УДК 53.01

РАСЧЕТ СЕЧЕНИЯ ФОТОИОНИЗАЦИИ ОТРИЦАТЕЛЬНОГО ИОНА ВОДОРОДА В РЕГУЛЯРНОЙ ТЕОРИИ ВОЗМУЩЕНИЙ

ЗУНГ ВАН ЛЫ¹⁾, И. Д. ФЕРАНЧУК¹⁾

¹⁾Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030, г. Минск, Республика Беларусь

Регулярная теория возмущений в приближении эффективного заряда апробируется при вычислении сечения фотоионизации иона *H*⁻. Показано, что суммирование по конечным состояниям системы можно осуществить в замкнутой форме с помощью двухчастичной кулоновской функции Грина. Выполнен аналитический расчет сечения в нулевом приближении регулярной теории возмущений и с учетом поправок к волновым функциям основного и возбужденного состояний системы. Проведено сравнение теоретических расчетов с известными экспериментальными данными, которое показало, что точность нулевого приближения регулярной теории возмущений при вычислении сечения имеет ту же величину, что и в расчетах энергии стационарных состояний. Учет поправок в рамках регулярной теории возмущений позволил оценить вклад различных промежуточных состояний в полное сечение.

Ключевые слова: сечения фотоионизации; ион водорода; регулярная теория возмущений; функция Грина.

CALCULATION OF PHOTOIONIZATION CROSS SECTION OF THE NEGATIVELY CHARGED HYDROGEN ION IN REGULAR PERTURBATION THEORY

DUNG VAN LU^a, I. D. FERANCHUK^a

^aBelarusian State University, Nezavisimosti avenue, 4, 220030, Minsk, Republic of Belarus

Regular perturbation theory in the approximation of the effective charge is being tested in the calculating of photoionization cross section for H^- ion. It is shown that the summation over the final states of the system is carried out in the closed form by using the twoparticle Coulomb Green's function. Analytical results are found in the zero approximation of regular perturbation theory and by taking into account corrections to the wave functions of the ground and excited states of the system. Comparison of theoretical results and experimental data demonstrated that the accuracy of the regular perturbation theory zero approximation for the cross section is the same value as for the stationary state energies. Analysis of the next order corrections in the framework of regular perturbation theory allows one to evaluate the contribution of different intermediate states in the total cross-section.

Key words: photoionization cross section; hydrogen ion; regular perturbation theory; Green function.

Задача о сечении фотоионизации отрицательного иона водорода (H^{-}) представляет большой интерес для астрофизики, поскольку этот процесс в основном определяет поглощение инфракрасного и видимого излучения в фотосфере звезд в широком температурном диапазоне [1, 2]. Детальный обзор теоретических и экспериментальных результатов, полученных к настоящему времени в исследовании этого

Образец цитирования:

Зунг Ван Лы, Феранчук И. Д. Расчет сечения фотоионизации отрицательного иона водорода в регулярной теории возмущений // Вестн. БГУ. Сер. 1, Физика. Математика. Информатика. 2016. № 2. С. 60–66.

Авторы:

Зунг Ван Лы – аспирант кафедры теоретической физики и астрофизики физического факультета. Научный руководитель – И. Д. Феранчук.

Илья Давыдович Феранчук – доктор физико-математических наук, профессор; заведующий кафедрой теоретической физики и астрофизики физического факультета.

For citation:

Dung Van Lu, Feranchuk I. D. Calculation of photoionization cross section of the negatively charged hydrogen ion in regular perturbation theory. *Vestnik BGU. Ser. 1, Fiz. Mat. Inform.* 2016. No. 2. P. 60–66 (in Russ.).

Authors:

Dung Van Lu, postgraduate student at the department of theoretic physics and astrophysics, faculty of physics. *dvanlu@email.com*

Ilya Feranchuk, doctor of science (physics and mathematics), full professor; head of the department of theoretic physics and astrophysics, faculty of physics. *feranchuk@bsu.by*

процесса, приведен в работе [3], там же представлены новые экспериментальные измерения сечения фотоионизации, в которых были обнаружены достаточно заметные расхождения с теоретическими результатами. Как было отмечено в [3], ион H^- является одной из простейших систем и устранение этого расхождения имеет принципиальное значение для выяснения роли межэлектронных корреляций при описании взаимодействия атомов с внешними полями. Важно подчеркнуть, что энергия и волновые функции начального (основного) состояния H^- найдены вариационным методом с очень высокой точностью [4], поэтому главным источником расхождения теории и эксперимента является, по-видимому, недостаточно полный учет корреляционных эффектов при суммировании по конечным состояниям системы, образованной из атома водорода и электрона.

