ...3d⁶_(5/2), обладающая наименьшей энергией и также позволяющая включить дискретные переходы 3p_(1/2) → 3d_(3/2) и

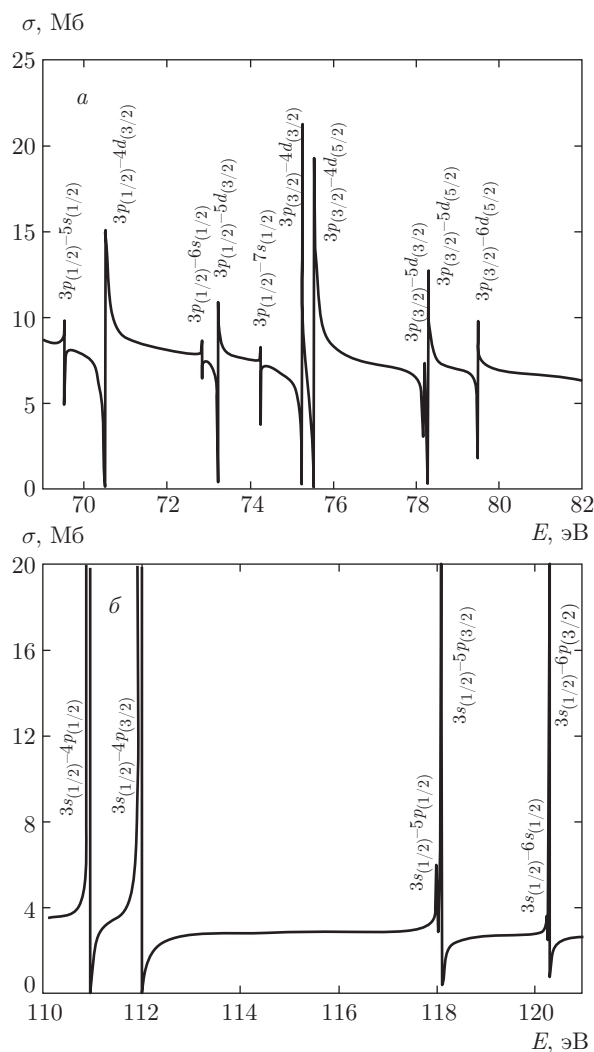


Рис. 3. Профили линий автоионизационных резонансов в сечении фотоионизации иона Fe^+ , обусловленных дискретными переходами из $3p$ -оболочек (а) и $3s$ -оболочки (б). Энергии оболочек вычислены с учетом поляризационных поправок

$3p_{(3/2)} \rightarrow 3d_{(3/2)}$. Как и в случае иона Fe^+ , сечение фотоионизации, рассчитанное в рамках РПСФО, намного лучше согласуется с имеющимися экспериментальными данными, чем кривая, полученная в нерелятивистском СПФСФО. Как видно из графиков, представленных на рис. 4, в районе 55 эВ и 60 эВ наблюдаются пики ГАР, существенно меняющие профиль зависимости.

В ходе дальнейших вычислений улучшение согласия теоретического расчета и экспериментальных данных [24] было достигнуто путем учета поляризационных эффектов. С использованием уравнения Дайсона для учета поляризационных поправок (ХФД+УД) и без их учета (ХФД) бы-

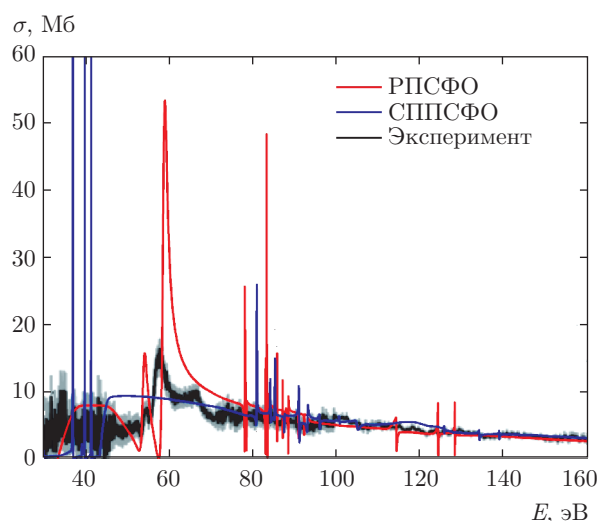


Рис. 4. (В цвете онлайн) Расчетные зависимости полного сечения фотопоглощения иона Fe^{2+} от энергии фотона, полученные в рамках РПСФО и СПФСФО. Для сравнения приведены экспериментальные данные [24]

