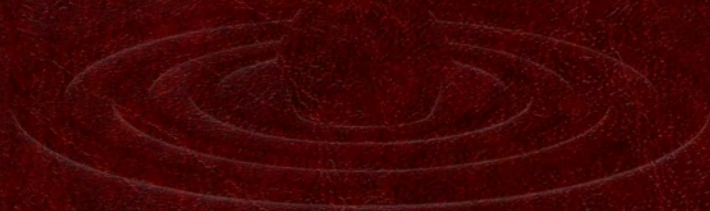


М. Я. Амуся, Л. В. Чернышева, В. Г. Яржемский

ПОГЛОЩЕНИЕ
ФОТОНОВ
РАССЕЯНИЕ
ЭЛЕКТРОНОВ
РАСПАД
ВАКАНСИЙ

Атомные данные



РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе
Институт неорганической химии им. Н. С. Курнакова

М. Я. Амуся, Л. В. Чернышева, В. Г. Яржемский

ПОГЛОЩЕНИЕ
ФОТОНОВ,
РАССЕЯНИЕ
ЭЛЕКТРОНОВ,
РАСПАД
ВАКАНСИЙ
Атомные данные



Санкт-Петербург
«НАУКА»
2010

УДК 539.182
ББК 22.383
А61

Амусья М. Я., Чернышева Л. В., Яржемский В. Г. Поглощение фотонов, рассеяние электронов, распад вакансий: Атомные данные. — СПб.: Наука, 2010. — 314 с. 51 ил. Компакт-диск. 504 с. Ил. 588.

ISBN 978-5-02-025328-5

Представлены результаты вычислений характеристик широкого круга атомных процессов с участием фотонов и электронов — сечений фотопоглощения, рассеяния электронов и вероятностей распадов образующихся в этих процессах атомных вакансий для множества атомов и ионов. Рассмотрены кратко фотоионизация и распад вакансий в эндодральных атомах и рассеяние позитронов.

Вычисления выполнены в рамках лучшего одноэлектронного приближения Хартри—Фока (ХФ) и с учётом многоэлектронных корреляций — в приближении случайных фаз с обменом (ПСФО). Влияние корреляций обычно очень важно. Нами используется вариант теории многих тел, основанный на технике диаграмм Фейнмана. Краткое теоретическое описание самих процессов включает тем не менее формулирование основных идей, а также ключевые формулы.

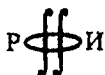
Собранные данные и методы, используемые при их получении, могут быть полезны при теоретическом описании уже выполненных экспериментов и в предложении новых.

We present calculation data for different characteristics of atomic processes with participation of photons and electrons: photoabsorption and electron scattering cross-sections, and probabilities of decay of vacancies formed in these processes for a big number of atoms and ions. Some attention is given also to photoionization and vacancy decay in endohedrals and to positron — atom scattering.

The calculations are performed in the frames of the best one-electron Hartree—Fock Approximation and with account of multi-electron correlations in the Random Phase Approximation with Exchange. The influence of correlations usually is very important. We use the version of it that is based on technique of Feynman diagrams. The theoretical description of the processes is given briefly, but includes formulation of the basic ideas, and also key formulas.

The collected data and the methods used in their derivations can be useful for the theoretical description of already performed experiments, and in suggesting of new ones.

*Издание осуществлено при финансовой поддержке
Российского фонда фундаментальных исследований
по проекту № 08-02-07027*



ISBN 978-5-02-025328-5

© М. Я. Амусья, Л. В. Чернышева,
В. Г. Яржемский, 2010
© Издательство «Наука», 2010

ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие	7
Литература	11
Список принятых обозначений и аббревиатур	12

Раздел I

ПОГЛОЩЕНИЕ ФОТОНОВ

Глава 1. Основные положения теории	14
1.1. Наиболее важное о фотоионизации	14
1.2. Одноэлектронное приближение Хартри—Фока (ХФ)	17
1.3. Диаграммная техника	19
1.4. Многочастичная теория возмущений (МТВ)	25
1.5. Приближение случайных фаз с обменом (ПСФО)	28
1.6. Обобщения ПСФО	34
1.7. Вычислительные процедуры	36
1.8. Параметры угловой анизотропии	40
1.9. Другие характеристики фотоионизации	46
1.10. Атомы с полузаполненными подоболочками	48
1.11. Атомы с незаполненными оболочками	52
1.12. Отрицательные и положительные ионы	54
1.13. Эндоедральные атомы — эффект отражения фотоэлектронов	56
1.14. Эндоедральные атомы — эффект поляризации фуллерена	60
1.15. Токи увлечения в атомарных газах	64
1.16. Неупругое рассеяние фотоэлектронов	66
1.17. Возбуждение сателлитов и двойная ионизация	68
Литература	71
Глава 2. Результаты вычислений	74
2.1. Способ представления данных и используемые формулы	74
2.2. Атомы и ионы благородных газов	78

2.3. Атомы и ионы элементов I группы периодической системы	90
2.4. Атомы и ионы элементов II группы периодической системы	98
2.5. Атомы и ионы элементов III группы периодической системы	102
2.6. Атомы и ионы элементов IV группы периодической системы	106
2.7. Атомы и ионы элементов V группы периодической системы	108
2.8. Атомы и ионы элементов VI группы периодической системы	110
2.9. Атомы и ионы элементов VII и VIII групп периодической системы	113
2.10. Эндоедральные атомы $A@C_{60}$	120
Литература	141

Раздел II

РАССЕЯНИЕ ЭЛЕКТРОНОВ

Глава 3. Основные положения теории	145
3.1. Наиболее важное о рассеянии частиц на атомах	145
3.2. Упругое рассеяние в одноэлектронном приближении	153
3.3. Поляризационное взаимодействие	155
3.4. Уравнение Дайсона	158
3.5. Неупругое рассеяние электронов низких и средних энергий	160
3.6. Неупругое рассеяние быстрых частиц	161
3.7. Эффект Комптона	167
3.8. Рассеяние позитрона на атомах с учетом поляризационного взаимодействия	173
Литература	177
Глава 4. Результаты вычислений	180
4.1. Способ представления данных и используемые формулы	180
4.2. Атомы благородных газов	183
4.3. Атомы и ионы элементов I группы периодической системы	201
4.4. Атомы элементов II группы периодической системы	207
4.5. Атомы и ионы элементов IV и V групп периодической системы	212
4.6. Ионы элементов VII группы периодической системы	214
4.7. Краткое обсуждение результатов вычислений	215
Литература	244

Раздел III

РАСПАД ВАКАНСИЙ

Глава 5. Основные теоретические положения и результаты расчетов	246
5.1. Наиболее важное о вакансиях и их распаде	246
5.2. Энергии атомных уровней	250
5.3. Поляризационное взаимодействие вакансий	251
5.4. Собственно энергетическая часть функции Грина и спектроскопические параметры	253
5.5. Форма спутных линий в фотоэлектронных спектрах	268
5.6. Эффекты межспутного взаимодействия	275
5.7. Радиационный распад	277
5.8. Безызлучательный или оже-распад	279
5.9. Форма низкоэнергетического оже-спектра	287
5.10. Двухэлектронный оже-распад	289
5.11. Однофотонный распад двухдырочных состояний	293
5.12. Угловая зависимость и спиновая поляризация оже-электронов	295
5.13. Распад вакансий эндоздральных атомов	301
Литература	305
Заключение	309

НА КОМПАКТ-ДИСКЕ

Раздел I. ПОГЛОЩЕНИЕ ФОТОНОВ

Глава 2. Результаты вычислений	6
Рисунки к главе 2	64
2.2. Атомы и ионы благородных газов He, He*, Ne, Ne ³⁺ , Ar, Kr, Kr ⁵⁺ , Xe, Xe ⁺ , Xe ³⁺ , Xe ⁵⁺ , Xe ⁶⁺	64
2.3. Атомы и ионы элементов I группы периодической системы Li, Li ⁺ , Li ⁻ , Na, Na ⁺ , Na ⁻ , K, K ⁺ , K ⁻ , Cu, Cu ⁺ , Rb, Rb ⁺ , Rb ⁻ , Ag, Ag ⁺ , Cs, Cs ⁺ , Cs ⁻	108
2.4. Атомы и ионы элементов II группы периодической системы Be, Mg, Ca, Ca ²⁺ , Ca ⁻ , Zn, Sr, Cd, Ba, Ba*	138
2.5. Атомы и ионы элементов III группы периодической системы B, B*, B ⁺ , Al ⁺ , Sc ³⁺ , In ⁺ , La, Eu, Eu ⁺ , Eu ²⁺	152
2.6. Атомы и ионы элементов IV группы периодической системы C*, C ⁻ , Si*, Si ⁻ , Ge ⁻	169
2.7. Атомы элементов V группы периодической системы N, P, As, Sb	178

2.8. Атомы и ионы элементов VI группы периодической системы O ⁺ , Cr, Cr*, Cr ⁺ , Mo	190
2.9. Атомы и ионы элементов VII и VIII групп периодической системы F, F*, F ²⁺ , F ⁻ , Cl, Cl ⁻ , Mn, Mn ⁺ , Br ⁻ , Tc, I, I ⁺ , I ²⁺ , I ⁻ , Pd	200
2.10. Эндоэдральные атомы A @C ₆₀ Ne, Ar, Xe, Cs, Ba, Eu	233
Таблицы к главе 2	266

Раздел II. РАССЕЯНИЕ ЭЛЕКТРОНОВ

Глава 4. Результаты вычислений	304
Рисунки к главе 4	351
4.2. Атомы благородных газов He, Ne, Ar, Kr, Xe	351
4.3. Атомы и ионы элементов I группы периодической системы Li, Li ⁺ , Li ⁻ , Na, Na ⁺ , Na ⁻ , K, K ⁺ , K ⁻ , Cs	420
4.4. Атомы и ионы элементов II группы периодической системы Be, Mg, Ca, Zn, Cd, Ba	445
4.5. Атомы элементов IV и V групп периодической системы Si ⁻ , N, P	468
4.6. Ионы элементов VII группы периодической системы F ⁻ , I ⁻	477
Таблицы к главе 4	482

Раздел III. РАСПАД ВАКАНСИЙ

Рисунки к главе 5	484
Таблицы к главе 5	493

ПРЕДИСЛОВИЕ

Цель данной книги состоит в том, чтобы представить результаты вычислений сечений и вероятностей широкого круга атомных процессов с участием фотонов и электронов, а именно сечений фотопоглощения и рассеяния электронов, а также вероятностей распадов образующихся в этих процессах вакансий для множества атомов. Таким образом, мы намереваемся представить систематически недавно полученные и ранее собранные атомные данные.

Эти данные требуются во многих научных областях, связанных с исследованием электронной структуры и физических процессов в твёрдых телах и жидкостях, молекулах и кластерах, астрономических объектах и в атмосфере нашей планеты и т. п. Глубокое понимание химических реакций и процессов невозможно без ясной и точной картины строения атома и многоатомных образований. Наша книга призвана обеспечить такие данные.

Следует помнить также, что все атомы, кроме водорода и возможно гелия, сами по себе весьма сложные системы. Они всё ещё являются объектами интенсивных теоретических и экспериментальных исследований, в которых приходится применять довольно сложные и тонкие методы. Для того чтобы планировать соответствующие эксперименты, оценивать эффективность новых сложных теоретических подходов, нужны данные, которые являются разумно точными, достаточно общими и сравнительно легкодоступными. Наша книга имеет целью подобные данные предоставить.

Роль, играемая атомами в макрофизике, химии, биологии, некоторых областях технологии и инженерии да и в описании всего макромира, подобна той, которую играют элементарные частицы в микромире. Действительно, атомы — главный «строительный материал», своего рода «кирпичи», из которых по-

строен весь макроскопический мир. «Клей», который держит вместе макроскопические тела, — это межатомное взаимодействие, которое меняется в некоторых пределах, во многих случаях значительно, когда связывается вместе много атомов.

Несмотря на очевидный спрос в обширных атомных данных, современной книги, которая бы их аккумулировала, попросту нет. Обычно, если это книга по экспериментальной физике атома, главное внимание сосредоточено на результатах измерений, которые сравниваются с доступными теоретическими данными. Если взять книгу по теории, она концентрируется на деталях предложенных математических подходов, иллюстрируя их достижения сравнением с экспериментальными данными. В обоих типах книг главный интерес — это информация о рассматриваемом физическом процессе.

Наша цель состоит в том, чтобы концентрироваться на расчете и сборе самих данных. Чтобы их получить, мы будем использовать теоретические методы, которые открывают возможность массовых расчетов и в то же самое время настолько точны, насколько это возможно при таких расчётах.

Конечно, было бы лучше, если бы имелись простые аналитические формулы для расчета всех необходимых атомных характеристик и вероятностей процессов. Увы, строение атома достаточно сложно. Поэтому аналитические формулы слишком грубы. С другой стороны, быстрое развитие вычислительных технических средств, персональных компьютеров в частности, позволяет проводить относительно точные вычисления, используя довольно сложные теоретические подходы.

Демонстрация такого подхода, позволяющего сосредоточить главное внимание на представлении результатов вычислений, и является основной целью нашей книги. Что же касается используемых теоретических методов, они будут описаны кратко и лишь для того, чтобы объяснить, как получены приводимые данные.

Мы представим в этой книге результаты вычислений, проведенных в рамках как лучшего одноэлектронного хартри-фоковского (ХФ) приближения, так и с учётом многоэлектронных корреляций в так называемом приближении случайных фаз с обменом (ПСФО). Влияние корреляций во многих случаях очень важно для широкого класса характеристик атомов и процессов с их участием. Однако имеются ситуации, когда поправки, обусловленные многоэлектронной структурой атома, не велики,

хотя и существенны. В таких случаях мы будем использовать так называемую многочастичную теорию возмущений (МТВ).

В теоретическом рассмотрении, чтобы сделать его по возможности прозрачным, мы будем использовать вариант теории многих тел, основанный на технике диаграмм Фейнмана. Соответствующие ссылки помогут интересующимся найти детали теоретических подходов, используемых в этой книге.

Существует несколько обзоров и книг, где представлены таблицы атомных данных и сечения фотоионизации многих элементов в одноэлектронном, притом ещё сильно упрощённом приближении. В большинстве этих публикаций внимание уделялось только характеристикам атомной структуры, таким как полные энергии атомов, средние радиусы, энергии занятых уровней и т. п. В большой степени уровень и объём этих вычислений были определены не только спросом на соответствующие данные, но и техническими возможностями проведения соответствующих вычислений. Вероятно, первой в этом направлении была книга [1]. Затем появилось несколько других публикаций [2—4], где атомные данные сведены в таблицы, с увеличением шаг за шагом качества данных.

В [5] и [6] приведены расчёты сечений фотоионизации и дипольного параметра угловой анизотропии для многих атомов, но в рамках существенно упрощённого по сравнению с ХФ одночастичного приближения. В то же время хорошо известно, что это приближение, как правило, плохо работает для наружных и промежуточных оболочек, равно как и в околопороговой области энергий фотонов, — для внутренних. Там роль многоэлектронных корреляций велика. Этот недостаток в значительной мере преодолен в данной книге.

Как следует из названия настоящей книги, мы сосредоточимся на процессах взаимодействия фотонов и электронов с атомами и ионами. Причина состоит в том, что соответствующие характеристики можно во многих случаях вычислить с очень высокой точностью и надежностью. Теоретическое описание каждого рассмотренного процесса будет кратким и включать лишь формулирование основных идей, лежащих в основе используемых методов, а также ключевые формулы, которые применяются при проведении наших вычислений. Мы представим только главные пункты процедур вычисления.

Предлагаемая книга будет полезна для очень многих профессионалов и студентов, которые специализируются в атомной

физике и связанных с ней областях. Эта книга будет полезна для теоретиков, работающих в различных областях современной физики, химии и биологии, технологов, занятых производством новых материалов, и для экспериментаторов, исследующих взаимодействие фотонов и электронов с атомами, молекулами, твердыми телами и жидкостями. В целом, мы полагаем, что у данной книги будет достаточно широкая читательская аудитория. Это подтверждается обилием ссылок на предыдущие публикации [1—6].

Собранные данные и методы, используемые при их получении, могут быть полезны при теоретическом описании уже выполненных экспериментов и в предложении новых, для которых теоретические оценки или даже вычисления могут быть выполнены заранее. Все это сможет помочь экспериментаторам планировать их деятельность более эффективно, проводя предварительно весьма простые изыскания и расчёты, которые уместно именовать теоретическим экспериментом.

В целом, мы рассмотрим в этой книге очень много различных физических процессов, которые почти все, связаны со взаимодействием атомов и ионов с фотонами, электронами и позитронами, а также рассмотрим вероятности распада атомных вакансий. Для каждого из этих процессов мы представим результаты в одноэлектронном приближении Хартри—Фока (ХФ) и с учетом многоэлектронных корреляций в рамках приближения случайных фаз с обменом (ПСФО) или многочастичной теории возмущений (МТВ).

В качестве справочников по квантовой механике и электродинамике при описании строения атомов и процессов с их участием мы будем использовать следующие две фундаментальные нестареющие книги-руководства: *Л. Д. Ландау* и *Е. М. Лифшиц*. «Квантовая механика. Нерелятивистская теория» (М.: Физматгиз, 1962) и *В. Б. Берестецкий, Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский*. «Квантовая электродинамика» (М.: Наука, 1980). При расчете атомных характеристик и сечений рассеяния радиальные, угловые и спиновые переменные обычно разделены и интегрирование по угловым переменным и суммирование по проекциям спина выполняются аналитически. В качестве руководства для этих действий рекомендуем и сейчас современную книгу *И. И. Собельмана* «Введение в теорию атомных спектров» (М.: ГИФМЛ, 1963). Далее ссылки на все эти источники будут даваться как [ЛЛ], [БЛП] и [ИС] соответственно.

Имеется значительное перекрытие, особенно в обозначениях, диаграммах, которые изображают физические процессы, и в представлении математических формул, используемых в настоящей книге, с предыдущими публикациями.

Везде в книге мы используем так называемую *атомную систему единиц*, полагая постоянной Планка $\hbar$, заряд электрона e и его массу m равными 1, так как в противном случае формулы, расчеты и выражения будут перегружены различными степенями $\hbar$, m и e .

При переходе к системе единиц СИ используются следующие численные значения заряда и массы электрона: $e = 1.6 \cdot 10^{-19}$ К, $m = 9.108 \cdot 10^{-31}$ кг, а также связь основных единиц СИ с атомными единицами: длина $a_0 = \hbar^2 / me^2 = 0.529 \cdot 10^{-10}$ м = $0.529 \cdot 10^{-1}$ нм; энергия $\epsilon_0 = 2 \text{ Ry} = me^4 / \hbar^2 \approx 27.21$ эВ = $43.59 \cdot 10^{-10}$ нДж; сечение $a_0^2 \approx 27.98 \cdot 10^{-18}$ см² = $27.98 \cdot 10^{-4}$ нм² = 27.98 Мб (1 Мб равен 10^{-18} см²); скорость $v_0 = (\epsilon_0 / m)^{1/2} = e^2 / \hbar \approx 2.188 \cdot 10^6$ м/с; время $t_0 = a_0 / v_0 = \hbar^3 / me^4 \approx 0.242 \cdot 10^{-16}$ с. Единицами углового момента и импульса в атомной системе единиц являются $\hbar$ и $\hbar / a_0 = me^2 / \hbar$ соответственно. Постоянная тонкой структуры равна $\alpha = e^2 / \hbar c \approx 1/137.04$, причем в атомной системе $\alpha = 1 / c$ и скорость света $c \approx 137.04$.

Литература

1. Herman F., Skillman S. Atomic Structure Calculations N. J.: Prentice-Hall Inc., Englewood Cliffs, 1963.
2. Froese Ch. Some Hartree-Fock Results for the Atomic Helium to Radon. University of British Columbia Report, Vancouver, B. C., 1968.
3. Nestor C. W., Tucker T. C., Carlson T. A., Roberts L. D., Malik F. B., Froese Ch. Relativistic and non-relativistic self consistent field wave functions for atoms and ions from $Z = 2$ to 80, together with calculations of binding energies, mean radii, screening constants, charge distributions and electron shake-off probabilities. Oak Ridge National Laboratory Report ORNL-4027, 1966.
4. Lu C. C., Carlson T. A., Malik F. B., Tucker T. C., Nestor C. W. Relativistic Hartree—Fock—Slater eigenvalues, radial expectation values and potentials for atoms, $2 \leq Z \leq 126$ // Atomic Data. 1971. Vol. 3. P. 1—131.
5. Yeh J. J., Lindau I. // Atomic Data and Nuclear Data Tables. 1985. Vol. 32. P. 1—155.
6. Yeh J. J. Atomic calculation of photoionization cross-sections and asymmetry parameters. Gordon and Breach Science Publishers, Langhorne, PE (USA), 1993.

СПИСОК ПРИНЯТЫХ ОБОЗНАЧЕНИЙ И АББРЕВИАТУР

Аббревиатура основных ссылок

- [АИЧЧ] — Амусья М. Я., Иванов В. К., Черепков Н. А., Чернышева Л. В. Процессы в многоэлектронных атомах. СПб.: Наука, 2006
- [АМ] — Амусья М. Я. Атомный фотоэффект. М.: ГИФМЛ, 1987. (*Amusia M. Ya. Atomic photoeffect. N.Y.; London: Plenum Press, 1990*)
- [АМУ] — *Amusia M. Ya. Atomic photoeffect. New York; London: Plenum Press, 1990.*
- [АЧ] — *Amusia M. Ya. and Chernysheva L. V. Computation of atomic processes. Bristol and Philadelphia: Institute of Physics Publishing, 1997.*
- [БЛП] — Берестецкий Н. Б., Лифшиц Е. М., Питаевский Л. П., Квантовая электродинамика. М.: Наука, 1980.
- [ИС] — Соболевман И. И. Введение в теорию атомных спектров. М.: ГИФМЛ, 1963.
- [ЛЛ] — Ландау Л. Д. и Лифшиц Е. М. Квантовая механика. Нерелятивистская теория. М.: Физматгиз, 1962.

Аббревиатура основных методов и физических эффектов

- БПВ — борновское приближение искажённых волн
- ГАР — гигантский автоионизационный резонанс
- ИМ — интерференционный минимум
- ИР — интерференционный резонанс
- МТВ — многочастичная теория возмущений
- ОИ — отрицательные ионы
- ОПСФО — обобщенный метод ПСФО
- ОПСФО-II — ОПСФО с учётом оже-распада внутренней вакансии
- ОСО — обобщенная сила осциллятора (обобщенные силы осцилляторов)

ПСФО	— приближение случайных фаз с обменом
ПСФОН	— ПСФО для атомов с незаполненными оболочками
СП ПСФО	— спин-поляризованный вариант ПСФО
УПСФО	— упрощённое ПСФО
ХФ-приближение	— приближение Хартри—Фока
ХФ-д	— приближение ХФ с оператором взаимодействия электрона с фотоном в форме «длины»
ХФ-с	— приближение ХФ с оператором взаимодействия электрона с фотоном в форме «скорости»

Наиболее часто используемые обозначения

$A@C_{60}$	— эндоэдральный атом с оболочкой в виде фуллерена C_{60}
c	— скорость света
F	— уровень Ферми
$G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}', E), G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', E),$ $G_E(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$	— одночастичная функция Грина
$\hat{H}_0, \hat{H}$	— оператор Гамильтона
$\hat{M}$	— оператор перехода
N	— число электронов в атоме
q	— волновое число
$R_{nl}(r)$	— радиальная часть волновой функции
$U(\mathbf{r}, t)$	— потенциал внешнего поля
V	— потенциал взаимодействия между частицами
$Y_{lm}(\mathbf{r} / r) = Y_{lm}(\vartheta, \phi)$	— угловая часть волновой функции
Z	— заряд ядра
α	— постоянная тонкой структуры
γ^C, δ^C	— недипольные параметры угловой анизотропии
E, ϵ_i	— энергия состояния или частицы
λ	— длина волны
$\sigma(\omega)$	— сечение процесса
σ^{sup}	— сечение сверхупругих процессов
$\phi_j(x)$	— одночастичная волновая функция в состоянии j
χ_σ	— спиновая часть волновой функции
$\Psi(\mathbf{r}, t)$	— волновая функция
Ω	— частота колебаний
ω	— энергия (частота) фотона

РАЗДЕЛ I

ПОГЛОЩЕНИЕ ФОТОНОВ

ГЛАВА 1

ОСНОВНЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ ТЕОРИИ

1.1. Наиболее важное о фотоионизации

В этой книге мы рассматриваем фотопоглощение и фотоионизацию как процессы, в которых фотон энергии ω с импульсом k ($k = \omega/c$, где c — скорость света) поглощается мишенью — атомом или ионом. В результате, мишень может быть или *возбуждена*, или *ионизована*. Возбуждение есть переход атома или иона на один или несколько дискретных уровней энергии.

Ионизация — процесс, в котором в результате поглощения фотона один или несколько электронов покидают мишень — атом или ион, в то время как *остаточный ион* оказывается в самом низком состоянии своей энергии. Поглощение фотона может кончиться также *ионизацией с возбуждением*. Это процесс, в котором один или несколько электронов удаляются из мишени, и она остается в возбужденном состоянии, то есть на одном из дискретных возбужденных уровней остаточного иона.

Если рассматривать атом в рамках одноэлектронной картины, то есть считать все его электроны невзаимодействующими и движущимися независимо в общем потенциальном поле, то атом или ион может быть или ионизован, или возбужден, потому что один фотон может взаимодействовать только с одним электроном. Несмотря на ограниченную точность такого подхода, мы выполним и представим результаты вычислений в его рамках. Во многих случаях эти результаты можно считать хорошим начальным шагом и они могут применяться главным образом для ориентировки. В качестве одноэлектронного мы будем использовать приближение Хартри—Фока (ХФ), которое является лучшим методом, совместимым с идеей независимого движения всех атомных электронов в общем, так называемом *самосогла-*

сованном, поле атома. Главные особенности приближения ХФ мы опишем в следующем разделе.

Однако почти во всех процессах, рассматриваемых в этой книге, существенна роль межэлектронного взаимодействия, и во многих случаях эта роль решающе важна. Учет межэлектронного взаимодействия, которое ведет к *корреляциям* в атомном электронном движении, по существу изменяет отклик атома (или иона) на налетающий фотон а именно значительно меняются вероятности поглощения фотона, и даже вероятности удаления одного электрона. Кроме этого, становится возможным целый ряд атомных процессов, которые не могут иметь места в рамках одноэлектронного приближения. Среди них такие как ионизация двух и даже более электронов одним фотоном, ионизация с возбуждением и многоэлектронные возбуждения.

Чтобы учесть межэлектронное взаимодействие, или, как это часто называют, *многоэлектронные корреляции*, мы будем использовать в этой книге *приближение случайных фаз с обменом* (ПСФО) или *многочастичную теорию возмущений* (МТВ). В сущности, ПСФО учитывает корреляции вне рамок МТВ, рассматривая их как большую поправку, динамическую вариацию самосогласованного поля, действующего на каждый электрон, которая вызвана поглощением налетающего фотона [АМ]. В ряде случаев, однако, МТВ может использоваться для рассмотрения атомных процессов, так как иногда межэлектронное взаимодействие можно рассматривать как относительно малое возмущение.

В этой книге при рассмотрении фотопроцессов мы ограничимся так называемым дипольным приближением, которое справедливо, если, грубо говоря, длина волны, соответствующая налетающему фотону $\lambda = 2\pi / k = 2\pi c / \omega$, намного больше, чем атомный или ионный характерный радиус r_A , $\omega \ll 2\pi c / r_A$.

Оператор, описывающий взаимодействие между фотоном и электроном, может быть представлен в следующей форме [БЛП]:

$$\hat{M}(\mathbf{k}) = \sum_{i=1}^N \hat{\mu}_i(\mathbf{k}) \equiv \sum_{i=1}^N \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}_i)(\boldsymbol{\varepsilon} \nabla_i), \quad (1.1)$$

где $\boldsymbol{\varepsilon}_i$ — вектор поляризации фотона; r_i — координата электрона; $\nabla_i \equiv -i\partial / \partial \mathbf{r}$ и N — полное число атомных (ионных) электронов. В дипольном приближении импульсом фотона k можно пре-

небредь, так что вместо (1.1) взаимодействие атома с фотоном выглядит следующим образом:

$$\hat{M}_d^V = \sum_{i=1}^N \hat{d}^V \equiv \sum_{i=1}^N (\mathbf{e} \nabla_i). \quad (1.2)$$

Верхний индекс v в M^V означает, что оператор взаимодействия записан в так называемой *форме скорости*. Наряду с этой формой существует другая, так называемая *форма длины*:

$$\hat{M}^R = \sum_{i=1}^N \hat{d}^R(\omega) \equiv \sum_{i=1}^N \omega(\mathbf{e} \mathbf{r}_i). \quad (1.3)$$

Амплитуда процесса, или матричный элемент $M_{i \rightarrow f}^{V,R}(\omega)$, который описывает взаимодействие атома с фотоном, определен следующим интегралом:

$$M_{i \rightarrow f}^{V,R}(\omega) = \int \Psi_i^*(x_1, \dots, x_i, \dots, x_N) \times \\ \times \hat{M}^{V,R}(\omega) \Psi_f(x_1, \dots, x_i, \dots, x_N) \prod_{i=1}^N dx_i, \quad (1.4)$$

где $\Psi_i(x_1, \dots, x_i, \dots, x_N)$ и $\Psi_f(x_1, \dots, x_i, \dots, x_N)$ — волновые функции атома (иона), взаимодействующего с фотоном, в начальном и конечном состояниях соответственно. В случае ионизации $\Psi_f(x_1, \dots, x_i, \dots, x_N)$ описывает и состояния непрерывного спектра одного или нескольких электронов. В (1.4) переменная $x_i \equiv r_i, s_i$, где r_i — координата и s_i — спиновая проекция атомного электрона. Интегрирование по dx_i в (1.4) включает не только интегрирование по всему пространству $\mathbf{r}$, но и суммирование по проекции спина s .

Процесс фотоионизации характеризуется *полным* $\sigma^{V,R}(\omega)$, *парциальным* $\sigma_q^{V,R}(\omega)$ и *дифференциальным по углу* $d\sigma_q^{V,R}(\omega)/d\Omega$ сечениями фотоионизации, где Ω — телесный угол вылета электрона. Полное сечение $\sigma^{V,R}(\omega)$ дается выражением

$$\sigma^{V,R}(\omega) = \frac{4\pi^2}{\omega c} \sum_f \int |M_{if}^{V,R}(\omega)|^2 \delta(E_f - E_i + \omega) dE_f. \quad (1.5)$$

Здесь E_i — энергия атома в его начальном состоянии, в то время как E_f — энергия конечного состояния системы, возникшего из

атома-мишени после поглощения фотона. Суммирование по f проводится по всем состояниям, которые имеют ту же самую энергию E_f .

Если состояние f принадлежит дискретному спектру атомных возбуждений, фотон-атомное взаимодействие характеризуется так называемой *силой осциллятора*:

$$g_{if}^{V,R} = \frac{2}{\omega_{if}} \left| M_{if} \right|^2, \quad (1.6)$$

где $\omega_{if} \equiv E_f - E_i$. Заметим, что для точной атомной волновой функции сечения и силы осциллятора в формах длины R и скорости V совпадают, но для приближенных волновых функций они могут быть отличны.