В некоторых случаях суммирование по конечным состояниям квантовой системы можно выполнить методом, который успешно применялся для расчетов характеристик, определяющих взаимодействие водородоподобных атомов с внешними полями [5, 6]. Данный метод заключается в представлении суммы через одночастичную функцию Грина для электрона в кулоновском поле, для которой используется хорошо известное аналитическое выражение. В нашей работе [7] было также построено аналитическое представление для функции Грина системы двух электронов в кулоновском поле и на этой основе развита регулярная теория возмущений (РТВ) для вычисления энергии и волновых функций основного и возбужденного состояний атома гелия. Уже во втором порядке РТВ обеспечивала точность порядка 0,1 %. Важной особенностью РТВ является возможность вычисления поправок к нулевому приближению без введения дополнительных вариационных параметров и обобщения этого метода для много-электронных систем [8].

Цель настоящей работы – апробация эффективности РТВ при вычислении вероятностей переходов в квантовых системах на примере расчета полного сечения фотоионизации иона H^- . В связи с этим оно в общем виде представлено через функцию Грина атомной системы с энергией, соответствующей начальному состоянию. Для иллюстрации эффективности метода вычислено сечение фотоионизации (фотоэффекта) для атома водорода и результат сравнивается с хорошо известным значением, полученным при прямом суммировании по конечным состояниям [9]. В случае двухэлектронной системы, которой является ион H^- , волновые функции начального состояния и функция Грина системы в конечном состоянии вычисляются на основе РТВ с использованием в нулевом порядке приближения эффективного заряда. Далее, рассчитаны вклады в полное сечение за счет поправок первого порядка, что позволяет оценить роль различных промежуточных состояний системы в процессе фотоионизации.

Предположим, что атомная система, состоящая из N электронов, описывается гамильтонианом H с набором собственных векторов $|\Psi_v(\xi)\rangle$ и собственных значений E_v :

$$\widehat{H} | \Psi_{\nu}(\xi) \rangle = E_{\nu} | \Psi_{\nu}(\xi) \rangle, \qquad (1)$$

причем квантовые числа ν включают как непрерывный, так и дискретный спектр, а набор переменных 5 определяется координатами и спинами всех электронов.

Введем также функцию Грина системы

$$(\widehat{H} - E) G_E(\xi, \xi') = \delta(\xi, \xi'),$$

$$G_E(\xi, \xi') = -\sum_{\nu} \frac{|\Psi_{\nu}(\xi)\rangle \langle \Psi_{\nu}(\xi)|}{E - E_{\nu}}.$$

$$(2)$$

Взаимодействие атома с электромагнитным полем определяется оператором [9] (выбрана система единиц с $\hbar = c = 1$):

$$\widehat{V}_{e} = \frac{-e_{0}\sqrt{4\pi}}{\sqrt{2\omega}} \sum_{l=1}^{N} \frac{\left(\vec{e}_{s}\vec{p}_{l}\right)}{m} \left(e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}a_{\vec{k},s} + e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}}a_{\vec{k},s}^{+}\right),\tag{3}$$

где $e_0 \left(e_0^2 = \alpha = \frac{1}{137} \right)$ – заряд электрона; *m* – масса электрона; \vec{p}_l – оператор импульса атомного элект-

рона; $a_{\vec{k},s}$, $a_{\vec{k},s}^+$ – операторы уничтожения и рождения фотона с поляризацией \vec{e}_s , волновым вектором \vec{k} и частотой $\boldsymbol{\omega} = |\vec{k}|$.