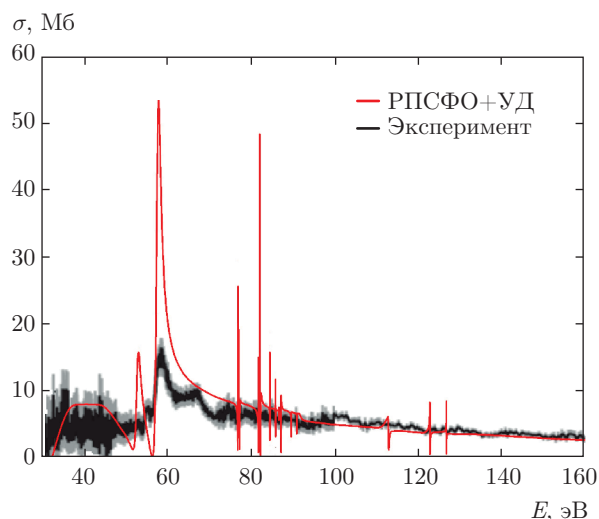


Рис. 5. (В цвете онлайн) Сравнение результатов расчета сечения фотопоглощения иона Fe^{2+} , проведенного в рамках РПСФО с использованием поляризационных поправок с помощью уравнения Дайсона (УД), с экспериментальными данными [24]

ли рассчитаны значения энергии ионизации наружной $3d_{(5/2)}^6$ -оболочки иона Fe^{2+} : соответственно -33.93 эВ и -34.76 эВ.

На рис. 5 приведены полученные расчетное и экспериментальное сечения фотопоглощения. Как видно из рисунка, учет поляризационного взаимодействия в многоэлектронной системе вновь привел к улучшению согласия между результатами вычислений и экспериментальными данными по сравнению с рис. 4.

Таблица 3. Полные энергии иона Fe²⁺ с различными электронными конфигурациями

Электронная конфигурация	Полная энергия ХФД, эВ
$1s^2_{(1/2)}2s^2_{(1/2)}2p^2_{(1/2)}2p^4_{(3/2)}3s^2_{(1/2)}3p^2_{(1/2)}3p^4_{(3/2)}3d^6_{(5/2)}$	-34573.62
$1s^2_{(1/2)}2s^2_{(1/2)}2p^2_{(1/2)}2p^4_{(3/2)}3s^2_{(1/2)}3p^2_{(1/2)}3p^4_{(3/2)}3d^4_{(3/2)}4s^2_{(1/2)}$	-34556.5
$1s^2_{(1/2)}2s^2_{(1/2)}2p^2_{(1/2)}2p^4_{(3/2)}3s^2_{(1/2)}3p^2_{(1/2)}3p^4_{(3/2)}3d^4_{(3/2)}3d^1_{(5/2)}4s^1_{(1/2)}$	-34567.81
$1s^2_{(1/2)}2s^2_{(1/2)}2p^2_{(1/2)}2p^4_{(3/2)}3s^2_{(1/2)}3p^2_{(1/2)}3p^4_{(3/2)}3d^4_{(3/2)}3d^2_{(5/2)}$	-34573.58
$1s^2_{(1/2)}2s^2_{(1/2)}2p^2_{(1/2)}2p^4_{(3/2)}3s^2_{(1/2)}3p^2_{(1/2)}3p^4_{(3/2)}3d^5_{(5/2)}4s^1_{(1/2)}$	-34567.17

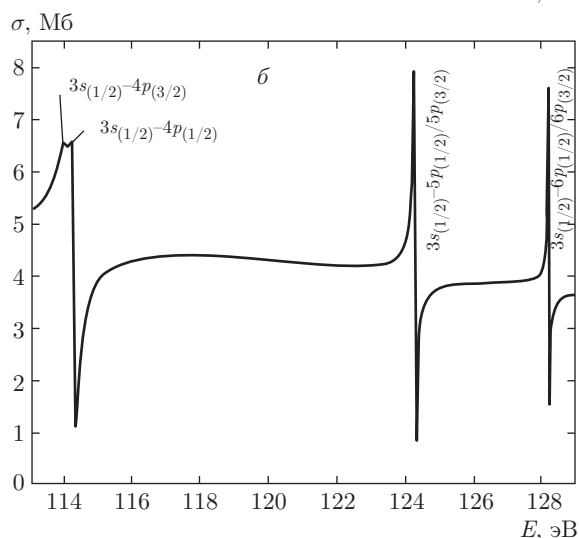
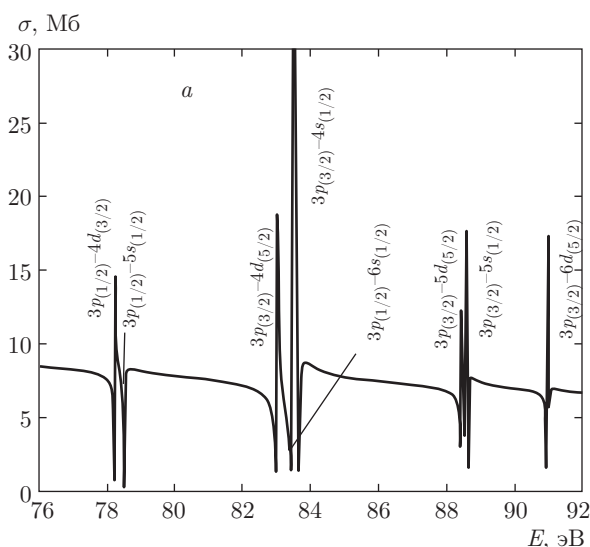