Полное сечение и силы осциллятора, вычисленные с точными волновыми функциями начальных и конечных состояний, подчиняются так называемому *золотому правилу сумм*:

$$\sum_f g_{if}^{V,R}(\omega) + \frac{c}{2\pi^2} \int_I^\infty \sigma^{V,R}(\omega) d\omega = N, \quad (1.7)$$

где I — потенциал ионизации атома, то есть минимальная энергия, требуемая для удаления электрон из атома.

Парциальное сечение $\sigma_q^{V,R}(\omega)$ характеризует удаление атомного электрона из данного состояния, или с уровня энергии. Дифференциальное по углу сечение $d\sigma_q^{V,R}(\omega)/d\Omega$ характеризует процесс фотоионизации, в котором вылетающий электрон, называемый *фотоэлектроном*, покидает атом в заданном направлении, в элемент телесного угла $d\Omega$ относительно импульса налетающего фотона.

1.2. Одноэлектронное приближение Хартри—Фока (ХФ)

В приближении ХФ атомные волновые функции начальных и конечных состояний представлены в виде антисимметризованных произведений одноэлектронных волновых функций $\varphi_i(\mathbf{r}, s)$. В этом подходе предполагается, что все электроны движутся в самосогласованном потенциале $\hat{U}_{\text{ХФ}}(r)$, так что для по-

лучения атомной волновой функции должно быть решено следующее уравнение:

$$\hat{H}_{\text{ХФ}} \Psi_E(x_1, \dots, x_N) = \sum_{j=1}^N \left[-\frac{\Delta_j}{2} - \frac{Z}{r_j} + \hat{U}_{\text{ХФ}}(r_j) \right] \times \\ \times \Psi_E(x_1, \dots, x_N) = E \Psi_E(x_1, \dots, x_N). \quad (1.8)$$

В приближении ХФ решение (1.8) представлено как

$$\Psi_E(x_1, \dots, x_N) \equiv \Psi_E^{\text{ХФ}} = \frac{1}{\sqrt{N!}} \hat{A} \prod_{j=1}^N \varphi_j(x_j), \quad (1.9)$$

где $\hat{A}$ — оператор перестановок координат и спинов, который равен $+1$ в случае четного числа перестановок и -1 в случае нечетного их числа. Определяя одноэлектронные волновые функции $\varphi_i(\mathbf{r}, s)$ и самосогласованный потенциал $\hat{U}_{\text{ХФ}}(r)$ из требования минимизации полной энергии атома на базисе (1.9), получим следующее уравнение:

$$-\frac{\Delta}{2} \varphi_j(x) - \frac{Z}{r} \varphi_j(x) + \sum_{k=1}^N dx' \varphi_k^*(x') \frac{1}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|} \times \\ \times [\varphi_k(x') \varphi_j(x) - \varphi_j(x') \varphi_k(x)] = \varepsilon_j \varphi_j(x). \quad (1.10)$$

Здесь ε_j обозначает одночастичную энергию электрона в состоянии j . В основном состоянии атома заполнены N наиболее низких уровней энергии. Введем уровень Ферми F как заполненный уровень с самой высокой энергией. Тогда ограничение в сумме по k может быть представлено как $k \leq F$.

Электронная энергия ε_j определена главным квантовым числом n_j и угловым моментом l_j , который определяет радиальную часть волновой функции. Электронные уровни одной и той же энергии образуют *подоболочку*, в то время как все уровни с тем же самым главным квантовым числом образуют *оболочку*. Одноэлектронные волновые функции ортогональны и нормированы:

$$\int \varphi_j^*(x) \varphi_k(x) dx = \delta_{jk}, \quad (1.11)$$

где $\delta_{ii} = 1$ и $\delta_{j \neq k} = 0$.

Решения (1.10) в $j > F$ — это волновые функции дополнительного, т. е. $N + 1$ -го электрона. Они могут соответствовать дискретному ($\epsilon_j < 0$) и непрерывному ($\epsilon_j > 0$) спектрам. При $\epsilon_j > 0$ решения (1.10) существуют для любой величины ϵ . На большом расстоянии от атома эти решения осциллируют. Они нормированы следующим условием:

$$\int \varphi_{\epsilon l m s}^*(x) \varphi_{\epsilon' l' m' s'}(x) dx = \delta(\epsilon - \epsilon') \delta_{ll'} \delta_{mm'} \delta_{ss'}, \quad (1.12)$$

где $\delta(\epsilon - \epsilon')$ — дельта-функция Дирака; $l(l')$ — угловой момент электронов; $m(m')$ — его проекции на некую заранее выбранную ось и $s(s')$ — его спин.

В приближении ХФ (1.10) дипольные амплитуды фотопоглощения определены как матричные элементы операторов

$$\hat{d}^V = (\mathbf{e} \vec{\nabla}) \text{ или } \hat{d}^R = \omega(\mathbf{e} \mathbf{r}) \quad (1.13)$$

(см. (1.2) и (1.3)):

$$d_{if}^{V,R}(\omega) = \int d\mathbf{r} \varphi_i^*(x) \hat{d}^{V,R} \varphi_f(x). \quad (1.14)$$

Сечение фотоионизации в приближении ХФ определяется уравнением, подобным (1.4), с $\hat{M}^{V,R}(\omega)$, замененным на $\hat{d}^{V,R}$. Та же самая ситуация имеет место для сил осциллятора.

1.3. Диаграммная техника

Важный элемент теоретического описания процессов, которые рассматриваются в данной книге, это создание их схематического эскиза — диаграммы, в которой используются обозначения и которая сконструирована по методу, представленному ниже. Эти диаграммы были введены шестьдесят лет назад в квантовой электродинамике и затем успешно применялись и применяются в других областях физики, при описании твёрдых тел, конденсированных состояний, атомных ядер.

В диаграммах используются следующие обозначения:

а) *пунктирная линия* представляет нестационарное внешнее поле, а именно фотон:

$$\text{-----} \quad (1.15)$$

б) линия со стрелкой направо обозначает электрон в состоянии v_1 , описываемом в приближении ХФ волновой функцией $\phi_{v_1}(\mathbf{r}, s)$, которая определена (1.10):

$$\longrightarrow^{v_1} \quad (1.16)$$

в) линия с двойной стрелкой направо обозначает электрон в дискретном возбужденном состоянии v_1 , описываемом в приближении ХФ волновой функцией, данной формулой (1.10):

$$\longrightarrow\!\!\longrightarrow^{v_1} \quad (1.17)$$

г) линия со стрелкой налево представляет вакансию в состоянии v_2 , описываемом в приближении ХФ волновой функцией, определенной в (1.10):

$$\longleftarrow^{v_2} \quad (1.18)$$

д) волнистая линия обозначает кулоновское взаимодействие между атомными электронами или взаимодействие между атомным электроном и налетающим электроном или позитроном в процессе рассеяния:

$$\begin{array}{c} \text{~~~~~} \\ \text{~~~~~} \\ \text{~~~~~} \\ \text{~~~~~} \\ \text{~~~~~} \\ \text{~~~~~} \\ \text{~~~~~} \\ \text{~~~~~} \\ \text{~~~~~} \\ \text{~~~~~} \end{array} \quad (1.19)$$

е) кружок или точка обозначает акт взаимодействия между полем и электроном:

$$\bullet \quad (1.20)$$

Используя эти обозначения, так же как слова очень простого словаря, мы можем создать элементарные диаграммы, описывающие взаимодействие между атомными электронами или между атомными электронами и внешним полем. Следующая диаграмма объясняет взаимодействие фотона с атомными электронами, которое ведет к образованию пары электрон—дырка $v_1 v_2$ и поглощению фотона с энергией ω :

$$\begin{array}{c} \text{~~~~~} \\ \text{~~~~~} \\ \text{~~~~~} \\ \text{~~~~~} \\ \text{~~~~~} \\ \text{~~~~~} \\ \text{~~~~~} \\ \text{~~~~~} \\ \text{~~~~~} \\ \text{~~~~~} \end{array} \quad (1.21)$$

Аннигиляция (коллапс) пары электрон—дырка $v_1 v_2$ с эмиссией фотона ω может быть представлена как



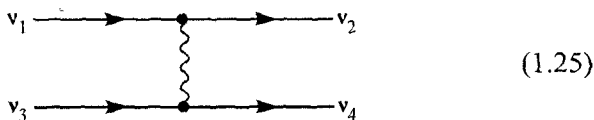
Следующие элементарные процессы могут быть только виртуальными (временными): «создание» пары электрон—дырка $v_1 v_2$ и фотона ω из вакуума



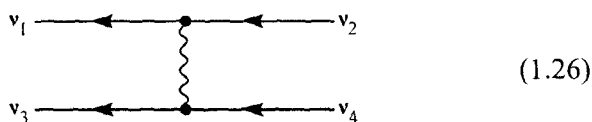
и аннигиляция электрон-дырочной пары и фотона ω в вакуум



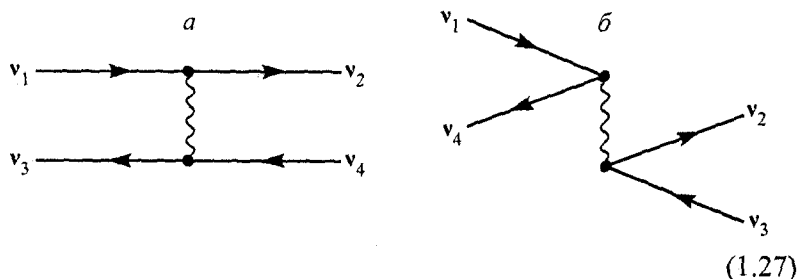
Взаимодействие между двумя электронами в состояниях v_1 и v_3 описывает, во-первых, акт рассеяния электрона v_1 другим электроном v_3 , в результате чего они переходят в состояния v_2 и v_4 :



или рассеяние вакансии (дырки) v_1 другой дыркой v_3

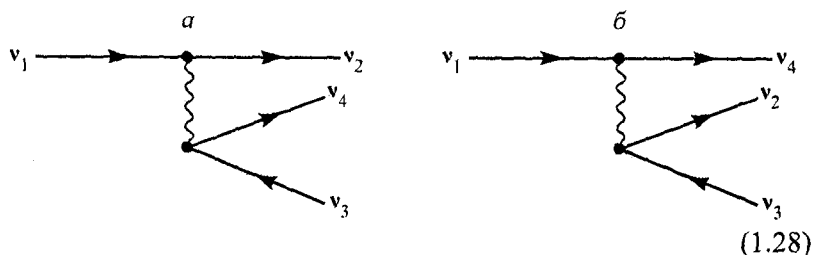


Рассеяние дырки v_4 электроном v_1 или наоборот описывается диаграммами:



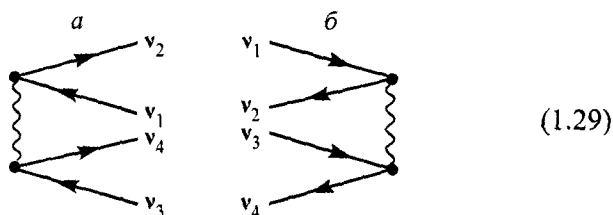
Вторая диаграмма (1.27б) представляет аннигиляцию пары $v_1 v_4$, сопровождаемой созданием пары в другом состоянии $v_2 v_3$.

Распространение электрона v_1 (или дырки v_2) может сопровождаться его переходом в v_2 (v_1) и созданием пары $v_3 v_4$. Это можно описать следующим образом:



Распространение электрона v_1 (или дырки v_2) может также сопровождаться аннигиляцией пары, которая может быть представлена в виде диаграмм — зеркальных отражений (1.28) относительно волнистой линии кулоновского межэлектронного взаимодействия.

Есть два следующих виртуальных элементарных процесса: создание двух электрон-дырочных пар $v_2 v_1$ и $v_3 v_4$ из вакуума и аннигиляция их:

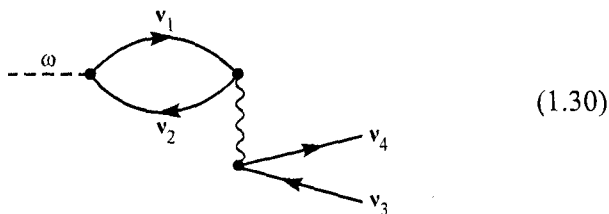


Каждая в отдельности или комбинация этих элементарных диаграмм представит любой физический процесс, который будут рассматриваться в этой и следующих главах данной книги.

Чтобы построить диаграмму атомного процесса, сначала должны быть представлены начальное и конечное состояния посредством элементарных диаграмм. Например, для фотоионизации с удалением одного электрона из атома-мишени фотон (1.15) и электрон-дырочная пара задают начальное и конечное состояние соответственно. Для упругого описания рассеяния электрона и начальное, и конечное состояния должны быть представлены линиями со стрелками, ориентированными направо (1.16). При «распаде» вакансии её состояние изменяется, а энергия перехода идет на создание электрон-дырочной пары. Здесь начальное состояние есть вакансия (1.17), в то время как конечное состояние — это вакансия и электрон-дырочная пара.

Построение диаграммы начинается с самого низкого порядка по межэлектронному взаимодействию. Цель состоит в том, чтобы представить процесс при исследовании как развитие от его начального к конечному состоянию через самый короткий ряд элементов межчастичного взаимодействия. Например, самая простая диаграмма фотоионизации — (1.21), а (1.28a) — самая простая диаграмма неупругого рассеяния электрона с созданием электрон-дырочной пары.

Начальные и конечные состояния можно также соединить вместе, используя целый ряд элементарных актов взаимодействия. Например, следующая диаграмма представляет вклад в амплитуду одноэлектронной фотоионизации с созданием электрона v_4 и вакансии v_3 , которая включает и взаимодействие с электрон-дырочной парой $v_1 v_2$:



Диаграммы представляют процесс, развивающийся во времени. Время считается нарастающим слева направо.

Следующие так называемые *правила соответствия* позволяют нам связывать аналитическое выражение с диаграммой-рисунком. Для этого надо:

— приписать набор состояний $v_1, v_2, \dots, v_n$ всем электронам и дыркам диаграммы;

— ввести «рассечения» диаграмм, т. е. нарисовать в действительности или воображаемо вертикальные линии, разделяющие каждое событие взаимодействия между атомными электронами или атомным электроном и фотоном;

— соотнести каждому рассеянию так называемый энергетический знаменатель

$$\left(\sum \varepsilon_h - \sum \varepsilon_p + E_{in} + i\eta \right)^{-1}, \quad (1.31)$$

где $\sum \varepsilon_h$ и $\sum \varepsilon_p$ — соответственно полные энергии всех дырок и электронов, включенных в рассеяние; E_{in} является поступающей энергией, $\eta \rightarrow 0$;

— каждому акту взаимодействия фотона с электроном или дыркой (1.21)—(1.24), где $\mu(\mathbf{k})$ задано (1.1), соотнести матричный элемент

$$\langle v_1 | \hat{\mu}(\mathbf{k}) | v_2 \rangle \equiv \int d\mathbf{r} \varphi_{v_1}^*(x) \hat{\mu}(\mathbf{k}) \varphi_{v_2}(x) \quad (1.32)$$

и матричный элемент

$$\begin{aligned} & \langle v_1 v_3 | V | v_2 v_4 \rangle \equiv \\ & \equiv \int dx dx' \varphi_{v_1}^*(x) \varphi_{v_3}^* \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \varphi_{v_2}(x) \varphi_{v_4}(x') \end{aligned} \quad (1.33)$$

— межэлектронному взаимодействию (1.25)—(1.29);

— просуммировать и проинтегрировать по всем состояниям внутренних электронов и дырок v_j с учётом того, что $\eta \rightarrow 0$ в (1.31) показывает направление обхода полюса в (1.31);

— умножить полученное выражение на $(-1)^Q$, где Q — сумма числа дырочных линий в диаграмме и числа замкнутых электрон-дырочных петель.

Результатом проведения всех этих действий станет получение вклада данной диаграммы в амплитуду исследуемого процесса.

Например, вклад диаграммы (1.30) равен

$$\Delta \mu_{v_3 v_4}(\omega) = \sum_{v_1 > F, v_2 < F} \frac{\langle v_1 | \hat{\mu}(\mathbf{k}) | v_2 \rangle \langle v_1 v_3 | V | v_2 v_4 \rangle}{\epsilon_{v_3} - \epsilon_{v_3} + \omega + i\eta} (-1)^3. \quad (1.34)$$

Здесь $Q = 3$, так как в диаграмме есть одна электрон-дырочная петля и две дырочные линии v_2 и v_3 . Более сложные диаграммы могут быть созданы точно так же, и аналитические выражения связаны с ними тем же самым способом.

Разнообразие диаграмм, в принципе бесконечное, соответствует любому физическому процессу с данными начальным и конечным состояниями. Ограничив рассмотрение некоторыми отобранными диаграммами, можно связать их с соответствующими аналитическими выражениями и таким образом получить амплитуду исследуемого процесса, вероятность которого пропорциональна квадрату модуля амплитуды. Полная вероятность процесса в единицу времени — это сумма квадратов модулей амплитуд по всем возможным конечным состояниям, усредненная по начальным состояниям с учетом выполнения закона сохранения энергии. Согласно этому закону энергии системы в её начальном и конечном состояниях должны быть равны.

1.4. Многочастичная теория возмущений (МТВ)

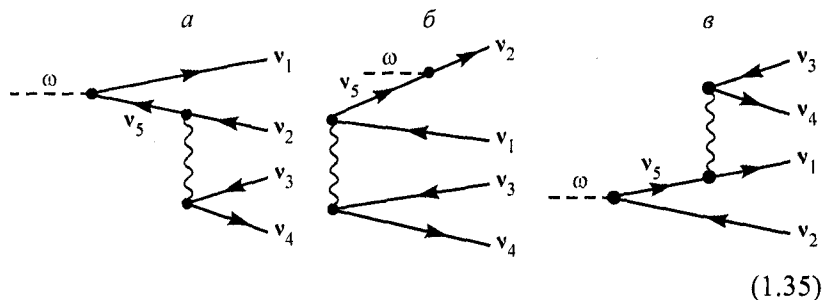
В настоящее время, несмотря на быстрое развитие вычислительной техники, невозможно описать атом, содержащий N электронов с $N > 2$, точно решая уравнение Шрёдингера для всех N электронов, взаимодействующих друг с другом через кулоновский потенциал и двигающихся в поле ядра заряда Z . Таким образом, при исследовании атомов неизбежны упрощения или модели.

Существенные упрощения становятся возможными и оправданными, когда взаимодействие слабо. Тогда его можно рассматривать, используя *теорию возмущений*. В этой книге мы исследуем взаимодействие атомов только с полем фотона низкой интенсивности. Поэтому фотон-электронное взаимодействие достаточно учесть только в самом низшем порядке теории возмущения. Для фотопоглощения это означает, что соответствующие амплитуды будут рассчитаны в первом порядке по $\hat{\mu}(\mathbf{k})$ [см. (1.1)].

Ситуация с электрон-электронным и электрон-ядерным взаимодействиями намного сложнее. Действительно, эти взаимодействия можно рассматривать как возмущение вообще, только когда относительная скорость взаимодействующих частиц является большой. В атоме дело обстоит не так. Без сомнения, ХФ-поле отличается от чисто ядерного достаточно сильно. Поэтому будут использоваться одноэлектронные и однодырочные состояния, рассчитанные в приближении ХФ (1.10).

Взаимодействие между быстрой налетающей частицей и электронами мишени также достаточно учесть лишь в первом порядке по V . Существует целый ряд процессов, например распад вакансии с испусканием быстрых электронов или фотонов высокой энергии, где теория возмущения по межэлектронному взаимодействию может быть также применена. Теория возмущения, даже в её низшем порядке, может использоваться в любом случае при изучении сложного процесса, который является слишком трудным или невозможным для рассмотрения. В последнем случае полученные данные должны использоваться с разумной осторожностью, имея в виду, что это может быть не достаточно точно.

Преимущество подхода, основанного на теории возмущений, состоит в том, что исходное грубое приближение сравнительно легко получить, и механизм рассмотрения становится ясным и очевидным. В качестве примера последней ситуации, рассмотрим двухэлектронную фотоионизацию, т. е. процесс, в котором два электрона удалены из атома после поглощения одного фотона. Самые простые диаграммы, описывающие создание двух электрон-дырочных пар одним фотоном выглядят следующим образом:



где диаграммы (1.35 а) и (1.35 в) описывают выбивание электрона и переход из состояния v_3 в состояние v_4 вследствие рассея-

ния электрона (или дырки) v_5 , сопровождаемый переходом последнего в состояние v_2 . Заметим, что в первом порядке наряду с диаграммой (1.35 б) существует подобная ей; в которой налетающий фотон взаимодействует не с электроном, а с дыркой. Эта диаграмма вместе с (1.35 б) и соответствует взаимодействию между электронами в основном состоянии. В результате действия механизмов, представленных диаграммами (1.35), два электрона удаляются из атома или переходят в возбужденные состояния.

Чтобы получить достаточно точные результаты для двух-электронной фотоионизации при не очень высокой ω , нужно учесть вне рамок МТВ по крайней мере взаимодействие между двумя атомными электронами $v_1 v_4$. В начальном состоянии следует учесть взаимодействие между двумя ионизируемыми электронами вне рамок МТВ даже для высоких ω . Однако вычисления, использующие амплитуду, изображенную в (1.35), дают весьма хорошее первое приближение к реальной ситуации.

Не слишком трудно учесть поправки по V следующего порядка к (1.35). Однако уже включение всех членов третьего порядка — очень сложная задача. Поэтому расчеты в рамках МТВ ограничены не больше, чем всеми диаграммы третьего порядка. Конечно, некоторые члены бесконечных порядков учитываются выбором ХФ-функций в качестве одноэлектронных. Но вообще, при числе межэлектронных взаимодействий, превышающем три, даже нарисовать все диаграммы становится задачей, отнимающей довольно много времени. Что же касается расчета соответствующих матричных элементов, то это становится просто невозможным. Действительно, при числе событий взаимодействия, равном $N_{\text{инт}}$, число диаграмм равно $N_{\text{инт}}!$ Расчет вклада каждой данной диаграммы становится все более сложным с увеличением $N_{\text{инт}}$, так как число промежуточных состояний увеличивается, а следовательно, и число требуемых интегрирований и суммирований.

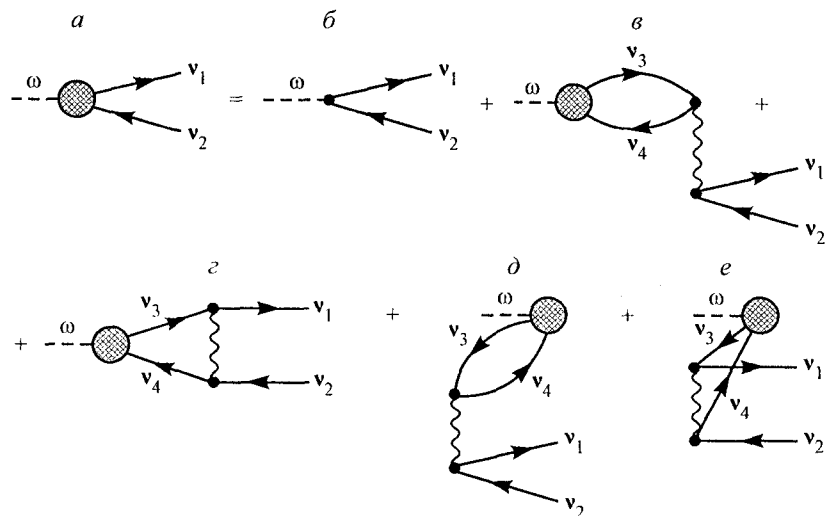
Однако часто используется другой подход. Учитываются члены всех степеней по V , но в каждом порядке q (т. е. с произведением q матричных элементов V) сохраняется ограниченное число членов разложения. Очевидно, даже часть членов всех степеней по V не может быть просуммирована последовательно, учитывая один порядок за другим. Однако в некоторых случаях такое суммирование может быть выполнено посредством решения одного уравнения (или их системы), называемого замкнутым уравнени-

ем, с помощью которого все искомые функции выражены через уже известные. Примером такого подхода является так называемое *приближение случайных фаз с обменом* — ПСФО.

1.5. Приближение случайных фаз с обменом (ПСФО)

ПСФО — это обобщение приближения ХФ для атома в слабом электромагнитном внешнем поле или в возбужденном состоянии, создаваемом, например, при столкновении атома с электроном и т. п. Метод базируется на предположении, что как в присутствии, так и от отсутствия нестационарного внешнего поля атомная волновая функция в каждый момент есть детерминант Слетера, составленный из одноэлектронных волновых функций $\varphi_v(x, t)$. В ПСФО полагается, что вариация одноэлектронной волновой функции под действием внешнего электромагнитного поля мала.

Уравнения ПСФО учитывают не только действие внешнего поля на определённый атомный электрон, но также и взаимодействие внешнего поля со всеми другими электронами. Виртуальные переходы, вызванные этим взаимодействием, изменяют среднее атомное поле, делают его зависящим от времени и поэтому ведут к удалению или возбуждению атомного электрона. В терминах диаграмм ПСФО соответствует учету актов взаимодействия между дыркой и электроном. Схематически, уравнения ПСФО представлены следующим способом:



(1.36)

Здесь заштрихованный круг обозначает оператор электрон-фотонного взаимодействия в ПСФО. Диаграммное уравнение (1.36) может быть проитерировано. Первый шаг этой итерации состоит в замене заштрихованного круга точкой. Тогда диаграмма (1.36, в) преобразуется в (1.30).

Диаграммы (1.36) представляют процесс фотоионизации развивающимся во времени, слева направо, начиная с фотона и кончая электрон-дырочной парой. Поэтому диаграммы (1.36, б, в, г) называют диаграммами «вперед по времени», тогда как (1.36, д, е) называются диаграммами «назад по времени».

Уравнение (1.36) может быть аналитически представлено в виде интегрального. В дипольном приближении, которое будет использоваться во всех, кроме двух, разделах этой главы, имеем (см. [АС]):

$$\begin{aligned} \langle v_1 | D(\omega) | v_2 \rangle &= \langle v_1 | \hat{d} | v_2 \rangle + \\ &+ \sum_{v_3, v_4} \frac{\langle v_3 | D(\omega) | v_4 \rangle (n_{v_4} - n_{v_3}) \langle v_4 v_1 | U | v_3 v_2 \rangle}{\epsilon_{v_4} - \epsilon_{v_3} + \omega + i\eta(1 - 2n_{v_3})}, \quad (1.37) \\ \langle v_4 v_1 | U | v_3 v_2 \rangle &\equiv \langle v_4 v_1 | V | v_3 v_2 \rangle - \langle v_4 v_1 | V | v_2 v_3 \rangle. \end{aligned}$$

Здесь матричный элемент $\langle v_1 | \hat{d} | v_2 \rangle$ определен согласно (1.32) с $\mu(\mathbf{k})$, заменённым на $\hat{d}^{V,R}$ из (1.13), а n_v есть так называемая *ступенчатая функция Ферми*:

$$n_v = \begin{cases} 1 & v \leq F \\ 0 & v > F' \end{cases}. \quad (1.38)$$

Суммирование по непрерывным состояниям в (1.37) включает также интегрирование по их энергиям, и поэтому (1.37) есть интегральное уравнение.

Важными особенностями ПСФО является то, что для решений (1.37) должны совпадать результаты в формах «длины» и «скорости» и выполняться правило сумм (1.7) вопреки тому, что имеет место для приближения ХФ и общее — в МТВ-приближениях. Эти особенности ПСФО будут использоваться, чтобы проверить численную точность наших вычислений. Сечение фотоионизации в ПСФО определяется соотношением, подобным

(1.4), с $\hat{M}^{V,R}(\omega)$, замененным на $\hat{D}(\omega)$. Та же ситуация имеет место и для сил осциллятора.

Важный элемент ПСФО — это *эффективное взаимодействие* $\Gamma(\omega)$. Оно отличается от чисто кулоновского взаимодействия V -поправками, вызванными виртуальным возбуждением других атомных электронов в ходе взаимодействия пары рассматриваемых электронов. Мы можем выразить в терминах эффективного взаимодействия $\Gamma(\omega)$ поправки ПСФО ко всем физическим характеристикам атомов и атомных процессов, полученным в приближении ХФ. Их называют *корреляционными поправками*.

Следующие соображения позволяют нам написать уравнение ПСФО для $\Gamma(\omega)$. Действие одного атомного электрона на другой может быть рассмотрено как внешнее поле:

$$B_{v_3 v_4}(\mathbf{r}) = \int dx \varphi_{v_3}(x) \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \varphi_{v_4}^*(x). \quad (1.39)$$

Заменяя в (1.37) $\hat{d}$ на (1.39), мы получаем выражение для эффективного межэлектронного взаимодействия в ПСФО:

$$\begin{aligned} \langle v_1 v_3 | \Gamma(\omega) | v_2 v_4 \rangle &= \langle v_1 v_3 | U | v_2 v_4 \rangle + \\ &+ \sum_{v_5, v_6} \frac{\langle v_3 v_5 | \Gamma(\omega) | v_4 v_6 \rangle (n_{v_6} - n_{v_5}) \langle v_6 v_1 | U | v_5 v_2 \rangle}{\varepsilon_{v_6} - \varepsilon_{v_5} + \omega + i\eta(1 - 2n_{v_5})}. \end{aligned} \quad (1.40)$$

На языке диаграмм эффективное взаимодействие $\Gamma(\omega)$ представлено уравнением, построенным подобно (1.36), где первый член в правой части — (1.27) вместо (1.21).

Важно заметить, что некоторая неопределенность существует в определении приближения ХФ для возбужденных состояний. Было показано (см. [АМ]), что в результате этого некоторые части вклада диаграмм ПСФО могут быть учтены соответствующим выбором одноэлектронных волновых функций в приближении ХФ. Эта техника будет широко использоваться в следующих разделах данной книги.

Уравнения в приближении ХФ и ПСФО обычно решаются численно, равно как и учёт вкладов различных диаграмм в МТВ. Но чтобы предвидеть качественные особенности, которые можно ожидать в результате учета многоэлектронных корреляций,

уместно использовать следующий подход. Представим (1.37) и (1.40) в форме символических операторных уравнений:

$$\hat{D}(\omega) = \hat{d} + \hat{D}(\omega) \times \hat{\chi}(\omega) \times \hat{U} \quad (1.41a)$$

и

$$\hat{\Gamma}(\omega) = \hat{U} + \hat{\Gamma}(\omega) \times \hat{\chi}(\omega) \times \hat{U} \quad (1.41b)$$

соответственно. Обозначения очевидны из сравнения с (1.37) и (1.40). Используя (1.41б), уравнение (1.41а) может быть представлено в следующей форме:

$$\hat{D}(\omega) = \hat{d} + \hat{d}(\omega) \times \hat{\chi}(\omega) \times \hat{\Gamma}(\omega). \quad (1.42)$$

Уравнения (1.41а) и (1.41б) могут быть легко решены в операторной форме, которая ведет к следующим выражениям:

$$\hat{D}(\omega) = \hat{d} / [1 - \hat{\chi}(\omega) \times \hat{U}] \quad (1.43a)$$

и

$$\hat{\Gamma}(\omega) = \hat{U} / [1 - \hat{\chi}(\omega) \times \hat{U}]. \quad (1.43b)$$

Уравнение (1.41б) имеет важную особенность в решении. Представим $\chi(\omega)$ как сумму двух членов $\chi(\omega) = \chi_1(\omega) + \chi_2(\omega)$. Тогда, определяя $\Gamma_1(\omega)$ уравнением

$$\hat{\Gamma}_1(\omega) = \hat{U} + \hat{\Gamma}_1(\omega) \times \hat{\chi}_1(\omega) \times \hat{U}, \quad (1.44)$$

имеем из (1.41б) выражение для $\Gamma(\omega)$:

$$\hat{\Gamma}(\omega) = \hat{\Gamma}_1(\omega) + \hat{\Gamma}(\omega) \times \hat{\chi}_2(\omega) \times \hat{\Gamma}_1(\omega). \quad (1.45)$$

Выражения (1.43а, б) позволяют выполнять качественный анализ решений системы уравнений ПСФО. Действительно, амплитуда $\hat{D}(\omega)$ значительно увеличена в области ω , где знаменатель в (1.43) мал. Если межэлектронное взаимодействие U достаточно сильно, знаменатель при некоторых $\omega = \Omega_{GR}$ может быть и равен нулю:

$$1 - \chi(\Omega_{GR}) \times \hat{U} = 0. \quad (1.46)$$

Соответствующая частота Ω_{GR} — комплексная величина, $\Omega_{GR} = \text{Re } \Omega_{GR} + i \text{Im } \Omega_{GR}$, где $\text{Re } \Omega_{GR}$ и $\Gamma_{GR} = \text{Im } \Omega_{GR}$ — энергия и

ширина соответственно так называемого *гигантского резонанса* (ГР). ГР проявляются как мощные, широкие и высокие максимумы в сечениях фотоионизации ряда атомов.