В дальнейших формулах используем также атомные единицы, в которых m = 1 и единицами длины и энергии являются боровский радиус a_0 и атомная единица энергии ε_0 соответственно [9]:

$$a_0 = 0,529 \cdot 10^{-8} \text{ cm}; \ \varepsilon_0 = 27,21 eV; \ \omega \to \frac{\hbar \omega [eV]}{\varepsilon_0}$$

Для диапазона частот фотонов, представляющего интерес в рассматриваемой задаче, в операторе (3) можно использовать дипольное приближение, опуская экспоненты. Тогда полное сечение поглощения фотона, соответствующее переходу атома из начального состояния $|\Psi_i\rangle$ в произвольное конечное состояние $|\Psi_f\rangle$ в первом порядке теории возмущений по оператору \hat{V}_e , определяется следующим выражением [9]:

$$\sigma = \frac{4\pi^2 \alpha}{\omega} \sum_{f} \left| \left\langle \Psi_f \left| \left(\vec{e}_s \sum_{l=1}^{N} \vec{\nabla}_l \right) \right| \Psi_i \right\rangle \right|^2 \delta \left(E_i + \omega - E_f \right).$$
(4)

При частоте фотона ($\omega + E_i$) > 0, т. е. E_f > 0, это выражение описывает сечение фотоэффекта, когда атомная система переходит в состояния непрерывного спектра. Поскольку квадрат матричного элемента является действительной величиной, то, используя тождество

$$\delta(E_i + \omega - E_f) = \frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \frac{1}{E_i + \omega - E_f - i\delta}$$

формулу (4) можно преобразовать к следующему виду:

$$\sigma = \frac{4\pi\alpha}{\omega} \operatorname{Im} \sum_{f} \frac{\left\langle \Psi_{i}(\xi) \middle| \left(\vec{e}_{s} \sum_{l=1}^{N} \vec{\nabla}_{l}\right) \middle| \Psi_{f}(\xi) \right\rangle \left\langle \Psi_{f}(\xi') \middle| \left(\vec{e}_{s} \sum_{l=1}^{N} \vec{\nabla}_{l'}\right) \middle| \Psi_{i}(\xi') \right\rangle}{E_{i} + \omega - E_{f} - i\delta} = \frac{4\pi\alpha}{\omega} \operatorname{Im} \int d\xi \, d\xi' G_{E_{i} + \omega - i\delta}(\xi, \xi') \left(\vec{e}_{s} \sum_{l=1}^{N} \vec{\nabla}_{l} \Psi_{i}^{*}(\xi) \right) \left(\vec{e}_{s} \sum_{l=1}^{N} \vec{\nabla}_{l'} \Psi_{i}(\xi') \right).$$
(5)

Таким образом, суммирование по конечным состояниям системы сводится к вычислению матричного элемента от функции Грина по волновым функциям начального состояния.

Для того чтобы оценить эффективность исследуемого подхода, рассмотрим сечение фотоэффекта для водородоподобного атома с зарядом ядра Z, когда суммирование в (4) можно выполнить аналитически [9]. Тогда волновая функция основного состояния имеет простой вид

$$\Psi_{i}(\vec{r}) = R_{10}(r)Y_{00}(\Omega) = \frac{2Z^{3/2}e^{-Zr}}{\sqrt{4\pi}}; \ E_{i} \equiv E_{0} = -\frac{Z^{2}}{2}.$$

Без нарушения общности ось квантования при интегрировании по угловым переменным атома можно выбрать вдоль вектора поляризации фотона $\vec{e}_s \parallel Oz$, так что

$$\left(\vec{e}_{s}\vec{\nabla}\right)\Psi_{i}\left(\vec{r}\right)=-Z\cos\theta\Psi_{i}\left(\vec{r}\right)=-Z\sqrt{\frac{4\pi}{3}}Y_{10}\left(\Omega\right)\Psi_{i}\left(\vec{r}\right).$$

Для одноэлектронного атома аналитическое решение уравнения (2) – кулоновская функция Грина (КФГ) – хорошо известно. Оно приведено, например, в [7]. Используя разложение этой функции по сферическим гармоникам и интегрируя по угловым переменным, находим

$$\sigma = -\frac{16\pi\alpha Z^{5}}{3\omega} \operatorname{Im} \int d\Omega \, d\Omega' dr \, dr' r^{2} r'^{2} \sum_{l, m_{l}} G_{\omega + E_{0} - i\delta, l}^{(1)}(r, r') Y_{l, m_{l}}^{*}(\Omega) Y_{l, m_{l}}(\Omega') \times \times Y_{10}(\Omega) Y_{10}(\Omega') e^{-Z(r+r')} = -\frac{16\pi\alpha Z^{5}}{3\omega} \operatorname{Im} \int dr \, dr' r \, r' G_{\omega + E_{0} - i\delta, l}^{(1)}(r, r') e^{-Z(r+r')},$$
(6)