Рис. 6. Пики автоионизационных резонансов в сечении фотоионизации иона Fe²⁺, обусловленных дискретными переходами из 3p-оболочек (а) и 3s-оболочки (б). Энергии оболочек рассчитаны с учетом уравнения Дайсона

Помимо пиков ГАР, обусловленных переходами $3p_{(1/2)} \rightarrow 3d_{(3/2)}$ и $3p_{(3/2)} \rightarrow 3d_{(3/2)}$, в сечении фотоионизации также наблюдаются резонансные пики, связанные с другими дискретными переходами из 3p-подоболочек в диапазоне энергий 75–96 эВ и из 3s-оболочки в районе 115–130 эВ. Профили ряда автоионизационных пиков изображены на рис. 6.

На рис. 6б раздвоенность крайнего левого пика обусловлена тем, что разница энергий переходов $3s_{(1/2)} \rightarrow 4p_{(3/2)}$ и $3s_{(1/2)} \rightarrow 4p_{(1/2)}$ составляет около 0.05 эВ, что позволяет увидеть расщепление резонансной линии. У переходов $3s_{(1/2)} \rightarrow 5p_{(3/2)}$ и $3s_{(1/2)} \rightarrow 5p_{(1/2)}$, $3s_{(1/2)} \rightarrow 6p_{(3/2)}$ и $3s_{(1/2)} \rightarrow 6p_{(1/2)}$ разница энергий оказалась на порядок меньше, около 0.001 эВ, и, таким образом, оставшиеся два пика на графике выглядят нерасщепленными.

3.3. Нейтральный атом Fe

Вычисление сечений фотоионизации нейтрального атома Fe проводилось только в релятивистском приближении, которое, как показали предыдущие расчеты, обеспечивает существенно лучшее согласие с экспериментом. При проведении расчетов была использована конфигурация основного состояния с полностью заполненными электронными оболочками:

$$1s^2_{(1/2)}2s^2_{(1/2)}2p^2_{(1/2)}2p^4_{(3/2)}3s^2_{(1/2)}3p^2_{(1/2)}3p^4_{(3/2)}3d^6_{(5/2)}4s^2_{(1/2)}.$$

Сечения фотоионизации, полученные в приближениях «замороженного» остова и поляризованного остова (с учетом поляризационного потенциала), представлены на рис. 7. Энергии ионизации ряда наружных оболочек приведены в табл. 4, профили пиков автоионизационных резонансов изображены на рис. 8.

Таблица 4. Энергии наружных электронных оболочек нейтрального атома Fe

Оболочка	ХФД, эВ	ХФД + УД, эВ	Экспериментальные данные, эВ
$3s^2_{(1/2)}$	-116.1	-115.5	-98
$3p^2_{(1/2)}$	-72.105	-63.46	-61
$3p^4_{(3/2)}$	-77.12	-68.48	-59
$3d^6_{(5/2)}$	-16.4	-16.86	-16.7
$4s^2_{(1/2)}$	-7.166	-7.904	-7.9

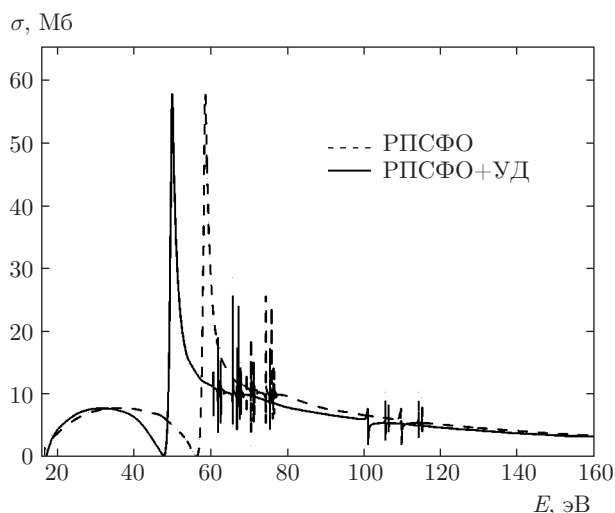


Рис. 7. Зависимости полного сечения фотопоглощения нейтрального атома Fe от энергии фотона с учетом поляризационных поправок в рамках метода уравнения Дайсона (УД) и без их учета