Другой вид максимумов, названных *интерференционными резонансами* (ИР), и соответствующие им *интерференционные минимумы* (ИМ) появляются вследствие воздействия подболочки b с большим сечением фотоионизации на любую другую подболочку a , если межподбололочное взаимодействие U_{ab} достаточно сильно. Действительно, согласно (1.41a), амплитуда фотоионизации подболочки a дается следующим уравнением:

$$\begin{aligned}\hat{D}_a(\omega_{IR}) &= d_a + \hat{D}_b(\omega_{IR}) \times \hat{\chi}_b(\omega_{IR}) \times \hat{U}_{ba} \approx \\ &\approx \hat{D}_b(\omega_{IR}) \times \hat{\chi}_b(\omega_{IR}) \times \hat{U}_{ba} \gg d_a.\end{aligned}\quad (1.47)$$

Сечение фотоионизации внешней подболочки, имеющей меньший потенциал ионизации I_0 , сильно меняется в окрестности дискретного возбуждения внутренней подболочки, имеющей больший потенциал ионизации I_i , т. е. $I_i > I_0$. В этом случае в окрестности дискретного уровня с энергией ω_d амплитуда фотоионизации сплошного спектра $D_c(\omega)$ может быть представлена, в соответствии с (1.41a), в довольно простой форме.

Действительно, аппроксимируя $\chi(\omega)$ как $\chi(\omega) \approx (\omega - \omega_d)^{-1}$, легко получить выражение для амплитуды сплошного спектра, имея в виду что близко к особенности в $\chi(\omega)$ оно может быть представлено как

$$\begin{aligned}\chi(\omega) &\approx \hat{\chi}_1(\omega_d) + (\omega - \omega_d + i\delta)^{-1} = \\ &= \hat{\chi}_1(\omega_d) + (\omega - \omega_d)^{-1} - i\pi\delta(\omega - \omega_d).\end{aligned}$$

Пренебрегая для простоты членом $\hat{\chi}_1(\omega_d)$, получаем:

$$\hat{D}_c(\omega) \approx d_c / (\omega - \omega_d - U_{dc} - i\Gamma_d). \quad (1.48)$$

Здесь *ширина* Γ_d — следствие распада дискретного уровня d , вызванного его взаимодействием с непрерывным спектром c . Символическое отношение определяет Γ_d

$$\Gamma_d = 2\pi |U_{cd}|^2. \quad (1.49)$$

В принципе, если есть несколько непрерывных спектров, взаимодействующих с изолированным дискретным уровнем d ,

соотношение (1.49) следует изменить добавлением суммирования по всем d . Используя (1.48) и (1.49), можно получить следующее выражение для сечения фотоионизации около дискретного возбуждения — резонанса:

$$\sigma_R(\omega) = \sigma_0 \left[(1 - \rho^2) + \rho^2 \frac{(q + \zeta)^2}{1 + \zeta^2} \right]. \quad (1.50)$$

Эту формулу впервые получил У. Фано в 1961 году [1].* Мы приводим здесь упрощенные выражения и объяснения для ввода параметров. Детальные выражения могут быть найдены, к примеру, в [АМ]. В (1.50) ρ описывает вклад примеси нескольких непрерывных спектров, взаимодействующих с одним и тем же дискретным уровнем d . Если только один непрерывный спектр взаимодействует с уровнем d , то $\rho = 1$. Параметр ζ в (1.50), определяется как $\zeta = (\omega - \omega_d - U_{cd}) / \Gamma_d$, σ_0 есть сечение без резонанса и q — параметр асимметрии, определенный отношением $q = U_{cd} / \Gamma_d$.

Если вместо одного есть два дискретных взаимодействующих уровня, формулы для сечений становятся более сложными, потому что в этом случае (1.41а) сводится вместо одного уравнения к системе двух связанных алгебраических уравнений.

Корреляции ПСФО влияют также и на силы осциллятора. В результате их можно представить выражением, которое отличается от (1.6) фактором F_d :

$$g_d = \frac{2}{\tilde{\omega}_d} F_d |\tilde{D}_d(\tilde{\omega}_{id})|^2. \quad (1.51)$$

Здесь энергия возбуждения ω_d дискретного уровня d , изменившаяся благодаря ПСФО-поправкам, дается уравнением $\tilde{\omega}_d = \omega_d + \tilde{\Gamma}_{dd}(\tilde{\omega}_d)$. Амплитуда $\tilde{D}_d(\tilde{\omega}_d)$ и матричный элемент $\tilde{\Gamma}_{dd}(\tilde{\omega}_d)$ — решения соответствующих уравнений ПСФО, где знаменатель $1 / (\omega - \omega_d)$ удален из $\chi(\omega)$ в (1.41а, б). Фактор F_d связан с производной $\tilde{\Gamma}_{dd}(\omega)$ в ω :

$$F_d = \left[1 - \frac{\partial \tilde{\Gamma}_{dd}(\omega)}{\partial \omega} \Big|_{\omega = \tilde{\omega}_d} \right]^{-1}. \quad (1.52)$$

* В других главах эта и последующие ссылки гл. 1 даются с указанием ее номера: так, ссылка [1] гл. 1 в других главах записывается как [1.1].

Детали вывода (1.51) также могут быть найдены в [АМ]. Фактор F_d определяет примесь других электрон-дырочных возбуждений к дискретному возбуждению d . Естественно, $F_d < 1$. Наиболее прозрачно виден физический смысл F_d , когда значение $\partial \tilde{\Gamma}_{dd}(\omega) / \partial \omega$ мало, и только поправку второго порядка по U_{dc} достаточно учесть в $\tilde{\Gamma}_{dd}(\omega)$. Рассматривая только существенный в таком случае вклад диаграмм «время вперед» в $\tilde{\Gamma}_{dd}(\omega)$, имеем:

$$F_d \approx 1 + \frac{\partial \tilde{\Gamma}_{dd}(\omega)}{\partial \omega} \Big|_{\omega=\tilde{\omega}_d} \approx 1 - \sum_c \frac{|U_{dc}|^2}{(\omega_d - \omega_c)^2} < 1. \quad (1.53)$$

Сумма по c в (1.53) дает обычную квантово-механическую вероятность того, что взаимодействие между d и c в низшем порядке может смешать их с другими состояниями c .

1.6. Обобщения ПСФО

В рамках ПСФО волновые функции всех вакансий рассматриваются как решения (1.10), где суммирование выполнено по всем i , от 1 до N , а N есть общее число электронов в рассматриваемом атоме. Как отмечено в п. 1.2, для возбужденного электрона или электрона в непрерывном спектре решения (1.10) есть волновые функции дополнительного $(N+1)$ -го электрона. Даже чисто интуитивно, кажется естественным учесть и присутствие вакансии i , созданной в результате фотопоглощения. Создание этой вакансии изменяет уравнение, которое определяет волновую функцию возбужденного или уходящего ионизированного электрона. Вместо (1.10) это должно быть уравнением, в котором из суммы по всем атомным электронам один член, представляющий ионизированный электрон, удален. В результате, имеем для $\varphi_k(x)$ ($k > F$) вместо (1.10):

$$-\frac{\Delta}{2} \varphi_k(x) - \frac{Z}{r} \varphi_k(x) + \sum_{j \neq i=1}^N \int dx' \varphi_j^*(x') \frac{1}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|} \times \\ \times [\varphi_j(x') \varphi_k(x) - \varphi_k(x') \varphi_j(x)] = \epsilon_k \varphi_k(x). \quad (1.54)$$

Аналогично, уравнение для волновых функций других занятых состояний i' может быть изменено удалением из суммы по j члена $s_j = i$.

Тогда соответственно уравнения ПСФО должны быть изменены так, что вместо (1.37) имеем следующее:

$$\begin{aligned} \langle i | D(\omega) | v_2 \rangle &= \langle i | \hat{d} | v_2 \rangle + \\ + \sum_{v_3, v_4 \neq i} \frac{\langle v_3 | D(\omega) | v_4 \rangle (n_{v_4} - n_{v_3}) \langle v_4 | U | v_3 v_2 \rangle}{\varepsilon_{v_4} - \varepsilon_{v_3} + \omega + i\eta(1 - 2n_{v_3})}. \end{aligned} \quad (1.55)$$

Это уравнение представляет обобщенную версию ПСФО, или ОПСФО. Она выходит за рамки теоретически последовательного подхода ПСФО учетом следующего физического процесса: в то время как уходящий фотозлектрон покидает атом, все состояния атомных электронов меняются благодаря созданию этой вакансии. В результате такой перестройки поле иона, действующего на фотозлектрон, меняется. Это влияет на сечение фотоионизации и на изменение его тем большее, чем меньше энергия фотозлектрона.

Перестройка состояний атомного электрона благодаря появлению дырки ведет к изменению электронных потенциалов ионизации по сравнению с их ХФ-значениями, естественно сближая их с опытными данными. Однако расчёт потенциалов ионизации с учётом перестройки весьма сложен. Поэтому в ОПСФО-расчетах в качестве энергии вакансии вместо ХФ-значений используются сразу экспериментальные потенциалы ионизации.

Для внутренних вакансий существенно также учесть тот факт, что в то время как фотозлектрон оставляет атом, вакансия может исчезнуть вследствие её оже-распада. В результате этого фотозлектрон движется в поле по крайней мере дважды вместо однократно заряженного иона.

$$\begin{aligned} -\frac{\Delta}{2} \varphi_k(x) - \frac{Z}{r} \varphi_k(x) + \sum_{j \neq p, q=1}^N \int dx' \varphi_j^*(x') \frac{1}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|} \times \\ \times [\varphi_j(x') \varphi_k(x) - \varphi_k(x') \varphi_j(x)] = \varepsilon_k \varphi_k(x). \end{aligned} \quad (1.56)$$

Здесь $i \rightarrow p, q$; ε_A — доминирующий канал оже-распада дырки i . Соответственно система уравнений (1.55) должна быть изменена удалением двух членов из суммы по v в правой части: $v_3, v_4 \neq p, q$. Это приближение называется ОПСФО-II.

1.7. Вычислительные процедуры

Чтобы получить сечения, силы осциллятора и другие характеристики атомных процессов, должны быть выполнены расчёты, и численные, и аналитические.

В качестве первого шага представим одноэлектронные волновые функции $\varphi_k(x) \equiv \varphi_{\varepsilon(n)lm\sigma}(\mathbf{r}, s)$, т. е. решения уравнений в приближении ХФ (1.10), как произведения радиальных $R_{\varepsilon(n)l}(r) \equiv r^{-1}P_{\varepsilon(n)l}(r)$, угловых $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$ и спиновых χ_σ функций:

$$\varphi_{\varepsilon(n)lm\sigma}(\mathbf{r}, s) = r^{-1}P_{\varepsilon(n)l}(r)Y_{lm}(\vartheta, \varphi)\chi_\sigma. \quad (1.57)$$

Здесь $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$ — так называемая сферическая функция; χ_σ — спиновая функция; $\varepsilon(n)$ — одноэлектронная энергия (n — главное квантовое число); l — орбитальное квантовое число; m — его проекция на выбранную ось; σ — спиновая проекция электрона; ϑ и φ — полярные и азимутальные углы координаты $\mathbf{r}$ электрона. Используя выражение (1.57), можно выполнить интегрирование по угловым переменным и суммирование по спиновым переменным аналитически, так как аналитические выражения для $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$ и χ_σ хорошо известны.

Техника интегрирования различных произведений $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$ по ϑ , φ и суммирования χ_σ по σ хорошо развита и обсуждена подробно в ряде книг, например в [ЛЛ, ИС]. Применяя эту технику, систему уравнений в приближении ХФ (1.10), сначала сводят к системе для радиальных волновых функций $R_{\varepsilon(n)l}(r) \equiv r^{-1}P_{\varepsilon(n)l}(r)$, которую затем решают численно.

После выполнения интегрирования по ϑ , можно представить дипольные матричные элементы (1.14) в следующей форме:

$$d_{i \rightarrow f}^{V,R} = (-1)^{l_i - m_i} \begin{pmatrix} l_i & 1 & l_f \\ -m_i & \mu & m_f \end{pmatrix} \langle n_i l_i \| d^{V,R} \| \varepsilon_f(n_f), l_f \rangle. \quad (1.58)$$

Здесь $\begin{pmatrix} l_i & 1 & l_f \\ -m_i & \mu & m_f \end{pmatrix}$ есть $3j$ -символ (см. [ИС]) $l_f = l_i \pm 1$ $\langle n_i l_i \| d^{V,R} \| \varepsilon_f(n_f), l_f \rangle$ является приведенным дипольным матричным элементом. Последний определяется выражением [АС],

которое становится особенно простым для атомов с заполненными оболочками:

$$d_{nl, n'l'}^R \equiv \langle nl \| d^R \| n'l' \rangle = (-1)^{(l+l'+1)/2} \sqrt{\frac{(l+l'+1)}{2}} \times \\ \times \omega \int_0^{\infty} P_{nl}(r) r P_{n'l'}(r) dr, \quad l = l' \pm 1; \quad (1.59a)$$

$$d_{nl, n'l'}^V \equiv \langle nl \| d^V \| n'l' \rangle = (-1)^{(l+l'+1)/2} \sqrt{\frac{(l+l'+1)}{2}} \times \\ \times \int_0^{\infty} P_{nl}(r) \left(\frac{d}{dr} \pm \frac{l+l'+1}{2r} \right) P_{n'l'}(r) dr. \quad (1.59b)$$

Здесь знак «плюс» соответствует $l' = l + 1$ и знак «минус» соответствует $l' = l - 1$.

Следующие обозначения используются для радиальных интегралов в (1.59):

$$d_l^R \equiv \int_0^{\infty} P_{nl}(r) r P_{n'l'}(r) dr$$

и

$$d_{l'}^V \equiv \int_0^{\infty} P_{nl}(r) \left(\frac{d}{dr} \pm \frac{l+l'+1}{2r} \right) P_{n'l'}(r) dr. \quad (1.60)$$

Подобно (1.58), в кулоновских матричных элементах (1.33) интегрирование по угловым частям одноэлектронных волновых функций ведёт к следующему выражению:

$$\langle \alpha | V | \beta \rangle = \sum_{\lambda=0}^{\infty} \sum_{m=-\lambda}^{\lambda} (-1)^{m_1+m_3+m} \begin{pmatrix} l_1 & \lambda & l_2 \\ -m_1 & m & m_2 \end{pmatrix} \times \\ \times \begin{pmatrix} l_3 & \lambda & l_4 \\ -m_3 & m & m_3 \end{pmatrix} V_{\alpha\beta}^{\lambda}. \quad (1.61)$$

Здесь матричный элемент $V_{\alpha\beta}^{\lambda}$ определен как

$$V_{\alpha\beta}^{\lambda} \equiv \langle v_1 v_4 \| V_{\lambda} \| v_2 v_3 \rangle = \sqrt{(2l_1+1)(2l_2+1)(2l_3+1)(2l_4+1)} \times \\ \times \begin{pmatrix} l_1 & \lambda & l_2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_3 & \lambda & l_4 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} R_{\lambda}(v_1 v_2 v_3 v_4), \quad (1.62)$$

где $v \equiv nl$ ($v \leq F$) или $v \equiv n(\epsilon)l$ ($v > F$), т. е. v_j определяются двумя квантовыми числами вместо четырех в (1.33). В (1.62) $R_{\lambda}(v_1 v_2 v_3 v_4)$ — это чисто радиальный матричный элемент, данный интегралом

$$R_{\lambda}(v_1 v_2 v_3 v_4) = \int_0^{\infty} P_{v_1}(r) P_{v_2}(r) dr \int_0^r \frac{r'^{\lambda}}{r^{\lambda+1}} P_{v_3}(r') P_{v_4}(r') dr'. \quad (1.63)$$

Радиальные интегралы в (1.59) и (1.63) берутся численно, с заменой бесконечных верхних пределов конечными суммами, которые охватывают расстояния до $r \leq R$. В конкретных вычислениях мы выбираем $R \approx 50$ а. е., то есть значительно больше размера атома $R_A \approx 1$. Это обеспечивает достаточную точность, потому что обычно подынтегральные выражения уменьшаются быстрее, чем $1/r^2$. Если дело обстоит не так, вклад r по области $r > R$ находится аналитически, потому что далеко от атома все электронные волновые функции и выражения, которые включают кулоновское межэлектронное взаимодействие, существенно упрощаются.

Специфика атомной проблемы заключается в присутствии ядерного кулоновского поля, что требует большего числа точек интегрирования около ядра, то есть при малых r . Это достигается введением новой переменной $\rho = \alpha r + \beta \ln r$, которая разрешает размещать точки интегрирования с постоянным шагом по ρ .

Число точек интегрирования по ρ задается равным приблизительно 1000. После того как радиальные интегралы рассчитаны, вклад отдельных диаграмм или решение уравнения ПСФО (а в принципе — любых других подобных уравнений) может быть найден сравнительно легко. Это требует интегрирования по переменным одноэлектронной энергии ϵ и суммирования по дискретным возбуждениям n . Обычно интегралы по ϵ заменяются конечными суммами с точками, расположенными равноудаленно по $p = \sqrt{2\epsilon}$. В результате, больше точек помещено

при малых ε , где подынтегральные выражения как функции ε быстро меняются, в то время как меньше точек находится в области высоких ε .

Обычно подынтегральные выражения убывают довольно быстро, и достаточно иметь приблизительно 50 точек в области с верхним пределом, равным приблизительно 5—6 потенциалов ионизации рассматриваемой подболочки, которая возбуждена или ионизована. Увеличивая число точек по p , можно рассматривать более высокие энергии ε . Используя современный персональный компьютер, можно достигнуть весьма больших энергий вылетающих электронов, вплоть до 150—200 Ry. Но чтобы вычислять функции при более высоких ε , требуется значительно большая память компьютера.

Существенная трудность численных расчетов в рамках МТВ или ПСФО следует из того факта, что эти приближения включают энергетические знаменатели, которые, как это замечено в (1.31), (1.34), (1.37) и (1.40), могут стать равными нулю, таким образом вводя полюс в подынтегральные выражения. Чтобы их вычислить, используется следующая идея: сначала отделить сингулярную часть и вычислить ее аналитически, а затем остальную часть найти численно. Действительно, представим интеграл около особенности как

$$\int_{\varepsilon_n}^{\varepsilon_{n+1}} d\varepsilon Q(\varepsilon) / (\omega + \varepsilon_v - \varepsilon + i\eta) \approx$$

$$\approx -Q(\omega + \varepsilon_v) \ln \left| \frac{\omega + \varepsilon_v - \varepsilon_n}{\omega + \varepsilon_v - \varepsilon_{n+1}} \right| - i\pi Q(\omega + \varepsilon_v). \quad (1.64)$$

Здесь $\varepsilon_n \rightarrow \varepsilon_{n+1}$ — интервал энергии, который включает полюс подынтегрального выражения в (1.64). Вне этого интервала вычисления выполняются полностью численно, в то время как правая часть (1.64) представляет вклад этого интервала. Точность (1.64) тем выше, чем меньше интервал $\varepsilon_n \rightarrow \varepsilon_{n+1}$.

Существенно заметить, что значительная часть диаграмм ПСФО может быть учтена надлежащим выбором одноэлектронных ХФ-волновых функций возбужденных состояний. Чем больше многочастичных диаграмм учтено выбором одноэлектронных волновых функций, тем меньше остается для многочастичных поправок. В наших вычислениях мы выбираем такие волновые функции, которые вместе с соответствующими

волновыми функциями вакансии образуют определённый терм, то есть состояние электрона и дырки с данным полным угловым моментом L и спином S . При этом подходе угловой момент и проекция спина состояний возбужденного электрона и вакансии отдельно не определены. Угловой момент возбужденного электрона, а не только его проекция также не определен в этом подходе. Следующие диаграммы «время вперед» включены этим выбором волновых функций:

$$\begin{aligned}
 & \text{Diagram 1} = \text{Diagram 2} + \text{Diagram 3} + \text{Diagram 4} + \text{Diagram 5} \quad (1.65)
 \end{aligned}$$

Состояния i' , учтённые в (1.65), имеют ту же самую энергию, т. е. $\varepsilon_{i'} = \varepsilon_i$. Больше подробностей можно найти в [АМ] и [АЧ].

1.8. Параметры угловой анизотропии

Важная характеристика процесса фотоионизации — угловое распределение фотоэлектронов. В дипольном приближении оно особенно просто и определяется для неполяризованного пучка фотонов следующим выражением:

$$\frac{d\sigma_{nl}(\omega)}{d\Omega} = \frac{\sigma_{nl}(\omega)}{4\pi} [1 - \beta_{nl}(\omega) P_2(\cos \theta)]. \quad (1.66)$$

Здесь nl обозначает главное квантовое число n и угловой момент l ионизованной подоболочки; Ω — телесный угол вылета фотоэлектрона; $P_2(\cos \theta)$ — полином Лежандра второго порядка; θ — угол между фотоэлектронным импульсом и направлениями пучка фотонов; $\beta_{nl}(\omega)$ называется *параметром угловой анизотропии*. Угол, при котором $P_2(\cos \theta_M) = 0$, называется *магическим углом*. Он равен $\theta_M \approx 54.7^\circ$. Под этим углом поправки к $d\sigma_{nl}(\omega) / d\Omega$, обусловленные β , не проявляются.

Для поляризованного света формула углового распределения фотоэлектронов немного другая:

$$\frac{d\sigma_{nl}(\omega)}{d\Omega} = \frac{\sigma_{nl}(\omega)}{4\pi} [1 + (-2)^{-|\mu|} \beta_{nl}(\omega) P_2(\cos \vartheta)]. \quad (1.67)$$

Здесь μ характеризует поляризацию поступающего света, $\mu = 0$ для линейно поляризованного света и $\mu = \pm 1$ для циркулярно-, лево- и право-поляризованного света соответственно. Угол ϑ — между направлениями векторов поляризации и импульса фотоэлектрона.

Парциальное сечение фотоионизации $\sigma_{nl}^{R,V}(\omega)$ nl -подоболочки в приближении ХФ определяется дипольными матричными элементами (1.60), вычисленными с использованием радиальных частей $P_{n(\epsilon)l}(r)$ ХФ-волновых функций (1.10), с помощью следующего соотношения [АМ]:

$$\sigma_{nl}^{R,V}(\omega) = 2.689 \frac{\omega N_{nl}}{2l+1} \times \\ \times [l |d_{\epsilon, l-1}^{R,V}|^2 + (l+1) |d_{\epsilon, l+1}^{R,V}|^2] [10^{-18} \text{ см}^2]. \quad (1.68)$$

Выражение для сечения фотоионизации для $\sigma_{nl}(\omega)$ для nl -подоболочки в ПСФО подобно (1.68). Но дипольные матричные элементы берутся теперь в ПСФО и сечение определяется соотношением, подобным (1.68):

$$\sigma_{nl}(\omega) = 2.689 \frac{\omega N_{nl}}{2l+1} \times \\ \times [l |D_{\epsilon, l-1}|^2 + (l+1) |D_{\epsilon, l+1}|^2] [10^{-18} \text{ см}^2]. \quad (1.69)$$

Здесь матричные элементы $D_{\epsilon l \pm 1} \equiv D_{nl, \epsilon l \pm 1}^{V,R}(\omega)$ — решения уравнений ПСФО для радиальных матричных элементов, полученных из (1.37) после интегрирования по угловым и суммирования по спиновым переменным. Полное сечение фотоионизации $\sigma(\omega)$ выражается через $\sigma_{nl}(\omega)$:

$$\sigma(\omega) = \sum_{nl} \sigma_{nl}(\omega), \quad (1.70)$$

где суммирование выполнено по всем nl -подоболочкам, потенциал ионизации которых I_{nl} меньше, чем ω .

В приближении ХФ параметр угловой анизотропии $\beta_{nl}(\epsilon)$ выражается через дипольные радиальные матричные элементы (1.60)

$$\beta_{nl}(\omega) = \frac{1}{(2\lambda + 1)[ld_{l-1}^2 + (l+1)d_{l+1}^2]} [l(l-1)d_{l-1}^2 + (l+1)(l+2)d_{l+1}^2 - 6l(l+1)d_{l-1}d_{l+1} \cos(\delta_{l-1} - \delta_{l+1})]. \quad (1.71)$$

Параметр $\beta_{nl}(\epsilon)$ в ПСФО может быть получен из (1.71) с помощью следующих подстановок:

$$\begin{aligned} & d_{l+1}d_{l-1} \cos(\delta_{l-1} - \delta_{l+1}) \rightarrow \\ & \rightarrow [(\text{Re } D_{l+1} \text{Re } D_{l-1} + \text{Im } D_{l+1} \text{Im } D_{l-1}) \cos(\delta_{l+1} - \delta_{l-1}) - \\ & - (\text{Re } D_{l+1} \text{Im } D_{l-1} - \text{Im } D_{l+1} \text{Re } D_{l-1}) \sin(\delta_{l-1} - \delta_{l+1})] \equiv \\ & \equiv \tilde{D}_{l+1} \tilde{D}_{l-1} \cos(\delta_{l+1} + \Delta_{l+1} - \delta_{l-1} - \Delta_{l-1}); \\ & d_{l\pm 1}^2 \rightarrow \text{Re } D_{l\pm 1}^2 + \text{Im } D_{l\pm 1}^2 \equiv \tilde{D}_{l\pm 1}^2. \end{aligned} \quad (1.72)$$

Здесь используются следующие обозначения для дипольных матричных элементов с учётом многоэлектронных корреляций:

$$D_{l\pm 1}(\omega) \equiv \tilde{D}_{l\pm 1}(\omega) \exp[i\Delta_{l\pm 1}(\epsilon)], \quad (1.73)$$

где $\tilde{D}_{l\pm 1}(\omega)$ и $\Delta_{l\pm 1}$ есть абсолютные значения (модули) амплитуд соответствующих переходов и фазы фотоэлектронов с угловыми моментами $l \pm 1$.

В результате, параметр угловой анизотропии в ПСФО определяется следующей формулой:

$$\begin{aligned} \beta_{nl}(\epsilon) &= \frac{1}{(2l+1)[l|D_{\epsilon, l-1}|^2 + (l+1)|D_{\epsilon, l+1}|^2]} \times \\ & \times \{ l(l-1)|D_{\epsilon, l-1}|^2 + (l+1)(l+2)|D_{\epsilon, l+1}|^2 + 6l(l+1) \times \\ & \times [(\text{Re } D_{\epsilon, l-1} \text{Re } D_{\epsilon, l+1} + \text{Im } D_{\epsilon, l-1} \text{Im } D_{\epsilon, l+1}) \cos(\delta_{l+1} - \delta_{l-1}) - \\ & - (\text{Re } D_{\epsilon, l-1} \text{Im } D_{\epsilon, l+1} - \text{Im } D_{\epsilon, l-1} \text{Re } D_{\epsilon, l+1}) \sin(\delta_{l+1} - \delta_{l-1})] \} \equiv \\ & \equiv \frac{1}{(2l+1)[l\tilde{D}_{\epsilon, l-1}^2 + (l+1)\tilde{D}_{\epsilon, l+1}^2]} \times \end{aligned}$$

$$\times [l(l-1)\tilde{D}_{\varepsilon, l-1}^2 + (l+1)(l+2)\tilde{D}_{\varepsilon, l+1}^2 - \\ - 6l(l+1)\tilde{D}_{\varepsilon, l-1}\tilde{D}_{\varepsilon, l+1} \cos(\delta_{l-1} + \Delta_{l-1} - \delta_{l+1} - \Delta_{l+1})]. \quad (1.74)$$

Определение фаз рассеяния вылетающих фотоэлектронов $\delta_{l\pm 1} \equiv \delta_{l\pm 1}(\varepsilon)$ обычно производится исходя из асимптотики волновой функции.

Около автоионизационных резонансов угловой параметр анизотропии как функция ε меняется быстро. Это может быть представлено выражением, подобным (1.50) [2]

$$\beta_{nl}(\zeta) = \frac{X\zeta^2 + Y\zeta + Z}{A\zeta^2 + B\zeta + c}. \quad (1.75)$$

Здесь

$$X = \sum_{k, k'} a_{kk'} \operatorname{Re} [\tilde{D}_k^* \tilde{D}_{k'} e^{i(\delta_k - \delta_{k'})}]; \quad (1.76a)$$

$$Y = \frac{\operatorname{Im} \tilde{D}_d}{\operatorname{Im} \tilde{\Gamma}_{dd}} \sum_{k, k'} a_{kk'} \times \\ \times \{ \operatorname{Re} [(q+i)\tilde{\Gamma}_{dk}^* \tilde{D}_k + (q-i)\tilde{\Gamma}_{dk} \tilde{D}_{k'}^*] e^{i(\delta_k - \delta_{k'})} \}; \quad (1.76б)$$

$$Z = \sum_{kk'} a_{kk'} \operatorname{Re} \left\{ \left[\tilde{D}_k^* \tilde{D}_k + \frac{\operatorname{Im} \tilde{D}_d}{\operatorname{Im} \tilde{\Gamma}_{dd}} \times \right. \right. \\ \times [(iq-1)\tilde{\Gamma}_{dk}^* \tilde{D}_k - (iq+1)\tilde{\Gamma}_{dk} \tilde{D}_{k'}^*] + \\ \left. \left. + \left(\frac{\operatorname{Im} \tilde{D}_d}{\operatorname{Im} \tilde{\Gamma}_{dd}} \right)^2 (q^2 + 1) \tilde{\Gamma}_{dk}^* \tilde{\Gamma}_{dk} \right] e^{i(\delta_k - \delta_{k'})} \right\}; \quad (1.76в)$$

$$\zeta = (\omega - \omega_d - \operatorname{Re} \tilde{\Gamma}_{dd}) / \operatorname{Im} \tilde{\Gamma}_{dd}; \quad (1.76г)$$

$$A = \frac{\sigma_0}{4\pi}, \quad B = 2q\rho^2 A, \quad C = (1 - \rho^2 + q^2 \rho^2) A; \quad (1.76д)$$

$$a_{kk'} = \frac{1}{2l+1} \begin{pmatrix} l-1 & 3\sqrt{l(l+1)} \\ 3\sqrt{l(l+1)} & l+2 \end{pmatrix}. \quad (1.76е)$$

Здесь параметры σ_0 , ρ и q определены как в (1.50). Индексы k и k' в суммах обозначают переходы $l \rightarrow l \pm 1$.