где

$$G_{\omega+E_{0}-i\delta,l}^{(1)}(r,r') = \frac{\nu\Gamma(2-\nu)}{Z\Gamma(4)} M_{\nu,3/2} \left(\frac{2Z}{\nu}r_{<}\right) W_{\nu,3/2} \left(\frac{2Z}{\nu}r_{>}\right), \nu = \frac{Z}{\sqrt{-2(\omega+E_{0}-i\delta)}};$$

$$\sigma = -\frac{8\pi\alpha Z^{4}}{9\omega} \operatorname{Im} \left[\nu\Gamma(2-\nu)\int_{0}^{\infty} dr_{0}^{r} dr' M_{\nu,3/2} \left(\frac{2Z}{\nu}r'\right) W_{\nu,3/2} \left(\frac{2Z}{\nu}r\right) e^{-Z(r+r')}rr' + \int_{0}^{\infty} dr\int_{r}^{\infty} dr' M_{\nu,3/2} \left(\frac{2Z}{\nu}r\right) W_{\nu,3/2} \left(\frac{2Z}{\nu}r'\right) e^{-Z(r+r')}rr' \right].$$
(7)

Здесь *М* и *W* – функции Уиттекера. Отметим, что роль параметра $\delta \rightarrow 0$ состоит в выделении правильного знака в определении значения v, который соответствует положительному знаку величины σ в (6).

Интегралы в формуле (7) можно найти численно в пакете *Mathematica* с любой необходимой точностью. Полученные результаты, как показывает рисунок, совпадают с результатами вычислений по формуле для сечения фотоэффекта на атоме водорода, полученными прямым суммированием по конечным состояниям [9] (при переходе к обычным единицам результат необходимо умножить на $a_0^2 \approx 2,80 \cdot 10^{-17}$ см²):

$$\sigma = -\frac{2^9 \pi \alpha}{3Z^2} \left(\frac{|E_0|}{\omega}\right)^4 \frac{e^{-4u \arctan u}}{1 - e^{-2\pi u}}; \quad u = \sqrt{\frac{|E_0|}{\omega + E_0}}.$$
(8)



Численные результаты (•) совпадают с результатами вычислений по формуле (8) для сечения фотоэффекта на атоме водорода (+), полученными прямым суммированием по конечным состояниям [9]

В задаче о фотоионизации иона H^- аналитическое решение уравнений (1), (2) не найдено, поэтому для определения как волновой функции основного состояния, так и функции Грина необходимо использовать приближенные методы. В настоящей работе эти вычисления выполнены в рамках РТВ [7], которая основана на использовании в качестве нулевого приближения модели эффективного заряда.

При решении уравнения Шрёдингера для начального вектора состояния системы РТВ строится с оператором возмущения, определенным следующим образом:

$$\widehat{H} | \Psi_0(1, 2) \rangle = E_0 | \Psi_0(1, 2) \rangle; \ \widehat{H} = \widehat{H}_0(1, 2) + \widehat{V},$$
$$\widehat{H}_0(1, 2) = \frac{1}{2} (\widehat{p}_1^2 + \widehat{p}_2^2) - Z^* \left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2}\right); \ \widehat{V}(1, 2) = -(Z - Z^*) \left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2}\right) + \frac{1}{|\vec{r_1} - \vec{r_2}|},$$

где $Z^* = Z - \frac{5}{16}$ – эффективный заряд.