Для неглубоких оболочек, с учетом поляризационных поправок, удалось достичь приемлемого соответствия расчетных и экспериментальных [25] значений энергий ионизации. Для 4s-оболочки расхождение с экспериментальным значением составило 0.05 %, для оболочек $3p_{(3/2)}$ и $3p_{(1/2)}$ различие оказалось существенно большим, соответственно 16 % и 4 %. К сожалению, даже с учетом поляризационного потенциала не удалось в достаточной мере добиться улучшения согласия с экспериментом для энергии более глубокой 3s-оболочки.

Из рис. 7 видно, что включение поляризационного потенциала приводит к заметному смещению основного автоионизационного пика ГАР влево, при этом форма линии сохраняется и незначительно смещаются остальные пики.

4. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ РАСЧЕТОВ

Сравнение результатов расчетов спектров фотопоглощения нейтрального атома и положительных ионов железа, выполненных в релятивистском приближении случайных фаз с обменом (РПСФО) и в нерелятивистском спин-поляризованном приближении (СППСФО), показало, что СППСФО дает качественно адекватное описание сечений только в диапазоне энергий больше 80 эВ для обоих ионов. При этом нерелятивистские значения порогов ионизации электронных оболочек и положения резонансных пиков существенно расходятся с экспериментальными данными.

В диапазоне энергий 50–80 эВ основным фактором, определяющим профиль сечений фотопоглощения для всех трех систем, является пик гигантского автоионизационного резонанса (ГАР), обусловленный дискретными переходами $3p \rightarrow 3d$. Аппарат СППСФО позволяет описать эти пики, однако их ширины и положения оказываются далеки от экспериментальных. Так, для иона Fe^{2+} энергия перехода $3p_{\uparrow} \rightarrow 3d_{\uparrow}$ равна 24.53 эВ, что оказывается ниже полученного в спин-поляризованном приближении Хартри – Фока порога ионизации 4s-оболочки (25.9 эВ), поэтому соответствующий автоионизационный пик в сечении фотоионизации не наблюдается.

Помимо непосредственных численных расчетов было проведено сравнение полученных профилей пиков гигантских автоионизационных резонансов с аналитическими кривыми, описываемыми формулой Фано (6). Расчетные параметры, использованные при построении контуров, приведены в табл. 5, сами кривые изображены на рис. 9. Следует отметить, что, как видно из рис. 9a, в случае нейтрального атома наблюдается хорошее согласие формы оги-

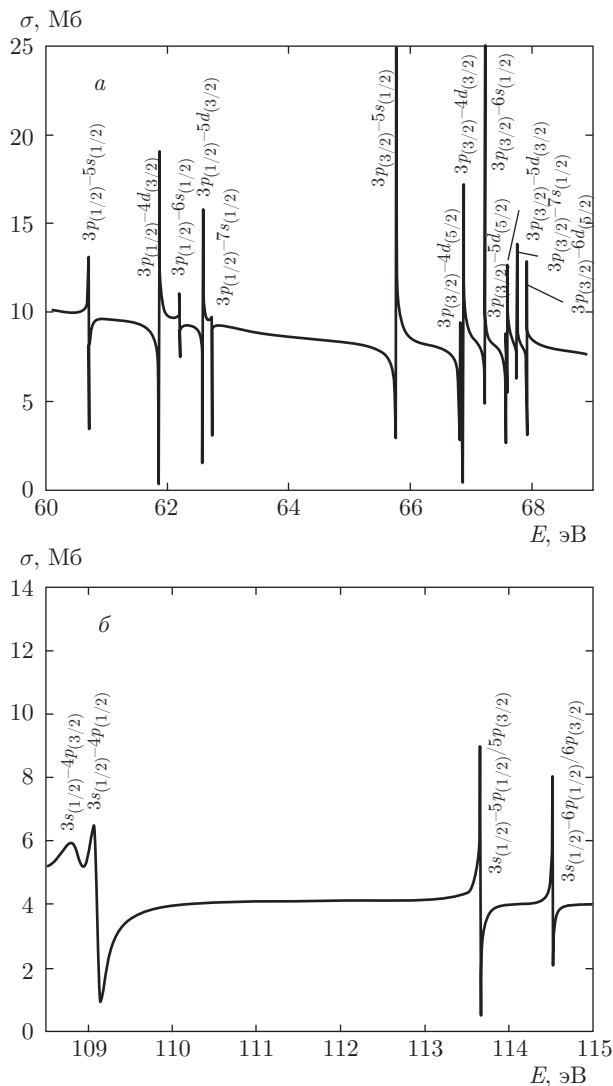


Рис. 8. Пики автоионизационных резонансов в сечении фотоионизации нейтрального атома Fe, обусловленных дискретными переходами из 3p-оболочек (а) и 3s-оболочки (б). Энергии оболочек рассчитаны с учетом поляризованного потенциала

