

# Динамика фотоионизации атомов благородных газов между первым и вторым порогом ионизации



Ростовский государственный  
университет путей сообщения,  
Россия

Технический университет  
Кайзерслаутерн,  
Германия

В Л Сухоруков  
И Д Петров

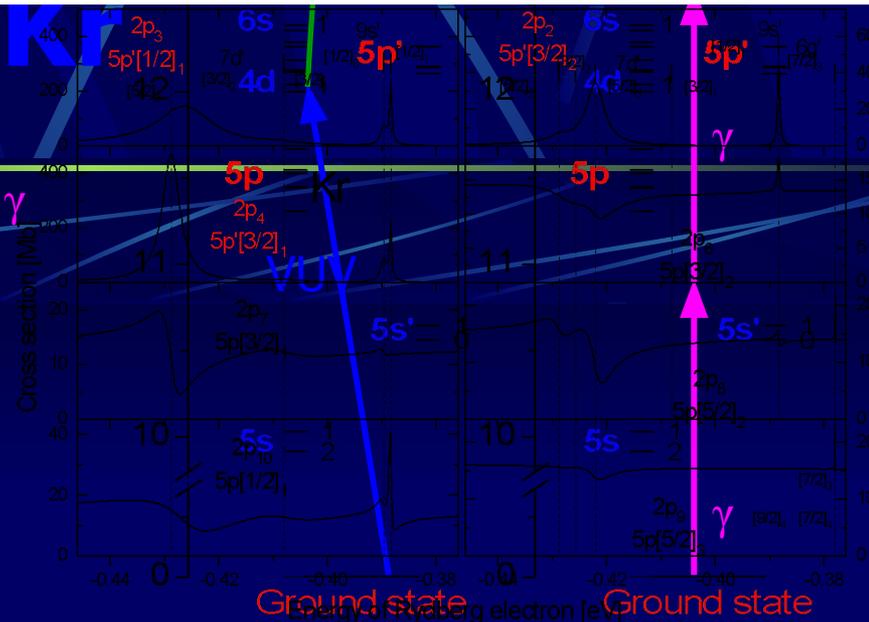
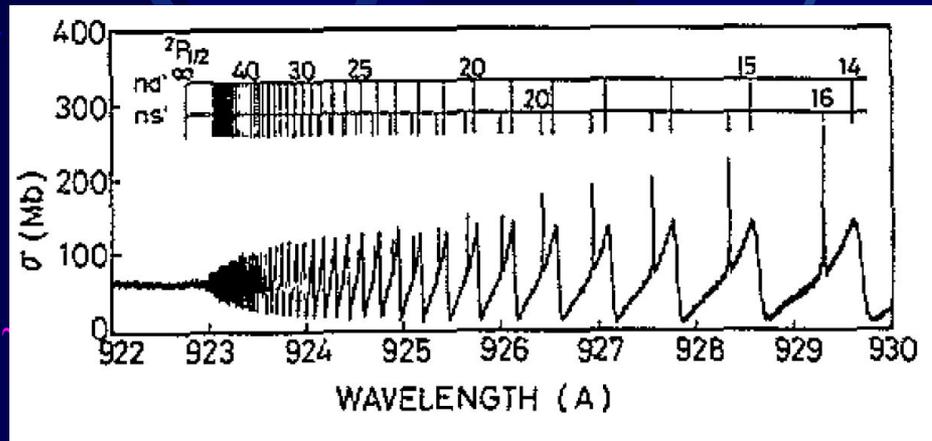
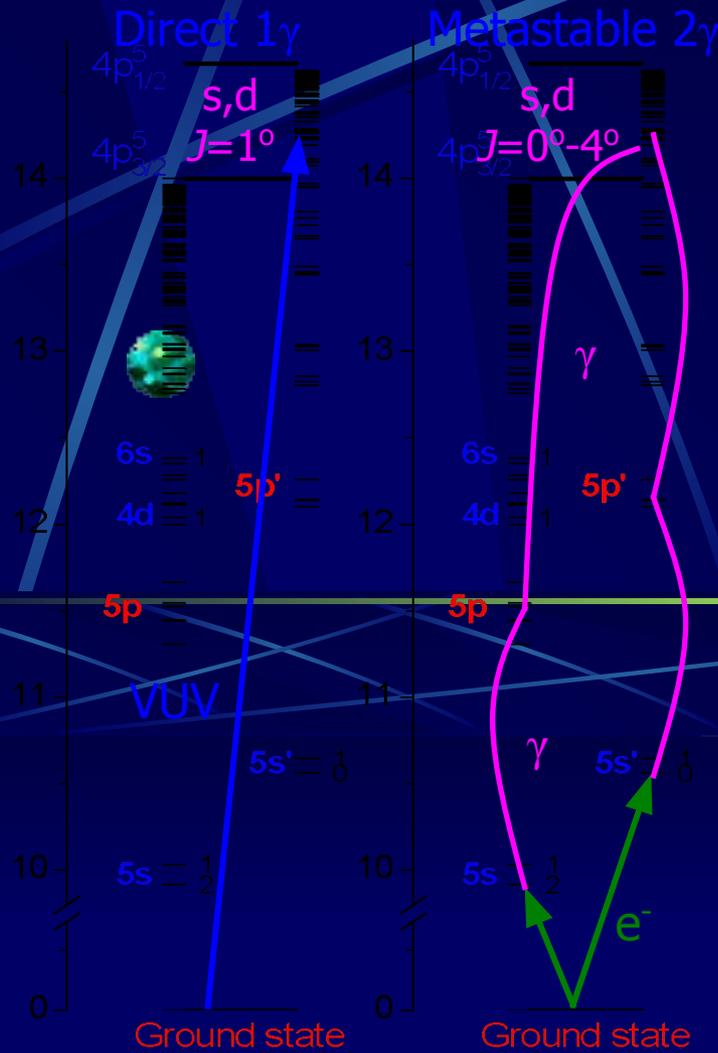


Х Хотоп

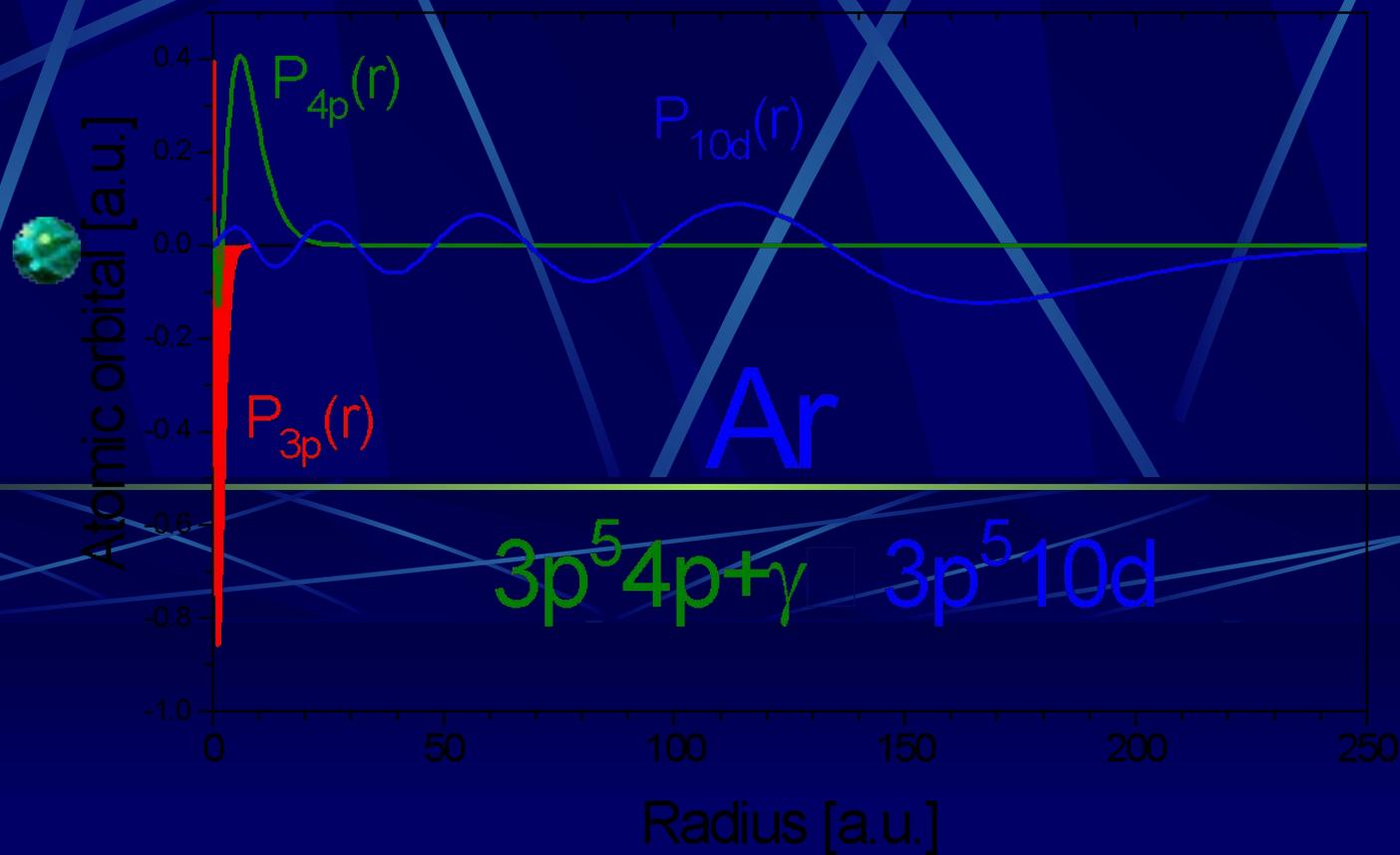


Новосибирск, 24-27 мая 2010 года

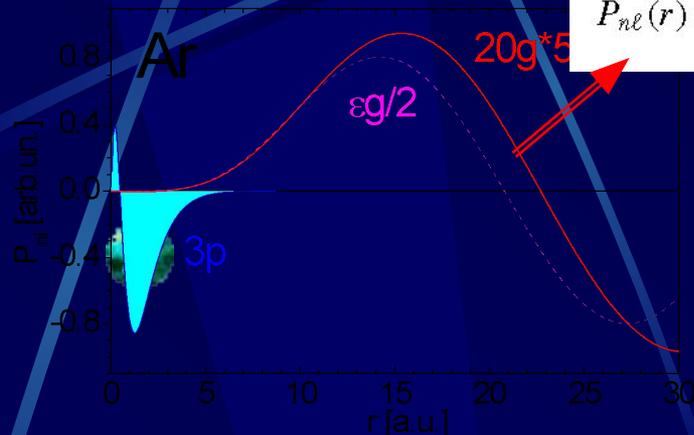
# Энергетический масштаб и экспериментальные схемы