При таком выборе в [7, 8] было построено аналитическое представление для двухчастичной КФГ $G_E^{(2)}(Z^*, \vec{r_1}, \vec{r_2}, \vec{r_1}, \vec{r_2})$ и во втором порядке РТВ найдено

$$E_{0} \approx -Z^{2} + \frac{5}{8}Z - 0,15759; \quad \Psi_{0}^{(0)}(\vec{r}_{1},\vec{r}_{2}) = 4Z^{*3}e^{-Z^{*3}(r_{1}+r_{2})}Y_{00}(\Omega_{1})Y_{00}(\Omega_{2});$$

$$\Psi_{0}(\vec{r}_{1},\vec{r}_{2}) \approx \Psi_{0}^{(0)}(\vec{r}_{1},\vec{r}_{2}) - \int d\vec{r}_{1}' d\vec{r}_{2}' G_{E}^{(2)}(Z^{*},\vec{r}_{1},\vec{r}_{2},\vec{r}_{1}',\vec{r}_{2}')\hat{V}(1,2)\Psi_{0}^{(0)}(\vec{r}_{1}',\vec{r}_{2}').$$
(9)

Для иона водорода заряд равен Z = 1, $E_0 \approx -0.5326$. Таким образом, однопараметрическая функция (9) обеспечивала точность ≈ 1 % по сравнению с вариационным вычислением энергии с помощью пробной волновой функции основного состояния с большим числом параметров ($E_0 \approx -0.5278$). Указанной точности достаточно для решения поставленной задачи, поскольку расхождение между экспериментальными и теоретическими значениями, обнаруженное в [3], составляет величину ≈ 20 %.

В конечном состоянии системы один электрон остается в связанном состоянии, а второй переходит в состояние непрерывного спектра, поэтому корреляция между электронами достаточно мала и гамильтониан нулевого приближения можно выбрать в следующем виде:

$$\widehat{H} | \Psi_f (1, 2) \rangle = E_f | \Psi_f (1, 2) \rangle; \quad \widehat{H} = \widehat{H}_f^0 (1, 2) + \widehat{V}_f;$$
$$\widehat{H}_f^0 (1, 2) = \frac{1}{2} (\widehat{p}_1^2 + \widehat{p}_2^2) - Z \left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right); \quad \widehat{V}_f (1, 2) = \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}.$$

Поскольку оператор возмущения не зависит от спина электронов, то начальному и конечному состояниям иона H^- соответствуют полный спин S = 0 и симметричная по координатам волновая функция, тогда разложение РТВ для $|\Psi_f(1, 2)\rangle$ отличается от (9):

$$\Psi_{f}^{(0)}(\vec{r}_{1}, \vec{r}_{2}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \Big[\Psi_{v}(\vec{r}_{1}) \Psi_{\bar{p}}(\vec{r}_{2}) + \Psi_{v}(\vec{r}_{2}) \Psi_{\bar{p}}(\vec{r}_{1}) \Big];$$

$$\Psi_{f}(\vec{r}_{1}, \vec{r}_{2}) \approx \Psi_{f}^{(0)}(\vec{r}_{1}, \vec{r}_{2}) - \int d\vec{r}_{1}' d\vec{r}_{2}' G_{E}^{(2)}(Z, \vec{r}_{1}, \vec{r}_{2}, \vec{r}_{1}', \vec{r}_{2}') \widehat{V}(1, 2) \Psi_{f}^{(0)}(\vec{r}_{1}', \vec{r}_{2}'),$$
(10)

где ψ_v , $\psi_{\bar{p}}$ – хорошо известные волновые функции электрона в кулоновском поле ядра, отвечающие дискретному и непрерывному спектрам соответственно.

Тогда с учетом симметрии волновых функций по координатам электронов выражение для сечения фотоионизации (5) в нулевом приближении РТВ принимает следующий вид:

$$\sigma \approx \frac{16\pi\alpha}{\omega} \operatorname{Im}\sum_{\mathbf{v},\,\vec{p}} \frac{\left\langle \Psi_{0}^{(0)}(\vec{r_{1}},\,\vec{r_{2}}) \middle| \left(\vec{e}_{s}\,\vec{\nabla}_{1}\right) \middle| \Psi_{f}^{(0)}(\vec{r_{1}},\,\vec{r_{2}}) \right\rangle \left\langle \Psi_{f}^{(0)}(\vec{r_{1}}',\,\vec{r_{2}}') \middle| \left(\vec{e}_{s}\,\vec{\nabla}_{1}'\right) \middle| \Psi_{0}^{(0)}(\vec{r_{1}}',\,\vec{r_{2}}') \right\rangle}{\omega + E_{0} - E_{f} - i\delta}.$$
(11)