Как было упомянуто выше, дипольное приближение верно, если длина волны ионизирующего излучения λ намного больше, чем радиус атома r_A , фактически радиус ионизируемой подболочки r_i . Таким образом, дипольное приближение верно, если $\omega \ll 2\pi c / r_i$. Однако дипольный параметр $r_i / \lambda \ll 1$ входит в сечение фотоионизации во второй степени, в то время как в параметр угловой анизотропии β — в первой. По этой причине и из-за некоторых специфических взаимных компенсаций вкладов разных релятивистских поправок к сечению фотоионизации [3], с ростом ω недипольные эффекты проявляются сначала в угловых распределениях. Ф-лы (1.66) и (1.67) меняются включением членов, пропорциональных первой степени дипольного параметра [4]:

$$\frac{d\sigma_{nl}(\omega)}{d\Omega} = \frac{\sigma_{nl}(\omega)}{4\pi} [1 - \beta_{nl}(\omega)P_2(\cos\theta) + \kappa\gamma_{nl}(\omega)P_1(\cos\theta) + \kappa\eta_{nl}(\omega)P_3(\cos\theta)]. \quad (1.77)$$

Здесь $\kappa = \omega / c$ и $P_l(\cos\theta)$ — полиномы Лежандра. Под магическим углом (см. (1.66)) все поправки к сечению $d\sigma_{nl}(\omega) / d\Omega$ обусловлены недипольными компонентами.

Недипольные параметры угловой анизотропии $\gamma(\omega)$ и $\eta(\omega)$ определяются следующим образом [5]:

$$\begin{aligned} \gamma_{nl}(\omega) = & \frac{3}{5[l d_{l-1}^2 + (l+1)d_{l+1}^2]} \left\{ \frac{l+1}{2l+3} d_{l+1} \times \right. \\ & \times [3(l+2)q_{l+2} - \cos(\delta_{l+2} - \delta_{l+1}) - lq_l - \cos(\delta_l - \delta_{l+1})] - \\ & - \frac{l}{2l+1} d_{l-1} [3(l-1)q_{l-2} - \cos(\delta_{l-2} - \delta_{l-1}) - \\ & \left. - (l+1)q_l - \cos(\delta_l - \delta_{l-1})] \right\}; \quad (1.78) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \eta_{nl}(\omega) = & \frac{3}{5[l d_{l-1}^2 + (l+1)d_{l+1}^2]} \left\{ \frac{(l+1)(l+2)}{(2l+1)(2l+3)} q_{l+2} \times \right. \\ & \times [5l d_{l-1} \cos(\delta_{l+2} - \delta_{l-1}) - (l+3) d_{l+1} \cos(\delta_{l+2} - \delta_{l+1})] - \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -\frac{(l-1)l}{(2l+1)(2l+1)} q_{l-2} [5(l+1)d_{l+1} \cos(\delta_{l-2} - \delta_{l+1}) - \\
& -(l-2)d_{l-1} \cos(\delta_{l-2} - \delta_{l-1})] + 2 \frac{l(l+1)}{(2l-1)(2l+3)} q_l \times \\
& \times [(l+2)d_{l+1} \cos(\delta_l - \delta_{l+1}) - (l-1)d_{l-1} \cos(\delta_l - \delta_{l-1})] \Big\}. \quad (1.79)
\end{aligned}$$

Здесь матричные элементы $d_{l\pm 1}$ определены с помощью (1.60), в то время как $q_{l\pm 2,0}$ в $\mathbf{r}$ -форме даются следующим соотношением:

$$q_{l\pm 2,0} = \frac{1}{2} \int_0^\infty P_{nl}(r) r^2 P_{\ell l\pm 2,l}(r) dr. \quad (1.80)$$

Мы не будем использовать форму скорости для матричного элемента $q_{l\pm 2,0}$, но вместо этого выполним вычисления недипольных параметров в ПСФО, где результаты в формах «длины» и «скорости» [см. (1.2) и (1.3)] совпадают.

Поскольку обычно в эксперименте по исследованию углового распределения фотоэлектронов используются источники линейно поляризованного излучения, вместо (1.77) более удобно использовать иную форму записи этого выражения [6]:

$$\begin{aligned}
\frac{d\sigma_{nl}(\omega)}{d\Omega} &= \frac{\sigma_{nl}(\omega)}{4\pi} [1 + \beta_{nl} P_2(\cos \Theta) + \\
&+ (\delta_{nl}^C + \gamma_{nl}^C \cos^2 \Theta) \sin \Theta \cos \Phi]. \quad (1.81)
\end{aligned}$$

Здесь Θ — полярный угол между направлениями скорости фотоэлектрона $\mathbf{v}$ и поляризации фотона $\mathbf{e}$, а Φ есть азимутальный угол, определяемый проекцией $\mathbf{v}$ в плоскости, ортогональной $\mathbf{e}$ и включающей вектор скорости фотона. Обратим внимание, что под магическим углом Θ_M поправки к дипольному сечению определяются лишь комбинацией параметров $(\gamma_{nl}^C + 3\delta_{nl}^C)$, которую мы будем называть *магической*.

Недипольные параметры в (1.77) и (1.81) связаны простыми соотношениями [7]:

$$\frac{\gamma_{nl}^C}{5} + \delta_{nl}^C = \kappa \gamma_{nl}, \quad \frac{\gamma_{nl}^C}{5} = -\kappa \eta_{nl}. \quad (1.82)$$

Выражения для $\gamma_{nl}(\omega)$ и $\eta_{nl}(\omega)$ в ПСФО могут быть получены из (1.78) и (1.79) с использованием следующих подстановок:

$$\begin{aligned} & d_{l\pm 1} q_{l\pm 2,0} \cos(\delta_{l\pm 2,0} - \delta_{l\pm 1}) \rightarrow \\ & \rightarrow [(\operatorname{Re} D_{l\pm 1} \operatorname{Re} Q_{l\pm 2,0} + \operatorname{Im} D_{l\pm 1} \operatorname{Im} Q_{l\pm 2,0}) \cos(\delta_{l\pm 2,0} - \delta_{l\pm 1}) - \\ & - (\operatorname{Re} D_{l\pm 1} \operatorname{Im} Q_{l\pm 2,0} - \operatorname{Im} D_{l\pm 1} \operatorname{Re} Q_{l\pm 2,0}) \sin(\delta_{l\pm 2,0} - \delta_{l\pm 1})], \\ & d_{l\pm 1}^2 \rightarrow \operatorname{Re} D_{l\pm 1}^2 + \operatorname{Im} D_{l\pm 1}^2. \end{aligned} \quad (1.83)$$

Здесь

$$Q_{l\pm 2,0}(\omega) \equiv \tilde{Q}_{l\pm 2,0}(\omega) \exp[i\Delta_{l\pm 2,0}(\varepsilon)], \quad (1.84)$$

где $\tilde{Q}_{l\pm 2,0}(\omega)$ и $\Delta_{l\pm 2,0}$ — абсолютные значения (модули) и фазы амплитуд соответствующих переходов, а $\delta_{l\pm 2,0}$ — фазы фотоэлектронов с угловыми моментами $l \pm 2, 0$.

Квадрупольные матричные элементы $Q_{l\pm 2,0}$ мы получаем из решения радиальной части ПСФО квадрупольного уравнения, которое выглядит подобно (1.37):

$$\begin{aligned} & \langle v_1 | Q(\omega) | v_2 \rangle = \langle v_1 | \hat{q} | v_2 \rangle + \\ & + \sum_{v_3, v_4} \frac{\langle v_3 | Q(\omega) | v_4 \rangle \langle n_{v_4} - n_{v_3} \rangle \langle v_4 v_2 | U | v_3 v_2 \rangle}{\varepsilon_{v_4} - \varepsilon_{v_3} + \omega + i\eta(1 - 2n_{v_3})}. \end{aligned} \quad (1.85)$$

Здесь в r -форме $\hat{q} = r^2 P_2(\cos \theta)$. Численная процедура для решения (1.85) в основном подобна дипольной. Это уравнение может быть обобщено так же, как уравнения для дипольного случая, с тем чтобы учитывать эффекты статической и динамической перестроек, то есть того, что входит в ОПСФО и ОПСФО-II.

1.9. Другие характеристики фотоионизации

В этом разделе мы обсудим некоторые другие характеристики фотоионизации, а именно поляризуемости и параметры поляризации фотоэлектронов.

Атомная дипольная поляризуемость $\alpha_d(\omega)$ выражается через силы осциллятора $g_{vv'}$ и сечение фотоионизации $\sigma(\omega)$ с помощью следующей формулы:

$$\alpha_d(\omega) = \sum_{j \leq F, k > F} \frac{g_{jk}}{\omega_{jk}^2 - \omega^2} + \frac{c}{2\pi^2} \int_I^{\infty} \frac{\sigma(\omega') d\omega'}{\omega'^2 - \omega^2 + i\omega\eta}, \quad \eta \rightarrow 0. \quad (1.86)$$

Вычисляя силы осциллятора $g_{vv'}$ и сечение фотоионизации $\sigma(\omega)$ с использованием процедур, описанных выше, можно получить атомные поляризуемости. Как видно из (1.86), $\alpha_d(\omega)$ — комплексная величина; ее мнимая часть пропорциональна $\sigma(\omega)$. Дипольная поляризуемость представляет интерес, так как определяет сечение упругого рассеяния фотона на атоме и электрон-атомный потенциал взаимодействия на больших расстояниях.

Взаимодействие между двумя сферически симметрическими атомами A и B на больших расстояниях $R_{AB} \gg r_{A,B}$, $V_{AB}(R_{AB}) = -C_6^{AB} / R_{AB}^6$ также выражено через суммы по силам осциллятора g_{jk} и интегралы по плотности сил $g_{j\varepsilon} \equiv c \sigma_j(\omega) / 2\pi^2$ осциллятора ($c \varepsilon = \omega - I_j$):

$$C_6^{AB} = -\frac{3}{2} \sum_{\substack{j \leq F \\ k > F}} \sum_{\substack{j' \leq F \\ k' > F}} \frac{g_{jk}^A g_{j'k'}^B}{\omega_{jk} \omega_{j'k'} (\omega_{jk} + \omega_{j'k'})}, \quad (1.87)$$

где $\omega_{jk} = \varepsilon_k - I_j$ и суммирование по $k, k' > F$ подразумевает также интегрирование по непрерывному спектру с одним возбуждённым электроном и с одной вакансией атомов A и B соответственно.

Важные характеристики процесса фотоионизации — это параметры поляризации фотоэлектрона, которые определяют ориентацию спина фотоэлектронов. Сравнительно давно было продемонстрировано, что фотоэлектроны имеют среднюю ориентацию спина, отличную от нуля [8]. Формула для потока фотоэлектронов $I_{JJ'}(\mathbf{x}, \mathbf{s})$, который возникает при фотоионизации атома с полным угловым моментом начального состояния атома J и конечного состояния иона J' и для соответствующих параметров $A^J(\omega)$, $\zeta^J(\omega)$, $\xi^J(\omega)$ поляризации, где j полный момент ионизируемого электрона, были получены в [9]. Там читатель может найти необходимые детали. Для циркулярного поляризованного света имеем [10]

$$I_{JJ'}(\omega) = \sum_j \frac{\sigma_{nj'l}}{8\pi} \left\{ 1 - \frac{1}{2} \beta_{nl}(\omega) \left[\frac{3}{2} (\mathbf{x} \mathbf{s})^2 - \frac{1}{2} \right] + \right.$$

$$+A^j(\omega)(\mathbf{s} \mathbf{s}_y) - \zeta^j(\omega) \left[\frac{3}{2}(\mathbf{x} \mathbf{s}_y)(\mathbf{x} \mathbf{s}) - \frac{1}{2}(\mathbf{s} \mathbf{s}_y) \right] + \\ + \xi^j(\omega) [\mathbf{s}(\mathbf{x} \times \mathbf{k}_y)(\mathbf{x} \mathbf{k}_y)] \}. \quad (1.88)$$

Здесь $\mathbf{s}_y$ и $\mathbf{s}$ — единичные векторы в направлениях спина фотона и фотоэлектрона; $\mathbf{x}$ — направление движения фотоэлектрона, и $\mathbf{k}_y$ — единичный вектор в направлении движения фотона. Полный момент ионизируемого электрона j может иметь два значения, $j = l \pm 1/2$. Подобное выражение для линейно поляризованного света может быть найдено в [10]. Параметры $A^j(\omega)$, $\zeta^j(\omega)$ и $\xi^j(\omega)$ даются следующими отношениями:

$$A^j(\omega) = \frac{(-1)^{j-l-1/2} l(l+1)}{2j+1} \frac{d_{l+1}^2 - d_{l-1}^2}{ld_{l-1}^2 + (l+1)d_{l+1}^2}, \\ \zeta^j(\omega) = \frac{2(-1)^{j-l-1/2} l(l+1)}{(2j+1)(2l+1)} [(l+2)d_{l+1}^2 - (l-1)d_{l-1}^2 - \\ - 3d_{l+1}d_{l-1} \cos(\delta_{l+1} - \delta_{l-1})][ld_{l-1}^2 + (l+1)d_{l+1}^2]^{-1}, \\ \xi^j(\omega) = \frac{3(-1)^{j-l-1/2} l(l+1)}{2j+1} \frac{d_{l+1}d_{l-1} \sin(\delta_{l+1} - \delta_{l-1})}{ld_{l-1}^2 + (l+1)d_{l+1}^2}. \quad (1.89)$$

В ПСФО параметры $A^j(\omega)$, $\zeta^j(\omega)$ и $\xi^j(\omega)$ могут быть получены аналогично (1.74), (1.78) и (1.77) после использования подстановок (1.72, 1.83).

1.10. Атомы с полузаполненными подболочками

Применение теории многих тел к атомам с незаполненными оболочками усложнено тем фактом, что основное состояние этих объектов вырождено. Поэтому основное состояние должно быть в качестве первого шага вычислений перестроено таким образом, чтобы снять вырождение, на эксперименте отсутствующее. Однако существует одно исключение из этого общего правила, для которого подход теории многих тел может быть

применен почти так же просто, как и для атомов со всеми замкнутыми подоболочками. Мы имеем в виду атомы с полузаполненными оболочками, где по меньшей мере одна из подоболочек содержит половину полного возможного числа электронов.

Известно, что для этих атомов верно так называемое правило Хунда, которое утверждает, что в полузаполненной подоболочке все электроны должны иметь одну и ту же проекцию спина [11]. Они могут обмениваться только с электронами той же самой проекции спина из других подоболочек. В результате, каждая подоболочка расщепляется на два уровня со спином «вверх» и «вниз». Таким образом, все электроны могут быть разделены на две группы различных частиц — электроны типов «вверх» и «вниз». Обмен существует только между электронами одной и той же проекции спина.

Уравнения, ранее используемые для описания фотоионизации, должны быть обобщены так, чтобы позволить описание системы двух видов различных частиц. Так, вместо уравнения в приближении ХФ (1.10) мы имеем систему уравнений:

$$(\hat{H}_{\uparrow(\downarrow)}^{X\Phi} + \hat{V}_{\downarrow(\uparrow)}^X) \varphi^{\uparrow(\downarrow)}(\mathbf{r}) = \varepsilon^{\uparrow(\downarrow)} \varphi^{\uparrow(\downarrow)}(\mathbf{r}), \quad (1.90)$$

где $\uparrow(\downarrow)$ обозначает «вверх» («вниз») электроны. В (1.90) оператор $\hat{H}_{\uparrow(\downarrow)}^{X\Phi}$ есть ХФ-одноэлектронный гамильтониан для «вверх» («вниз») электронов; $\hat{V}_{\downarrow(\uparrow)}^X$ — потенциал Хартри для «вниз» («вверх») электронов; $\varepsilon^{\uparrow(\downarrow)}$ и $\varphi^{\uparrow(\downarrow)}$ — энергии и волновые функции «вниз» («вверх») электронов соответственно.

В приближении ХФ дипольные $d_{l'\uparrow\downarrow}^{R,V}$ и квадрупольные $q_{l'\uparrow\downarrow}^{R,V}$ матричные элементы даются отношениями, подобными (1.60) и (1.80):

$$d_{l'\uparrow(\downarrow)}^R = \int_0^\infty P_{nl\uparrow(\downarrow)}(r) r P_{n'(\varepsilon)l'\uparrow(\downarrow)}(r) dr; \quad (1.91)$$

$$d_{l'\uparrow(\downarrow)}^V = \int_0^\infty P_{nl\uparrow(\downarrow)}(r) \left(\frac{d}{dr} \pm \frac{l+l'+1}{2r} \right) P_{n'(\varepsilon)l'\uparrow(\downarrow)}(r) dr;$$

$$q_{l'\uparrow(\downarrow)} = \frac{1}{2} \int_0^\infty P_{nl\uparrow(\downarrow)}(r) r^2 P_{\varepsilon l\pm 2, l'\uparrow(\downarrow)}(r) dr, \quad (1.92)$$

где $P_{nl\uparrow, \downarrow}(r)$ — радиальные части решений $\varphi^{\uparrow(\downarrow)}(\mathbf{r})$ (1.90).

Подобно уравнениям в приближении ХФ, должны быть изменены уравнения ПСФО (ОПСФО, ОПСФО-II), образуя так называемое спин-поляризованное ПСФО, или СП ПСФО (а также СП ОПСФО, СП ОПСФО-II). Уравнение для амплитуды фотоионизации $\hat{D}(\omega)$ (1.41a) в СП ПСФО может быть представлено следующим образом:

$$(\hat{D}_{\uparrow}(\omega)\hat{D}_{\downarrow}(\omega)) = (\hat{d}_{\uparrow}(\omega)\hat{d}_{\downarrow}(\omega)) + (\hat{D}_{\uparrow}(\omega)\hat{D}_{\downarrow}(\omega)) \times \\ \times \begin{pmatrix} \hat{\chi}_{\uparrow\uparrow} & 0 \\ 0 & \hat{\chi}_{\downarrow\downarrow} \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} U_{\uparrow\uparrow} & V_{\uparrow\downarrow} \\ V_{\downarrow\uparrow} & U_{\downarrow\downarrow} \end{pmatrix}. \quad (1.93)$$

Аналогично, эффективное межэлектронное взаимодействие в СП ПСФО $\hat{\Gamma}$ может быть представлено в матричной форме, которая обобщает уравнение (1.41б):

$$\begin{pmatrix} \hat{\Gamma}_{\uparrow\uparrow} & \hat{\Gamma}_{\uparrow\downarrow} \\ \hat{\Gamma}_{\downarrow\uparrow} & \hat{\Gamma}_{\downarrow\downarrow} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U_{\uparrow\uparrow} & V_{\uparrow\downarrow} \\ V_{\downarrow\uparrow} & U_{\downarrow\downarrow} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} U_{\uparrow\uparrow} & V_{\uparrow\downarrow} \\ V_{\downarrow\uparrow} & U_{\downarrow\downarrow} \end{pmatrix} \times \\ \times \begin{pmatrix} \hat{\chi}_{\uparrow\uparrow} & 0 \\ 0 & \hat{\chi}_{\downarrow\downarrow} \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \hat{\Gamma}_{\uparrow\uparrow} & \hat{\Gamma}_{\uparrow\downarrow} \\ \hat{\Gamma}_{\downarrow\uparrow} & \hat{\Gamma}_{\downarrow\downarrow} \end{pmatrix}. \quad (1.94)$$

В (1.93) и (1.94) $U_{\uparrow\uparrow}(\downarrow\downarrow)$ определяется из (1.37), но для электронов с теми же самыми проекциями спинов, в то время как $V_{\uparrow\downarrow}(\downarrow\uparrow)$ определяется из (1.33), но для электронов с противоположными проекциями спинов.

Уравнения (1.90, 1.93, 1.94) могут быть решены численно так же как (1.10) и (1.41a, б) и сечение фотоионизации в СП ПСФО даётся (1.69), где $N_{nl}|\hat{D}(\omega)|^2$ заменяется следующим выражением:

$$N_{nl}|\hat{D}(\omega)|^2 \rightarrow N_{nl}^{\uparrow}|\hat{D}_{\uparrow}(\omega)|^2 + N_{nl}^{\downarrow}|\hat{D}_{\downarrow}(\omega)|^2, \quad (1.95)$$

где $N_{nl} = N_{nl}^{\uparrow} + N_{nl}^{\downarrow}$, а $N_{nl}^{\uparrow(\downarrow)}$ — числа электронов на nl «вверх» («вниз») уровнях. Парциальное сечение фотоионизации nl «вверх» («вниз») уровней в СП ПСФО даётся формулой, подобной (1.69):

$$\sigma_{nl\uparrow(\downarrow)}(\omega) = 2.689 \frac{\omega N_{nl}}{2l+1} \times \\ \times [l |D_{\epsilon, l-1\uparrow(\downarrow)}|^2 + (l+1) |D_{\epsilon, l+1\uparrow(\downarrow)}|^2] [10^{-18} \text{ см}^2]. \quad (1.96)$$

Дипольный параметр угловой анизотропии фотоэлектронов с nl «вверх» («вниз») уровней в СП ПСФО получается обобщением уравнения (1.74):

$$\beta_{nl\uparrow(\downarrow)}(\epsilon) = \frac{1}{(2l+1)[\tilde{D}_{\epsilon, l-1\uparrow(\downarrow)}^2 + (l+1)\tilde{D}_{\epsilon, l+1\uparrow(\downarrow)}^2]} \times \\ \times [l(l-1)\tilde{D}_{\epsilon, l-1\uparrow(\downarrow)}^2 + (l+1)(l+2)\tilde{D}_{\epsilon, l+1\uparrow(\downarrow)}^2 - \\ - 6l(l+1)\tilde{D}_{\epsilon, l-1\uparrow(\downarrow)}\tilde{D}_{\epsilon, l+1\uparrow(\downarrow)} \times \\ \times \cos(\delta_{l-1\uparrow(\downarrow)} + \Delta_{l-1\uparrow(\downarrow)} - \delta_{l+1\uparrow(\downarrow)} - \Delta_{l+1\uparrow(\downarrow)})], \quad (1.97)$$

где

$$D_{l\pm 1\uparrow(\downarrow)}(\omega) \equiv \tilde{D}_{l\pm 1\uparrow(\downarrow)}(\omega) \exp[i\Delta_{l\pm 1\uparrow(\downarrow)}(\epsilon)]. \quad (1.98)$$

Недипольные параметры угловой анизотропии фотоэлектронов с nl «вверх» («вниз») уровней в СП ПСФО получается обобщением уравнений (1.78) и (1.79):

$$\gamma_{nl\uparrow(\downarrow)}(\omega) = \frac{3}{5[(l+1)\tilde{D}_{l-1\uparrow(\downarrow)}^2 + l\tilde{D}_{l+1\uparrow(\downarrow)}^2]} \left\{ \frac{(l+1)}{2l+3} \times \right. \\ \times D_{l+1\uparrow(\downarrow)} [3(l+2)\tilde{Q}_{l+2\uparrow(\downarrow)} \cos(\tilde{\delta}_{l+2\uparrow(\downarrow)} - \tilde{\delta}_{l+1\uparrow(\downarrow)}) - \\ - l\tilde{Q}_{l\uparrow(\downarrow)} \cos(\tilde{\delta}_{l+2\uparrow(\downarrow)} - \tilde{\delta}_{l+1\uparrow(\downarrow)})] - \\ - \frac{l}{2l+1} D_{l-1\uparrow(\downarrow)} [3(l-1)\tilde{Q}_{l-2\uparrow(\downarrow)} \cos(\tilde{\delta}_{l-2\uparrow(\downarrow)} - \tilde{\delta}_{l-1\uparrow(\downarrow)}) - \\ - (l+1)\tilde{Q}_{l\uparrow(\downarrow)} \cos(\tilde{\delta}_{l\uparrow(\downarrow)} - \tilde{\delta}_{l-1\uparrow(\downarrow)})] \Big\}, \quad (1.99)$$

$$\begin{aligned}
\eta_{nl\uparrow(\downarrow)}(\omega) = & \frac{3}{5[(l+1)\tilde{D}_{l+1\uparrow(\downarrow)}^2 + l\tilde{D}_{l-1\uparrow(\downarrow)}^2]} \left\{ \frac{(l+1)(l+2)}{(2l+1)(2l+3)} \times \right. \\
& \times \tilde{Q}_{l+2\uparrow(\downarrow)} [5l\tilde{D}_{l-1\uparrow(\downarrow)} \cos(\tilde{\delta}_{l+2\uparrow(\downarrow)} - \tilde{\delta}_{l-1\uparrow(\downarrow)}) - \\
& - (l+3)\tilde{D}_{l+1\uparrow(\downarrow)} \cos(\tilde{\delta}_{l+2\uparrow(\downarrow)} - \tilde{\delta}_{l-1\uparrow(\downarrow)})] - \\
& - \frac{(l-1)}{(2l+1)(2l+1)} \tilde{Q}_{l-2\uparrow(\downarrow)} [5(l+1)\tilde{D}_{l+1\uparrow(\downarrow)} \cos(\tilde{\delta}_{l-2\uparrow(\downarrow)} - \tilde{\delta}_{l+1\uparrow(\downarrow)}) - \\
& - (l-2)\tilde{D}_{l-1\uparrow(\downarrow)} \cos(\tilde{\delta}_{l-2\uparrow(\downarrow)} - \tilde{\delta}_{l-1\uparrow(\downarrow)})] + 2 \frac{l(l+1)\tilde{Q}_{l\uparrow(\downarrow)}}{(2l-1)(2l+3)} \times \\
& \times [(l+2)\tilde{D}_{l+1\uparrow(\downarrow)}\tilde{D}_{l+1\uparrow(\downarrow)} \cos(\tilde{\delta}_{l\uparrow(\downarrow)} - \tilde{\delta}_{l+1\uparrow(\downarrow)}) - \\
& - (l-1)\tilde{D}_{l-1\uparrow(\downarrow)}\tilde{D}_{l-1\uparrow(\downarrow)} \cos(\tilde{\delta}_{l\uparrow(\downarrow)} - \tilde{\delta}_{l-1\uparrow(\downarrow)})] \left. \right\}, \quad (1.100)
\end{aligned}$$

где

$$Q_{l\pm 2,0\uparrow(\downarrow)}(\omega) \equiv \tilde{Q}_{l\pm 2\uparrow(\downarrow)}(\omega) \exp[i\Delta_{l\pm 1,0\uparrow(\downarrow)}(\epsilon)] \quad (1.101)$$

и $\tilde{\delta}_{l_j\uparrow(\downarrow)} = \delta_{l_j\uparrow(\downarrow)} + \Delta_{l_j\uparrow(\downarrow)}$ (см. (1.73)).

Интересно заметить, что расстояние по энергии между «вверх»- и «вниз»-уровнями с теми же самыми квантовыми числами n и l намного больше величины спин-орбитального расщепления во всех, кроме самых тяжелых, атомах. Это ясно, так как обменное взаимодействие обычно больше, чем релятивистское спин-орбитальное взаимодействие.

1.11. Атомы с незаполненными оболочками

Теория фотоионизации атомов с незаполненными оболочками технически очень сложна. Причина — это упомянутое выше вырождение основного состояния и возможность обмена моментами между возбужденной электрон-дырочной парой и остовом (см., к примеру, [12]). Только одно ПСФО-обобщение, представленное в [13], кажется надежным, потому что дает те же самые

результаты в форме «длины» и «скорости» и выполняет правило сумм. Оно сохраняет полный угловой момент в начальном (фотон + атом), промежуточном и конечном состояниях, то есть полный момент фотоэлектрона и иона-остатка. Для простоты, всюду в этой книге мы ограничиваемся так называемой LS -связью, в которой полный момент L и полный спин S сохраняются по отдельности.

Два случая, а именно ионизацию самой открытой подоболочки непосредственно и замкнутой подоболочки в присутствии открытой, нужно рассматривать по-другому из-за сложности связей всех угловых моментов и спинов в полные. Начнем с фотоионизации открытой оболочки. Амплитуда фотоионизации в приближении ХФ определяется из следующего выражения [13, АС]:

$$\begin{aligned} & \langle \epsilon_3 l_3, L_3 S_3 \| d \| n_1 l_1, LS \rangle = \\ & = \delta_{SS_3} \sqrt{2S+1} C_{LS', l_2 L_1 S_1}^{l_1 LS_1} \langle \epsilon_3 l_3 \| d \| n_1 l_1 \rangle. \end{aligned} \quad (1.102)$$

Здесь ϵ_3 и l_3 — энергия и угловой момент фотоэлектрона; n_1 и l_1 — главное квантовое число и угловой момент созданной вакансии; LS — полный угловой момент на спин незамкнутой подоболочки: $(n_1 l_1)^q (LS)$, где q — число электронов в ней, $q < 4l_1 + 2$, а $4l_1 + 2$ — полное число электронов в замкнутой подоболочке l_1 ; $\langle \epsilon_3 l_3 \| d \| n_1 l_1 \rangle$ — обычный приведенный дипольный матричный элемент, данный в (1.58).

Уравнения ПСФО для открытой оболочки намного более сложны, чем для замкнутых оболочек (1.37). Они становятся более сложными с ростом числа электронов в открытых оболочках. Поэтому эти уравнения были решены только для атомов с одним электроном или одной вакансией вне замкнутой подоболочки, таких как Al, с одной стороны, и Cl, I — с другой [14]. Во всех этих случаях изучались только незамкнутые подоболочки.

Теперь перейдем к фотоионизации замкнутой оболочки в присутствии открытой. Недавно подход, развитый в [13], был обобщен в [14, 15] таким способом, что разрешил учитывать несколько подоболочек, одновременно включая открытые. Вычисления были выполнены для Xe^+ и I.

Фотоионизация замкнутой подоболочки в присутствии открытых ведет к более сложному конечному состоянию, имеющему три открытые подоболочки, включая вылетающий элект-

рон. Во-первых, угловой момент l_1 ионизированной подобо-
лочки $n_1 l_1$ и фотоэлектрона $\epsilon_3 l_3 - l_3$ связаны, чтобы привести к
конечному состоянию с термом 1P , поскольку этого требуют
правила дипольного отбора $\{(n_1 l_1)^{4l_1+1} (L_1 S_1) \epsilon l_3\} ({}^1P)$, где $L_1 = l_1$,
 $S_1 = 1/2$. После этого угловые и спиновые моменты открытой
подобо-лочки $(n_2 l_2)^q (LS)$, $q < 4l_2 + 2$, складываются, чтобы по-
лучить полные угловые и спиновые моменты конечного состоя-
ния $L_3 S_3$.

Есть несколько возможных значений $L_3 S_3$, которые соответ-
ствуют числу каналов в фотоионизации закрытой оболочки в
присутствии открытой. Соответствующий ХФ-матричный эле-
мент дается следующей формулой [15, 16]:

$$\begin{aligned} & \langle \epsilon_3 l_3, L_3 S_3 \| d \| n_1 l_1, LS \rangle = \\ & = \delta_{SS_3} \sqrt{2S+1} W_{l_3 L_3 S_3}^{l_1 L S_1} \langle \epsilon_3 l_3 \| d \| n_1 l_1 \rangle, \end{aligned} \quad (1.103)$$

где $W_{l_3 L_3 S_3}^{l_1 L S_1} = \sqrt{2(2l_3+1)/(2l+1)} (-1)^{l+L-L_3}$. Заменяя коэффици-
енты $C_{LS', l_2 L_1 S_1}^{l_1 L S_1}$ в (7) и (9) из [17] соответствующими значениями
 $W_{l_3 L_3 S_3}^{l_1 L S_1}$, приходим к выражению для кулоновских матричных
элементов, которые должны использоваться в ПСФО-уравнени-
ях (1.37). Общая процедура решения этих уравнений та же самая
для атомов с закрытой [АС] и открытой оболочкой [13, 18]. В це-
лом, этот подход получил название ПСФО для незамкнутых обо-
лочек, или ПСФОН.