# Пространственный масштаб



# Постоянство формы АО



$$P_{nl}(r) \approx 2 \left( \frac{Z}{n} \right)^{\frac{3}{2}} \frac{(2Zr)^\ell}{(2\ell+1)!} r \left( 1 - \frac{2Zr}{2\ell+2} + \frac{(2Zr)^2}{(2\ell+2)(2\ell+3) \cdot 2!} - \dots \right).$$

Reduced width: (J Berkowitz Adv.Chem.Phys. 1988)

$$\Gamma_r(nl[K]_J) = (n - \mu(l[K]_J))^3 \Gamma(nl[K]_J),$$

Generalized reduced width

$$\Gamma_{gr} = (\ell' + 3/2)(\ell' + 1)^2(\ell' + 1/2)^2 \ell' \Gamma_r(\ell' + 1/2),$$

$$\Gamma_{gr} = (\ell' - 1/2)(\ell' + 1)(\ell' + 1/2)^2 \ell'^2 \Gamma_r(\ell' - 1/2).$$

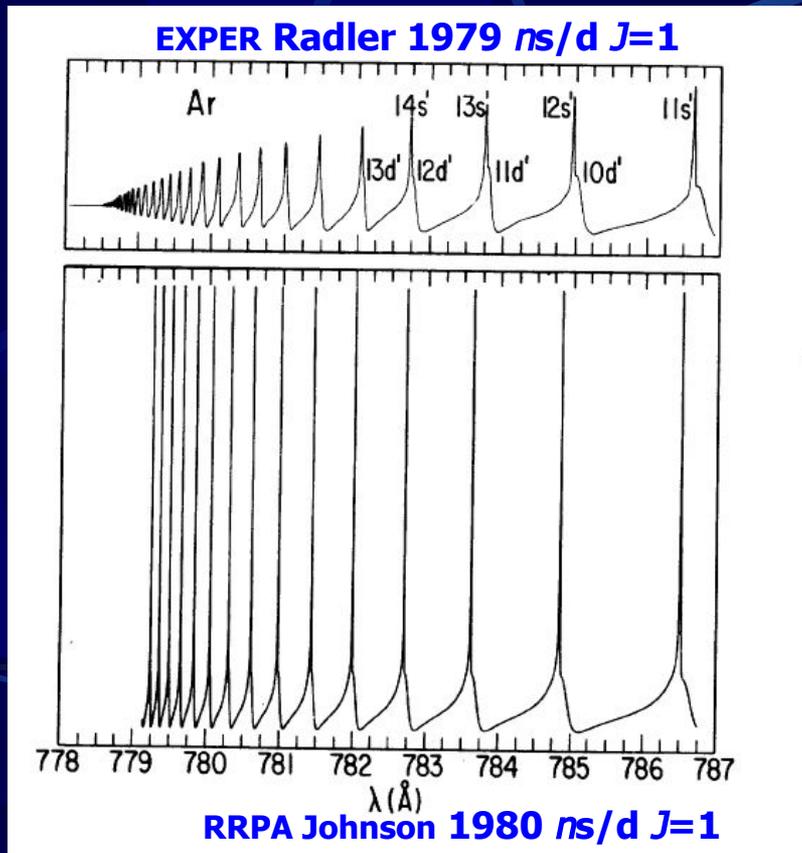
Table 3. Generalized reduced widths (cm<sup>-1</sup>) calculated in the PF approximation.

|          |      | $J = \ell'$        |            |                    |                    |            |                    |                 |
|----------|------|--------------------|------------|--------------------|--------------------|------------|--------------------|-----------------|
|          |      | $K' = \ell' - 1/2$ |            |                    | $K' = \ell' + 1/2$ |            |                    |                 |
| $n = 20$ | Atom | $\ell'$            | $\Gamma_r$ | $\Gamma_r \ell'^6$ | $\Gamma_{gr}^a$    | $\Gamma_r$ | $\Gamma_r \ell'^6$ | $\Gamma_{gr}^a$ |
|          |      | 3                  | 23.63      | 17226              | 26 052             | 9.64       | 7025               | 25500           |
|          | Ne   | 4                  | 4.30       | 17621              | 24 392             | 2.19       | 8970               | 24 391          |
|          |      | 5                  | 1.10       | 17219              | 22 501             | 0.65       | 10 183             | 23 065          |

<sup>a</sup>  $\Gamma_{gr} = \Gamma_r(\ell' - 1/2)(\ell' + 1)(\ell' + 1/2)^2 \ell'^2$  for  $\ell'[\ell' - 1/2]_e$  resonance;  
 $\Gamma_{gr} = \Gamma_r(\ell' + 3/2)(\ell' + 1)^2(\ell' + 1/2)^2 \ell'$  for  $\ell'[\ell' + 1/2]_e$  resonance.

Figure and table from:  
 I D Petrov et al.  
 J. Phys. B, **35** (2002) 323

# Проблемы: (i) ширины резонансов



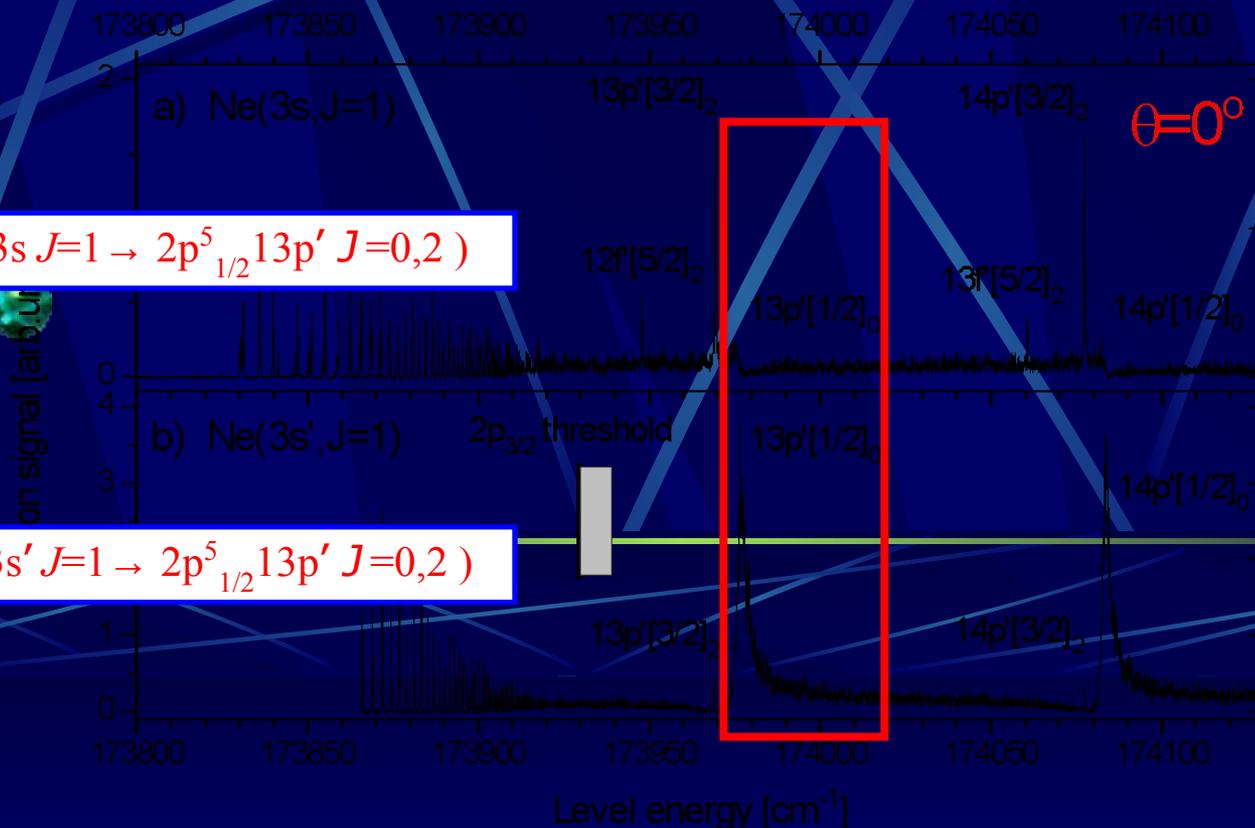
Reduced width

$$\Gamma_r = n^*3 \Gamma_n$$

| Ar 12s' $J=1$     | $\Gamma_r, \text{cm}^{-1}$ |
|-------------------|----------------------------|
| Exper Klar 1992   | 510                        |
| Johnson 1980 RRPA | 1210                       |
| Klar 1992 RPAE    | 826                        |
| HF approach       | 1587                       |

# Проблемы : (ii) Форма резонансов (Ne)

Experiment of Merkt (Petrov *JPB* 2007)



$\text{Ne}(2p_{3/2}^5 3s, J=1 \rightarrow 2p_{1/2}^5 13p', J=0,2)$

$\text{Ne}(2p_{1/2}^5 3s', J=1 \rightarrow 2p_{1/2}^5 13p', J=0,2)$

$$|2p_{3/2}^5 3s\rangle = 0.645 |2p_{1/2}^5 3s_{1/2}; 1\rangle + 0.764 |2p_{3/2}^5 3s_{1/2}; 1\rangle$$

$$|2p_{1/2}^5 3s'\rangle = 0.764 |2p_{1/2}^5 3s_{1/2}; 1\rangle - 0.645 |2p_{3/2}^5 3s_{1/2}; 1\rangle$$