Таблица 5. Параметры для построения контуров Фано

	σ_0 , Мб	q	γ , эВ	E_f , эВ
Fe	9	2.286	0.76	58.536
Fe ⁺	9	2.753	0.727	57.872
Fe ²⁺	7	2.628	0.52	58.943

бающей автоионизационного пика с контуром Фано, в то время как для ионов Fe⁺ и Fe²⁺, графики для которых приведены на рис. 9б,в, есть расхождение. Это может быть объяснено большей плотностью дискретных возбужденных состояний в интервале энергий, близких к частоте ГАР, в случае положительных ионов по сравнению с нейтральным атомом, взаимодействие с которыми приводит к изменению формы резонансного профиля.

Представленные результаты наглядно показывают, что расчеты, основанные на релятивистском приближении с учетом поляризационных поправок, обеспечивают хорошее согласие с экспериментальными данными при описании сечений фотопоглощения в окрестности ГАР. Для сравнения на рис. 10 приведены результаты численных расчетов сечения фотопоглощения иона Fe²⁺, выполненных другими авторами [26–33].

Как видно из представленных выше рис. 1 и 2, в экспериментальном сечении однократно заряженного иона железа наблюдаются две группы интенсивных линий: в области энергий ниже 25 эВ, в основном обусловленных дискретными переходами из оболочки 3d_(5/2), и широкий автоионизационный резонансный пик, связанный с переходами 3p_(1/2) → 3d_(3/2) и 3p_(3/2) → 3d_(3/2). В расчетных кривых полного сечения фотоионизации Fe⁺, полученных в рамках широко используемого в астрофизических исследованиях одночастичного приближения Хартри–Слэтера [32, 33], резонансный пик отсутствует, в то время как в нерезонансной области наблюдается качественное согласие экспериментальных и расчетных значений. Таким образом, подтверждается необходимость учета многочастичных корреляций при описании резонансных явлений в процессах фотопоглощения. С другой стороны, как видно из рис. 1 и 2, наши расчетные кривые не описывают тонкую структуру спектра фотопоглощения в области энергий ниже 26 эВ. Основной целью работы было исследование автоионизационных резонансов, в особенности связанных с дискретными переходами в незанятое состояние 3d_(3/2), поэтому при расчетах не было включено достаточное количество переходов из оболочек 3d_(5/2) и 4s_(1/2) для описания этой области спектра. Напротив, представленные в работах [29, 30] результаты расчетов, выполненных методом R-матрицы с учетом большого числа конфигураций, дают детальную картину спектра фотопоглощения именно в этой области частот.

Как следует из анализа результатов расчетов и сравнения с данными экспериментов, представленного в работе [24], расчеты, выполненные с исполь-