1.12. Отрицательные и положительные ионы

Сечения фотоионизации отрицательных ионов представляют
дополнительный интерес с точки зрения порогового поведения
сечения в этих объектах. Уходящий электрон в отрицательных
ионах «чувствует» поле остаточного нейтрального атома, ко-
торое имеет короткий радиус действия, вместо кулоновского
«хвоста» положительно заряженного иона, когда ионизован ней-
тральный атом. Сечение отрицательного иона, согласно закону
Вигнера [ЛЛ], дается следующей формулой, справедливой вбли-
зи порога ионизации:

$$\sigma_{nl}^{(-)}(\omega) \sim (\omega - I^-)^l, \quad (1.104)$$

где l — угловой момент ионизованной оболочки. Нет сомнения, что этот закон верен лишь близко к порогу ионизации, но числовое значение слова «близко» остается неясным. На первый взгляд, «близко» или «около» порогов означает справедливость соотношения $(\omega - I^-) \leq I^-$. Как оказывается, однако, дело обстоит не так: сечение атомного отрицательного иона следует закону Вигнера только чрезвычайно близко к порогу, при $(\omega - I^-) \leq 0.1 I^-$ [18].

Есть два различных вида отрицательных ионов, а именно «простые» и «сложные», или «поляризационные» отрицательные ионы. «Простые» — это те, которые могут быть созданы уже в рамках приближения ХФ [19]. Обычно, однако, потенциал ионизации $I_{\text{ХФ}}$ в приближении ХФ для этих ионов является слишком малым. Чтобы улучшить ситуацию, мы можем или ввести экспериментальное значение $I_{\text{эксп}}$ вместо ХФ-потенциала ионизации, или добавить некоторый дополнительный к ядерному заряд ΔZ , выбранный так, чтобы $I_{\text{ХФ}}^{(Z+\Delta Z)} = I_{\text{эксп}}^Z$. Это отношение определяет фактически величину ΔZ . Все, и ХФ- (1.10) и ПСФО- (1.37) уравнения должны быть решены для эффективного заряда $Z_{\text{эф}} = (Z + \Delta Z)$. Другой вариант — это решить те же самые уравнения, пренебрегая различием между $I_{\text{ХФ}}$ и $I_{\text{эксп}}$. Этот подход нехорош для непосредственного рассмотрения дополнительного электрона.

«Сложные» отрицательные ионы могут быть сформированы, только если учтена поляризация атомного остова дополнительным электроном [20]. Эта поляризация и соответствующие поправки к межэлектронному эффективному взаимодействию и к эффективному фотон-электронному взаимодействию выходят за рамки приближения ХФ и ПСФО [АИЧЧ]. Обширные расчеты фотоионизации «сложных» отрицательных ионов были выполнены сравнительно недавно (см. [21] и ссылки там).

Нет ничего специфического в фотоионизации положительных ионов, если они принадлежат одной из следующих групп: имеют только заполненные, полузаполненные подоболочки и/или дополнительный электрон вне заполненной оболочки (или дырку в ней). Во всех этих случаях методы, описанные выше, могут использоваться без каких-либо специфических трудностей. Фактически, положительные ионы — более простые объекты, чем нейтральные атомы, с точки зрения скорости сходимости вычислительных процедур.

Подходы, развитые в предыдущих разделах, могут применяться к атомам и ионам, находящимся не только в основном, но и в возбуждённых состояниях. Это особенно просто, когда рассматриваемое состояние представляет собой замкнутую или полузаполненную оболочку, а также имеет один электрон (или одну вакансию) вне заполненных (полузаполненных оболочек).

Обсуждавшиеся методы — ПСФО и МТВ применимы и при рассмотрении простых молекул, имеющих всего несколько атомов. Решающим осложнением при рассмотрении молекул является отсутствие сферической симметрии и, как следствие, невозможность проведения аналитически интегрирования по угловым переменным. Именно поэтому ПСФО-уравнения для молекул не являются одномерными: для цилиндрически симметричных молекул они двумерны, а для лишённых и этой симметрии — они трёхмерны. Но даже современные персональные компьютеры, не говоря уже о стационарных вычислительных системах, способны справиться с решением ПСФО и им подобных уравнений методом «грубой силы», т. е. решая прямо трёхмерные уравнения.

1.13. Эндоедральные атомы — эффект отражения фотоэлектронов

В течение прошлого десятилетия были обнаружены новые атомоподобные объекты, состоящие из многих углеродистых атомов и образующие закрытую почти «пустую» и двухмерную поверхность, так называемый фуллерен [22]. Большое внимание уделялось исследованию их структуры, используя данные фотопоглощения. Оказалось, что все электроны атомов углерода, кроме $1s^2$, в большой степени коллективизированы. В результате, спектр фотопоглощения этих объектов характеризуется видным максимумом, называемым *гигантский резонанс* (см. разд. 1.5, [23, 24] и ссылки там). Общая мощность этого резонанса, его полная сила *осциллятора*, близка к полному числу связанных электронов фуллеренов. Фуллерены — сложные объекты для проведения *ab initio* вычислений. Поэтому приходится использовать существенное упрощения, чтобы исследовать их сечения фотоионизации и другие свойства.

Фуллерен имеет довольно специфическую и необычную особенность: почти любой атом из периодической таблицы может

быть расположен внутри фуллерена, таким образом создавая так называемые *эндоэдральные атомы*, состоящие из фуллерена F и включённого в него атома A , $A@F$. Фактически, не только один, но также и несколько атомов могут быть помещены внутрь фуллерена, особенно внутрь структуры, которая состоит из шести-десяти или даже больше атомов углерода. На свойства и характеристики поведения внутреннего атома, например его сечение фотоионизации и распад созданных в таком процессе вакансий, сильно влияет окружающая фуллереновая оболочка.

Это представляет интерес, чтобы увидеть, как меняется под влиянием фуллерена, наиболее исследованным из которых является C_{60} , сечение фотоионизации и вероятность последующего распада вакансий в эндоэдральных атомах — $A@C_{60}$. Предложенные методы могли быть применены к фуллеренам с другим числом атомов углерода, отличным от 60. Результаты получены нами с использованием очень простой модели и на основе существующих экспериментальных данных.

Мы рассмотрим два самых важных типа воздействия на сечение фотоионизации атома, помещенного внутри фуллереновой оболочки: отражение фотоэлектронной волны статическим полем фуллереновой оболочки и модификацию налетающего фотона из-за динамического отклика коллективизированных электронов фуллерена.

Таким образом, мы исследуем процессы, которые, хотя и имеют в некоторых случаях относительно малые сечения и вероятности, отличаются от других процессов с помощью методов электронной спектроскопии или при проведении экспериментов на совпадение. Для конкретности, мы сконцентрируемся только на одном типе фуллерена, а именно C_{60} , и предположим для простоты, что атом A расположен в центре почти сферически-симметричной оболочки C_{60} . Заметим, что действие фуллереновой оболочки на фотоэлектронную волну ведет к интерференции прямых и отраженных фотоэлектронных волн от атома A .

Так как толщина C_{60} -оболочки меньше, чем его радиус R_C , для фотоэлектронов низкой энергии можно заменить C_{60} -потенциал псевдопотенциалом нулевой толщины [25, 26]:

$$V(r) = -V_0 \delta(r - R). \quad (1.105)$$

Параметр V_0 определяется из условия, чтобы энергия связи дополнительного электрона в отрицательном ионе C_{60} была равна величине, наблюдаемой на опыте. Дополнение потенциала (1.105)

может быть учтено аналитически [27, 28], если выразить парциальную волну с угловым моментом l через так называемые регулярное $u_{kl}(r)$ и нерегулярное $v_{kl}(r)$ в точке $r \rightarrow 0$ решения атомного ХФ-уравнения для фотоэлектрона с импульсом $k = \sqrt{2\varepsilon}$, где ε — энергия фотоэлектронов, связанная с частотой ω фотона соотношением $\varepsilon = \omega - I_A$, и I — потенциал ионизации атома A .

Включение (1.105) ведет к фактору $F_{l'}(k)$ в амплитуде фотоионизации, который зависит только от линейных k и угловых l' моментов фотоэлектрона [28]:

$$F_l(k) = \cos \Delta\delta_l(k) \left[1 - \tan \Delta\delta_l(k) \frac{v_{kl}(R)}{u_{kl}(R)} \right], \quad (1.106)$$

где $\Delta\delta_l(k)$ — поправка к фазе упругого рассеяния фотоэлектрона за счет потенциала (1.105), которая может быть выражена с учетом следующего соотношения:

$$\tan \Delta\delta_l(k) = \frac{u_{kl}^2(R)}{u_{kl}(R) v_{kl}(R) - k / 2V_0}. \quad (1.107)$$

Используя (1.100), можно получить следующие соотношения для амплитуд эндоэдрального атома $D^{AC(r)}$ и $Q^{AC(r)}$, выраженных через соответствующие значения для изолированного атома, которые соответствуют $nl \rightarrow \varepsilon l'$ переходам:

$$\begin{aligned} D_{nl, kl'}^{AC(r)}(\omega) &= F_{l'}(k) D_{nl, kl'}(\omega) \exp[i\Delta\delta_{l'}(k)], \\ Q_{nl, kl'}^{AC(r)}(\omega) &= F_{l'}(k) Q_{nl, kl'}(\omega) \exp[i\Delta\delta_{l'}(k)], \end{aligned} \quad (1.108)$$

где верхний индекс $AC(r)$ обозначает принадлежность к $A@F$, то есть принадлежность к эндоэдральному атому, а (r) отмечает, что учтено отражение фотоэлектрона от оболочки фуллерена.

Для сечений имеем

$$\sigma_{nl, kl'}^{AC(r)}(\omega) = F_{l'}^2(k) \sigma_{nl, kl'}(\omega). \quad (1.109)$$

Заметим, что фактор $F_{l'}(k)$ как функция ω имеет сильные резонансы, которые отражены в $\sigma_{nl, kl'}^{AC(r)}(\omega)$ и называются *резонансами ограничения* [29, 30].

С этими амплитудами, используя выражения (1.71), (1.78), (1.79) и выполняя замены (1.72), (1.83), мы получаем сечения для $A@F$ и параметры угловой анизотропии.

В результате, имеем для дипольного параметра угловой анизотропии эндоэдрального атома $A@F$ из (1.74):

$$\beta_{nl}^{AC(r)}(\omega) = \frac{1}{(2l+1)[(l+1)F_{l+1}^2\tilde{D}_{l+1}^2 + lF_{l-1}^2\tilde{D}_{l-1}^2]} \times \\ \times [(l+1)(l+2)F_{l+1}^2\tilde{D}_{l+1}^2 + l(l-1)F_{l-1}^2\tilde{D}_{l-1}^2 - \\ - 6l(l+1)F_{l+1}F_{l-1}\tilde{D}_{l+1}\tilde{D}_{l-1}\cos(\tilde{\delta}_{l+1}-\tilde{\delta}_{l-1})], \quad (1.110)$$

где $\tilde{\delta}_{l'} = \tilde{\delta}_{l'} + \Delta\delta_{l'}$ (см. (1.73)).

Из (1.78) и (1.79), используя (1.72, 1.83), мы приходим к следующим выражениям для недипольного параметра угловой анизотропии:

$$\gamma_{nl}^{AC(r)}(\omega) = \frac{3}{5[(l+1)F_{l+1}^2\tilde{D}_{l+1}^2 + lF_{l-1}^2\tilde{D}_{l-1}^2]} \left\{ \frac{(l+1)F_{l+1}\tilde{D}_{l+1}}{2l+3} \times \right. \\ \times [3(l+2)F_{l+2}\tilde{Q}_{l+2}\cos(\tilde{\delta}_{l+2}-\tilde{\delta}_{l+1}) - \\ - lF_l\tilde{Q}_l\cos(\tilde{\delta}_l-\tilde{\delta}_{l+1})] - \\ \left. - \frac{lF_{l-1}\tilde{D}_{l-1}}{2l+1} [3(l-1)F_{l-2}\tilde{Q}_{l-2}\cos(\tilde{\delta}_{l-2}-\tilde{\delta}_{l-1}) - \right. \\ \left. - (l+1)F_l\tilde{Q}_l\cos(\tilde{\delta}_l-\tilde{\delta}_{l-1})] \right\}, \quad (1.111)$$

$$\eta_{nl}^{AC(r)}(\omega) = \frac{3}{5[(l+1)F_{l+1}^2\tilde{D}_{l+1}^2 + lF_{l-1}^2\tilde{D}_{l-1}^2]} \left\{ \frac{(l+1)(l+2)}{(2l+1)(2l+3)} \times \right. \\ \times F_{l+2}\tilde{Q}_{l+2} [5lF_{l-1}\tilde{Q}_{l+2}\tilde{D}_{l-1}d_{l-1}\cos(\tilde{\delta}_{l+2}-\tilde{\delta}_{l-1}) - \\ - (l+3)F_{l+1}\tilde{D}_{l+1}\cos(\tilde{\delta}_{l+2}-\tilde{\delta}_{l-1})] - \\ \left. - \frac{(l-1)}{(2l+1)(2l+1)} F_{l-2}\tilde{Q}_{l-2} [5(l+1)F_{l+1}\tilde{D}_{l+1}\cos(\tilde{\delta}_{l-2}-\tilde{\delta}_{l+1}) - \right. \\ \left. - (l-2)F_{l-1}\tilde{D}_{l-1}\cos(\tilde{\delta}_{l-2}-\tilde{\delta}_{l-1})] + 2 \frac{l(l+1)F_l\tilde{Q}_l}{(2l-1)(2l+3)} \times \right.$$

$$\times [(l+2) F_{l+1} \tilde{D}_{l+1} \tilde{D}_{l+1} \cos(\tilde{\delta}_l - \tilde{\delta}_{l+1}) - (l-1) F_{l-1} \tilde{D}_{l-1} \tilde{D}_{l-1} \cos(\tilde{\delta}_l - \tilde{\delta}_{l-1})] \}. \quad (1.112)$$

Те же самые параметры могут быть рассчитаны, если A является атомом с полузаполненными подоболочками. Чтобы получить $\sigma_{nl, kl}^{AC(r)}(\omega)$, $\beta_{nl\uparrow\downarrow}^{AC(r)}(\omega)$, $\gamma_{nl\uparrow\downarrow}^{AC(r)}(\omega)$ и $\eta_{nl\uparrow\downarrow}^{AC(r)}(\omega)$, используем (1.110—1.112), заменяя там $\tilde{D}_{l'}(\omega)$, $\tilde{Q}_{l''}(\omega)$, $\tilde{\delta}_{l''}(\omega)$ и $F_{l'}(\omega)$ на $\tilde{D}_{l'\uparrow}(\omega)$, $\tilde{Q}_{l''\uparrow}(\omega)$, $\tilde{\delta}_{l''\uparrow}(\omega)$ и $F_{l'\uparrow}(\omega)$ или на $\tilde{D}_{l'\downarrow}(\omega)$, $\tilde{Q}_{l''\downarrow}(\omega)$, $\tilde{\delta}_{l''\downarrow}(\omega)$ и $F_{l'\downarrow}(\omega)$ для фотоэлектронов со спином «вверх» ($\uparrow$) и спином «вниз» ($\downarrow$) (см. разд. 1.10).

1.14. Эндодральные атомы — эффект поляризации фуллерена

Фуллереновая электронная оболочка эффективно меняет интенсивность налетающего пучка фотонов, который её проникает и достигает внутреннего атома A . Этот эффект может быть учтен подобно тому, как это делается при учёте воздействия одной электронной оболочки на другую. Действительно, с физической точки зрения ситуация остается той же, только наряду с атомными оболочками появляется дополнительная оболочка фуллерена.

Существенное упрощение заключается в том, что взаимодействие между фуллереном и электронами атома A относительно слабо и потому его достаточно учесть в первом порядке МТВ. Это есть следствие того, что радиус фуллерена R намного больше, чем атомный радиус r_A . В результате, имеем для главного члена взаимодействия атомного и фуллеренового электронов только диполь — дипольный вклад:

$$V_{AC} \approx \mathbf{r}_A \cdot \mathbf{r}_C / R^3. \quad (1.113)$$

Здесь $\mathbf{r}_A$ и $\mathbf{r}_C$ — радиусы-векторы электронов атома A и фуллерена соответственно. Это отношение параметрически справедливо для атомов, чей потенциал ионизации намного больше, чем фуллерена.

На языке теории диаграмм амплитуда фотопоглощения $A@F$ подобна (1.36), где волнистая линия обозначает (1.113):

(1.114)

где D^{AC} , D_A , D_F являются амплитудами фотоионизации $A@F$, изолированного атома A и фуллерена F соответственно. Заметим, что до сих пор наиболее часто изучаемый случай — это $F \equiv C_{60}$, хотя другие фуллерены, например C_{80} , также становятся объектами исследования. Аналитически, имеем для (1.114):

$$D^{AC}(\omega) \equiv D_A \left(1 - \frac{\alpha_F(\omega)}{R^3} \right) = D_A G_F(\omega), \quad (1.115)$$

где $\alpha_F(\omega)$ — дипольная поляризуемость оболочки фуллерена. В рамках ПСФО D_A является решением (1.37). Но с точки зрения (1.115) несущественно, какое приближение используется, чтобы описать изолированный атом.

Объединенное действие статического потенциала фуллерена, описываемого $F_l(k)$ из (1.108), который учитывает отражение фотоэлектрона атома A оболочкой фуллерена, и множителя $G_F(\omega)$ из (1.115), который описывает модификацию налетающего потока фотонов, действующих на атом A вследствие поляризации фуллерена F , ведет к следующему соотношению [31]:

$$\begin{aligned} \sigma_{nl,kl'}^{AC}(\omega) &= |F_{l'}(k)|^2 \left| 1 - \frac{\alpha_F(\omega)}{R^3} \right|^2 \sigma_{nl,kl'}(\omega) \equiv \\ &\equiv |F_{l'}(k)|^2 |G_F(\omega)|^2 \sigma_{nl,kl'}(\omega). \end{aligned} \quad (1.116)$$

Здесь верхний индекс AC без (r) означает такие значения вычисляемых величин, которые учитывают и отражение фотоэлектрона статическим полем фуллерена, и его динамическую поляризуемость. Отметим, что ф-лу (1.116) можно использовать с экспериментальными сечениями фотоионизации $\sigma_{nl,kl'}(\omega)$ изолированного атома и дипольной поляризуемостью $\alpha_F(\omega)$ фулле-

рена, и с факторами $F_l(k)$, вычисленными в рамках модели, лучшей представленной выше модели потенциального пузыря (1.104).

Множитель $G_F(\omega)$ в (1.115) изменяет поток дипольных фотонов. Аналогична модификация и квадрупольного матричного элемента $Q_{AC}(\omega)$, который учитывает диаграммы, подобные (1.114), приводя к следующему выражению:

$$Q_{AC}(\omega) \equiv Q_A \left(1 - \frac{\alpha_F^q(\omega)}{4R^5} \right) \equiv Q_A G_F^q(\omega), \quad (1.117)$$

где $\alpha_F^q(\omega)$ — квадрупольная поляризуемость фуллерена.

Множители $G_F(\omega)$ и $G_F^q(\omega)$ проявляются в недипольных параметрах и приводят их к дополнительным отношениям $G_F^q(\omega) / G_F(\omega)$. Заметим, что $G_F(\omega)$ и $G_F^q(\omega)$ — комплексные величины:

$$G_F^{q,d}(\omega) = G_F^{q,d}(\omega) \exp[i\Lambda^{q,d}(\omega)], \quad (1.118)$$

где $G_F(\omega) \equiv G_F^d(\omega)$.

В результате, недипольные параметры угловой анизотропии определяются выражениями:

$$\begin{aligned} \gamma_{nl}^{AC}(\omega) = & \frac{3\tilde{G}_F^d(\omega)}{5\tilde{G}_F^d(\omega)[(l+1)F_{l+1}^2\tilde{D}_{l+1}^2 + lF_{l-1}^2\tilde{D}_{l-1}^2]} \left\{ \frac{(l+1)F_{l+1}\tilde{D}_{l+1}}{2l+3} \times \right. \\ & \times [3(l+2)F_{l+2}\tilde{Q}_{l+2}\cos(\tilde{\delta}_{l+2}-\tilde{\delta}_{l+1}) - \\ & \left. - lF_l\tilde{Q}_l\cos(\tilde{\delta}_l-\tilde{\delta}_{l+1})] - \right. \\ & \left. - \frac{lF_{l-1}\tilde{D}_{l-1}}{2l+1} [3(l-1)F_{l-2}\tilde{Q}_{l-2}\cos(\tilde{\delta}_{l-2}-\tilde{\delta}_{l-1}) - \right. \\ & \left. - (l+1)F_l\tilde{Q}_l\cos(\tilde{\delta}_l-\tilde{\delta}_{l-1})] \right\}; \quad (1.119) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \eta_{nl}^{AC}(\omega) = & \frac{3\tilde{G}_F^q(\omega)}{5\tilde{G}_F^q(\omega)[(l+1)F_{l+1}^2\tilde{D}_{l+1}^2 + lF_{l-1}^2\tilde{D}_{l-1}^2]} \left\{ \frac{(l+1)(l+2)}{(2l+1)(2l+3)} \times \right. \\ & \times F_{l+2}\tilde{Q}_{l+2} [5lF_{l-1}\tilde{D}_{l-1}d_{l-1}\cos(\tilde{\delta}_{l+2}-\tilde{\delta}_{l-1}) - \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -(l+3)F_{l+1}\tilde{D}_{l+1}\cos(\tilde{\delta}_{l+2}-\tilde{\delta}_{l+1})] - \\
& - \frac{(l-1)l}{(2l+1)(2l+1)}F_{l-2}\tilde{Q}_{l-2}[5(l+1)F_{l+1}\tilde{D}_{l+1}\cos(\tilde{\delta}_{l-2}-\tilde{\delta}_{l+1}) - \\
& - (l-2)F_{l-1}\tilde{D}_{l-1}\cos(\tilde{\delta}_{l-2}-\tilde{\delta}_{l-1})] + 2\frac{l(l+1)F_l\tilde{Q}_l}{(2l-1)(2l+3)} \times \\
& \times [(l+2)F_{l+1}\tilde{D}_{l+1}\tilde{D}_{l+1}\cos(\tilde{\delta}_l-\tilde{\delta}_{l+1}) - \\
& - (l-1)F_{l-1}\tilde{D}_{l-1}\tilde{D}_{l-1}\cos(\tilde{\delta}_l-\tilde{\delta}_{l-1})] \Big\}. \quad (1.120)
\end{aligned}$$

Здесь $\tilde{\delta}_{l\pm 1} = \tilde{\tilde{\delta}}_{l\pm 1} + \Lambda^d = \tilde{\tilde{\delta}}_{l\pm 1} + \Delta\delta_{l\pm 1} + \Lambda^d = \delta_{l\pm 1} + \Delta_{l\pm 1} + \Lambda^d$
и $\tilde{\delta}_{l\pm 2, l} = \tilde{\tilde{\delta}}_{l\pm 2, l} + \Lambda^q = \tilde{\tilde{\delta}}_{l\pm 2, l} + \Delta\delta_{l\pm 2, l} + \Lambda^q = \delta_{l\pm 2, l} + \Delta_{l\pm 2, l} + \Delta\delta_{l\pm 2, l} + \Lambda^q$.

Поляризуемость $\alpha_F(\omega)$ может быть получена в результате *ab initio* вычислений, которые весьма трудны, так как требуют, согласно (1.85), вычисления сил осцилляторов и сечения фотопоглощения. Вместо этого можно использовать экспериментально определенное сечение фотопоглощения фуллерена $\sigma_F(\omega)$, подставляя его в (1.85). Мы предпочитаем использовать экспериментальное сечение $\sigma_F(\omega)$, которое прямо пропорционально мнимой части дипольной поляризуемости [БЛП]:

$$\text{Im } \alpha_F(\omega) = c\sigma_F(\omega) / 4\pi\omega. \quad (1.121)$$

Зависимость $\sigma_F(\omega)$ от ω характеризуется мощным максимумом, называемым *гигантским резонансом*. Для C_{60} он расположен приблизительно около 22 эВ. Эксперименты обычно не дают непосредственно абсолютных значений $\sigma_F(\omega)$. Они, однако, могут быть надежно оценены с использованием процедуры нормировки, базирующейся на правиле сумм:

$$(c / 2\pi^2) \int \sigma_F(\omega) d\omega = N. \quad (1.122)$$

Здесь N — число коллективизированных электронов. Для C_{60} оно равно $N = 240$, что означает четыре коллективизированных электрона от каждого атома углерода. Заметим, что можно пре-

небрежь вкладом дискретных возбуждений, который для фуллерена мал.

Дисперсионное соотношение для вещественной части $\alpha_F(\omega)$ имеет вид

$$\operatorname{Re} \alpha_F(\omega) = \frac{c}{2\pi^2} \int_{I_F}^{\infty} \frac{\sigma_F(\omega') d\omega'}{\omega'^2 - \omega^2}. \quad (1.123)$$

В (1.123) I_F — потенциал ионизации фуллерена.

В гл. 2 мы приведём примеры важных модификаций полного и дифференциального по углу и энергии сечений фотоионизации, которые появляются вследствие отражения волн фотоэлектронов статическим потенциалом C_{60} и усиления налетающего электромагнитного поля из-за поляризации им электронной оболочки C_{60} . Результаты получены с помощью известных из эксперимента характеристик фуллерена — его электронного сродства и сечения фотопоглощения — и с использованием того, что радиус фуллерена намного больше радиуса атома, и оболочка фуллерена значительно тоньше, чем его радиус.

Модификация поля налетающего пучка фотонов и вероятностей распада вакансий происходят главным образом из-за виртуального или реального возбуждения дипольного гигантского резонанса C_{60} .

1.15. Токи увлечения в атомарных газах

Асимметрия углового распределения, проявляющаяся при учёте недипольных поправок к угловому распределению фотоэлектронов (1.77), (1.81), приводит к тому, что они создают отличный от нуля суммарный ток $J(\omega)$, направленный по или против направления потока фотонов [4, 32].

В процессе поглощения потока фотонов объемом газа последний поглощает не только их энергию $Q\omega$, но и импульс $Qk = Q\omega/c$, где Q — полное число поглощаемых фотонов. Импульс Qk передается всем ионам и электронам, возникающим вследствие поглощения газом энергии $Q\omega$. Импульс электронов $\mathbf{P}_{эл}$ и ионов $\mathbf{P}_и$ в сумме равен полному импульсу фотонов Qk : $Qk = |\mathbf{P}_{эл} + \mathbf{P}_и|$. Если $|\mathbf{P}_{эл}|$ и $|\mathbf{P}_и|$ одного порядка, то скорость направленного движения электронов $V_{эл}$ значительно больше, чем скорость ионов $V_и$, а следовательно, значительно больше и

создаваемый этим движением электронный ток $J_{эл} \gg J_{и}$, названный *током увлечения*. В дипольном приближении угловое распределение фотоэлектронов, согласно (1.66), симметрично относительно замены $\theta = 0$ на $\theta = \pi$, а следовательно, в этом приближении $V_{эл} = 0$ и $J_{эл} = 0$, и чтобы описать ток, следует выйти за рамки этого приближения, учтя квадрупольные поправки, как это и сделано в (1.77), (1.81).

В формировании тока увлечения фотоэлектроны участвуют до тех пор, пока они не сталкиваются с другими атомами (или ионами) газа. Идея существования тока увлечения и формула для его вычисления были предложены в работах [4, 33], где можно найти детали вывода. Выражение для тока увлечения, точнее его плотности $j(\omega)$, то есть величина электронного тока, приходящегося на единицу площади газа-мишени, имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} j(\omega) &= \sum_i \frac{W}{\sigma_{эл}(\epsilon_i)} \int \frac{d\sigma_i(\omega)}{d\Omega} \cos \theta \, d\Omega = \\ &= \sum_i \frac{W k \sigma_i(\omega) \gamma_i(\omega)}{\sigma_{эл}(\epsilon_i)}, \end{aligned} \quad (1.124)$$

где интегрирование по угловым переменным $d\Omega$ проведено с помощью [ИС] и W — поток фотонов через единицу освещённой поверхности газа. Суммирование в (1.124) производится по всем i -оболочкам, которые могут быть ионизованы фотоном с энергией ω ; $\sigma_{эл}(\epsilon_i)$ есть сечение упругого рассеяния (см. гл. 3) фотоэлектрона энергии $\epsilon_i = \omega - I_i$ на атомах газа, а I_i — потенциал ионизации i -й оболочки. Как следует из (1.124), ток определяется недипольной компонентой углового распределения фотоэлектронов $\gamma_i(\omega)$, выражение для которой даётся формулами (1.78), (1.83), (1.119). По порядку величины ток увлечения значителен, и его появление есть в принципе наблюдаемый эффект.

Действительно, согласно (1.124) при потоке $W = 10^{13}$ фот./($\text{с} \cdot \text{см}^2$), вполне достижимом для современных накопителей, плотность тока порядка 10^{-9} А/см². Величина $j(\omega)$ значительно возрастает там, где сечение упругого рассеяния мало (см. гл. 3), и особенно, где велико сечение фотоионизации $\sigma_i(\omega)$ и недипольный параметр $\gamma_i(\omega)$. Этот параметр велик при наличии дипольных и квадрупольных резонансов [34]. Последнее утверждение наиболее

отчетливо видно из выражения для вклада в $\gamma_i(\omega)$ от s -электронов, которое получается из (1.78) с учётом (1.83):

$$\gamma_{ns}(\omega) = \frac{6}{5} \frac{\tilde{Q}_d(\omega)}{\tilde{D}_p(\omega)} \cos(\tilde{\delta}_d - \tilde{\delta}_p) \quad (1.125)$$

для обычного атома и

$$\gamma_{ns}^{AC}(\omega) = \frac{6\tilde{G}_F^q(\omega)}{5\tilde{G}_F^d(\omega)} \frac{\tilde{Q}_d(\omega)}{\tilde{D}_p(\omega)} \cos(\tilde{\delta}_d - \tilde{\delta}_p) \quad (1.126)$$

— для эндоэдрального (см. (1.119)).

Выражение для вклада s -электронов в ток увлечения в газе атомов имеет следующий вид:

$$j_0(\omega) = \sum_{ns} W \frac{3k}{5} \frac{\tilde{D}_{np}(\omega) \tilde{Q}_{nd}(\omega)}{\sigma_{эл}(\epsilon_{np})} \times \\ \times \cos[\tilde{\delta}_d(\epsilon_{ns}) - \tilde{\delta}_p(\epsilon_{ns})], \quad (1.127)$$

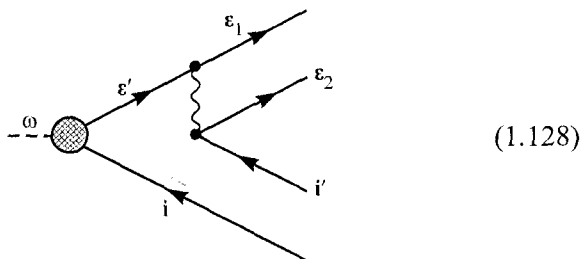
где $\tilde{D}_{np}(\omega)$ и $\tilde{Q}_{nd}(\omega)$ — дипольный и квадрупольный матричные элементы, получаемые решением уравнений ПСФО, (1.37) и (1.85) соответственно; $\epsilon_{ns} = \omega - I_{ns}$.