В эксперименте [3] сечение измерялось при частоте фотона, близкой к порогу ионизации. Тогда основной вклад в сумму по конечным состояниям дискретного спектра вносит переход, в котором конечный атом водорода остается в основном состоянии [4]. В то же время сумма по состояниям непрерывного спектра заменяется на КФГ аналогично (5):

$$\sigma \approx -\frac{32\pi\alpha}{\omega} \operatorname{Im} \int d\vec{r}_{1} d\vec{r}_{2} d\vec{r}_{1}' d\vec{r}_{2}' G_{\omega + E_{0} - E_{0}^{(0)} - i\delta}(\vec{r}_{2}, \vec{r}_{2}') \Psi_{0}^{*}(\vec{r}_{1}) \Psi_{0}(\vec{r}_{1}') \times \\ \times \left(\vec{e}_{s} \vec{\nabla}_{1} \Psi_{0}^{(0)}(\vec{r}_{1}, \vec{r}_{2})\right) \left(\vec{e}_{s} \vec{\nabla}_{1}' \Psi_{0}^{(0)}(\vec{r}_{1}', \vec{r}_{2}')\right),$$
(12)

где $E_0^{(0)} = \frac{-Z^2}{2}$.

После подстановки в это выражение функций (9), (12) и (6) и значения частоты фотона $\omega = 0,042\,823$, соответствующей эксперименту [3], численный расчет по формуле (12) дает для сечения в нулевом приближении РТВ следующую величину (после умножения на a_0^2):

$$\sigma_{\rm th}^{(0)} \approx 2.9 \cdot 10^{-21} \,{\rm M}^2,\tag{13}$$

которую следует сравнить с экспериментальным значением

$$\sigma_{\rm exp}^{(0)} \approx 4.2 \cdot 10^{-21} \,\,{\rm m}^2. \tag{14}$$

Сравнение значений (13) и (14) показывает, что нулевое приближение РТВ, соответствующее независимым электронам, обеспечивает точность порядка 25 % при вычислении сечения, как это имеет место и при вычислении энергии (9). Это означает, что корреляционные эффекты существенно влияют на вероятность рассматриваемого процесса. Учет следующего порядка РТВ позволяет оценить вклады различных промежуточных состояний в искомое сечение.

Рассмотрим сначала поправку, обусловленную корреляцией электронов в конечном состоянии в соответствии со вторым слагаемым в формуле (10). Эту поправку удобнее учесть, рассматривая изменение двухчастичной функции Грина системы в конечном состоянии в соответствии с уравнением (12) и симметрией по координатам электронов:

$$(H_0 + V_f - E)G_f = \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2); \ G_f \approx G_0 - \int G_0 V_f G_0 d\vec{r}_1' d\vec{r}_2' \equiv G_0 + G_1;$$

$$G_0(\vec{r}_1, \vec{r}_1', \vec{r}_2, \vec{r}_2') \approx G_{\omega + E_0 - E_0^{(0)} - i\delta}(\vec{r}_2, \vec{r}_2') \Psi_0^*(\vec{r}_1) \Psi_0(\vec{r}_1') + G_{\omega + E_0 - E_0^{(0)} - i\delta}(\vec{r}_1, \vec{r}_1') \Psi_0^*(\vec{r}_2) \Psi_0(\vec{r}_2'),$$

так что поправка к сечению за счет корреляции электронов в конечном состоянии определяется следующим выражением:

$$\sigma^{(1)} = 4 \frac{4\pi\alpha}{\omega} \operatorname{Im} \left\langle \Psi_0^{(0)} \middle| \left(\vec{e}_s \vec{p} \right) G_1 \left(\vec{e}_s \vec{p} \right) \middle| \Psi_0^{(0)} \right\rangle.$$

Вычисление этой поправки при указанных выше параметрах дает значение

$$\sigma_{\rm th}^{(1)} \approx -0,004 \cdot 10^{-21} \,{\rm M}^2.$$

Дополнительный вклад в сечение определяется тем, что атом водорода в результате фотоионизации остается не в основном, а в одном из возбужденных связанных состояний. Для оценки величины этой поправки учтем два низколежащих возбужденных состояния 2S и 2P при суммировании по промежуточным состояниям в формулах (10), (12):

$$\Psi_{f}^{(0)}(\vec{r_{1}}, \vec{r_{2}}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \Big[\Psi_{2S, 2P}(\vec{r_{1}})(\vec{r_{1}}) \Psi_{\bar{P}}(\vec{r_{2}}) + \Psi_{2S, 2P}(\vec{r_{2}}) \Psi_{\bar{P}}(\vec{r_{1}}) \Big],$$

где $\Psi_{2S, 2P}$ – хорошо известные волновые функции электрона в кулоновском поле ядра с эффективным зарядом Z = 1.