# Теоретическая модель (СІРФСР)

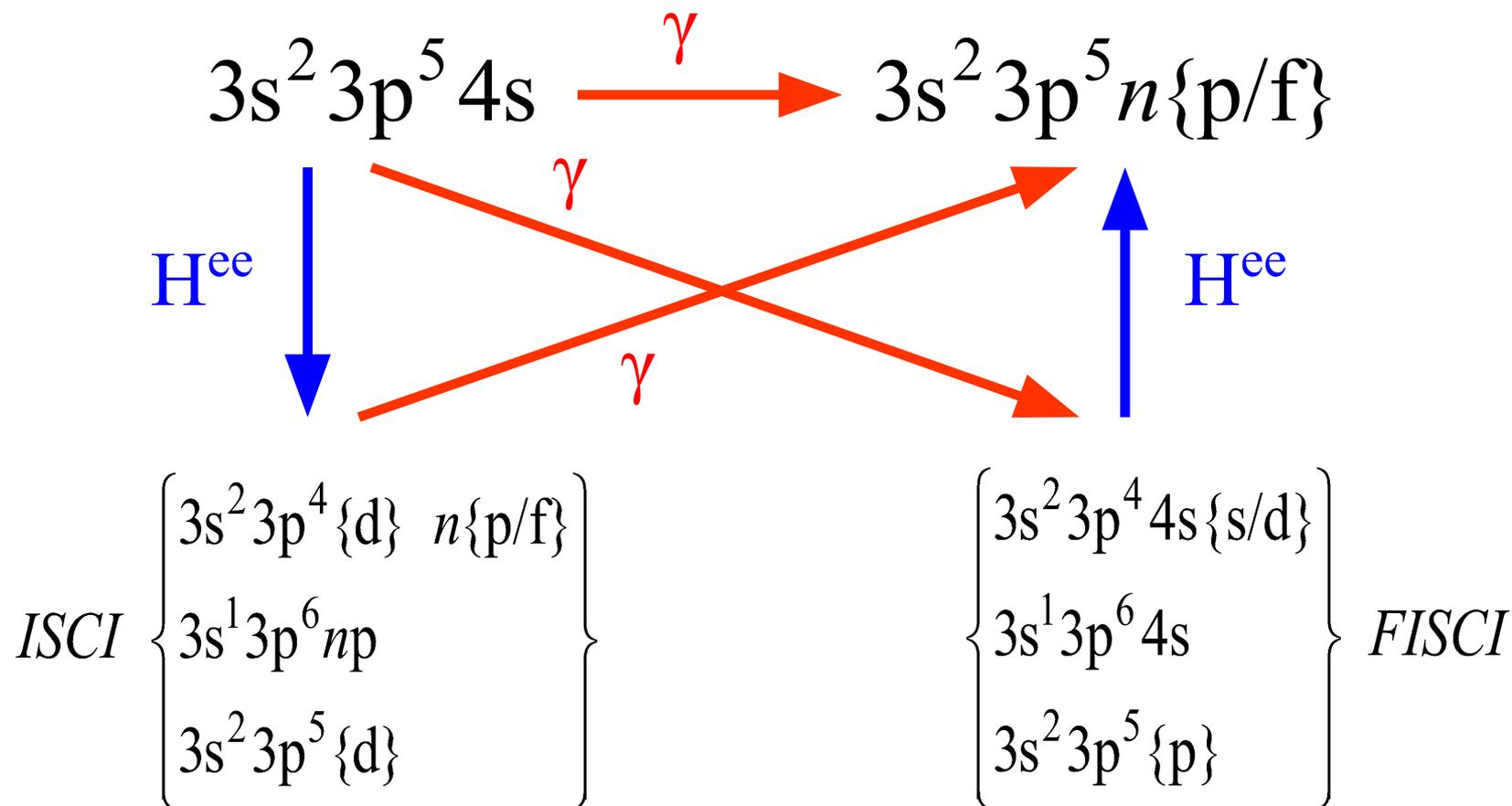
Одноэлектронные атомные орбитали (АО):

- Релятивистские эффекты: приближение Паули
- Ab-initio поляризационный потенциал как первый шаг по пути к полному многоконфигурационному приближению

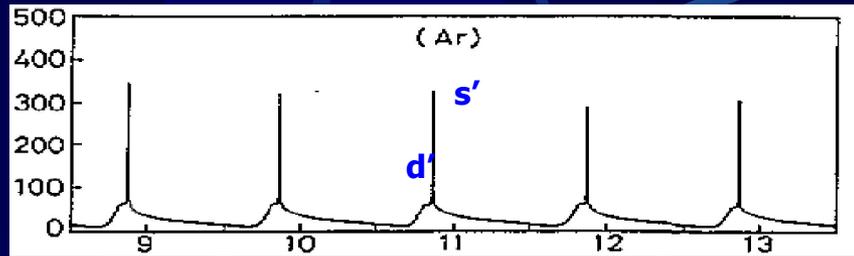
Многоэлектронные эффекты

- Метод взаимодействия конфигураций для сильновзаимодействующих конфигураций
- Теория возмущений и теория эффективных операторов для слабовзаимодействующих конфигураций
- Метод К-матрицы для взаимодействия сплошных спектров

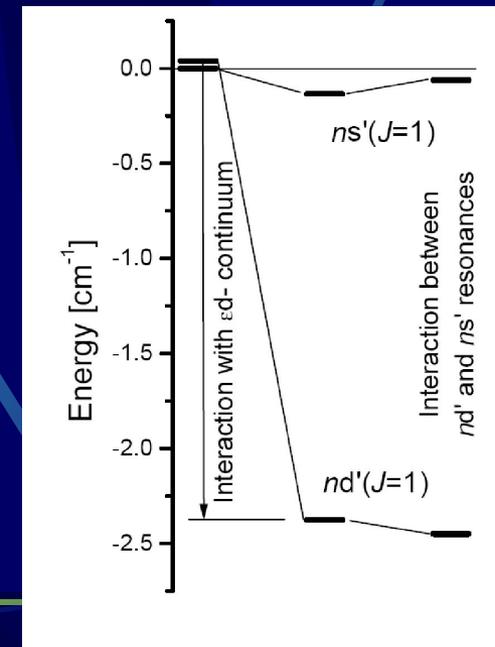
# Схема переходов (Ar)



# Ширины резонансов s-d смешивание (Ar J=1)



| Ar 20s' J=1                          | s'                       | d'           |
|--------------------------------------|--------------------------|--------------|
| Exper, Hollenstein 2000<br>Klar 1992 | <b>505</b><br><b>510</b> | <b>28800</b> |
| Theor, Johnson 1980 RRPA             | 1210                     | 36330        |
| PF                                   | 1587                     | 13330        |
| PF+CP                                | 1805                     | 24500        |
| PF+CP+CI                             | 1498                     | 23410        |
| PF+CP+CI+Res.Interact                | <b>606</b>               | <b>23960</b> |



$$|20s'\rangle = 0.985|20s'\rangle + 0.174|18d'\rangle$$

$$\Gamma_{20s'} = 1498 \text{ cm}^{-1}$$

$$\Gamma_{\overline{20s'}} = 606 \text{ cm}^{-1}$$

# Сильная интерференция в амплитудах переходов

INSTITUTE OF PHYSICS PUBLISHING

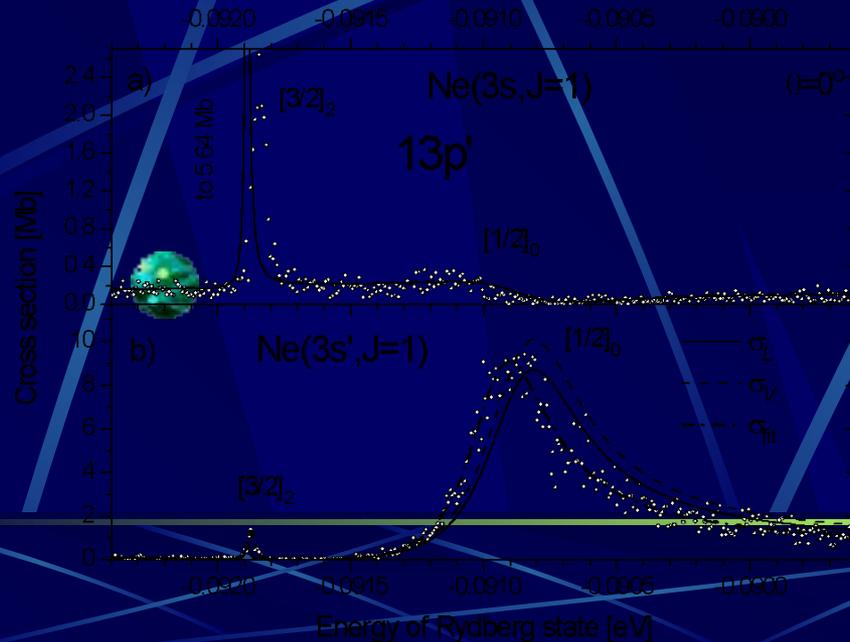
JOURNAL OF PHYSICS B: ATOMIC, MOLECULAR AND OPTICAL PHYSICS

J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 39 (2006) 3159–3176

doi:10.1088/0953-4075/39/16/002

**Autoionizing even  $2p_{1/2}^5 n\ell' [K']_{0,1,2} (\ell' = 1, 3)$  Rydberg series of Ne: a comparison of many-electron theory and experiment**

I D Petrov<sup>1,2</sup>, V L Sukhorukov<sup>1,2</sup>, T Peters<sup>2</sup>, O Zehnder<sup>3</sup>, H J Wörner<sup>3</sup>, F Merkt<sup>3</sup> and H Hotop<sup>2</sup>