Конкретный расчет показывает, что $j(\omega)$ как функция энергии кванта ω может менять знак, причем полный импульс фотоэлектронов оказывается существенно отличающимся от полного импульса фотонов. Это значит, что полный импульс отдачи — импульс, передаваемый всем ионам, также оказывается достаточно большим по величине и зависящим от ω .

Многоэлектронные корреляции существенно влияют на ток увлечения — на его величину и знак.

1.16. Неупругое рассеяние фотоэлектронов

Фотоэлектрон на пути из атома может рассеиваться неупруго, если его энергии достаточно для возбуждения или ионизации другого атомного электрона. Теперь рассмотрим роль механизма рассеяния фотоэлектрона на остальных электронах. На языке диаграмм обсуждаемый эффект изображается в простейшем виде следующим образом:



Физически диаграмма (1.128) описывает процесс, в котором сначала создается вакансия i и фотоэлектрон ϵ' . Этот процесс описывается в рамках ПСФО. Затем фотоэлектрон неупруго рассеивается, удаляя или возбуждая другой атомный электрон, то есть переходит из состояния ϵ' в состояние ϵ_1 и порождает состояние электрон—дырка $\epsilon_2 i'$. В проводимых расчётах диаграмма (1.128) учитывает межэлектронное взаимодействие в низшем порядке теории возмущений. Процесс неупругого рассеяния фотоэлектрона был назван — «выбивание сходу». Он был впервые предложен и описан в работах [35, АИЧЧ].

«Вывивание сходу» приводит к уменьшению энергии фотоэлектрона и таким образом к уменьшению наблюдаемого методом фотоэлектронной спектроскопии сечения фотоионизации определенной оболочки. Само по себе «выбивание сходу» увеличивает число удаляемых из атома электронов. Соответствующее сечение получается подстановкой амплитуды (1.128) в ф-лу (1.4).

Если рассматривается достаточно глубокая оболочка i , выражение для сечения образования одного фотоэлектрона и вакансии $i - \sigma_i^{(+)}(\omega)$ упрощается и приобретает вид [35, 36, АИЧЧ]:

$$\sigma_i^{(+)}(\omega) = \sigma_i(\omega) \exp[-2 \operatorname{Im} \delta(\epsilon)], \quad (1.129)$$

где $\sigma_i(\omega)$ есть либо полное экспериментальное сечение фотопоглощения, либо сечение образования вакансии i , рассчитанное в рамках ПСФО или ОПСФО (см. п. 1.8). Величина $\operatorname{Im} \delta(\epsilon)$ есть мнимая часть фазы упругого рассеяния фотоэлектрона с энергией ϵ , описывающая вероятность его неупругого рассеяния (см. разд. 3).

Корреляционная поправка (1.128) существенно изменяет не только сечение ионизации, но и угловое, и спиновое распределение фотоэлектронов.

1.17. Возбуждение спутников и двойная ионизация

Процесс фотоионизации i -оболочки атома сопровождается релаксацией ионного остова, которая приводит к тому, что наряду с конечным состоянием i^{-1} (обозначает вакансию на уровне i) возникают возбужденные состояния типа «две дырки—одна частица» $i^{-1}j^{-1}s$, имеющие большую полную энергию, что соответствует меньшей кинетической энергии в фотоэлектронном спектре. Состояниям s дискретного спектра соответствуют спутники «встряски-возбуждения» (*shake-up*) [37, 38], а состояниям s сплошного спектра соответствует дополнительный подъем фона сплошного спектра со стороны больших энергий связи — спутники «встряски-удаления» (*shake off*). Для таких процессов выполняются монопольные правила отбора, т. е. угловые моменты дырки j и электрона s совпадают. Амплитуда фотоионизации с возбуждением спутника изображается диаграммой, похожей, но отличной от (1.128):

(1.130)

Поскольку интенсивности этих спутников обычно составляют менее 3% интенсивности основной линии [35,36], амплитуда фотоионизации спутничного состояния обычно может быть рассчитана по теории возмущений [ЛЛ].

Если s — дискретное состояние (спутник), то из (1.130) вытекает следующая формула для сечения фотоионизации (см. (1.69)):

$$\sigma_{ij}(\omega) = \left\{ 2.689 \frac{\omega N_{nl}}{2l+1} \left[l |D_{\epsilon, p_{l-1}}(\omega)|^2 + \right. \right. \\ \left. \left. + (l+1) |D_{\epsilon, p_{l+1}}(\omega)|^2 \right] \right\} \frac{|\langle si | U | ji \rangle|^2}{(\epsilon_s - \epsilon_j)} [10^{-18} \text{ см}^2]. \quad (1.131)$$

Здесь $\epsilon_p = \omega - \epsilon_s + \epsilon_j + \epsilon_i$, а l — орбитальный момент состояния i . В ф-ле (1.131) введены амплитуды фотоионизации $D_{\epsilon, p_{l\pm 1}}(\omega)$, которые определяются, в отличие от ф-лы (1.69), тремя энергетическими параметрами: энергией основного состояния ϵ_i , энергией конечного состояния ϵ_p и энергией фотона ω , причем в общем случае эти три величины не связаны законом сохранения энергии. Выражение в фигурных скобках имеет смысл сечения фотоионизации вне энергетической поверхности, которое обозначим $\sigma_{ip}(\omega)$.

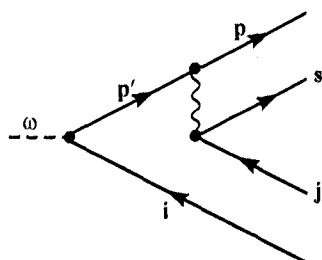
Таким образом, для описания ионизации подболочки i с возбуждением спутников требуется знание уже не кривой сечения фотоионизации $\sigma_i(\omega)$, но двумерный массив $\sigma_{ip}(\omega)$. Эти величины рассчитываются методом ПСФО. Ограниченное число кривых сечений фотоионизации вне энергетической поверхности (дополнительные кривые) могут быть изображены в тех же координатах, что и обычное сечение фотоионизации. Такие кривые начинаются на кривой сечения фотоионизации, где вся энергия фотона передается электрону i . Начав с какой-то точки ω_0 на кривой $\sigma_i(\omega)$, где $\omega_0 = \epsilon_p - \epsilon_i$, будем изображать энергию, переданную на возбуждение спутника, величиной горизонтального отрезка от текущей точки до начала этой дополнительной кривой. Тогда энергия, переданная в канале фотоэлектрона, равна величине горизонтального отрезка от начала координат до текущей точки на дополнительной кривой.

Если на диаграмме (1.130) s соответствует возбуждению в континууме (спутник «встряски-удаления» (*shake off*)), то сечение двойной ионизации, соответствующее этой диаграмме, запишется в виде:

$$\begin{aligned} \sigma'_{ijs}(\omega) = \\ = \iint \frac{\sigma_{ip}(\omega) \delta(\omega - \epsilon_p + \epsilon_i - \epsilon_s + \epsilon_j) |si \langle U \rangle ji|^2}{(\epsilon_s - \epsilon_j)^2} \times \\ \times d\epsilon_p d\epsilon_s. \end{aligned} \quad (1.132)$$

Такое же возбужденное состояние атома возникает вследствие взаимодействия вылетающего электрона с ионным остовом («выбивание сходу»), рассмотренного в п. 1.16. Диаграмма,

изображающая амплитуду процесса, имеет вид, подобный (1.128):



(1.133)

Если s — это дискретное состояние, то сечение фотоионизации такого процесса дается формулой

$$\sigma''_{ijs}(\omega) \sim \left| \int D_{ip'}(\omega) U_{sp',jp} \times \right. \\ \left. \times \left(i\pi\delta(\omega - \epsilon_{p'} + \epsilon_i) + \frac{1}{\omega - \epsilon_{p'} + \epsilon_i} \right) d\epsilon_{p'} \right|^2, \quad (1.134)$$

где $\epsilon_p = \omega - \epsilon_s + \epsilon_i + \epsilon_j$.

При записи формул (1.131) и (1.134) не была учтена возможность интерференции двух процессов возбуждения спутникового состояния. Если для «выбивания сходу» выполняются монопольные правила отбора, то этот процесс интерферирует с процессом «встряски», причем амплитуда последнего процесса обычно превосходит амплитуду первого.

Спутники «встряски» и «выбивания сходу» принципиально отличаются по угловому распределению. Как следует из (1.130), после того как произошла фотоионизация, вероятность возбуждения спутника «встряски» не зависит от углового момента фотозлектрона, поэтому амплитуды в каналах $l \pm 1$ будут строго пропорциональны соответствующим амплитудам однократной фотоионизации рассматриваемой оболочки.

Поэтому параметры угловой анизотропии для спутников, имеющих природу «встряски», будут полностью определяться кривыми β вне энергетической поверхности, то есть, как следует из анализа этих кривых, будут мало отличаться от параметров угловой анизотропии однократной ионизации соответствующей оболочки.

Однако диаграммы (1.130) (если промежуточное состояние вакансии отлично от конечного) и (1.133) (если угловые моменты p и p' не совпадают) могут описывать и немонотонные возбуждения s_j^{-1} , и спутники.

Формула (1.134) содержит матричный элемент, включающий функцию вылетающего электрона, поэтому соотношение между амплитудами в каналах $l \pm 1$ будет принципиально отличаться от такого же соотношения при однократной фотоионизации. Поэтому следует ожидать принципиального отличия параметра угловой анизотропии спутника, возникающего из-за взаимодействия вылетающего электрона с остовом, от параметра угловой анизотропии при однократной фотоионизации.

В заключение данной главы считаем уместным привести несколько ссылок на сравнительно недавние работы обзорного характера, описывающие современное состояние и развивающиеся методы, используемые здесь и содержащие данные по ряду атомов — простых и эндоэдральных [39—48].

Литература

1. Fano U. // Phys. Rev. 1961. Vol. 124. P. 1866.
2. Kabachnik N. M. and Sazhina T. // J. Phys. B. 1976. Vol. 9. P. 681.
3. Ron A., Goldberg I. B., Stein J., Manson S. T., Pratt R. H. // Phys. Rev. A. 1994. Vol. 50, № 2. P. 1312—1320.
4. Amusia M. Ya., Arifov P. U., Baltenkov A. S., Grinberg A. A. and Shapiro S. G. // Phys. Lett. 1974. Vol. 47A. P. 66.
5. Amusia M. Ya., Baltenkov A. S., Chernysheva L. V., Felfli Z. and Msezane A. Z. // Phys. Rev. A. 2001. Vol. 63. P. 052506.
6. Cooper J. W. // Phys. Rev. A. 1990. Vol. 42. P. 6942 // Phys. Rev. A. 1992. Vol. 45. P. 3362; Phys. Rev. A. 1993. Vol. 47. P. 1841; Bechler A. and Pratt R. H. // Phys. Rev. A. 1990. Vol. 42. P. 6400.
7. Amusia M. Ya., Baltenkov A. S., Felfli Z. and Msezane A. Z. // Phys. Rev. A. 1999. Vol. 59, № 4. P. R1—R4.
8. Черепков H. A. // ЖЭТФ. 1973. Т. 65. С. 933—946 // Phys. Lett. A. 1972. Vol. 40. P. 119—121.
9. Cherepkov N. A. // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 1981. Vol. 14. P. L73—L78.
10. Amusia M. Ya., Cherepkov N. A., Chernysheva L. V., Felfli Z. and Msezane A. Z. // Phys. Rev. A. 2004. Vol. 70. P. 062709.
11. Woodgate G. K. Elementary atomic structure. McGraw-Hill, 1970.
12. Starace A. F. and Armstrong L. J. // Phys. Rev. A. 1976. Vol. 13. P. 1850—1862.

13. Черепков Н. А., Чернышева Л. В. // Изв. АН СССР. Сер. физ. 1977. Т. 41, № 12, С. 2518—2528.
14. Amusia M. Ya., Cherepkov N. A., Chernysheva L. V. and Manson S. T. // Phys. Rev. A. 2000. Vol. 61. R207—R211.
15. Amusia M. Ya., Cherepkov N. A., Chernysheva L. V. and Manson S. T. // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 2000. Vol. 33, № 1. L37—L42.
16. Amusia M. Ya. Chernysheva L. V., Ivanov V. K. and Manson S. T. // Phys. Rev. A. 2002. Vol. 65, № 3. P. 032714.
17. Vesnicheva G. A., Malyshev G. M., Orlov V. F. and Cherepkov N. A. // Sov. Phys. Tech. Phys. 1986. Vol. 31. P. 402
18. Mead R. D., Lykke K. R. and Lineberger W. Carl. Photodetachment threshold laws // Electronic and atomic collisions. Proceedings, XIII ICPEAC / Eds J. Eichler, I. V. Hertel and N. Stolterfoht. Amsterdam: Elsevier, 1984. P. 721—730.
19. Амусья М. Я., Грибакин Г. Ф., Иванов В. К., Чернышева Л. В. // Изв. АН СССР. Сер. физ. 1986. Т. 50. С. 1274—1278.
20. Грибакин Г. Ф., Гульцев Б. В., Иванов В. К., Кучиев М. Ю. // Изв. вузов. Физика. 1990. Т. 33. С. 86—96.
21. Ivanov V. K. // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 1999. Vol. 32. № 12. P. R67—R101.
22. Kroto H. W., Heath J. R., O'Brien S. C., Curl R. F. and Smalley R. E. // Nature. 1985. Vol. 318. P. 162—163.
23. Bertsch G. F., Bulgac A., Tomanek D., Wang Y. // Phys. Rev. Lett. 1991. Vol. 67. P. 2690 — 2693.
24. Hertel I. V., Steger H. and de Vries J., et al. // Phys. Rev. Lett. 1992. Vol. 68. P. 784.
25. Amusia M. Ya., Baltenkov A. S. and Krakov B. G. // Phys. Lett. A. 1998. Vol. 243. P. 99.
26. Baltenkov A. S. // Phys. Lett. A. 1999. Vol. 254. P. 203.
27. Amusia M. Ya. and A. S. Baltenkov A. S. // Phys. Rev. A. 2006. Vol. 73. P. 062723.
28. Amusia M. Ya. and A. S. Baltenkov A. S. // Phys. Rev. A. 2006. Vol. 73. P. 063206.
29. Amusia M. Ya., Baltenkov A. S., Dolmatov V. K., Manson S. T. and Msezane A. Z. // Phys. Rev. A. 2004. Vol. 70. P. 023201.
30. Amusia M. Ya., Baltenkov A. S., Chernysheva L. V., Felfli Z. and Msezane A. Z. // Zh. Exp. Teor. Fiz. 2006. Vol. 129, № 1. P. 63—70; JETP. 2006. Vol. 102, № 1. P. 56—60.
31. Amusia M. Ya. Baltenkov A. S. and Chernysheva L. V. // JETP Lett. 2008. Vol. 87., № 4. On web from 30.07.2007: <http://arxiv.org/abs/0707.4404>.
32. Amusia M. Ya., Baltenkov A. S., Chernysheva L. V., Felfli Z., Msezane A. Z. and Nordgren J. // Phys. Rev. A. 2001. Vol. 63. P. 052512.
33. Амусья М. Я., Балтенков А. С., Гринберг А. А., Шаниро С. Г. // ЖЭТФ. 1975. Т. 68. С. 28—32.
34. Амусья М. Я., Долматов В. К. // ЖЭТФ. 1980. Т. 79. С. 1664—1670.

35. Амусья М. Я., Грибакин Г. Ф., Цемехман К. Л. // Изв. АН СССР. Сер. физ. 1989. Т. 53, № 9. С. 1672—1676.
36. Amusia M. Ya., Gribakin G. F., Tsemekhman K. L. and Tsemekhman V. L. // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 1990. Vol. 23, N 3. P. 393—402.
37. Svensson S., Eriksson B., Martensson N., Wendin G. and Gelius U. // J. Electron Spect. Rel. Phenom. 1988. Vol. 47. P. 327.
38. Kikas A., Osborne S. J., Ausmees A., Svensson S., Sairanen O.-P. and Askela S. // J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom. 1996. Vol. 77. P. 241.
39. Amusia M. Ya., Theory of Photoionization: VUV and Soft X-ray Frequency Region // Photoionization in VUV and Soft X-Ray Energy Region / Eds U. Becker and D. Shirley. New York; London: Plenum Press, 1996. P. 1—46.
40. Amusia M. Ya. and Connerade J.-P. Collective motion probed by light // Rep. Prog. Phys. 2000. Vol. 63. P. 41—70.
41. Amusia M. Ya. Random phase approximation: from Giant to Intra-doublet resonances // Rad. Phys. Chem. 2004. Vol. 70. P. 237—251.
42. Amusia M. Ya., Baltenkov A. S., Chernysheva L. V., Felfli Z. and Msezane A. Z. Near-threshold behavior of angular anisotropy parameters in negative ions photo-detachment // Phys. Rev. A. 2005. Vol. 72. P. 032727.
43. Amusia M. Ya. and Chernysheva L. V. Non-dipole angular anisotropy parameters of photoelectrons from semi-filled shell atoms // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 2006. Vol. 39. P. 4627—4636.
44. Amusia M. Ya. Fast electron scattering as a tool to study target's structure, review // J. Electron Spectr. Rel. Phenom. 2007. Vol. 159. P. 81—90.
45. Amusia M. Ya. Photoionization and vacancy decay of endohedral atoms, review // J. Electron Spectr. Rel. Phenom. 2007. Vol. 161. P. 112—120.
46. Amusia M. Ya., Baltenkov A. S., and Chernysheva L. V. Photoionization of 3d electrons of Xe, Cs and Ba endohedral atoms: comparative analyses // Central Europ. J. Phys. 2008. Vol. 6, N 1. P. 14—25.
47. Amusia M. Ya. and Chernysheva L. V. On the angular distribution and spin polarization of the photoelectrons from semi-filled shell atoms. // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. In preparation, 2009. On web 2007: <http://arxiv.org/abs/physics/0701040>.
48. Amusia M. Ya., Baltenkov A. S. and Chernysheva L. V. On the photoionization of the outer electrons in noble gas endohedral atoms // JETP (2h. Exp. Teor. Fyz.) 2008. Vol. 134, N 2. P. 221—230. On web 2007: <http://arxiv.org/abs/0710.3910>.

ГЛАВА 2

РЕЗУЛЬТАТЫ ВЫЧИСЛЕНИЙ

2.1. Способ представления данных и используемые формулы

В этой главе собраны результаты расчетов характеристик процесса фотоионизации. Мы приведем графики и таблицы, которые представляют данные, полученные в исследовании полных и парциальных сечений фотоионизации, различных отношений сечений, дипольных и недипольных параметров угловой анизотропии и спиновой поляризации фотоэлектронов, а также сил осцилляторов дискретных возбуждений. В некоторых случаях будут представлены также экспериментальные данные.

Нумерация рисунков* организована следующим образом: сначала идет номер соответствующего раздела; следующие буквы обозначают представляемый в соответствии с Периодической системой элементов Менделеева атом (например, в разд. 2.2 : Рис. 2.2_Ag_a1 обозначает: Ag — атом аргона), следующая маленькая буква — рассматриваемые величины или характеристики:

a — полное сечение фотоионизации и квазисечение возбуждения дискретных уровней атомов и ионов в основном и возбужденных состояниях в приближении ХФ или ПСФО;

b — парциальное сечение $\sigma_{nl}(\omega)$ в тех же самых приближениях;

c — отношение парциальных сечений;

d — дипольный параметр угловой анизотропии $\beta_{nl}(\omega)$;

* Рисунки в данной книге собраны на компакт-диске (CD). Страница, на которой расположен интересующий читателя рисунок, указана в соответствующем параграфе гл. 2 — в «Кратких комментариях к рисункам» (CD, 000).

e — недипольные параметры $\gamma_{nl}(\omega)$ и $\eta_{nl}(\omega)$;
 f — параметры $A^j(\omega)$, $\zeta^j(\omega)$ и $\xi^j(\omega)$ спиновой поляризации фотоэлектронов;

g — другие характеристики. Наконец, последняя цифра представляет номер данного рисунка в рассмотренной группе.

Однако не все упомянутые выше данные имеются для каждого атома. В таких случаях не все буквы и цифры будут использоваться в приведенных рисунках.

Чтобы описать различные характеристики поглощения фотона атомами, использовались следующие формулы гл. 1:

для полных сечений в приближении ХФ и ПСФО — ф-ла (1.70);

для парциальных сечений в приближении ХФ и ПСФО — ф-лы (1.68), (1.69);

для дипольных параметров угловой анизотропии в приближении ХФ и ПСФО — ф-лы (1.71), (1.74) с подстановками (1.72), (1.73);

для недипольных параметров $\gamma_{nl}(\omega)$ и $\eta_{nl}(\omega)$, в приближении ХФ — ф-лы (1.78) и (1.79), (1.82) и с заменой на ф-лу (1.83) — в ПСФО;

для параметров спиновой поляризации фотоэлектронов — ф-ла (1.89);

для атомной дипольной поляризуемости — ф-ла (1.86).

Наряду с приближением ХФ и ПСФО для промежуточных и внутренних оболочек применяются обобщённые приближения ХФ и ПСФО, или ОХФ и ОПСФО соответственно.

Вычисления для атомов с полузаполненными оболочками выполнены, используя соотношения (1.95)—(1.99), в рамках спин-поляризованных приближения ХФ и ПСФО, или СП ХФ и СП ПСФО. Сечения фотоионизации для атомов с незаполненными оболочками получаем из (1.69) с амплитудами в приближении ХФ, данными ф-ми (1.102) и (1.103), т. е. в ПСФО для незаполненных оболочек — ПСФОН (см. п. 1.11).

Вычисления сечений фотоионизации эндодральных атомов проведены, используя ф-лы (1.116), (1.119) и (1.120).

Токи увлечения рассчитывались по ф-ле (1.124), а сечение фотоионизации с учётом неупругого рассеяния фотоэлектрона в процессе его выхода из ионизируемого атома — по ф-ле (1.129).

Чтобы добиться единообразия в изображении дискретных линий возбуждения и сечения фотоионизации в области энергий

фотона над порогом ионизации, мы «размываем» дискретные линии, пользуясь постоянной шириной линии Δ . В результате, вместо силы осциллятора g_{if} из (1.6) будет изображаться квазисечение возбуждения дискретных уровней или линий

$$\sigma(\omega) = \frac{2\pi g_{if} \Delta}{c} \frac{1}{(\omega - \omega_{if})^2 + (\Delta/2)^2}. \quad (2.1)$$

Параметр Δ выбран для определённости равным 0.1 эВ. Ф-ла (2.1) подобна сечению возбуждения изолированного автоионизационного резонанса, которая следует из (1.50) при очень больших q и $\rho = 1$. В этом случае под $\Delta/2$ понимается Γ — ширина уровня на его полувысоте (1.49).

Напомним, что нашей целью является не возможно более точное теоретическое описание данных опыта по конкретному атому или иону, а проведение массовых расчётов в наилучшем, пригодном для такой цели приближении — ПСФО и в его различных обобщениях, и попутно демонстрация путём сравнения с результатами в приближении ХФ важности межэлектронных корреляций. Фактически, целью является создание нового исходного приближения, что стимулировало бы последующее проведение более точных измерений и необходимых для их интерпретации более сложных расчётов.

На самих рисунках результаты, полученные в приближении ХФ и ПСФО, обозначены в русском варианте в соответствии со своими английскими названиями HF (Hartree—Fock — Хартри—Фок) и RPAE (Random Phase Approximation with Exchange — приближение случайных фаз с обменом). Результаты представлены в формах «длины» и «скорости» (см. (1.13)), помеченных как ХФ-д, ХФ-с и ПСФО-д, ПСФО-с соответственно. Как правило, даже ранее полученные в рамках используемых здесь теоретических подходов и опубликованные ранее результаты специально пересчитывались для этой книги. Поэтому ссылка на них даётся не просто номером в списке литературы, к примеру [3], но указанием (см. [3]).

Для удобства читателя и последовательности изложения мы располагаем рассмотренные атомы и ионы в соответствии с Периодической системой элементов Менделеева, с тем только изменением, что начнём с атомов и некоторых ионов благородных газов.

Прокомментируем использованные подходы и рассмотренные объекты, имеющие определённую специфику. Начнём

с атомов с полузаполненными оболочками — Cr, Mn и Eu. Все они отличаются наличием относительно узкого мощного резонанса в сечении фотоионизации, который является результатом распада дискретного перехода на вакантный полузаполненный уровень в непрерывный спектр ионизации электрона занятого полузаполненного уровня. Соответствующий матричный элемент очень велик. В результате и ширина этого *гигантского автоионизационного резонанса* весьма велика. Этот резонанс определяет сечения во всех других подоболочках [1, 2],* существенно влияет на их угловые распределения и спиновую поляризацию фотоэлектронов.

Метод, развитый для рассмотрения атомов с полузаполненными оболочками, был применен недавно и к рассмотрению $3d$ -подоболочек Xe, Cs и Ba [3]. А именно, было предложено рассмотреть $3d_{5/2}$ - и $3d_{3/2}$ -уровни как «вверх», так и «вниз» компоненты $3d$ -подоболочки. Тогда взаимодействие между «вверх»- и «вниз»-электронами может быть легко учтено и описано, используя уравнения из п. 1.10. В уравнения ПСФО и при вычислении сечения фотоионизации следует ввести поправки, учитывающие, что уровни $5/2$ и $3/2$ имеют не равное число «вверх»- и «вниз»-электронов (по 5), а соответственно 6 и 4 электрона. Поэтому компоненты χ «вверх» и «вниз» в (1.93) приобретают множители $6/5$ и $4/5$ соответственно, равно как и сечения для «вверх»- и «вниз»-уровней.

Специальной группой атомов с полузаполненными оболочками являются атомы щелочных металлов, к примеру Li, Na, K и Cs. Их можно рассматривать и как атомы с незаполненными оболочками. Заметим, однако, что влияние внешнего валентного электрона на внутренний малó, так что не слишком важно, как рассматривать внешний электрон.

Полезно иметь в виду, что пороговый закон Вигнера (1.104) для отрицательных ионов справедлив, как оказалось, в столь узкой области частот, что в разумном масштабе рисунки выглядят так, как будто сечение имеет скачок на пороге.

Отметим, что с ионизацией одного электрона корреляции могут стать еще более сильными, чем в соседних нейтральных атомах. Однако с дальнейшим ростом заряда иона относительная роль корреляций становится меньше. Действительно, боль-

* В других главах эти и последующие ссылки даются с указанием номера гл. 2: так, ссылка [1] гл. 2 в других главах записывается как [2.1].

шая часть полной силы осциллятора данной подобоочки «перемещается» в его дискретные возбуждения, в то время как сечения поглощения фотона становятся меньше.

Мы приведём сечение фотоионизации ряда возбуждённых состояний атомов, которые могут рассматриваться в рамках представленных выше приближений, а именно приближение ХФ, ПСФО, ОПСФО и СП ПСФО. В принципе, указанные методики могут быть применены и к другим объектам. К примеру, можно было бы рассчитать сечение фотоионизации, равно как и силы осцилляторов в высоковозбужденных *спиновонасыщенных состояниях* (СНС), в которых все атомные электроны или по крайней мере те, которые принадлежат внешней оболочке, имеют ту же самую проекцию спина, таким образом формируя наиболее высокий возможный полный спин рассматриваемого атома.

Интерес к свойствам СНС определяется желанием понять возможное влияние полного изменения квантовых чисел занятых состояний на атомные свойства. По сравнению основными состояниями соответствующих атомов, СНС имеют значительно больше электронов, находящихся гораздо дальше от ядра, чем в основном состоянии. Поэтому в СНС роль межэлектронного взаимодействия значительно больше, а потому электронные корреляции становятся намного более сильными, чем в основных состояниях рассматриваемых атомов.

2.2. Атомы и ионы благородных газов

В этом разделе представлены результаты наших уже известных и новых вычислений полных и парциальных сечений фотоионизации, параметров дипольной и недипольной угловой анизотропии, параметров спиновой поляризации фотоэлектронов и сил осциллятора для атомов благородных газов и некоторых их ионов.

Вычисления были выполнены в одноэлектронном приближении ХФ и с учетом многоэлектронных корреляций в рамках ПСФО. В некоторых случаях для иллюстрации наши результаты сравниваются с экспериментальными данными. Если различие между ПСФО-д и ПСФО-с меньше 2 %, то на рисунках представлена только одна кривая. В некоторых случаях многоэлектронные эффекты рассчитаны используя ОПСФО (см. п. 1.6).

Атомы благородных газов рассмотрены особенно подробно. Конкретно, в этом разделе мы представляем наши результаты для внешней и промежуточных подоболочек атомов благородных газов He ($Z = 2$) $1s^2$; Ne ($Z = 10$) $1s^2, 2s^2, 2p^6$; Ar ($Z = 18$) $1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s^2, 3p^6$; Kr ($Z = 36$) $3s^2, 3p^6, 3d^{10}, 4s^2, 4p^6$; Xe ($Z = 54$) $3d^{10}, 4s^2, 4p^6, 4d^{10}, 5s^2, 5p^6$ и некоторых их ионов $\text{Ne}^{3+} 2s^2, 2p^3$; $\text{Kr}^{5+} 3d^{10}, 4s^2, 4p$; $\text{Xe}^+ 4d^{10}, 5s^2, 5p^5$; $\text{Xe}^{3+} 4d^{10}, 5s^2, 5p^3$; $\text{Xe}^{5+} 4d^{10}, 5s^2, 5p$; $\text{Xe}^{6+} 4d^{10}, 5s^2$.

Краткие комментарии к рисункам п. 2.2

Рисунки 2.2_He представляют данные по гелию (He).

Рис. 2.2_He_a1 (CD, 64) изображает сечение фотоионизации $\sigma_{1s}(\omega)$ He в приближении ХФ и ПСФО.

Различия в формах ХФ-д и ХФ-с малы, в то время как небольшая роль корреляций отражена в малом различии между результатами приближения ХФ и ПСФО. Согласие с экспериментальными данными [4] — в пределах заданной точности.

Рис. 2.2_He_e1 (CD, 65) изображает недипольный параметр $\gamma_{1s}(\omega)$ для He в приближении ХФ и ПСФО (см. [5]). Эта величина находится с помощью (1.125). Обращает внимание довольно быстрый рост у порога с последующим выходом на линейную зависимость.

Рис. 2.2_He_g1 (CD, 66) изображает дипольную поляризуемость $\alpha_{d1s}(\omega)$ для He в приближении ХФ и ПСФО.

Она положительна при нулевой частоте, быстро нарастает с приближением к энергии первого возбуждения, а за порогом ионизации в ПСФО всюду отрицательна и имеет минимум при энергии фотона в 2.5 Ry (см. [6]).

Рис. 2.2_He_g2 (CD, 66) приводит ток увлечения $1s$ -подоболочки атома He. Эта величина находится с помощью (1.127) (см. [7]). Приведен ток при потоке фотонов 10^{13} фот./ $(\text{с}\cdot\text{см}^2)$, легко достижимом на синхротронах и накопителях. Виден минимум при 6 Ry.

