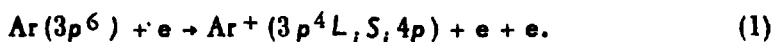


## ИОНИЗАЦИЯ АТОМОВ $\text{Ar}$ В ВОЗБУЖДЕННОЕ СОСТОЯНИЕ $\text{Ar}^+$

*Л.А.Вайнштейн, А.В.Виноградов*

В последнее время появились указания на существенную роль процессов столкновений электронов с атомом, при которых меняются состояния двух атомных электронов. Примером такого двойного процесса может служить ионизация атома  $\text{Ar}$  с одновременным возбуждением  $\text{Ar}^+$  [1,2]:



При описании атома ортогональными одноэлектронными волновыми функциями сечение этого процесса в первом борновском приближении равно нулю. В [1,3] для оценки сечения использовалось приближение внезапного возмущения. Предполагается, что выбитый электрон покидает атом настолько быстро, что состояние остальных электронов не успевает измениться. Отношение сечений двойного и однократного процессов при больших энергиях равно  $\Delta^2$ , где  $\Delta$  — интеграл неортогональности волновых функций атома и иона. К качественно аналогичным результатам приводит первое борновское приближение, если учесть неортогональность атомных функций в начальном и конечном состояниях [4]. Однако здесь изменение волновой функции выбитого электрона при возбуждении иона, а также различие в порогах учитываются более естественным образом.

Поскольку  $\Delta$  мало, сечение в первом порядке  $\sigma^I$  также мало, и может оказаться существенным второй порядок теории возмущений, в котором (1) рассматривается как переход через промежуточные уровни  $3p^5 4p$  и  $3p^5 E I$  ( $E, I$  — энергия и момент выбитого электрона).  $\sigma^{II}$  не зависит от  $\Delta$ .

Полное сечение процесса (1) равно (индексы 0 и 1 относятся к начальному и конечному состояниям).\*

$$\sigma = \frac{8}{k_0^2} \sum_{l_0} \int_0^{\epsilon} dE \int_{k_0-k_1}^{k_0+k_1} \frac{k_0+k_1 dq}{q^3} \sum_{L, S, M_L, M_S} |F(q, k_1)|^2, \quad q = k_1 - k_0, \quad (2)$$

где  $\epsilon$  — пороговая энергия,  $L, S, M_L, M_S$  — полные моменты системы  $\text{Ar}^+ + e$ .

Амплитуда рассеяния  $F = F^I + \sum_{\sigma} F_{\sigma}^{II}$  (сумма по промежуточным состояниям). Оценочные расчеты показали, что основной вклад в  $\sum_{\sigma} F_{\sigma}^{II}$  дает  $\sigma = 3p^5 EI$ . Если, кроме того, пренебречь интерференцией  $F^I$  и  $F^{II}$ , то  $\sigma = \sigma^I + \sigma^{II}$ . Величина  $\sigma^I$  вычислена нами в [4].  $F_{\sigma}^{II}$  можно записать в виде:

$$F_{\sigma}^{II}(q, k_1) = \int dR e^{-iqR} U_{0\sigma}(R) \int dx U_{\sigma 1}(R-x) \frac{e^{ik_{\sigma}x + ik_1x}}{2\pi x} \quad (3)$$

$$U = \sum_j |R - r_j|^{-1}, \quad k_{\sigma}^2 = k_0^2 + 2(E_0 - E_{\sigma}) = k_1^2 + 2(E_1 - E_{\sigma}).$$

При  $k_1 = 0$  формула (3) значительно упрощается [5]:

$$F_{\sigma}^{II}(q) = \frac{2}{K^2} \int dR e^{-iqR} U_{0\sigma}(R) Q_{\sigma 1}(R) dR \quad (4)$$

$$Q = \sum_j [\exp\{i\sqrt{2(E_1 - E_{\sigma})}|r_j - R|\} - 1] |R - r_j|^{-1} \quad (5)$$

$$K^2 = 2(E_1 - E_{\sigma}) \equiv k_{\sigma 1}^2. \quad (6)$$

С другой стороны, пользуясь квазиклассическим приближением, можно показать, что при больших энергиях  $F^{II} \sim k_{\sigma}^{-1}$ . Поскольку практическое использование формулы (3) связано с весьма серьезными трудностями, мы воспользуемся приближенной интерполяционной формулой. Именно, положим  $F_{\sigma}^{II}$  равным (4), но вместо (6) примем.

$$K^2 = k_{\sigma} k_{\sigma 1}. \quad (7)$$

Это приближение было апробировано на задаче о двойном возбуждении  $Ca$ , где возможен точный расчет  $F^{II}$  [5].