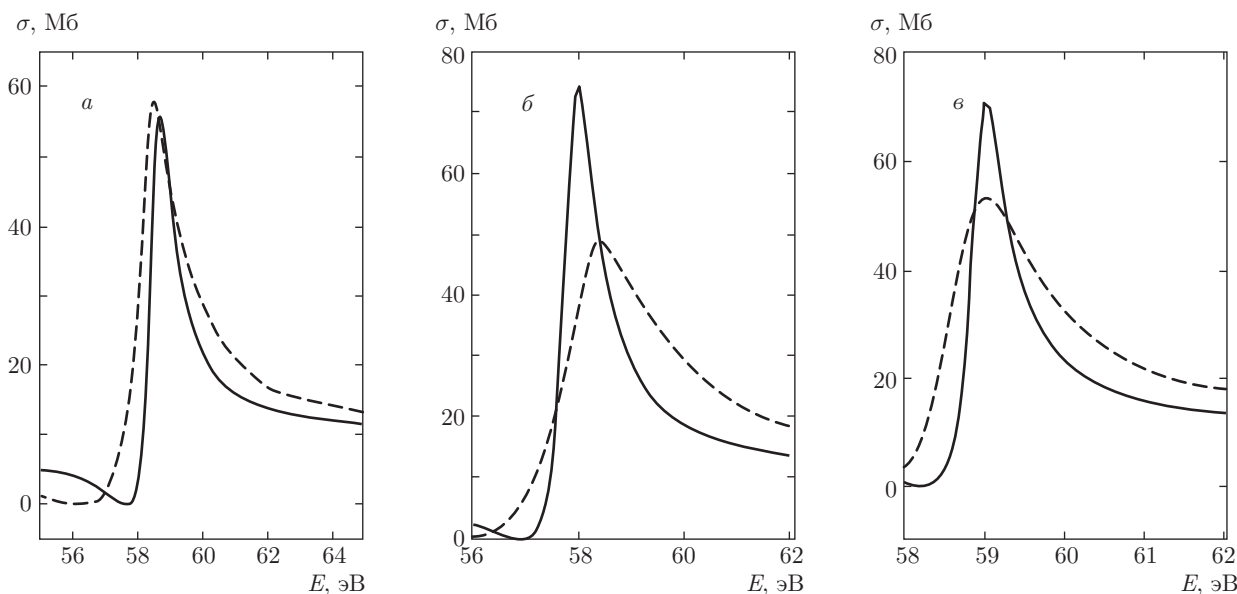


Рис. 9. Профили автоионизационных пиков ГАР, вычисленных в РПСФО (сплошные линии), и соответствующие контуры Фано (штриховые линии) для нейтрального атома железа (а), иона Fe⁺ (б) и иона Fe²⁺ (в)

зованием программного пакета OPAS в приближении jj -связи [26], обеспечивают удовлетворительное качественное согласие с экспериментальной зависимостью полного сечения фотопоглощения иона Fe²⁺ в области частот, содержащей широкий резонансный пик ГАР, а также в нерезонансной области выше 80 эВ. При этом, как видно из рис. 10а, расчетное сечение в области максимума более чем вдвое превосходит экспериментальное значение. Следует отметить, что, как видно из рис. 5, наш расчет, несмотря на лучшее совпадение положения главного резонансного пика, также предсказывает существенно большее значение сечения фотопоглощения в области главного максимума, который, кроме того, в экспериментальной зависимости имеет более сложную структуру [24]. Причины этого могут быть связаны с тем, что в проведенных расчетах не учитывались двухчастичные возбуждения, взаимодействие с которыми, как предполагалось в работе [24], может привести к уширению и фрагментации резонансной линии. Также следует отметить, что, как видно из анализа, проведенного в работе [24], расчеты, выполненные с использованием OPAS, обеспечивают хорошее согласие с экспериментальными сечениями в области ГАР для положительных ионов железа с зарядом +4 и выше, для которых поляризационные эффекты незначительны. В то же время, как можно увидеть на рис. 10а, для иона Fe²⁺ расчет на основе

OPAS дает заметное смещение резонансного пика в область более высоких энергий по сравнению с экспериментом. Та же картина наблюдалась в наших вычислениях, проводившихся без учета поляризационных поправок (см. рис. 1), что подтверждает необходимость включения поляризационных эффектов при описании процессов взаимодействия многоэлектронных атомов и слабозаряженных ионов с электромагнитным полем.

На рис. 10б,в для сравнения также представлены результаты расчетов, выполненных в рамках проекта Opacity в приближениях LS -связи [28] и jj -связи [29] методом R -матрицы. На обоих графиках отсутствует пик ГАР, поскольку при вычислениях не принимались в расчет переходы $3p \rightarrow 3d$, а основное внимание уделялось области дискретных возбуждений с энергиями ниже 40 эВ.

Наилучшее согласие с экспериментом и с нашими результатами в приближении РПСФО без учета поляризационных поправок (см. рис. 1) среди представленных на рис. 10 зависимостей демонстрирует график сечения фотопоглощения, приведенный на рис. 10г, численные значения для которого получены в работе [30] методом R -матрицы с учетом переходов $3p \rightarrow 3d$. Анализ результатов работы [30] показывает, что наилучшее согласие расчетных зависимостей с экспериментом наблюдается для ионов Fe⁵⁺ и Fe⁶⁺, причем данные хорошо согласуются