$3s \rightarrow 13p'$

$3s \rightarrow 3p \Rightarrow 13p'$

$$|2p_{3/2}^5 3s\rangle = 0.645 |2p_{1/2}^5 3s_{1/2}; 1\rangle + 0.764 |2p_{3/2}^5 3s_{1/2}; 1\rangle$$

$$|2p_{1/2}^5 3s'\rangle = 0.764 |2p_{1/2}^5 3s_{1/2}; 1\rangle - 0.645 |2p_{3/2}^5 3s_{1/2}; 1\rangle$$

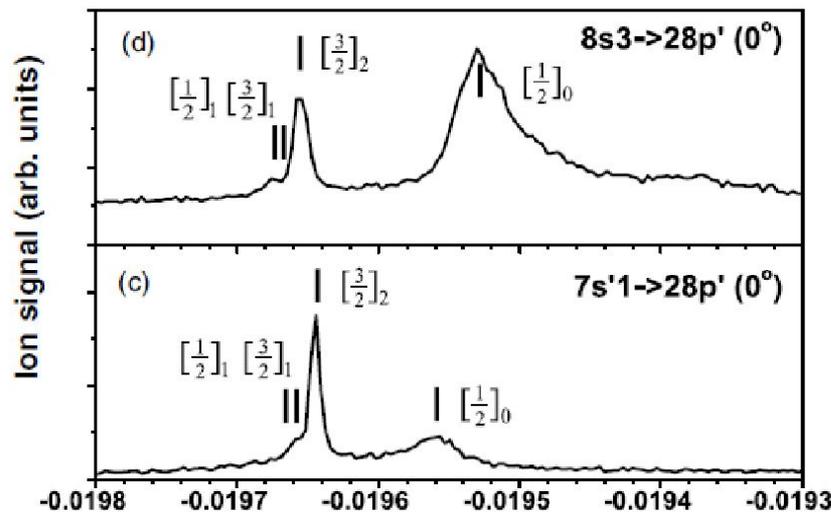
$$|2p_{1/2}^5 13p'\rangle = 0.99984 |2p_{1/2}^5 13p_{1/2}; 0\rangle + 0.00449 |2p_{3/2}^5 13p_{3/2}; 0\rangle$$

# Фотоионизация Ar ( $3p^5 ms, J=1$ )

Eur. Phys. J. D 40, 18  
DOI: 10.1140/epjd/e2

Lineshapes  
of Ar, Kr and Xe

I.D. Petrov<sup>1,2</sup>, T. Petrov<sup>1,2</sup>,  
V.L. Sukhorukov<sup>1,2</sup>



EUROPEAN  
PHYSICAL JOURNAL D

Resonances

PHYSICAL REVIEW A 78, 022509 (2008)

## Autoionizing Rydberg series ( $np'$ , $nf'$ ) of Ar investigated by stepwise excitations with lasers and synchrotron radiation

Yin-Yu Lee, Tzan-Yi Dung, Re-Ming Hsieh, Jih-Young Yuh, Yen-Fang Song, Grace H. Ho, and Tzu-Ping Huang  
*National Synchrotron Radiation Research Center, Hsinchu Science Park, Hsinchu 30076, Taiwan*

Wan-Chun Pan and I-Chia Chen  
*Department of Chemistry, National Tsing-Hua University, Hsinchu 30013, Taiwan*

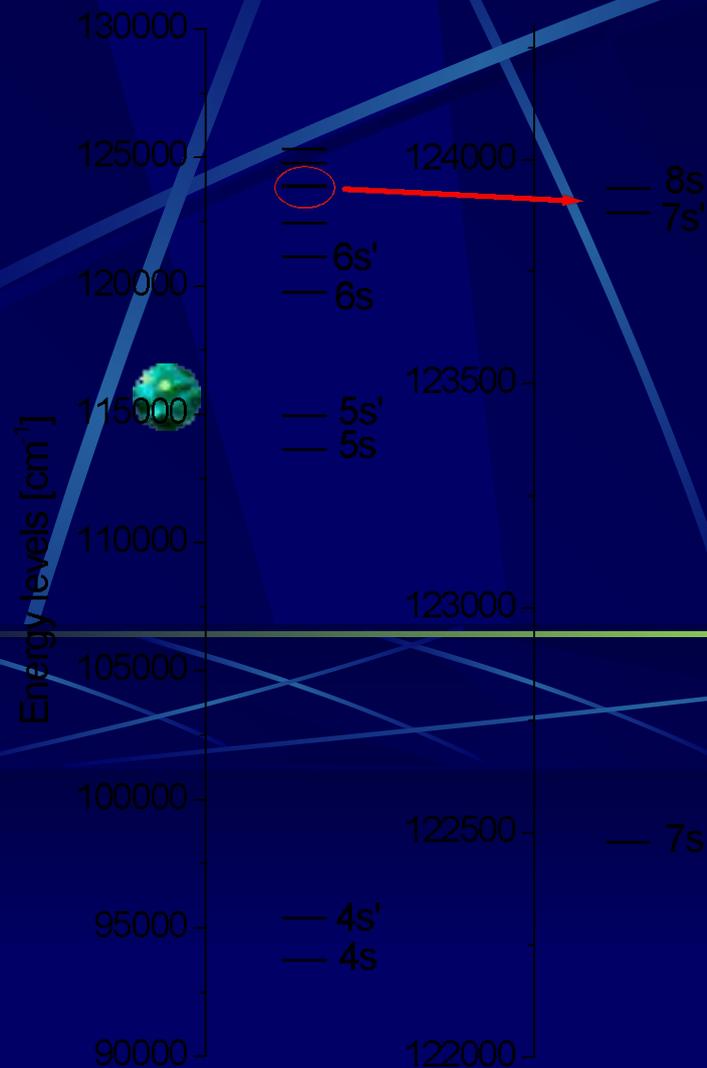
Shih-Yu Tu and A. H. Kung  
*Institute of Atomic and Molecular Sciences, Academia Sinica, Taipei, Taiwan Department of Photonics, National Chiao-Tung University, Hsinchu 30010, Taiwan*

L. C. Lee  
*Department of Electrical and Computer Engineering, San Diego State University, San Diego, California 92182, USA*  
(Received 27 June 2008; published 12 August 2008)



Новосибирск, 24-27 мая 2010 года

# Уровни энергии Ar(3p<sup>5</sup> ns, J=1)



Condition of the energy levels equality for  $ns$  and  $(n - 1)s'$  levels

$$\frac{1}{(n - 2.14)^2} - \frac{1}{(n - 2.14 - 1)^2} = IP_{3/2} - IP_{1/2},$$

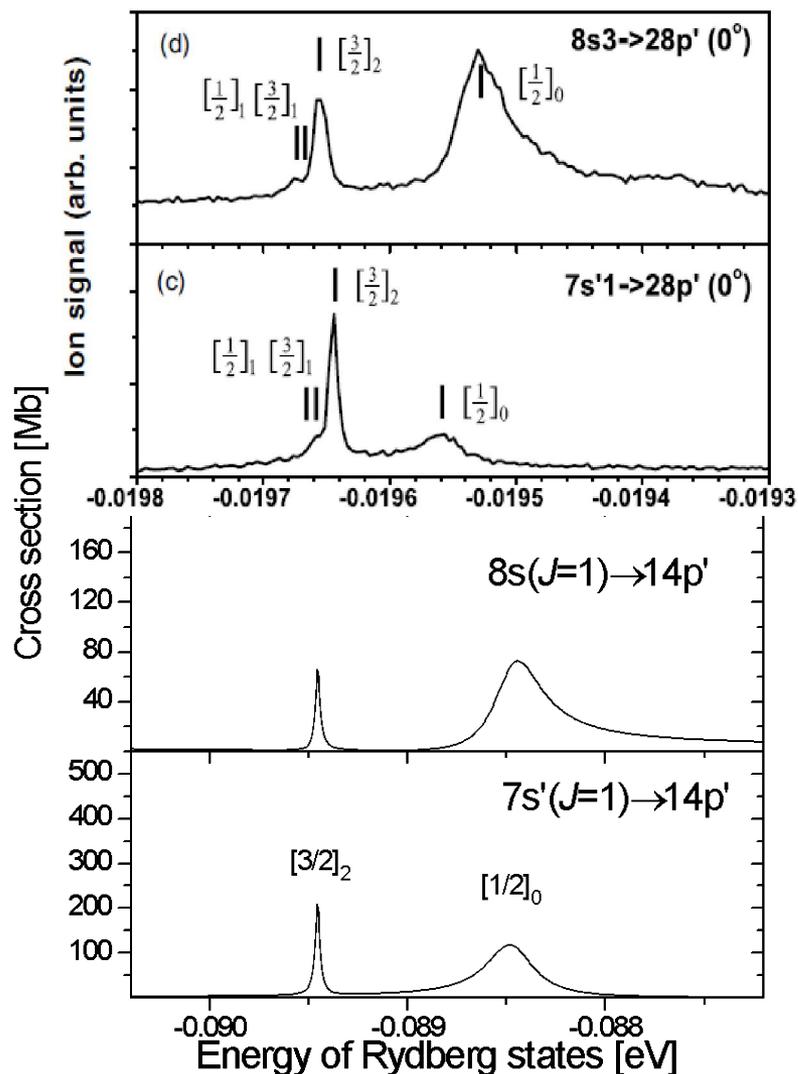
*Solution* :  $\{[n = 8.028]\} \{8s, 7s'\}$