Тогда с учетом симметрии волновых функций по координатам электронов выражение для вклада в сечение фотоионизации от этих состояний принимает следующий вид:

$$\sigma_{2S, 2P}^{(1)} \approx -\frac{16\pi\alpha}{\omega} \operatorname{Im} \int d\vec{r}_{1} d\vec{r}_{2} d\vec{r}_{1}' d\vec{r}_{2}' G_{\omega + E_{0} - E_{2S, 2P}^{(0)} + i\delta}(\vec{r}_{2}, \vec{r}_{2}') \Psi_{2S, 2P}^{*}(\vec{r}_{1}) \Psi_{2S, 2P}(\vec{r}_{1}') \times \\ \times \left(\vec{e}_{s} \vec{\nabla}_{1} \Psi_{0}^{(0)}(\vec{r}_{1}, \vec{r}_{2})\right) \left(\vec{e}_{s} \vec{\nabla}_{1}' \Psi_{0}^{(0)}(\vec{r}_{1}', \vec{r}_{2}')\right),$$
(15)

где без учета релятивистских эффектов $E_{2S}^{(0)} = E_{2P}^{(0)} = -\frac{1}{8}$ и функции $G_{\omega + E_0 - E_{2S, 2P}^{(0)} - i\delta}$ вычисляется при эффективном заряде $Z_1 \to 0$.

В результате вычислений по формуле (15) находим

$$\sigma_{2S}^{(1)} \approx 0, \, \sigma_{2P}^{(1)} \approx 0.$$

Отсутствие этого вклада объясняется тем, что энергии фотона недостаточно для возбуждения подобных промежуточных состояний.

Еще одна поправка к сечению связана с учетом отклонения двухэлектронной волновой функции иона водорода от приближения эффективного заряда за счет корреляции электронов в основном состоянии, которая описывается вторым слагаемым в формуле (9):

$$\begin{split} \Psi_{0}(\vec{r_{1}}, \vec{r_{2}}) &\approx \Psi_{0}^{(0)}(\vec{r_{1}}, \vec{r_{2}}) - \int d\vec{r_{1}}' \, d\vec{r_{2}}' \, G_{\omega + E_{0} - i\delta}^{(2)}(\vec{r_{1}}, \vec{r_{2}}, \vec{r_{1}}', \vec{r_{2}}') \hat{V}(1, 2) \Psi_{0}^{(0)}(\vec{r_{1}}', \vec{r_{2}}') \equiv \\ &\equiv \Psi_{0}^{(0)}(\vec{r_{1}}, \vec{r_{2}}) + \Psi_{0}^{(1)}(\vec{r_{1}}, \vec{r_{2}}), \end{split}$$

65

×

где двухчастичная функция Грина соответствует эффективному заряду нулевого приближения $Z^* = \frac{11}{16}$.

В общем случае она включает все промежуточные состояния системы и может быть найдена методом, описанным в [7]. Однако вычисление полного вклада от этой поправки требует расчета многомерного интеграла [7] и будет рассмотрено в отдельной работе. Здесь приближенно оценим вклад этой поправки (учитывая переходы в промежуточные состояния только одного из электронов), выраженной

через одночастичную кулоновскую функцию Грина для эффективного заряда $Z^* = \frac{11}{16}$:

$$G_{\omega+E_0-i\delta}^{(2)}(\vec{r_1}, \vec{r_2}, \vec{r_1'}, \vec{r_2'}) \approx \Psi_0^*(\vec{r_1})\Psi_0(\vec{r_1'})G_{\omega+E_0+Z^{*2/2}-i\delta}(\vec{r_2}, \vec{r_2'}).$$