При больших  $(E_1 - E_{\sigma})$  быстроосциллирующей величиной в (5) можно пренебречь и (6) (с точностью до интерпретации множителя  $K$ ) совпадает с известным адиабатическим приближением, в котором функция Грина  $e^{ik_{\sigma}x}/2\pi x$  заменяется на  $-2\delta(x)/k_{\sigma}^2$ . Таким образом, для применимости адиабатического приближения кроме малости  $k_1$  необходимо, чтобы расстояние от конечного уровня до промежуточного было велико.

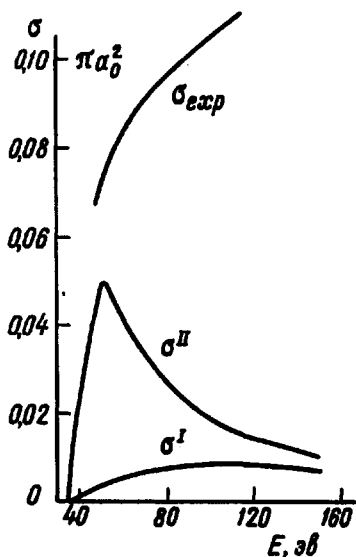
Выполнив суммирование по моментам (в схеме  $LS$ -связи), интегрирование по углам и ограничившись для простоты первым членом в разложении  $Q_{\sigma 1}$  по мультиполям, получим:

$$\sum_{LSML_S} |F_{II}(q)|^2 = 30 \left[ \frac{q^2}{K^2} G_{LSI}^{ZP} \right]^2 \sum_{\lambda=|\pm 1} \frac{2(l+\lambda+1)}{2\lambda+1} \left| \int_0^{\infty} y_{0\sigma}^{\lambda} Z_{\sigma 1} i_{\lambda}(qr) r^2 dr \right|^2 \quad (8)$$

$$y_{0\sigma}^{\lambda}(r) = \int_{r >}^{\leq} \frac{r^{\lambda}}{r^{\lambda+1}} R_{3p}(r') R_{E1}(r') r'^2 dr'$$

$$Z_{\sigma 1}(r) = \int [i k_{\sigma 1} i_0(k_{\sigma 1} r <) h_0^{(1)}(k_{\sigma 1} r >) - \frac{1}{r >}] R_{3p}(r') R_{4p}(r') r'^2 dr', \quad (9)$$

где  $G$  — генеалогический коэффициент Рака,  $R_{3P}$  и  $R_{4P}$  — полуэмпирические радиальные функции  $Ag(3p^6)$  и  $Ag^+(3p^44p)$ ,  $R_{E1}$  — радиальная функция выбитого электрона в поле  $Ag^+(3p^44p)$ ;  $i_\lambda$  и  $h_0^{(l)}$  — сферические функции Бесселя и Ханкеля (последняя комплексная, но это почти не усложняет расчеты). Суммирование по  $l$  в (2) проводилось до  $l=6$ . Эффективные сечения возбуждения термов  $L, S_1$  исходного иона  $Ag^{++}$  относятся как  $G^2$  для  $\sigma^{II}$  и  $G^2\Delta^2$  для  $\sigma^I$ . Величины  $\Delta^2$ , вычисленные с помощью полуэмпирических волновых функций [6] равны:  $\Delta^2(3P) = 1,4 \cdot 10^{-3}$ ,  $\Delta^2(1S) = 3,5 \cdot 10^{-3}$ ,  $\Delta^2(1D) = 4,5 \cdot 10^{-3}$ . На рисунке приведены  $\sigma^I$  и  $\sigma^{II}$  для  $3P$  терма  $Ag^{++}$ . Следует, однако, отметить, что  $\Delta$ , а следовательно и  $\sigma^I$  весьма чувствительны к энергии уровня. В част-