Condition of the energy levels equality for  $ns$  and  $(n - 2)s'$  levels

$$\frac{1}{(n - 2.14)^2} - \frac{1}{(n - 2.14 - 2)^2} = IP_{3/2} - IP_{1/2},$$

*Solution* :  $\{[n = 9.9872]\} \{10s, 8s'\}$

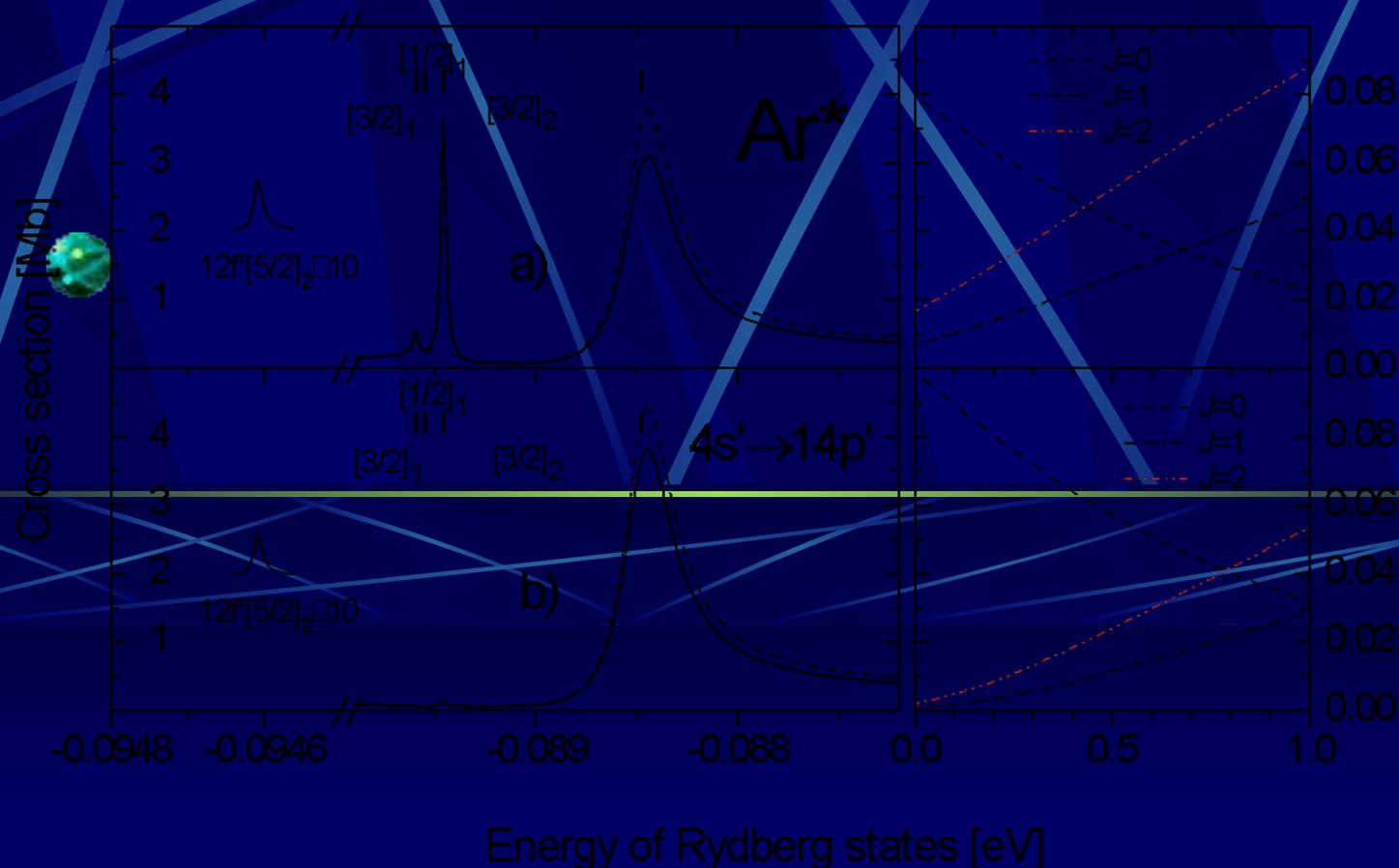
# Смешивание $7s'$ и $8s$ состояний



$$|8s\rangle = -0.5357|3p^5_{1/2} 7s\rangle + 0.8442|3p^5_{3/2} 8s\rangle$$

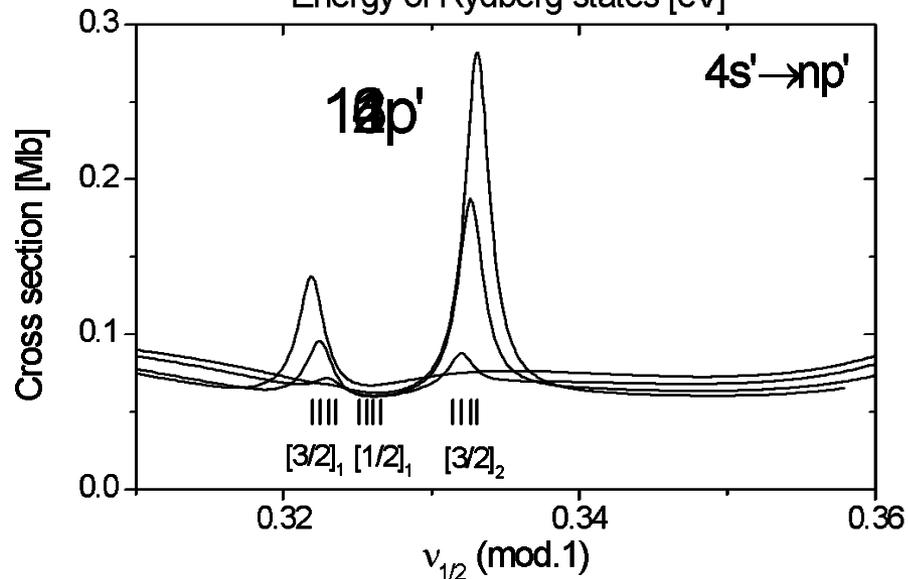
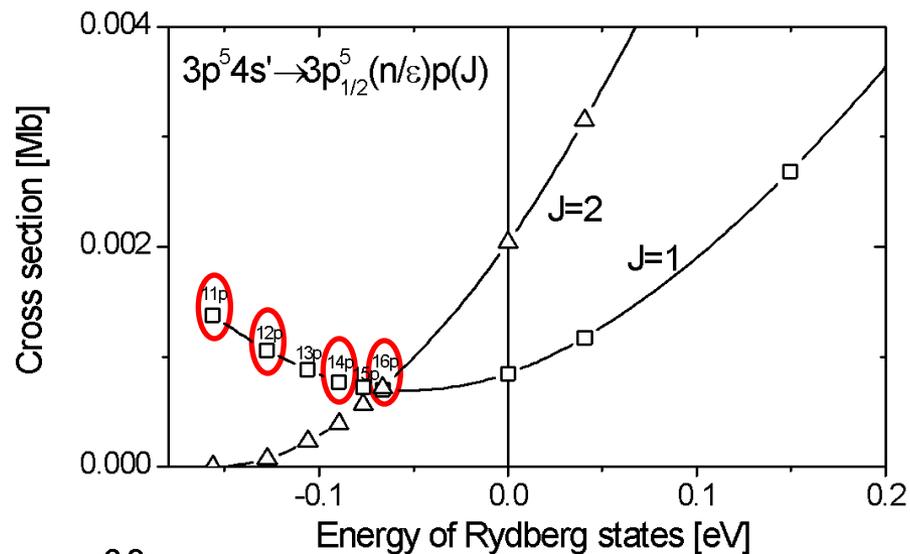
$$|7s'\rangle = 0.8427|3p^5_{1/2} 7s\rangle + 0.5380|3p^5_{3/2} 8s\rangle$$

# Куперовский минимум и форма $p$ -резонансов



a) CP potential decreased by the factor 1.25 relative to case b)

# Зависимость формы $np$ -резонансов от $n$



# Заключение

Исследованы автоионизационные резонансы для большинства атомов благородных газов

□ Вероятности распада резонансов (ширины) подвержены влиянию:

- Поляризации остова
- Взаимодействия между резонансами (“маленькая примесь больших величин” и “много маленьких примесей”)
- Корреляционного уменьшения Кулоновского взаимодействия

□ Форма автоионизационных резонансов подвержена влиянию:

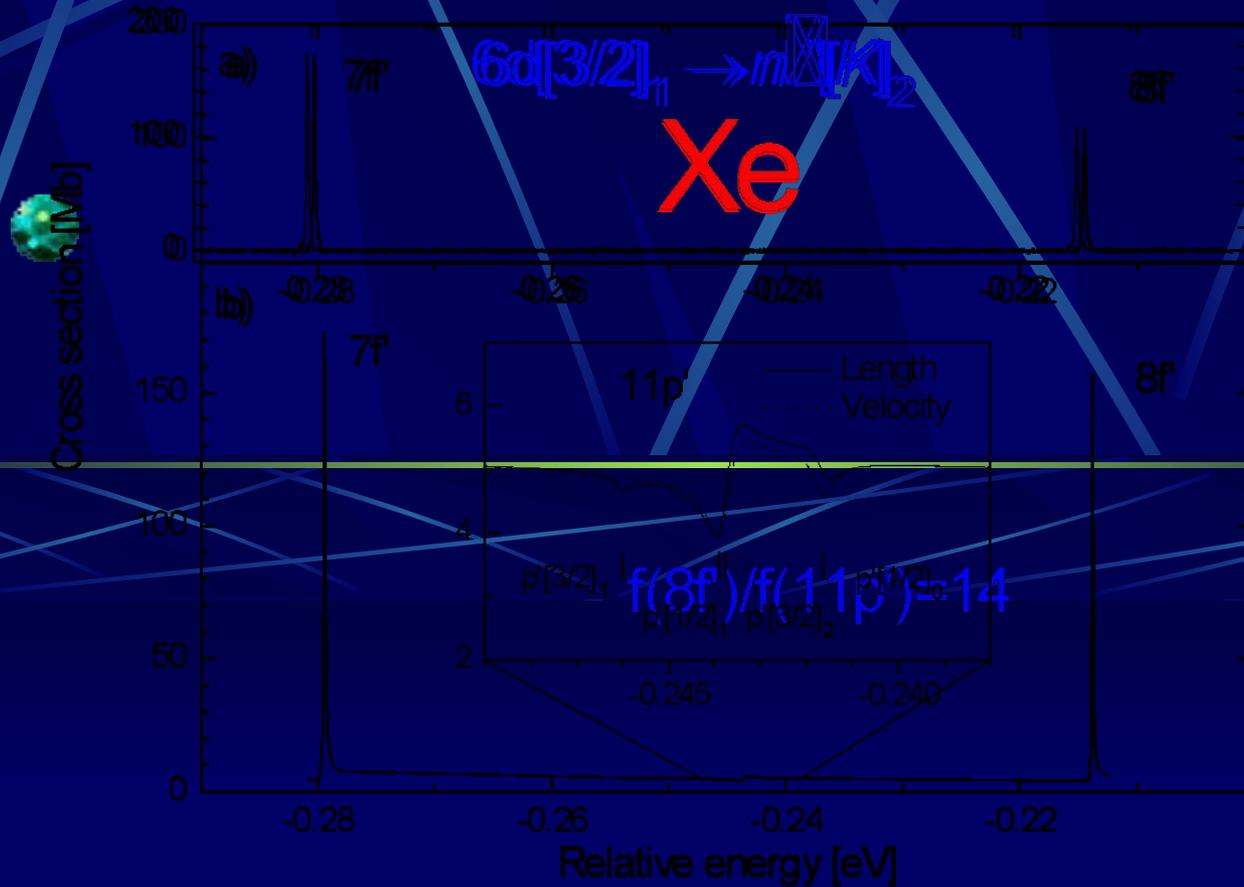
- Интерференции между каналами возбуждения
- внутриатомных взаимодействий