Рисунки 2.2_He* представляют данные по гелию в возбужденном состоянии (He^*).

Рис. 2.2_He*_a1 (CD, 67) изображает сечение фотоионизации $\sigma_{1s,2s}(\omega)$ в возбужденном состоянии $1s, 2s^3S_1$ He^* в приближении ХФ и СП ПСФО.

Рисунки 2.2_Ne включают все результаты вычислений для неона (Ne).

Рис. 2.2_Ne_a1 (CD, 67) представляет полное сечение $\sigma(\omega)$ для Ne в приближении ХФ и ПСФО. Здесь ПСФО-корреляции учтены во всех дипольных переходах $2p - n(\epsilon)d$, $2p - n(\epsilon)s$, $2s - n(\epsilon)p$ и $1s - n(\epsilon)p$. Роль $2p - n(\epsilon)d$ весьма значительна, но только при $\omega \leq 25 \text{ Ry}$. Влияние других переходов в этой области частот мало.

Рис. 2.2_Ne_b1 (CD, 68) представляет парциальное сечение фотоионизации $\sigma_{1s}(\omega)$ $1s$ -оболочки Ne в приближении ХФ-д, ХФ-с и ПСФО. Роль электронных корреляций очень мала.

Рис. 2.2_Ne_b2 (CD, 68) изображает парциальное сечение $\sigma_{2s}(\omega)$ $2s$ -подоболочки Ne в приближении ХФ и ПСФО. Здесь поправки ПСФО, главным образом из-за $2p - n(\epsilon)d$ перехода, велики при $\omega \leq 25 \text{ Ry}$.

Рис. 2.2_Ne_b3 (CD, 69) представляет сечение $\sigma_{2p}(\omega)$ $2p$ -подоболочки Ne, с учётом влияния (и без него) $2s$ подоболочки Ne.

Приведены результаты в приближении ХФ-д, ХФ-с и ПСФО. Заметим, что воздействие $2s$ - на $2p$ -подоболочку становится довольно важным при высоких частотах. В то же время с ростом ω влияние взаимодействия между самими $2p$ -электронами «затухает» весьма быстро. Важность межоболочечных поправок ПСФО при высоких энергиях фотона видна на вставке

Рис. 2.2_Ne_c1 (CD, 69) приводит отношение $\sigma_{2p}^{\text{ПСФО}}(\omega) / \sigma_{2p}^{\text{ХФ-с}}(\omega)$.

Для Ne в [8] было численно показано и на основе теоретического рассмотрения в [3] продемонстрировано как общее свойство сечений фотоионизации, что это отношение при высоких энергиях фотона ω должно достигнуть независимой от ω и отличной от единицы величины. Потенциалы ионизации в расчёте приняты равными $I_{2s, \text{эксп}} = 3.564 \text{ Ry}$, $I_{2p, \text{теор}} = 1.7 \text{ Ry}$, $I_{1s, \text{теор}} = 65.54 \text{ Ry}$. Порог $2s$ взят экспериментальным для более аккуратного учёта влияния $2p$ -электронов на $2s$ (см. [AM]).

Рис. 2.2_Ne_c2 (CD, 70) приводит отношения сечений $2s$ - и $2p$ -электронов с учётом ПСФО корреляций только $2p$ -, $(2p + 2s)$ - и $(2p + 2s + 1s)$ -электронов Ne.

Рис. 2.2_Ne_c3 (CD, 70) представляет отношение $\sigma_{2s}(\omega) / \sigma_{2p}(\omega)$ в различных приближениях с учётом ПСФО-корреляций только $2p$ -, $(2p + 2s)$ - и $(2p + 2s + 1s)$ -электронов Ne. Около порога $2s$ сечение значительно меньше сечения $2p$ -подоболочки. Заметим, что во всех приближениях это отношение начиная с $\omega \geq 40 \text{ Ry}$ становится больше единицы. Заметная вариация отно-

шения при $\omega \approx 40 \text{ Ry}$ есть результат действия $1s$ -оболочки на $\sigma_{2s}(\omega)$.

Рис. 2.2_Ne_d1 (CD, 71) изображает результаты расчёта дипольного параметра угловой анизотропии $\beta_{2p}(\omega)$ для $2p$ -электронов с учётом ПСФО корреляций только $2p$ -, $(2p + 2s)$ - и $(2p + 2s + 1s)$ -электронов. Видна существенная вариация этого параметра под влиянием $1s$ -электронов.

Рис. 2.2_Ne_e1 (CD, 71) представляет результаты расчёта недипольного параметра угловой анизотропии γ_{1s} $1s$ -электронов в Ne в приближении ХФ и ПСФО (см. [9]). В отличие от He появляется заметный минимум сразу за порогом.

Рис. 2.2_Ne_e2 (CD, 72) даёт результаты расчёта магической комбинации недипольных параметров $(\gamma^C + 3\delta^C)$ $2p$ -электронов в Ne в приближении ХФ и ПСФО (см. обсуждение (1.81)). Кривая как будто состоит из трёх линейных участков — около порога, до 600 эВ и далее.

Рис. 2.2_Ne_e3 (CD, 72) изображает результаты расчёта недипольного параметра угловой анизотропии γ_{2s} $2s$ -электронов в Ne в приближении ХФ и ПСФО. Параметр быстро меняется около порога, достигая максимума, проходит через минимум при 10 Ry и далее линейно нарастает.

Рис. 2.2_Ne_g1 (CD, 73) представляет ток увлечения $2p$ -подоболочки атома Ne в ПСФО, приведённый к единице потока фотонов W . Точки — параметр $\gamma_{2p}^C(\omega)$ (см. [3]).

Рис. 2.2_Ne_g2 (CD, 73) представляет ток увлечения $2s$ -подоболочки атома Ne в ПСФО, приведённый к единице потока фотонов W . Точки — параметр $\gamma_{2s}^C(\omega)$ (см. [3]). В отличие от $2p$ -подоболочки, имеется сильный максимум вблизи порога. Здесь, как и на предыдущем рисунке, обращает на себя внимание совпадение зависимостей от энергии фотона тока и недипольного параметра.

Рисунки 2.2_Ne³⁺ содержат результаты расчетов для иона Ne³⁺.

Рис. 2.2_Ne³⁺_a1 (CD, 74) изображает полное сечение фотоионизации иона Ne³⁺ от порога до 20 Ry в рамках СП ПСФО. «Частокол» максимумов — проявление дискретных возбуждений.

Рис. 2.2_Ne³⁺_a2 (CD, 74) изображает «квазисечения» дискретных линий возбуждения иона Ne³⁺ для частот от порога до 10 Ry. На врезках приведены интенсивности сравнительно слабых линий. Отметим, что этот ион есть объект с наружной полузаполненной оболочкой $2p^3$.

Рис. 2.2_Ne³⁺_d1 (CD, 75) представляет результаты расчёта дипольного параметра угловой анизотропии $\beta_{2p}(\omega)$ для $2p$ -электронов. Обращаем внимание на резкие вариации параметра вблизи дискретных линий.

Рисунки 2.2_Ar содержат результаты расчетов для аргона (Ar).

Рис. 2.2_Ar_a1 (CD, 75) представляет полное сечение фотоионизации Ar. Учтены ПСФО корреляции во всех дипольных переходах $3p - n(\epsilon)d$, $3p - n(\epsilon)s$, $3s - n(\epsilon)p$, $2p - n(\epsilon)d$, $2p - n(\epsilon)s$, $2s - n(\epsilon)p$ и $1s - n(\epsilon)p$. Рассмотренная область ω очень широка, приблизительно до 900 Ry. Роль канала $3p - n(\epsilon)d$ весьма внушительна, но лишь для значений ω , довольно близких к порогу $3p$ -подоболочки. Влияние других переходов в этой области частот мало.

Рис. 2.2_Ar_b1 (CD, 76) представляет результаты для $3p$ -подоболочки Ar с учётом и без учёта влияния ряда переходов, которые даются на рисунке. Замечено, что различие между $\sigma_{3p}^{\text{ПСФО}}(\omega)$ и $\sigma_{3p}^{\text{ХФ}}(\omega)$ сохраняется до весьма высоких ω , и там наиболее важным является влияние $3s$ - на $3p$ -подоболочку. Существенно, что с ростом ω влияние взаимодействия между самими электронами $3p$ «затухает» весьма быстро. Обратим внимание на небольшой максимум при 6 Ry.

Рис. 2.2_Ar_b2 (CD, 76) представляет сечение фотоионизации $3p$ -электронов вблизи порога. Видно большое отличие результатов в формах «длины» и «скорости» и большая роль ПСФО (см. [10]). Точки — эксперимент [11].

Рис. 2.2_Ar_b3 (CD, 77) представляет результаты для $3s$ -подоболочки Ar. Здесь поправки ПСФО, главным образом из-за влияния $3p - n(\epsilon)d$ -перехода, очень велики всюду, для $\omega \leq 25$ Ry. Из-за корреляций появляется второй, после порогового, максимум, при $\omega \approx 6$ Ry, называемый *интерференционным максимумом*. Перед ним, при $\omega \approx 3$ Ry, находится *интерференционный минимум*.

Рис. 2.2_Ar_b4 (CD, 77) изображает результаты для $3s$ -подоболочки Ar вблизи так называемого *интерференционного минимума*. Экспериментальные данные взяты из [12].

Важность поправок ПСФО, учитывающих взаимодействие электронов разных подоболочек при высоких энергиях фотона, иллюстрируется вставкой на Рис. 2.2_Ar_b2, где приводится отношение $\sigma_{3p}^{\text{ПСФО}}(\omega) / \sigma_{3p}^{\text{ХФ-с}}(\omega)$. В [13, 14] демонстрировалось, что это отношение при высоких ω должно достигнуть величины,

независимой от частоты и отличной от той, которая приведена на вставке, на Рис. 2.2_Ag_b3.

Рис. 2.2_Ag_b5 (CD, 78) представляет сечение фотоионизации $2p$ -электронов в приближении ХФ, ПСФО, ХФ с самосогласованным учётом $2p$ -вакансии (ОХФ) и в ОПСФО. Видно, что вблизи порога сечение в приближении ХФ и ПСФО имеет острый и узкий максимум, отсутствующий в ОХФ и ОПСФО. Роль ПСФО и ОПСФО корреляций (в сравнении с ХФ и ОХФ соответственно) невелика.

Рис. 2.2_Ag_b6 (CD, 78) приводит результаты для $1s$ -оболочки Ag в ОПСФО. Точки — данные эксперимента из [15]. Примечательно, что даже на пороге внутренней оболочки роль электронных корреляций, притом вне рамок ПСФО, велика и уменьшает сечение на пороге примерно в два раза.

Рис. 2.2_Ag_c1 (CD, 79) представляет относительную роль ОПСФО корреляций в сечении ионизации $3p$ -электронов. Взаимодействие электронов учтено в рамках ОПСФО, с экспериментальными значениями порогов ионизации $3p$ -, $3s$ -, $2p$ - и $2s$ -подоболочек.

Рис. 2.2_Ag_c2 (CD, 79) приводит отношение $\sigma_{3s}(\omega) / \sigma_{3p}(\omega)$, вычисленное в ОПСФО с учётом влияния различных подоболочек. Около порога $3s$ -сечение намного меньше сечения $3p$ -подоболочки. Видно, что во всех приближениях это отношение растёт довольно быстро, но не достигает таких больших значений, как $\sigma_{2s}(\omega) / \sigma_{2p}(\omega)$ в Ne.

Рис. 2.2_Ag_d1 (CD, 80) представляет результаты расчёта дипольного параметра угловой анизотропии $\beta_{3p}(\omega)$ в ОПСФО, в довольно широкой области частот ω с учётом влияния корреляций в различных переходах.

Рис. 2.2_Ag_d2 (CD, 80) демонстрирует важную роль ПСФО корреляций в $\beta_{3p}(\omega)$ в околороговой области, где для сравнения даны результаты в приближении ХФ-д, и данные эксперимента из [16, 17]. Параметр $\beta_{3p}(\omega)$ как функция ω имеет значительный максимум и глубокий минимум. Согласие с опытом хорошее.

Рис. 2.2_Ag_d3 (CD, 81) сопоставляет результаты расчётов дипольных параметров $\beta_{3p}(\omega)$ и $\beta_{2p}(\omega)$ в ОПСФО. Параметр $\beta_{3p}(\omega)$ имеет в сравнении с $\beta_{2p}(\omega)$ дополнительный максимум и небольшой минимум в окрестности порога I_{3p} .

Рис. 2.2_Ag_d4 (CD, 81) приводит результаты расчётов дипольных параметров $\beta_{2p}(\omega)$ в ПСФО и ОПСФО. В ОПСФО у порога исчезает минимум и параметр $\beta_{2p}(\omega)$ просто быстро растёт.

Рис. 2.2_Ag_e1 (CD, 82) представляет результаты расчёта недипольного параметра угловой анизотропии $\gamma_{3s}(\omega)$ $3s$ -электронов в довольно широкой области частот ω в приближении ХФ и с учётом корреляций в ПСФО. Параметр $\gamma_{3s}(\omega)$ имеет максимум при 5 эВ и минимум при 9 эВ.

Рис. 2.2_Ag_e2 (CD, 82) изображает магическую комбинацию (см. обсуждение (1.81)) недипольных параметров $3p$ -электронов Ag в приближении ХФ и ПСФО. Имеется весьма узкий максимум сравнительно близко к порогу ионизации атома.

Рис. 2.2_Ag_g1 (CD, 83) приводит вклад в дипольную поляризуемость Ag перехода $3p - \epsilon s$ в приближениях ХФ-д, ХФ-с и ПСФО (см. [6]). При нулевой энергии поляризуемость положительна, и заметно больше, чем в Ne. После порога ионизации она отрицательна и имеет минимум при 1.5 Ry.

Рис. 2.2_Ag_g2 (CD, 83) даёт вклад в дипольную поляризуемость Ag перехода $3p - \epsilon d$ в приближениях ХФ-д, ХФ-с и ПСФО. Поведение этого вклада подобно изображённому на Рис. 2.2_Ag_g1, а величина — в 5—10 раз больше по амплитуде.

Рисунки 2.2_Kr содержат результаты вычислений для криптона (Kr).

Рис. 2.2_Kr_a1 (CD, 84) представляет полное сечение фотоионизации Kr в приближениях ХФ-д, ХФ-с и ПСФО. Здесь ПСФО-корреляции включены во всех дипольных переходах $4p - n(\epsilon)d$, $4p - n(\epsilon)s$, $4s - n(\epsilon)p$, $3d - n(\epsilon)f$, $3d - n(\epsilon)p$, $3p - n(\epsilon)d$, $3p - n(\epsilon)s$ и $3s - n(\epsilon)p$. Рассмотренная область ω весьма широка, приблизительно до 120 Ry. Влияние перехода $4p - n(\epsilon)d$ внушительно, гораздо более сильно, чем перехода $3p - n(\epsilon)d$ в Ag, но по значениям ω сконцентрировано ближе к порогу $4p$ -подоболочки. Замечено, что из-за перехода $4p - n(\epsilon)d$ появляется второй минимум, при $\omega \approx 15$ Ry. Влияние других переходов в этой области частот мало.

Рис. 2.2_Kr_b1 (CD, 84) даёт результаты для $4p$ -подоболочки в ПСФО. Роль корреляций ПСФО велика. Виден большой максимум. При весьма значительной энергии фотона сечение имеет второй, однако, гораздо меньший максимум, на рисунке не приведенный.

Рис. 2.2_Kr_b2 (CD, 85) изображает результаты для $4s$ -подоболочки в ПСФО, где явно видны интерференционные минимум и максимум (см. обсуждение при (1.47)) (см. [18]).

Рис. 2.2_Kr_b3 (CD, 85) представляет сечение $3d$ -подоболочки Kr в приближениях ХФ-д, ХФ-с и ПСФО. ПСФО-по-

правки, главным образом из-за $3p - n(\epsilon)d$ -перехода, велики для $\omega \leq 70$ Ry. Виден переход к минимуму при $\omega = 110$ Ry.

Рис. 2.2_Kr_d1 (CD, 86) даёт результаты расчётов параметра угловой анизотропии $\beta_{4p}(\omega)$ и $\beta_{3d}(\omega)$ $4p$ и $3d$ -электронов. Роль корреляций ПСФО очень велика. Кривые подобны по форме и как будто просто сдвинуты по энергии целиком друг относительно друга.

Рис. 2.2_Kr_e1 (CD, 86) изображает недипольный параметр γ^C для $4s$ -электронов в приближении ХФ и ПСФО. Учёт корреляций в ПСФО приводит к появлению широкого максимума за порогом, за которым следует сравнительно узкий и глубокий минимум.

Рис. 2.2_Kr_e2 (CD, 87) представляет магическую комбинацию $(\gamma^C + 3\delta^C)$ (см. обсуждение (1.81)) недипольных параметров угловой анизотропии $4p$ -электронов в Kr в приближении ХФ и ПСФО. Зависимость параметра от энергии сложна, с тремя минимумами и максимумами.

Рисунки 2.2_Kr⁵⁺ содержат результаты вычислений для иона Kr⁵⁺.

Рис. 2.2_Kr⁵⁺_a1 (CD, 87) представляет полное сечение фотоионизации и квазисечения некоторых дискретных возбуждений иона Kr⁵⁺ в приближениях ХФ-д, ХФ-с и ПСФО.

Рис. 2.2_Kr⁵⁺_a2 (CD, 88) изображает дискретные уровни возбуждения иона Kr⁵⁺ в ПСФО.

Рис. 2.2_Kr⁵⁺_d1 (CD, 88) представляет результаты расчёта дипольного параметра угловой анизотропии $\beta_{4p}(\omega)$ $4p$ -электронов в ПСФО.

Рисунки 2.2_Хе содержат результаты вычислений для ксенона (Хе).

Рис. 2.2_Хе_a1 (см. с. 128) (CD, 89) представляет полное сечение Хе в приближениях ХФ-д, ХФ-с и ПСФО. Здесь включены корреляции ПСФО во всех дипольных переходах: $5p - n(\epsilon)d$, $5p - n(\epsilon)s$, $5s - n(\epsilon)p$, $4d - n(\epsilon)f$, $4d - n(\epsilon)p$, $4p - n(\epsilon)d$, $4p - n(\epsilon)s$, $4s - n(\epsilon)p$, $3d - n(\epsilon)f$ и $3d - n(\epsilon)p$. Рассмотренная область не слишком широка, приблизительно до 70 Ry. Роль перехода $5p - n(\epsilon)d$ весьма внушительна при значениях ω , сравнительно близких к порогу ионизации $5p$ -подоболочки. Влияние других переходов в этой области частоты мало. Сильные корреляции имеют место в диапазоне 5—12 Ry, где виден мощный максимум, так называемый гигантский резонанс.

Рис. 2.2_Хе_b1 (см. с. 129) (CD, 89) представляет результаты расчёта для $5p$ -подоболочки Хе в приближениях ХФ-д, ХФ-с и

ПСФО. Поправки ПСФО, главным образом влияние $5p - n(\epsilon)d$ -перехода, велики вплоть до $\omega \leq 25 \text{ Ry}$. Следствием влияния $4d - n(\epsilon)f$ -перехода является появление максимума при $\omega \approx 7 \text{ Ry}$, изображённого на вставке.

Рис. 2.2_Хе_b2 (см. с. 129) (CD, 90) представляет результаты для $5s$ - подоболочки, с учетом и без учёта влияния ряда переходов, которые даются на рисунке. Данные эксперимента взяты из [19, 20, 21].

Рис. 2.2_Хе_b3 (см. с. 130) (CD, 90) изображает результаты расчёта $4d$ -подоболочки в приближении ХФ и ПСФО. Виден второй максимум при $\omega \approx 22 \text{ Ry}$. На вставке дано отношение сечений в ПСФО и приближении ХФ. Видно, что роль корреляций заметна при всех рассмотренных ω .

Рис. 2.2_Хе_b4 (см. с. 130) (CD, 91) представляет результаты расчёта сечения фотоионизации $4d$ -подоболочки в приближении ХФ-д, ХФ-с и ПСФО в окрестности гигантского резонанса. Видно, что в ПСФО появляется дополнительный минимум при $\omega \approx 15 \text{ Ry}$ и максимум при $\omega \approx 20 \text{ Ry}$. На вставке показано отношение сечений в ПСФО и приближении ХФ, которое особо сильно отличается от единицы для $\omega \leq 40 \text{ Ry}$.

Рис. 2.2_Хе_b5 (см. с. 131) (CD, 91) изображает сечение однократной фотоионизации $4d$ -подоболочки в окрестности гигантского резонанса в приближениях ХФ-д, ХФ-с и ПСФО. Экспериментальные точки взяты из [22].

Рис. 2.2_Хе_b6 (см. с. 131) (CD, 92) даёт результаты для $4d$ -подоболочки в ПСФО и ОПСФО в широком диапазоне частот с учётом неупругого рассеяния фотоэлектрона на наружных оболочках иона-остатка. Эксперимент — из [23].

Рис. 2.2_Хе_b7 (см. с. 132) (CD, 92) изображает сечение фотоионизации $3d_{5/2}$ - и $3d_{3/2}$ -уровней в рамках в приближения ХФ и СП ПСФО [3]. Ясно виден второй максимум в сечении фотоионизации $5/2$ -электронов, вызванный воздействием на них электронов с уровня $3/2$, именуемый внутридублетным резонансом. Расчёт проведен на основе предположения, что $5/2$ - и $3/2$ -электроны могут рассматриваться как электроны «вверх» и «вниз» (см. разд. 1.10). Сечение может рассчитываться по ф-лам (1.96—1.99), с тем, однако, уточнением, что к членам «вверх» в (1.93) добавляется множитель $6/5$, а к членам «вниз» — множитель $4/5$, учитывающие реальное число электронов на уровнях $5/2$ и $3/2$ — 6 и 4 соответственно [24]. Данные эксперимента — из [25].

Заметим, что различие между $\sigma_{5p}^{\text{ПСФО}}(\omega)$ и $\sigma_{5p}^{\text{ХФ}}(\omega)$ сохраняется до весьма высоких ω , а там наиболее важно влияние $5s$ на $5p$. Существенно также, что с ростом ω влияние взаимодействия между самими $5p$ -электронами «затухает» весьма быстро.

Рис. 2.2_Хе_d1 (см. с. 132) (CD, 93) изображает результаты для параметра угловой анизотропии $\beta_{5p}(\omega)$ и $\beta_{4d}(\omega)$ в довольно широкой области частоты. Оба представлены осцилляцией, которая для $\beta_{4d}(\omega)$ несколько более сжата по энергии, чем для $\beta_{5p}(\omega)$.

Рис. 2.2_Хе_d2 (см. с. 133) (CD, 93) изображает параметр угловой анизотропии $\beta_{5p}(\omega)$ в приближении ХФ и ПСФО и демонстрирует значительнейшую роль ПСФО-корреляций в околопороговой области (см. [26]). Зависимость параметра $\beta_{5p}(\omega)$ от энергии фотона представлена осциллирующей кривой. ПСФО результаты хорошо согласуются с данными эксперимента из [27—30].

Рис. 2.2_Хе_d3 (см. с. 133) (CD, 94) изображает дипольные параметры угловой анизотропии $\beta_{3d_{5/2}}(\omega)$ и $\beta_{3d_{3/2}}(\omega)$ в СП ПСФО (см. [3]). На фоне мощной вариации виден, в виде малого максимума на кривой $\beta_{3d_{5/2}}(\omega)$, след влияния внутридублетного взаимодействия (см. обсуждение Рис. 2.2_Хе_b7).

Рис. 2.2_Хе_e1 (см. с. 134) (CD, 94) изображает магическую комбинацию недипольных параметров угловой анизотропии ($\gamma^C + 3\delta^C$) $5p$ -электронов Хе в приближении ХФ и ПСФО (см. [31]). Роль ПСФО-корреляций велика, особенно при малых энергиях фотоэлектронов.

Рис. 2.2_Хе_e2 (см. с. 134) (CD, 95) представляет недипольный параметр угловой анизотропии γ^C $5s$ -электронов Хе в приближении ХФ и ПСФО, вблизи порога ионизации. На вставке виден максимум, отражающий влияние $4d$ -подоболочки. Как и для $5p$ -электронов, роль ПСФО-корреляций велика.

Рис. 2.2_Хе_e3 (см. с. 135) (CD, 95) даёт недипольный параметр угловой анизотропии γ^C $5s$ -электронов Хе в приближении ХФ и ПСФО в значительном диапазоне частот фотонов. Существенно, что кривая в ПСФО хорошо согласуется с данными экспериментов [32], явно говоря в пользу точности ПСФО.

Рис. 2.2_Хе_e4 (см. с. 136) (CD, 96) приводит недипольные параметры угловой анизотропии γ^C , δ^C и их магическую комбинацию для $4d$ -электронов Хе в приближении ХФ и ПСФО. Роль ПСФО корреляций велика лишь при $\omega > 80$ эВ.

Рис. 2.2_Хе_e5 (см. с. 137) (CD, 97) представляет недипольные параметры угловой анизотропии γ^C , δ^C и их магические комбинации для $3d_{5/2}$ - и $3d_{3/2}$ -электронов Хе в приближении ХФ и СП ПСФО (см. [33]). Виден след внутридублетного резонанса (см. Рис. 2.2_Хе_b7).

Рис. 2.2_Хе_f1 (см. с. 138) (CD, 98) изображает параметры спиновой поляризации $A^i(\omega)$, $\zeta^i(\omega)$ и $\xi^i(\omega)$ $4d$ -электронов в ПСФО. Во всех зависимостях явно видны следы гигантского резонанса и следующего за ним значительно меньшего в сечении максимума при 12 Ry.

Рис. 2.2_Хе_f2 (см. с. 139) (CD, 99) представляет параметры спиновой поляризации $A^i(\omega)$, $\zeta^i(\omega)$ и $\xi^i(\omega)$ $3d_{5/2}$ - и $3d_{3/2}$ -электронов Хе в приближении ХФ и СП ПСФО (см. обсуждение Рис. 2.2_Хе_b7). Роль внутридублетных корреляций невелика.

Рис. 2.2_Хе_g1 (см. с. 140) (CD, 100) приводит сечение однократной фотоионизации в окрестности $4d$ -гигантского резонанса Хе в приближении ХФ и ПСФО (см. [34]). Точки — эксперимент [11].

Рис. 2.2_Хе_g2 (см. с. 140) (CD, 100) изображает токи увлечения в Хе в сопоставлении с токами увлечения в Ag и He (см. [7]).

Рисунки 2.2_Хе⁺ содержат результаты расчетов для иона Хе⁺.

Рис. 2.2_Хе⁺_a1 (CD, 101) представляет полное сечение фотоионизации иона Хе⁺ (*сплошная кривая 4* и вклады различных полных термов конечного состояния иона $^2S-1$, $^2P-2$, $^2D-3$) в приближении ХФ.

Рис. 2.2_Хе⁺_a2 (CD, 101) приводит полное сечение однократной фотоионизации иона Хе⁺ в ПСФОН. Дается вклад термов конечного состояния: 2D — *пунктир*, 2P — *штрихпунктир*, 2S — *штрих-штрихпунктир* и полное сечение — *сплошная линия* (см. [35]). Видно, что гигантский резонанс существенно изменён «частоколом» квазисечений дискретных возбуждений.

Рис. 2.2_Хе⁺_a3 (CD, 102) приводит полное сечение однократной фотоионизации иона Хе⁺ (см. [35]). Экспериментальные данные взяты из [36].

Рис. 2.2_Хе⁺_b1 (CD, 102) даёт сечение фотоионизации $5s$ -электронов в приближениях ХФ-д (*пунктир*), ХФ-с (*штрихпунктир*) и ПСФОН (с учётом $4d$ -подоболочки). Заметно отличие от случая Хе (см. Рис. 2.2_Хе_b2), проявляющееся в исчез-

новении интерференционного минимума и заметном усилении главного максимума.

Рис. 2.2_He⁺_b2 (CD, 103) приводит сечение фотоионизации 4d-электронов в приближениях ХФ-д (*пунктир*), ХФ-с (*штрихпунктир*) и ПСФОН (*сплошная линия*). Заметна асимметрия гигантского резонанса, отсутствующая в Хе (см. Рис. 2.2_He_b5).

Рисунки 2.2_He³⁺ содержат результаты расчетов для иона Хе³⁺.

Рис. 2.2_He³⁺_a1 (CD, 103) изображает квазисечение дискретных возбуждений иона и сечение фотоионизации Хе³⁺ в приближениях ХФ-д, ХФ-с и СП ПСФО. Видно, что гигантский резонанс существенно меньше, чем в нейтральном атоме, но вполне заметен.

Рис. 2.2_He³⁺_a2 (CD, 104) приводит квазисечение возбуждения дискретных уровней иона Хе³⁺ в области малых энергий фотона в диапазоне энергий от первого дискретного уровня до 40 эВ.

Рис. 2.2_He³⁺_a3 (CD, 104) приводит квазисечение возбуждения дискретных уровней иона Хе³⁺ в области малых энергий фотона в диапазоне энергий 40—55 эВ.

Рис. 2.2_He³⁺_d1 (CD, 105) представляет дипольный параметр $\beta(\omega)$ угловой анизотропии 5p-«вверх»-электронов (*сплошная линия*) и 4d-«вверх» (*пунктир*)- и 4d-«вниз» (*штрихпунктир*)-электронов Хе³⁺. Параметры представлены схожими по форме осциллирующими функциями.

Рисунки 2.2_He⁵⁺ содержат результаты расчетов для иона Хе⁵⁺.

Рис. 2.2_He⁵⁺_a1 (CD, 105) изображает полное сечение возбуждения дискретных уровней иона Хе⁵⁺ в приближении ХФ и ПСФОН. Видно, что гигантский резонанс целиком «съеден» дискретными возбуждениями.

Рис. 2.2_He⁵⁺_a2 (CD, 106) представляет квазисечение возбуждения дискретных уровней иона Хе⁵⁺ в приближении ХФ и ПСФОН при $\omega < 30$ эВ. На вставке приведены квазисечения для $35 < \omega < 75$ эВ.

Рис. 2.2_He⁵⁺_a3 (CD, 106) приводит квазисечение дискретных возбуждений иона Хе⁵⁺ в ПСФОН при $65 \text{ эВ} < \omega < 130 \text{ эВ}$.

Рис. 2.2_He⁵⁺_d1 (CD, 107) даёт дипольный параметр угловой анизотропии 5p-электронов (*сплошная линия*) и 4d-электронов (*пунктир*). Влияние дискретных возбуждений велико.

Рисунки 2.2_He⁶⁺ содержат результаты расчетов для иона Хе⁶⁺.

Рис. 2.2_Хе⁶⁺_a1 (CD, 107) изображает квазисечения возбуждения дискретных уровней иона Хе⁶⁺ в ПСФО.

Рис. 2.2_Хе⁶⁺_d1 (CD, 108) приводит дипольный параметр угловой анизотропии 4d-электронов.

Таблица к п. 2.2 (CD, 266) включает расчетные значения сил осцилляторов g_{if} в приближениях ХФ-д, ХФ-с, ПСФО-д-с (в некоторых случаях ОПСФО) нескольких самых низких дискретных уровней возбуждения и каждой рассмотренной подболочки атома этого раздела. В таблице даются также значения расчетных энергий перехода ω_{if} .