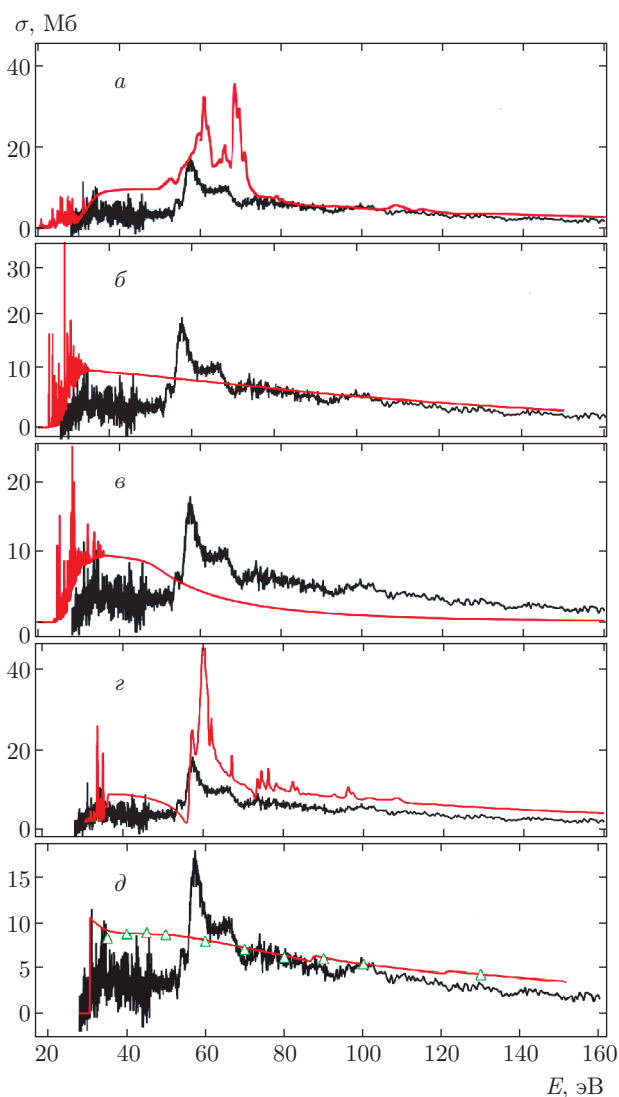


Рис. 10. (В цвете онлайн) Расчетные сечения фотоионизации иона Fe^{2+} , выполненные другими авторами в различных приближениях (красные линии) и экспериментальные данные (черные линии): *a* — расчет на основе пакета OPAS [24]; *b* и *c* — расчеты, проведенные в рамках Orasity Project методом *R*-матрицы в приближениях соответственно LS-связи [28] и *jj*-связи [29] без учета переходов $3p \rightarrow 3d$; *e* — результаты, полученные методом *R*-матрицы с учетом переходов $3p \rightarrow 3d$ [30]; *d* — результаты одноэлектронного приближения Хартри–Дирака–Слейтера [31, 32]

во всей области исследованных частот. Расхождения появляются для ионов с зарядом $+3$ и ниже, что вновь объясняется влиянием поляризационных эффектов, необходимость учета которых продемонстрирована на рис. 5.

Расчет с помощью одночастичного приближения Хартри–Дирака–Слейтера, результаты которого для сравнения также приведены на рис. 10*d*, позволяет достаточно хорошо оценить полное сечение фотопоглощения в нерезонансной области, однако оказывается неприменимым при описании ГАР и других автоионизационных линий.

Таким образом, можно сделать вывод о том, что большая часть расчетных кривых удовлетворительно описывает сечение фотопоглощения в диапазоне энергий 80–160 эВ, в то время как при более низких энергиях наблюдается заметное расхождение расчетной и экспериментальной зависимостей, в особенности в области ГАР. Из сравнения зависимостей, приведенных на рис. 10, с результатами наших вычислений (см. рис. 5) видно, что наш расчет обеспечивает лучшее согласие с экспериментом практически во всем диапазоне энергий, за исключением области дискретных переходов с энергиями ниже 26 эВ.

К сожалению, отсутствие свежих экспериментальных данных по фотоионизации нейтральных атомов железа не позволяет однозначно судить, насколько достоверен проведенный расчет для нейтрального атома. Однако общий профиль сечения демонстрирует качественное сходство с зависимостью для однократно ионизованного атома железа. В качестве возможного прогноза для будущих экспериментальных измерений можно предположить, что семейство пиков, связанных с переходами из $3s$ -оболочки (находящееся на расчетной кривой в диапазоне 100–108 эВ), будет находиться в диапазоне 83–91 эВ, так как согласно полученным результатам расхождение между значениями рассчитанной и экспериментально измеренной энергии $3s$ -оболочки (даже с учетом поляризационных эффектов) составляет около 17.5 эВ. Кроме того, рассчитанные пики ГАР, обусловленные переходами $3p_{(1/2)} \rightarrow 3d_{(3/2)}$ и $3p_{(3/2)} \rightarrow 3d_{(3/2)}$, на расчетном графике слились в один пик, который на экспериментальной зависимости может оказаться расщепленным.