□ Ридберговские состояния являются чувствительным инструментом для исследования атомных процессов

# Исчезающие серии:

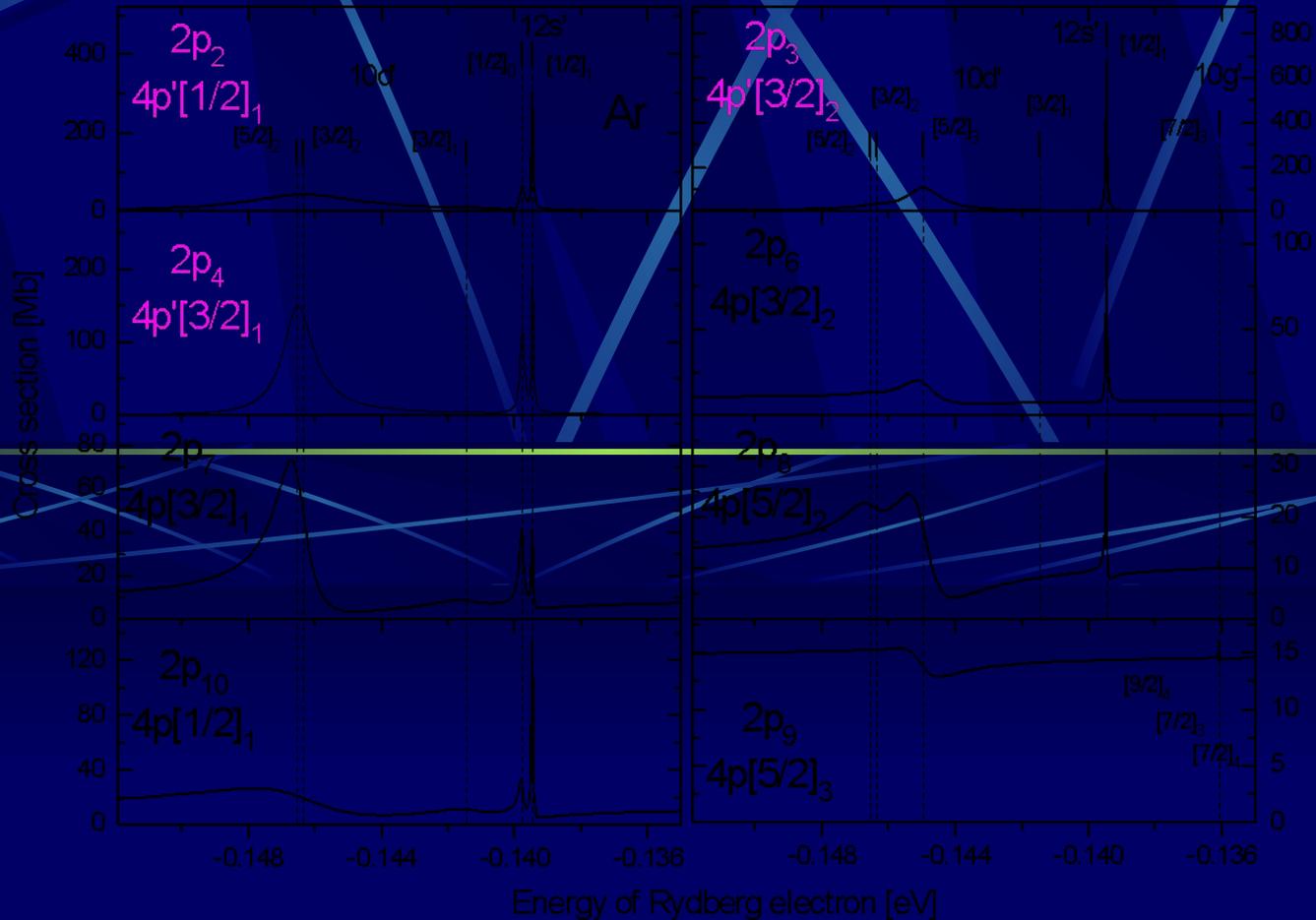
## Xe $6d[3/2]_1 \rightarrow np'/f'$

Meyer *JPB* 2005

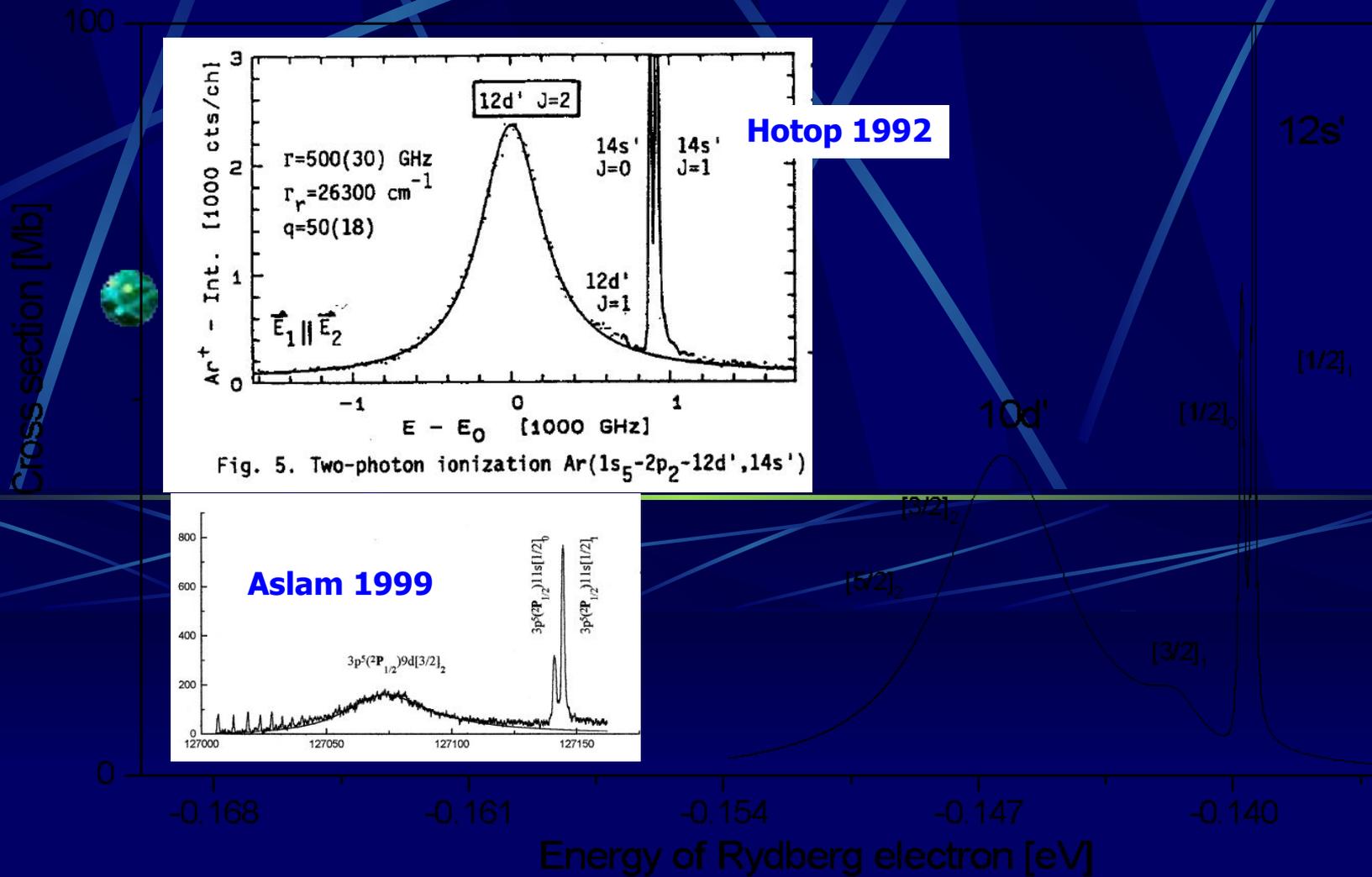


# Форма резонансов Ar $3p^5 4p$ ( $J=1,2,3$ )

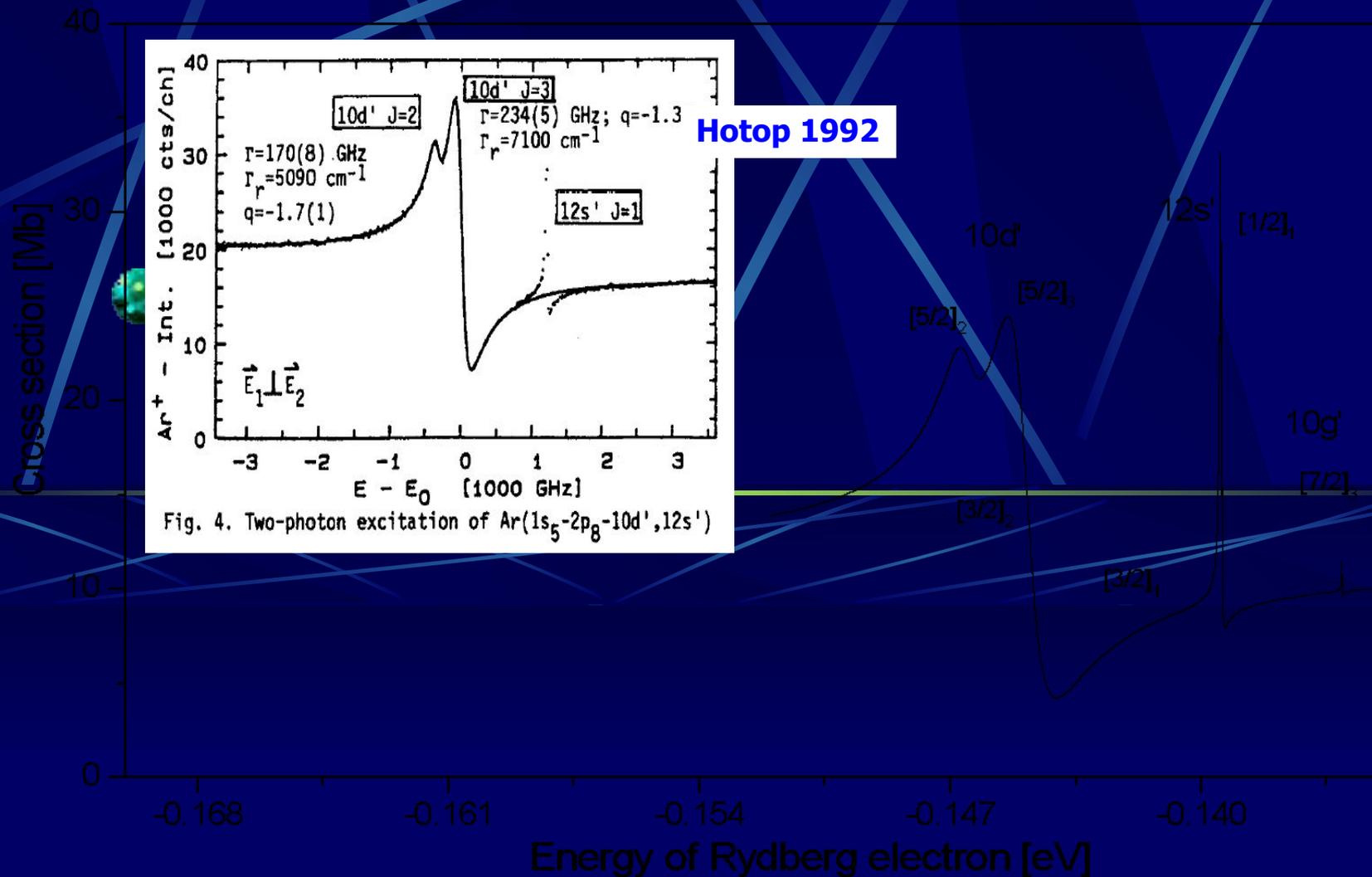
□  $n d'/s'$