ности нарушение схемы  $LS$ -связи, существенное в случае  $Ag$ , приводит к перемешиванию термов с разными энергиями, т.е. к значительному изменению "эффективного значения"  $\Delta$ . Оценки показывают, что при этом суммарное по  $LS$  сечение  $\sigma^I$ , по-видимому, существенно возрастет, в то время как  $\sigma^{II}$  изменится мало.\*\*

На том же рисунке приведена экспериментальная кривая из опубликованной недавно работы [7] (сечение, просуммирование по семи уровням). Превышение экспериментальных сечений над теоретическими вероятно в значительной мере обусловлено нарушением  $LS$ -связи, а также ролью каскадов (последнее отмечается авторами [7]).

Авторы благодарны Л.П.Преснякову за ценные дискуссии.

Физический институт  
им. П.Н.Лебедева  
Академии наук СССР

Поступило в редакцию  
6 октября 1966 г.

## Литература

- [1] W.R.Bennet. Appl. Opt. Suppl., 2, 3, 1965.  
 [2] S.Koozekanani. Quantum Electronics, QE-2, 87, 1B4, 1966.  
 [3] M.H.Mittleman. Phys. Rev. Lett., 16, 498, 1966.  
 [4] Л.А.Вайнштейн, А.В.Виноградов. Оптика и спектроскопия, 23, 1967 (в печати)  
 [5] И.Л.Бейгман, Л.А.Вайнштейн, А.В.Виноградов. Препринт ФИАН, № 5, 1967.  
 [6] Л.А.Вайнштейн. Оптика и Спектроскопия, 3, 313, 1957.  
 [7] W.R.Bennet, Jr., G.N.Mercer, P.I.Kindlmann, B.Wexler, H.Hyman. Phys. Rev. Lett., 17, 987, 1966.

\* Используются атомные единицы с единицей  $\pi\alpha_0^2$  для  $\sigma$ .

\*\* В схеме LS-связи согласно (8) возбуждается только  $^2P$ -терм.

## О САМОВОЗДЕЙСТВИИ СВЕТА В КРИСТАЛЛАХ

Л.А.Островский

1. Возможность наблюдения самофокусировки [1-5] и других эффектов "самовоздействия" [6] света связывается сейчас почти исключительно с кубической нелинейностью зависимости поляризации от поля в жидкостях, так как последние характеризуются большими значениями добавки к нелинейной поляризуемости [7,8]. Для кристаллов соответствующие значения обычно много меньше. Однако в кристаллах, не обладающих центром инверсии, возможно сильное самовоздействие из-за реакции второй гармоники. В этом случае интересны и специфические эффекты, обусловленные анизотропией. Ниже рассматриваются особенности такого механизма и даются простейшие оценки.

Взаимодействие волн с частотами  $\omega, 2\omega$  в квадратичной среде приводит к появлению на соответствующих частотах векторов нелинейной поляризации

$$P_i^{(2\omega)} = \chi_{ikl}^{(2\omega)} E_k^{(\omega)} E_l^{(2\omega)}(a); P_i^{(\omega)} = \chi_{ikl}^{(2\omega-\omega)} E_k^*(\omega) E_l^{(2\omega)}(b). \quad (1)$$

Определяя  $E^{(2\omega)}$  по (1, a) в приближении заданного поля (справедливом всюду, кроме направлений синхронизма) и подставляя результат в (1, б), получим для  $P_i^{(\omega)}$  в квазиплоской волне выражение вида

$$P_i^{(\omega)} = \theta_{iklm} A_k^* A_l A_m e^{-ik \cdot r} + P_i' e^{-i(k_1 - k_2) \cdot r}. \quad (2)$$

Здесь  $A$  — амплитуда основной волны,  $K_{1,2}$  — значения волнового вектора соответственно на частотах  $\omega, 2\omega$ ;  $\hat{A}$  — тензор, пропорциональный произведению тензоров  $\hat{\chi}^{(2\omega)}$  и  $\hat{\chi}^{(2\omega-\omega)}$ ;  $P_i'$  — поляризация, связанная с собственными волнами на частоте  $2\omega$  и определяемая из граничных условий. Поскольку размеры кристалла обычно много больше