На основании анализа полученных результатов и сравнения их с экспериментальными зависимостями и расчетными данными, полученными другими авторами, можно сделать вывод о необходимости использования релятивистского подхода с учетом поляризационных эффектов при описании сечений фотопоглощений атомов и ионов с незаполненными внутренними оболочками в рамках методов квантовой теории многих тел.

В заключение авторы выражают благодарность В. К. Иванову за полезные обсуждения при подготовке статьи.

ЛИТЕРАТУРА

1. М. Ya. Amusia, *Atomic Photoeffect*, Plenum Press, New York–London (1990).
2. Д. Хартри, *Расчеты атомных структур*, Изд-во иностр. лит., Москва (1960).
3. М. Ya. Amusia, N. A. Cherepkov, and L. V. Chernysheva, *Phys. Lett. A* **24**, 541 (1967).
4. М. Я. Амусья, В. К. Иванов, Н. А. Черепков, *ЖЭТФ* **60**, 160 (1974).
5. М. Я. Амусья, В. К. Иванов, *УФН* **152**, 185 (1987).
6. М. Ya. Amusia and L. V. Chernysheva, *Computation of Atomic Processes*, Institute of Physics Publ., Bristol–Philadelphia (1997).
7. М. Ya. Amusia, V. K. Ivanov, and L. V. Chernysheva, *J. Phys. B* **14**, L19 (1981).
8. М. Ya. Amusia, L. V. Chernysheva, and V. K. Ivanov, *Radiation Phys. Chem.* **59**, 137 (2000).
9. М. Ya. Amusia, L. V. Chernysheva, Z. Felffi et al., *Phys. Rev. Lett.* **88**, 093002 (2002).
10. М. Ya. Amusia and A. S. Kheifets, *Phys. Lett. A* **82**, 407 (1981).
11. W. R. Johnson and C. D. Lin, *Phys. Rev. A* **14**, 565 (1976).
12. W. R. Johnson and C. D. Lin, *J. Phys. B* **10**, L331 (1977).
13. I. P. Grant, *Adv. Phys.* **19**, 747 (1970).
14. Г. Ф. Грибакин, В. К. Иванов, М. Ю. Кучиев и др., Препринт № 1096 ФТИ им. А. Ф. Иоффе, Изд-во ЛИЯФ, Ленинград (1987).
15. L. V. Chernysheva, G. F. Gribakin, V. K. Ivanov et al., *J. Phys. B* **21**, L419 (1988).
16. Г. Ф. Грибакин, Б. В. Гульцев, В. К. Иванов и др., *Изв. вузов, физика* **33**, 86 (1990).
17. А. Н. Ипатов, В. К. Иванов, Р. Г. Полозков, *ЖЭТФ* **144**, 727 (2013).
18. М. Я. Амусья, В. К. Иванов, Н. А. Черепков и др., *Процессы в многоэлектронных атомах*, Наука, Санкт-Петербург (2006).
19. А. В. Коновалов, А. Н. Ипатов, Научно-технические ведомости СПбГПУ, физико-математические науки, вып. 1 (237), 87 (2016).
20. Г. Бете, Э. Солпитер, *Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами*, Физматлит, Москва (1960).
21. В. Б. Берестецкий, Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский, *Релятивистская квантовая теория*, ч. I, Наука, Москва (1968).
22. И. С. Кычкин, *Основы релятивистской теории многоэлектронных атомов и ионов*, Физматлит, Москва (1994).
23. Н. Kjeldsen, B. Kristensen, F. Folkmann et al., *J. Phys. B* **35**, 3655 (2002).
24. N. ElHassan, J. M. Bizau, C. P. Blancard et al., *Phys. Rev. A* **79**, 033415 (2009).
25. А. А. Радциг, Б. М. Смирнов, *Параметры атомов и атомных ионов*, Энергоатомиздат, Москва (1986).
26. J. D. Talman and B. A. Shadwick, *Phys. Rev. A* **14**, 36 (1976).
27. J. Bruneau, *J. Phys. B* **17**, 3009 (1984).
28. W. Cunto, C. Mendoza, F. Ochsenbein et al., *Astron. Astrophys.* **275**, L5 (1993).
29. S. N. Nahar, *Phys. Rev. A* **53**, 1545 (1996).
30. K. A. Berrington and C. Ballance, *J. Phys. B* **34**, 2697 (2001).
31. D. A. Verner and D. G. Yakovlev, *Astron. Astrophys. Suppl. Ser.* **109**, 125 (1995).
32. R. F. Reilman and S. T. Manson, *Phys. Rev. A* **18**, 2124 (1978).
33. D. A. Verner, G. J. Ferland et al., *Astrophys. J.* **465**, 487 (1996).