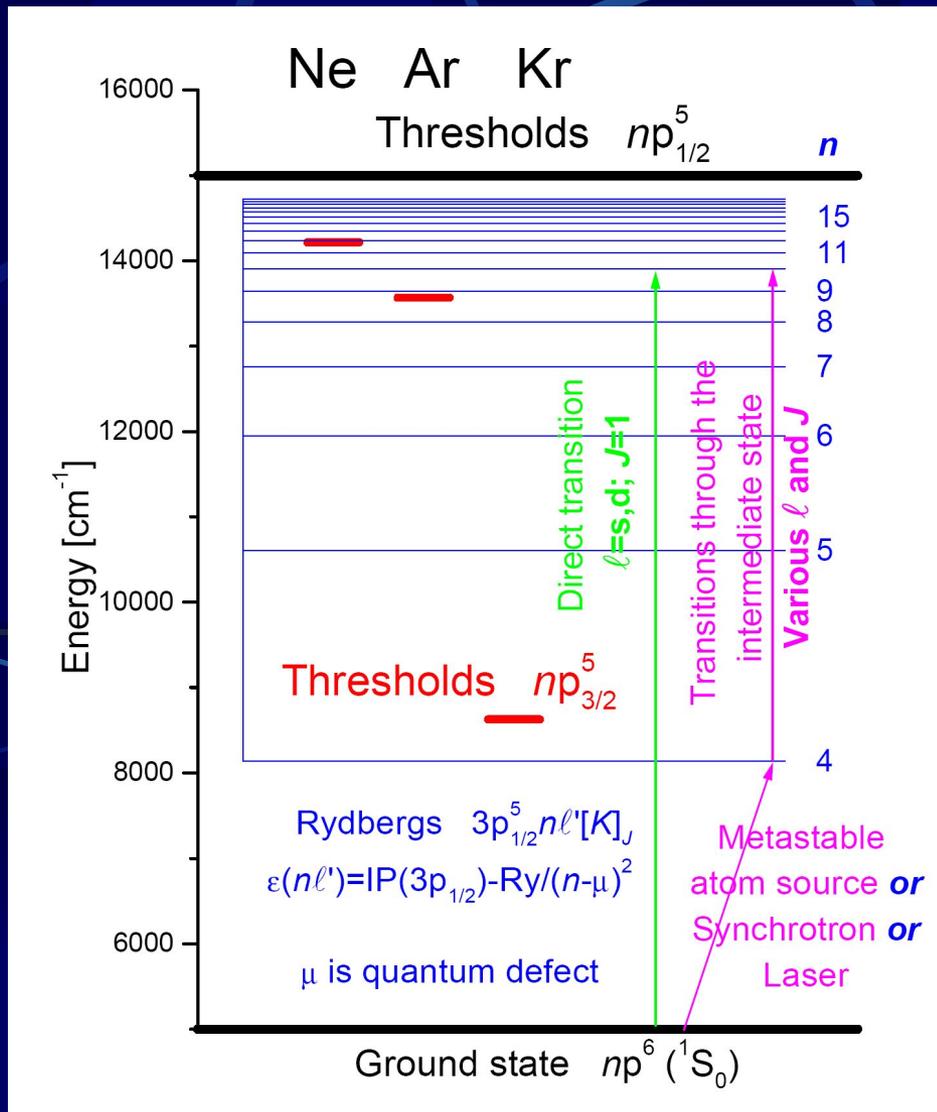
# Ar $2p_2 4p'[1/2]_1 \square n d'/s'$



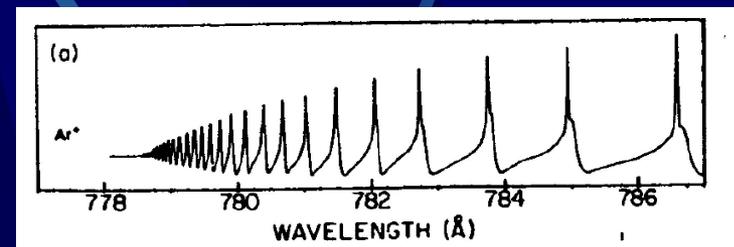
# Ar $2p_8$ $4p[5/2]_2 \square n d'/s'$



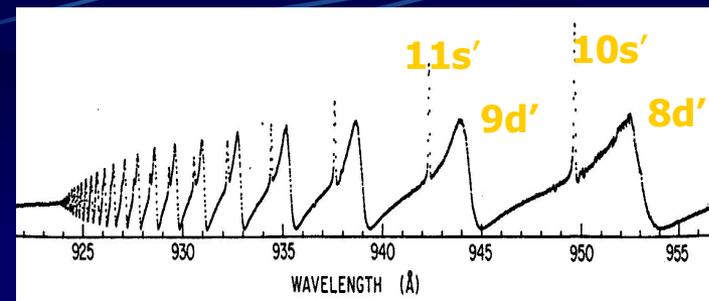
# Энергетический масштаб



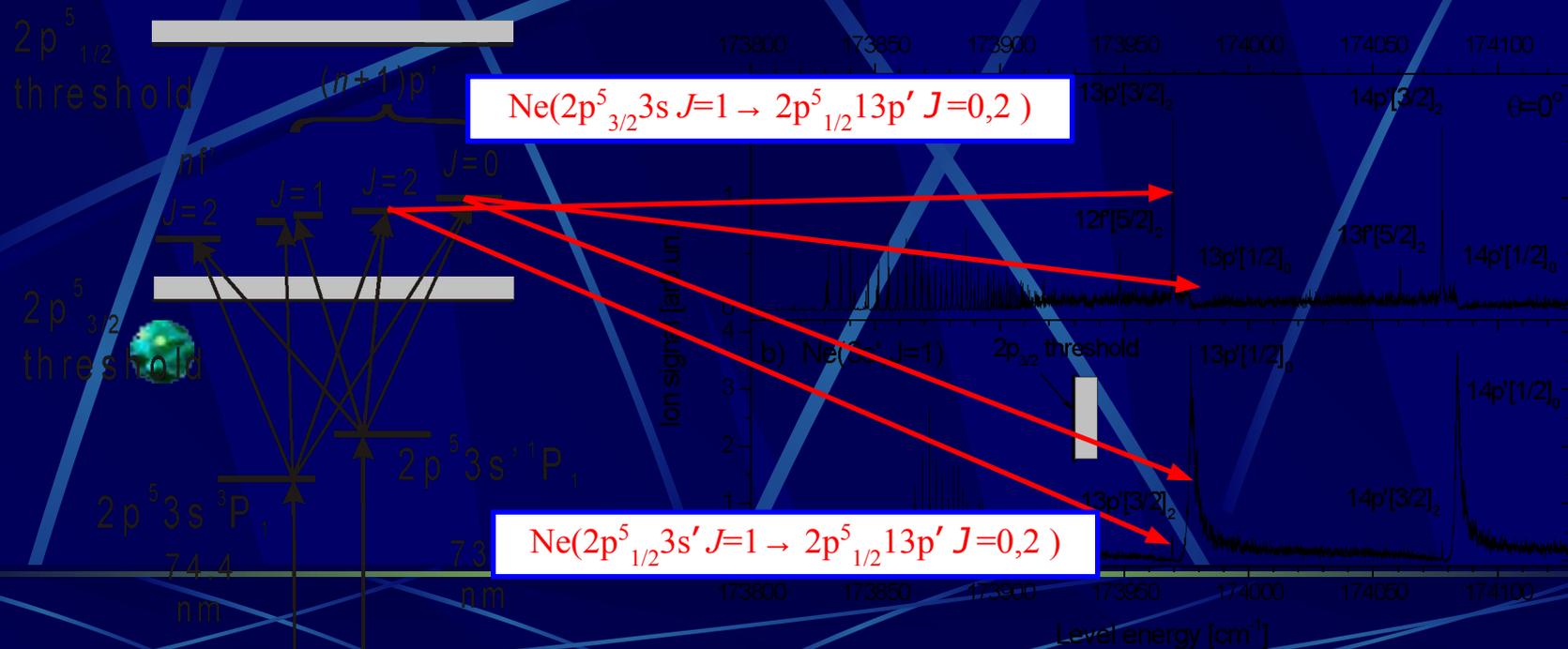
Ar



Xe

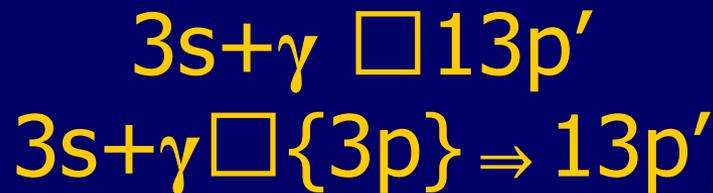