После симметризации по координатам электронов поправка к сечению в формуле (11) за счет корреляции электронов в основном состоянии принимает следующий вид:

$$\sigma_{0}^{(1)} \approx -\frac{16\pi\alpha}{\omega} \operatorname{Im} \int d\vec{r}_{1} d\vec{r}_{2} d\vec{r}_{1}' d\vec{r}_{2}' G_{\omega + E_{0} - E_{0}^{(0)} - i\delta} (\vec{r}_{2}, \vec{r}_{2}') \Psi_{0}^{*}(\vec{r}_{1}) \Psi_{0}(\vec{r}_{1}') \times \\ \times \left[\left(\vec{e}_{s} \vec{\nabla}_{2} \Psi_{0}^{(0)}(\vec{r}_{1}, \vec{r}_{2}) \right) \left(\vec{e}_{s} \vec{\nabla}_{2}' \Psi_{0}^{(0)}(\vec{r}_{1}', \vec{r}_{2}') \right) + \left(\vec{e}_{s} \vec{\nabla}_{2} \Psi_{0}^{(1)*}(\vec{r}_{1}, \vec{r}_{2}) \right) \left(\vec{e}_{s} \vec{\nabla}_{2}' \Psi_{0}^{(0)}(\vec{r}_{1}', \vec{r}_{2}') \right) \right].$$

Численное значение этой поправки при параметрах эксперимента [3]:

 $\sigma_0^{(1)} \approx 0.19 \cdot 10^{-21} \text{ m}^2.$

Полученные результаты показывают, что в нулевом порядке РТВ расчет матричных элементов переходов для атомной системы обеспечивает такую же точность, как и для энергии стационарных состояний. В то же время РТВ позволяет вычислить корреляционные поправки к наблюдаемым характеристикам системы без введения дополнительных вариационных параметров.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК (REFERENCES)

1. Aller L. H. The Atmospheres of the Sun and Stars. 2nd ed. N. Y., 1963.

2. Motz L. Astrophysics and Stellar Structure. Massachusetts, 1970.

3. Vandevraye \dot{M} , Babilotte Ph., Drag C., Blondel C. Laser measurement of the photodetachment cross-section of H⁻ at the wavelength 1064 nm // Phys. Rev. A. 2014. Vol. 90, issue 1. P. 013411 [Vandevraye M., Babilotte Ph., Drag C., Blondel C. Laser measurement of the photodetachment cross-section of H⁻ at the wavelength 1064 nm. Phys. Rev. A. 2014. Vol. 90, issue 1. P. 013411 (in Engl.)].

4. Frolov A. M. Bound state properties and photodetachment of the negatively charged hydrogen ions // Eur. Phys. J. D. 2015. Vol. 69, N_{0} 5. P. 132 [Frolov A. M. Bound state properties and photodetachment of the negatively charged hydrogen ions. *Eur. Phys. J. D.* 2015. Vol. 69, No. 5. P. 132 (in Engl.)].

5. Dalgarno A. M., Dalgarno A., Lewis J. T. The exact calculation of long-range forces between atoms by perturbation theory // Proc. R. Soc. A. 1955. Vol. 233, № 1192. P. 70 [Dalgarno A. M., Dalgarno A., Lewis J. T. The exact calculation of long-range forces between atoms by perturbation theory. *Proc. R. Soc. A.* 1955. Vol. 233, No. 1192. P. 70 (in Engl.)].

6. Shakeshaft R. Integral representation of the Coulomb Green function derived from the Sturmian expansion // Phys. Rev. A. 2004. Vol. 70, N_{0} 4. P. 042704 [Shakeshaft R. Integral representation of the Coulomb Green function derived from the Sturmian expansion. *Phys. Rev. A.* 2004. Vol. 70, No. 4. P. 042704 (in Engl.)].

7. Feranchuk I. D., Triguk V. V. Regular perturbation theory for two-electron atoms // Phys. Lett. A. 2011. Vol. 375, issue 26. P. 2550–2554 [Feranchuk I. D., Triguk V. V. Regular perturbation theory for two-electron atoms. *Phys. Lett. A.* 2011. Vol. 375, issue 26. P. 2550–2554 (in Engl.)].

8. Feranchuk I., Ivanov A., Le V.-H., Ulyanenkov A. Nonperturbative description of quantum systems. Berlin, 2015.

9. Berestetskii V. B., Lifshitz E. M., Pitaevskii L. P. Quantum Electrodynamics. Moscow, 1980.

Статья поступила в редколлегию 26.02.2016. Received by editorial board 26.02.2016.