# Форма резонансов (Ne)

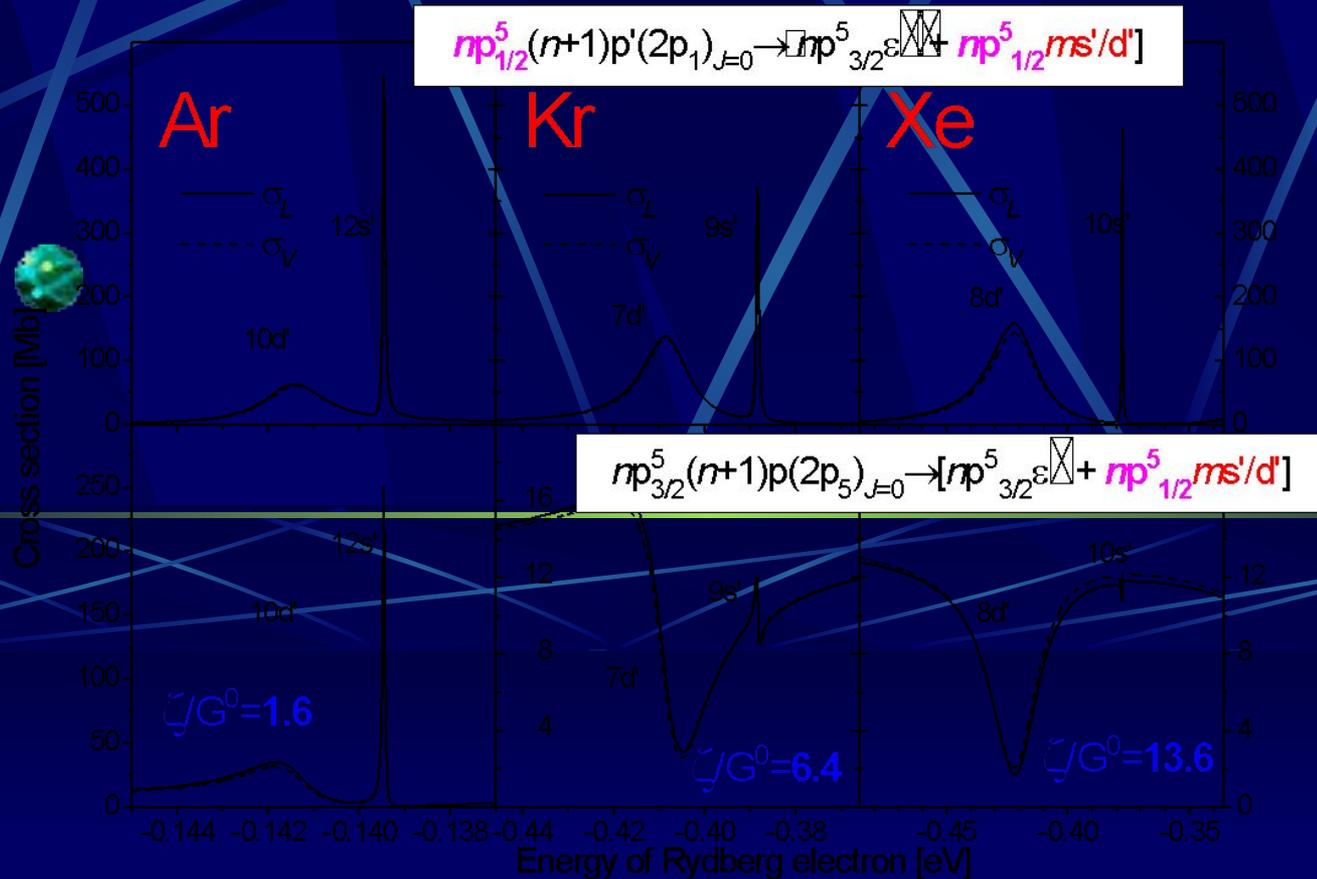


Experiment of Merkt (Petrov *JPB* 2007)

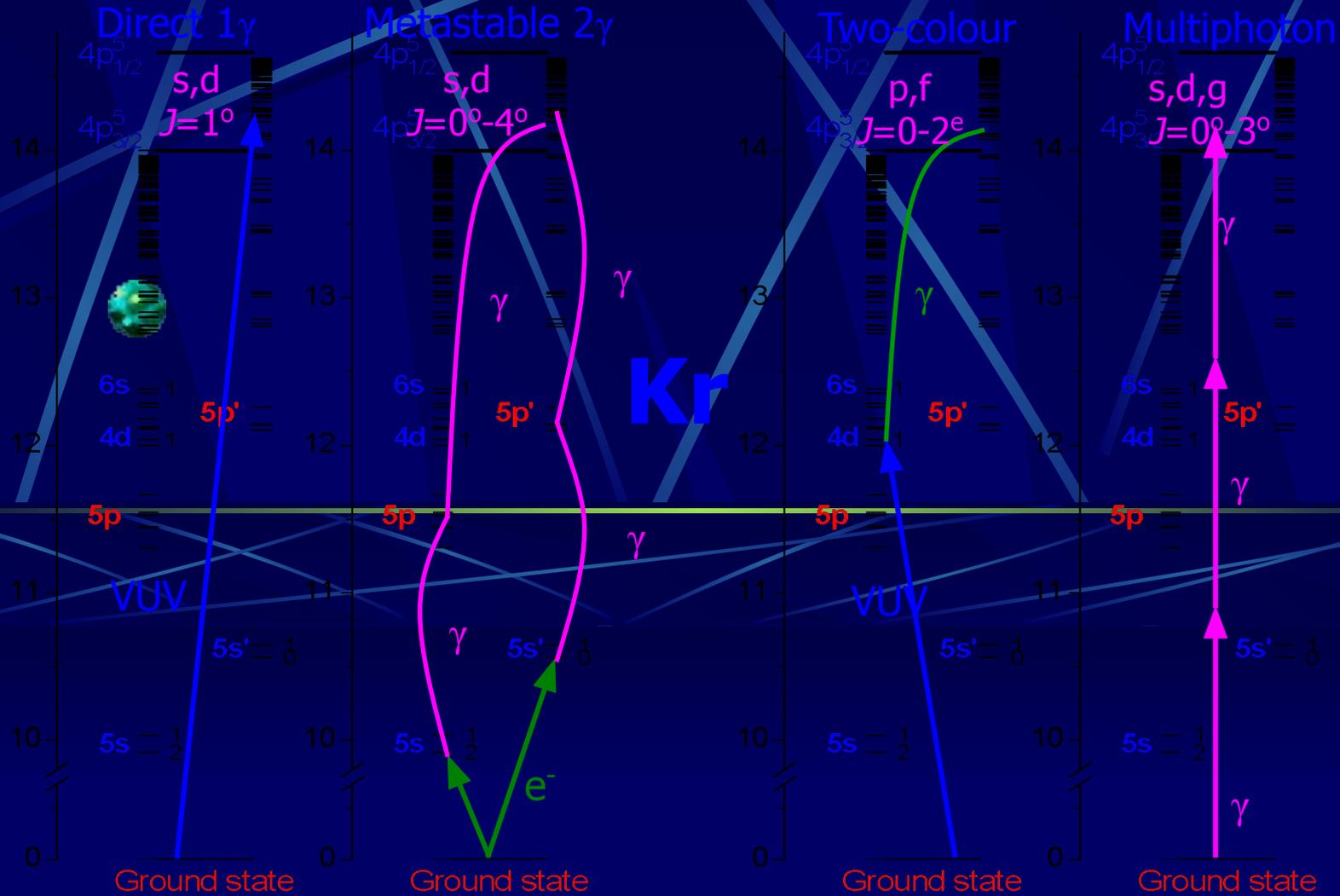
**Strong interference between the following pathways**



# Форма резонансов ( $Rg$ начальное состояние $J=0$ )



# Энергетический масштаб и экспериментальные схемы



# Ar $2p_9$ , $4p[5/2]_3 \rightarrow n l' / e l'$ cross sections