2.3. Атомы и ионы элементов I группы периодической системы

В этом разделе мы представляем наши результаты для внешней и промежуточных подболочек атомов и некоторых ионов элементов первой группы Периодической системы Менделеева, а именно: Li ($Z = 3$) $1s^2, 2s\uparrow$; Na ($Z = 11$) $1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s\uparrow$; K ($Z = 19$) $2s^2, 2p^6, 3s^2, 3p^6, 4s\uparrow$; Cu ($Z = 29$) $2p^6, 3s^2, 3p^6, 3d^{10}, 4s\uparrow$; Rb ($Z = 37$) $3p^6, 3d^{10}, 4s^2, 4p^6, 5s\uparrow$; Ag ($Z = 47$) $3d^{10}, 4s^2, 4p^6, 4d^{10}, 5s\uparrow$; Cs ($Z = 55$) $3d^{10}, 4s^2, 4p^6, 4d^{10}, 5s^2, 5p^6, 6s\uparrow$; Li⁺ $1s^2, 2s^2$; Na⁺ $1s^2, 2s^2, 2p^6$; K⁺ $2s^2, 2p^6, 3s^2, 3p^6, 4s^2$; Cu⁺ $2p^6, 3s^2, 2p^6, 3d^{10}$; Rb⁺ $3p^6, 3d^{10}, 4s^2, 4p^6$; Rb⁻ $3p^6, 3d^{10}, 4s^2, 4p^6, 5s^2$; Ag⁺ $3d^{10}, 4s^2, 4p^6, 4d^{10}$; Cs⁺ $3d^{10}, 4s^2, 4p^6, 4d^{10}, 5s^2, 5p^6$; Cs⁻ $3d^{10}, 4s^2, 4p^6, 4d^{10}, 5s^2, 5p^6, 6s^2$. Здесь $\uparrow$ обозначает «вверх»-электроны для СП ПСФО (см. п. 1.10).

Атомы элементов этой группы в качестве наружного имеют единственный s — электрон, т. е. полузаполненную подболочку, а потому мы их рассматриваем в рамках СП ПСФО (см. п. 1.10).

Формулы, с помощью которых получены данные, и обозначения на рисунках те же самые, что и для благородных газов в п. 2.1.

Краткие комментарии к рисункам п. 2.3

Рисунки 2.3_Li представляют данные по атому Li.

Рис. 2.3_Li_a1 (CD, 108) изображает полное сечение фотоионизации $\sigma(\omega)$ Li в приближениях ХФ-д, ХФ-с и ПСФО для $2s$ и $1s$ -подболочек.

Различия в формах ХФ-д и ХФ-с малы, в то время как небольшая роль корреляций отражена в сравнительно малом различии между результатами в приближении ХФ и СП ПСФО.

Рис. 2.3_Li_e1 (CD, 109) изображает недипольные параметры $\gamma_{1s}^C(\omega)$ и $\gamma_{2s}^C(\omega)$ для Li в приближении ХФ и ПСФО. На кривой $\gamma_{2s}^C(\omega)$ виден небольшой максимум при 50 эВ — след влияния 1s-подоболочки. Эта кривая имеет и небольшой минимум около самого порога.

Рисунки 2.3_Li⁺ представляет данные по иону Li⁺.

Рис. 2.3_Li_a1 (CD, 109) изображает полное сечение фотоионизации Li⁺ в приближениях ХФ-д, ХФ-с и ПСФО. Роль корреляций мала и сечение очень быстро убывает от порога.

Рисунки 2.3_Li⁻ представляет данные по иону Li⁻.

Рис. 2.3_Li_b1 (CD, 110) изображает полное сечение фотоионизации Li⁻ в приближении ХФ-д, ХФ-с и ПСФО. Сечение на пороге фотоионизации атома обращается ноль, достигая своего максимума на расстоянии 0.1—0.2 эВ за порогом.

Рис. 2.3_Li_b1 (CD, 110) представляет сечение фотоионизации 1s-электронов Li⁻ в ОПСФО (*сплошная линия*) (см. [37], [АИЧЧ]). Наличие одного особо слабосвязанного электрона делает учёт перестройки необходимым. Примечательно, что он оказывается и достаточным для достижения полуколичественного согласия с данными опыта. Эксперимент — *пустые квадраты* — из [38], *чёрные ромбы* — из [39].

Рис. 2.3_Li_e1 (CD, 111) представляет результаты расчёта γ_{1s}^C и γ_{2s}^C — недипольных параметров угловой анизотропии для 1s- и 2s-электронов в Li⁻ в приближении ХФ и ПСФО. Особо примечательна сильная вариация в γ_{2s}^C у порога.

Рис. 2.3_Li_e2 (CD, 111) приводит результаты расчёта γ_{1s}^C и γ_{2s}^C — недипольных параметров угловой анизотропии для 1s- и 2s-электронов в Li⁻ в приближении ХФ и ОПСФО. Особо велика роль ОПСФО в уменьшении параметра γ_{2s}^C вблизи резонанса, расположенного у порога.

Рис. 2.3_Li_e3 (CD, 112) сопоставляет недипольные параметры угловой анизотропии γ_{1s}^C для 2s-электронов Li⁻ (в приближении ХФ и ПСФО) и Li⁻ в приближении ХФ и с учётом перестройки — в ОПСФО.

Рис. 2.3_Li_e4 (CD, 112) приводит недипольные параметры угловой анизотропии γ_{1s}^C для 1s-электронов Li⁻ (в приближении ХФ и ПСФО) и Li (в приближении ХФ и СП ПСФО). В Li имеется минимум у порога 1s.

Рис. 2.3_Li⁻_e5 (CD, 113) сравнивает недипольные параметры угловой анизотропии γ_{2s}^C для $2s$ -электронов Li⁻ (в приближении ХФ и ПСФО) и Li (в приближении ХФ и СП ПСФО). Отчётливо виден след порога $1s$ -электронов.

Рис. 2.3_Li⁻_e6 (CD, 113) сравнивает недипольные параметры угловой анизотропии γ_{2s}^C $2s$ -электронов Li и Li⁻ в приближении ХФ, СП ПСФО для Li и в приближении ХФ и ПСФО для Li⁻.

Рисунки 2.3_Na включают все результаты вычислений для атома натрия (Na).

Рис. 2.3_Na_a1 (CD, 114) представляет полное сечение фотоионизации атома Na в приближениях ХФ-д, ХФ-с и СП ПСФО.

Корреляции учтены во всех дипольных переходах $3s - n(\epsilon)p$, $2p - n(\epsilon)d$, $2p - n(\epsilon)s$, $2s - n(\epsilon)p$ и $1s - n(\epsilon)p$. Роль $2p - n(\epsilon)d$ весьма значительна, но только при $\omega \leq 25$ Ry. Влияние других переходов в этой области частот мало, за исключением проявлений серии резонансов $2s - n(\epsilon)p$.

Рис. 2.3_Na_d1 (CD, 114) изображает дипольный параметр угловой анизотропии $\beta_{2p}(\omega)$ $2p^6$ -электронов Na в СП ПСФО. У порога параметр имеет узкий максимум.

Рисунки 2.3_Na⁺ включают все результаты вычислений для иона Na⁺.

Рис. 2.3_Na⁺_a1 (CD, 115) представляет полное сечение фотоионизации атома Na в приближениях ХФ-д, ХФ-с и ПСФО. Отчётливо виден максимум, с которого начинается сечение фотоионизации $1s$ -электронов.

Рис. 2.3_Na⁺_d1 (CD, 115) изображает дипольный параметр угловой анизотропии $\beta_{2p}(\omega)$ $2p^6$ -электронов иона Na⁺ в СП ПСФО.

Рисунки 2.3_Na⁻ включают все результаты вычислений для иона Na⁻.

Рис. 2.3_Na⁻_a1 (CD, 116) представляет полное сечение фотоионизации $\sigma(\omega)$ Na⁻ в приближениях ХФ-д, ХФ-с и ПСФО. Роль электронных корреляций при малых энергиях фотона велика. На вставке приведено и сечение фотоионизации $1s$ -электронов.

Рис. 2.3_Na⁻_d1 (CD, 116) представляет дипольный параметр угловой анизотропии $\beta_{2p}(\omega)$ для $2p$ -электронов иона Na⁻ в приближениях ХФ-д, ХФ-с и ПСФО. У порога имеется острый максимум с последующим глубоким минимумом.

Рисунки 2.3_K включают все результаты вычислений для атома калия (K).

Рис. 2.3_K_a1 (CD, 117) представляет полное сечение $\sigma(\omega)$ K в приближениях ХФ-д, ХФ-с и СП ПСФО. Виден максимум в сечении фотоионизации $3p$ -электронов и на вставке — максимум при 7 Ry от той же подоболочки, которому предшествует минимум Купера, обусловленный тем, что амплитуда фотоионизации в одноэлектронном приближении проходит через ноль.

Рис. 2.3_K_a2 (CD, 117) сравнивает результаты расчётов $\sigma_{3p}(\omega)$ атома K, выполненные в трёх различных подходах: ПСФО для незамкнутых оболочек (см. п. 1.10) — *сплошная линия*; ПСФО — *пунктир*; СП ПСФО — *штрихпунктир*. Согласие удовлетворительное.

Рис. 2.3_KK⁺K⁺_a3 (CD, 118) сравнивает результаты расчётов сечений фотоионизации атома K (приближение ХФ и СП ПСФО), K⁻ и K⁺ (ПСФО). Различие имеется и вблизи $2p$ -порога.

Рис. 2.3_K⁻AgCl⁻_a4 (CD, 118) сравнивает результаты расчётов сечений фотоионизации иона K⁻ (приближение ХФ и СП ПСФО), атома Ag и иона Cl⁻ (ПСФО). Отличия очень велики от порога до ~ 3.5 Ry, но сохраняются и далее.

Рис. 2.3_KK⁺Ag_dfl (CD, 119) представляет дипольные параметры угловой и спиновой анизотропии $3p$ -электронов Ag (в ПСФО), K (в СП ПСФО), K⁺ (в ПСФО). Спиновая анизотропия меняется вдоль рассмотренного ряда гораздо более существенно, чем угловая.

Рис. 2.3_K_d2 (CD, 120) изображает дипольные параметры угловой анизотропии $2p$ - и $3p$ -электронов атома K.

Рисунки 2.3_K⁺ включают все результаты вычислений для иона K⁺.

Рис. 2.3_K⁺_a1 (CD, 120) приводит полное сечение фотоионизации K⁺ в приближениях ХФ-д, ХФ-с, ПСФО. Учтены ПСФО-корреляции во всех дипольных переходах $3p - n(\epsilon)d$, $3p - n(\epsilon)s$, $3s - n(\epsilon)p$, $2p - n(\epsilon)d$, $2p - n(\epsilon)s$, $2s - n(\epsilon)p$. Рассмотренная область ω очень широка, приблизительно до 350 Ry. Роль канала $3p - n(\epsilon)d$ велика, но лишь для значений ω , довольно близких к порогу $3p$ -подоболочки. Влияние других переходов в этой области частот мало.

Рис. 2.3_K⁺_a2 (CD, 121) содержит результаты расчетов сечения фотоионизации иона K⁺ в ПСФО. Данные эксперимента: *пустые кружки* — из [40] и *зачернённые кружки* — из [41].

Рис. 2.3_K⁺_d1 (CD, 121) представляет результаты для параметров угловой $\beta_{2p, 3p}$ -анизотропии для $3p$ - и $2p$ -подоболочек K⁺ в ПСФО. *Сплошная линия* — $3p$ -подоболочка; *штрихпунктир* — $2p$ -подоболочка. Параметр β_{3p} имеет у порога узкий и значительный максимум со следующим за ним глубоким минимумом. При 300 эВ параметр β_{3p} имеет максимум, обусловленный влиянием $2p$ -электронов.

Рисунки 2.3_K⁻ включают все результаты вычислений для иона K⁻.

Рис. 2.3_K⁻_a1 (CD, 122) представляет полное сечение $\sigma(\omega)$ иона K⁻ в приближениях ХФ-д, ХФ-с и ПСФО. Роль корреляций велика. Сечение на пороге обращается в ноль, но очень быстро достигает максимума.

Рис. 2.3_K⁻_d1 (CD, 122) изображает параметры угловой $\beta_{2p, 3p}$ -анизотропии для $3p$ - и $2p$ -подоболочек K⁻ в приближении ХФ и ПСФО. *Сплошная линия* — $3p$ -подоболочка; *штрихпунктир* — $2p$ -подоболочка. Оба параметра у своих порогов быстро достигают максимума и затем имеют сравнительно узкий минимум.

Рисунки 2.3_Cu включают все результаты вычислений для атома меди (Cu).

Рис. 2.3_Cu_a1 (CD, 123) даёт сечение фотоионизации атома Cu в приближениях ХФ-д, ХФ-с и ПСФО. Видны проявления дискретных возбуждений внутренних подоболочек.

Рис. 2.3_Cu_d1 (CD, 123) приводит параметры угловой анизотропии $\beta_{3d, 3p}$ для $3d$ - и $3p$ -электронов Cu в СП ПСФО.

Рисунки 2.3_Cu⁺ включают все результаты вычислений для иона Cu⁺.

Рис. 2.3_Cu⁺_a1 (CD, 124) изображает полное сечение фотоионизации Cu⁺ в приближениях ХФ-д, ХФ-с и ПСФО.

Рис. 2.3_Cu⁺_d1 (CD, 124) приводит параметры угловой анизотропии $\beta_{2p, 3p, 3d}$ для $2p$ -, $3p$ - и $3d$ -электронов Cu⁺ в СП ПСФО. Для $\beta_{3p, 3d}$ характерны минимумы сразу за порогом подоболочки и сильная вариация вблизи $2p$ -порога.

Рисунки 2.3_Rb включают все результаты вычислений для атома рубидия (Rb).

Рис. 2.3_Rb_a1 (CD, 125) представляет результаты расчёта сечения фотоионизации атома в приближениях ХФ-д, ХФ-с и СП ПСФО. На вставке виден сильный широкий резонанс в сечении от $3d^{10}$ -электронов.

Рис. 2.3_Rb_d1 (CD, 125) даёт результаты расчёта дипольных параметров угловой анизотропии $\beta_{3d, 4p}(\omega)$ в СП ПСФО.

Рисунки 2.3_Rb⁺ включают все результаты вычислений для иона Rb⁺.

Рис. 2.3_Rb⁺_a1 (CD, 126) содержит результаты расчетов сечения фотоионизации иона Rb⁺ в приближениях ХФ-д, ХФ-с и ПСФО. Особо велико сечение на пороге 4p-подоболочки.

Рис. 2.3_Rb⁺_d1 (CD, 126) представляет результаты расчёта дипольных параметров угловой анизотропии $\beta_{3p, 3d, 4p}(\omega)$. Параметры $\beta_{3d, 4p}(\omega)$ имеют качественно подобные вариации около своих порогов — максимум с последующим минимумом.

Рисунки 2.3_Rb⁻ включают все результаты вычислений для иона Rb⁻.

Рис. 2.3_Rb⁻_a1 (CD, 127) содержит результаты расчета полного сечения фотоионизации иона Rb⁻ в приближениях ХФ-д, ХФ-с и ПСФО.

Рис. 2.3_Rb⁻_d1 (CD, 127) представляет результаты расчёта дипольных параметров угловой анизотропии $\beta_{3p, 4p}(\omega)$. Параметр для наружной оболочки растёт до максимума, который сменяется минимумом. Параметр $\beta_{3p}(\omega)$ от порога быстро убывает, достигая почти сразу минимума.

Рисунки 2.3_Ag включают все результаты вычислений для атома серебра (Ag).

Рис. 2.3_Ag_a1 (CD, 128) представляет полное сечение фотоионизации Ag в приближениях ХФ-д, ХФ-с и СП ПСФО. Первый максимум — это сечение фотоионизации 4d¹⁰-электронов. На его высокоэнергетическом склоне — набор узких максимумов — следы дискретных возбуждений 4p⁶. На вставке — второй, слабый, максимум, следующий за куперовским минимумом.

Рис. 2.3_Ag_d1 (CD, 128) представляет результаты расчёта дипольных параметров угловой анизотропии $\beta_{4d, 4p}(\omega)$ в СП ПСФО. Видно подобие кривых, причём $\beta_{4p}(\omega)$ выглядит как $\beta_{4d}(\omega)$, начинающаяся лишь от порога с большей энергией.

Рисунки 2.3_Ag⁺ включают все результаты вычислений для иона Ag⁺.

Рис. 2.3_Ag⁺_a1 (CD, 129) приводит результаты расчетов полного сечения фотоионизации иона Ag⁺ в приближениях ХФ-д, ХФ-с и ПСФО.

Рис. 2.3_Ag⁺_d1 (CD, 129) представляет результаты расчёта дипольных параметров угловой анизотропии $\beta_{4d, 4p, 3d}(\omega)$ для 4d-, 4p-, 3d-подоболочек в приближениях ХФ-д, ХФ-с и ОП ПСФО. Параметр $\beta_{4d}(\omega)$ — особо сложная функция, с тремя максимумами и минимумами, первый из которых — у самого порога.

Рисунки 2.3_Cs включают все результаты вычислений для атома цезия (Cs).

Рис. 2.3_Cs_a1 (CD, 130) представляет полное сечение фотоионизации Cs в приближениях ХФ-д, ХФ-с и СП ПСФО. Виден гигантский резонанс с максимумом при 7.5 Ry, сечение в котором особо сильно меняется при учёте ПСФО-корреляций.

Рис. 2.3_Cs_b1 (CD, 130) изображает сечение фотоионизации 4*d*-подоболочки атома Cs в приближении ХФ и ОПСФО. Видно, что отличие соответствующих кривых очень велико: при переходе к ОПСФО максимум смещается в сторону более высоких ω , расширяется и уменьшается по высоте примерно в 4 раза.

Рис. 2.3_Cs_b2 (CD, 131) изображает сечение фотоионизации 3*d*_{5/2}- и 3*d*_{3/2}-уровней в рамках приближения ХФ и СП ОПСФО (см. [3]). Ясно виден второй максимум в сечении фотоионизации 5/2-электронов, вызванный воздействием на них электронов с уровня 3/2, именуемый внутридублетным резонансом. Расчёт, как и для 3*d* Хе, проведен на основе предположения, что 5/2- и 3/2-электроны могут рассматриваться как электроны двух видов — «вверх» и «вниз» (см. п. 1.10). Сечение рассчитывается по ф-лам (1.96)—(1.99), с тем, однако, уточнением, что к членам «вверх» в (1.93) добавляется множитель 6/5, а к членам «вниз» — множитель 4/5, которые учитывают реальное число электронов на уровнях 5/2 и 3/2 — 6 и 4 соответственно [24]. Видно значительное усиление максимума в $\sigma_{3d, 5/2}$ по сравнению с аналогичным максимумом в Хе (см. Рис. 2.2_Xe_b7).

Рис. 2.3_Cs_d1 (CD, 131) приводит результаты расчёта дипольного параметра угловой анизотропии $\beta_{4d, 5p}(\omega)$ для 4*d*-, 5*p*-электронов в ПСФО, в широкой области частот ω . Кривые $\beta_{5p}(\omega)$ весьма сложные, с двумя максимумами и минимумами. Кривые $\beta_{4d}(\omega)$ для «вверх»- и «вниз»-электронов заметно отличаются в пороговой области.

Рис. 2.3_Cs_d2 (CD, 132) изображает результаты расчёта дипольного параметра угловой анизотропии $\beta_{4d}(\omega)$ для 4*d*-электронов в приближении ХФ и ОПСФО, в широкой области частот ω .

Рис. 2.3_Cs_d3 (CD, 132) представляет результаты расчёта дипольных параметров угловой анизотропии $\beta_{3d, 5/2; 3d, 3/2}(\omega)$ для 3*d*_{5/2}- и 3*d*_{3/2}-уровней в рамках приближения ХФ и СП ПСФО, по той же методике, что и парциальных сечений (см. Рис. 2.3_Cs_b2) (см. [42]). По сравнению с 3*d* Хе влияние уровня

$3d_{3/2}$ на $3d_{5/2}$ усиливается значительно, приводя к впечатляющему максимуму в $\beta_{3d, 5/2}(\omega)$ в отличие от случая Хе, изображённого на Рис. 2.2_Хе_d3.

Рис. 2.3_Cs_e1 (CD, 133) изображает недипольные параметры угловой анизотропии γ^C , δ^C и их магическую комбинацию ($\gamma^C + 3\delta^C$) для $4d$ -уровней Cs в приближении ХФ и ПСФО. Видны значительные максимумы, отражающие влияние $3/2$ - электронов на $5/2$ -электроны.

Рис. 2.3_Cs_e2 (CD, 134) изображает недипольные параметры угловой анизотропии γ^C , δ^C и их магическую комбинацию ($\gamma^C + 3\delta^C$) для $3d_{5/2}$ - и $3d_{3/2}$ -уровней Cs в приближении ХФ и СП ПСФО. Видны значительные максимумы, отражающие влияние $3/2$ -электронов на $5/2$ -электроны.

Рис. 2.3_Cs_f1 (CD, 135) представляет параметры спиновой поляризации фотоэлектронов $A^i(\omega)$, $\zeta^j(\omega)$ и $\xi^j(\omega)$ для $3d_{5/2}$ - и $3d_{3/2}$ -уровней Cs в приближении ХФ и СП ПСФО (см. обсуждение к Рис. 2.2_Хе_b7) (см. [43]). Видно сильное проявление влияния $3/2$ -уровня на $5/2$.

Рисунки 2.3_Cs⁺ включают все результаты вычислений для иона Cs⁺.

Рис. 2.3_Cs⁺_a1 (CD, 136) представляет полное сечение фотоионизации иона Cs⁺ в приближениях ХФ-д, ХФ-с и ПСФО. Виден гигантский резонанс $4d$ -подоболочки, где влияние корреляций велико.

Рис. 2.3_Cs⁺_d1 (CD, 136) представляет результаты расчёта дипольного параметра угловой анизотропии $\beta_{3d, 4p, 4d, 5p}(\omega)$ для $3d$ -, $4p$ -, $4d$ -, $4p$ -подоболочек в ПСФО, в широкой области частот ω .

Рисунки 2.3_Cs⁻ включают все результаты вычислений для иона Cs⁻.

Рис. 2.3_Cs⁻_a1 (CD, 137) представляет полное сечение фототрыва от иона Cs⁻ в приближениях ХФ-д, ХФ-с и ПСФО. Влияние ПСФО корреляций значительно.

Рис. 2.3_Cs⁻_d1 (CD, 137) изображает результаты расчётов дипольных параметров угловой анизотропии $\beta_{3d, 4p, 5p}(\omega)$ для $3d$ -, $4p$ -, $5p$ -подоболочек в ПСФО, в широкой области частот ω . Для $5p$ - и $3d$ -электронов характерен максимум вблизи порога с последующим минимумом, тогда как для $4p$ -электронов параметр β начинает сразу убывать, достигая минимума вблизи порога.

Таблица к п. 2.3 (CD, 270) включает расчетные значения сил осцилляторов g_{if} в приближениях ХФ-д, ХФ-с, ПСФО-д-с

(в некоторых случаях — ОПСФО) для нескольких самых низких дискретных уровней возбуждения каждой рассмотренной подболочки и всех атомов и ионов этого раздела. Таблица содержит также значения расчетных энергий перехода ω_{if} .

2.4. Атомы и ионы элементов II группы периодической системы

В этом разделе мы представляем наши результаты для внешней и промежуточных подболочек атомов и некоторых ионов элементов II группы Периодической системы элементов Менделеева, а именно: Be ($Z = 4$) $1s^2, 2s^2$; Mg ($Z = 12$) $1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s^2$; Ca ($Z = 20$) $2s^2, 2p^6, 3s^2, 3p^6, 4s^2$; Zn ($Z = 30$) $2p^6, 3s^2, 3p^6, 3d^{10}, 4s^2$; Sr ($Z = 38$) $3p^6, 3d^{10}, 4s^2, 4p^6, 5s^2$; Cd ($Z = 48$) $3d^{10}, 4s^2, 4p^6, 4d^{10}, 5s^2$; Ba ($Z = 56$) $3d^{10}, 4s^2, 4p^6, 4d^{10}, 5s^2, 5p^6, 6s^2$; $\text{Ca}^{2+} 2p^6, 3s^2, 3p^6$. Формулы, с помощью которых получены данные, и обозначения на рисунках те же самые, что и для благородных газов в п. 2.1.

Краткие комментарии к рисункам п. 2.4

Рисунки 2.4_Be представляют данные для атома бериллия (Be).

Рис. 2.4_Be_al (CD, 138) изображает полное сечение фотоионизации $\sigma(\omega)$ атома Be в приближениях ХФ-д, ХФ-с и ПСФО. Максимумы соответствуют фотоионизации $2s$ - и $1s$ -подболочек.

Различия в формах ХФ-д и ХФ-с малы, в то время как небольшая роль корреляций отражена в сравнительно малом различии между результатами приближения ХФ и ПСФО.

Рисунки 2.4_Mg содержат результаты вычислений для атома магния (Mg).

Рис. 2.4_Mg_al (CD, 138) изображает полное сечение фотоионизации атома Mg в приближениях ХФ-д, ХФ-с и ПСФО. При $\omega \approx 5 \text{ Ry}$ начинается вклад $2p^6$ -электронов, подобный наружной подболочке Ne. Электронная конфигурация Mg есть $[\text{Ne}]3s^2$.

Рис. 2.4_Mg_dl (CD, 139) изображает дипольный параметр угловой анизотропии $\beta_{2p}(\omega)$ для $2p^6$ -электронов атома Mg в СП ПСФО. Обращает внимание максимум с последующим глубоким минимумом вблизи порога.

Рисунки 2.4_Ca содержат результаты вычислений для атома кальция (Ca).

Рис. 2.4_Ca_a1 (CD, 139) изображает полное сечение фотоионизации атома Ca в приближениях ХФ-д, ХФ-с и ПСФО. Доминирует мощный, изрезанный следом дискретных возбуждений максимум, описывающий фотоионизацию $3p^6$ -электронов.

Рис. 2.4_Ca_d1 (CD, 140) представляет дипольный параметр угловой анизотропии $\beta_{3p}(\omega)$, $\beta_{2p}(\omega)$ для $3p^6$ - и $2p^6$ -электронов иона Ca в СП ПСФО. Сильны вариации параметра $\beta_{3p}(\omega)$ вблизи своего порога и вблизи порога $2p$ -подоболочки.

Рисунки 2.4_Ca²⁺ содержат результаты вычислений для Ca²⁺.

Рис. 2.4_Ca²⁺_a1 (CD, 140) изображает полное сечение фотоионизации иона Ca²⁺ в ПСФО. Расчёт в рамках другого подхода, R-матрицы, взят из [44].

Рис. 2.4_Ca²⁺_d1 (CD, 141) даёт дипольный параметр угловой анизотропии $\beta_{3p}(\omega)$ для $3p$ -электронов иона Ca²⁺ в СП ПСФО. Параметр быстро убывает за порогом и достигает глубокого минимума.

Рисунки 2.4_Zn содержат результаты вычислений для атома цинка (Zn).

Рис. 2.4_Zn_a1 (CD, 141) изображает полное сечение фотоионизации атома Zn в приближениях ХФ-д, ХФ-с и ПСФО. В сечении доминирует максимум от $3d^{10}$ -электронов. Электронная структура Zn — [Ar] $3d^{10} 4s^2$.

Рис. 2.4_Zn_d1 (CD, 142) представляет дипольные параметры угловой анизотропии $\beta_{2p, 3p, 3d}(\omega)$ для $2p$ -, $3p$ - и $3d$ -электронов иона Zn в СП ПСФО. Особо сложная кривая — $\beta_{3d}(\omega)$.

Рисунки 2.4_Sr содержат результаты вычислений для атома стронция (Sr).

Рис. 2.4_Sr_a1 (CD, 142) приводит полное сечение фотоионизации атома Sr в приближениях ХФ-д, ХФ-с и ПСФО. Обращает внимание максимум при 20 эВ, который есть следствие взаимодействия дискретных уровней возбуждения $4p$ -электронов со сплошным спектром ионизации $5s$ -электронов.

Рис. 2.4_Sr_d1 (CD, 143) изображает дипольные параметры угловой анизотропии $\beta_{4p, 3d, 3p}(\omega)$ для $4p$ -, $3d$ -, $3p$ -электронов Sr в ПСФО. Кривые $\beta_{4p}(\omega)$ и $\beta_{3p}(\omega)$ подобны, просто сжаты по ω .

Рисунки 2.4_Cd содержат результаты вычислений для атома кадмия (Cd).

Рис. 2.4_Cd_a1 (CD, 143) изображает полное сечение фотоионизации атома Cd в приближениях ХФ-д, ХФ-с и ПСФО. Виден мощный, сдвинутый за порог ионизации максимум в сечении $4d$ -электронов.

Рис. 2.4_Cd_d1 (CD, 144) изображает дипольные параметры угловой анизотропии $\beta_{4p, 3d, 3p}(\omega)$ для $4p$ -, $3d$ -, $3p$ -электронов Cd в СП ПСФО. Структура кривых подобна изображённой на Рис. 2.4_Sr_d1.

Рисунки 2.4_Ba содержат результаты вычислений для атома бария (Ba).

Рис. 2.4_Ba_a1 (CD, 144) приводит полное сечение фотоионизации атома Ba в приближениях ХФ-д, ХФ-с и ПСФО. Выделяется мощный гигантский резонанс при $\omega \approx 8.3 \text{ Ry}$.

Рис. 2.4_Ba_b1 (CD, 145) изображает сечение фотоионизации $4d$ -электронов Ba в ПСФО и ОПСФО. Данная подболочка определяет гигантский резонанс при $\omega \approx 8.3 \text{ Ry}$. Данные эксперимента взяты из [45].

Рис. 2.4_Ba_b2 (CD, 145) изображает сечение фотоионизации $3d_{5/2}$ - и $3d_{3/2}$ -уровней в СП ХФ и СП ПСФО (см. [3]). Ясно виден второй максимум в сечении фотоионизации $5/2$ -электронов, вызванный воздействием на них электронов с уровня $3/2$, именуемый внутридублетным резонансом. По высоте он значительно больше аналогичного внутридублетного резонанса в Cs (Рис. 2.3_Cs_b2) и тем более в Xe (Рис. 2.2_Xe_b7). Расчёт, как и для $3d$ Xe, проведен на основе предположения, что $5/2$ - и $3/2$ -электроны могут рассматриваться как электроны «вверх» и «вниз» (см. п. 1.10). Сечение рассчитывается по ф-лам (1.96)—(1.99), с тем, однако, уточнением, что к членам «вверх» в (1.93) добавляется множитель $6/5$, а к членам «вниз» — множитель $4/5$, которые учитывают реальное число электронов на уровнях $5/2$ и $3/2$ — 6 и 4 соответственно [23].

Рис. 2.4_Ba_d1 (CD, 146) даёт дипольные параметры угловой анизотропии $\beta(\omega)$ для $5p$ -, $4d$ -, $4p$ -, $3d$ -электронов Ba в СП ПСФО. Качественно кривые напоминают Рис. 2.4_Cd_d1.

Рис. 2.4_Ba_d2 (CD, 146) приводит дипольные параметры угловой анизотропии $\beta_{3d, 5/2; 3d, 3/2}(\omega)$ для $5/2$ - и $3/2$ -электронов Ba в приближении ХФ и СП ПСФО. Видно сильное влияние $3/2$ -электронов на параметр угловой анизотропии $5/2$ -электронов (см. [42]).

Рис. 2.4_Ba_e1 (CD, 147) приводит недиольный параметр угловой анизотропии $\gamma_{4d}^c(\omega)$ для $4d$ -электронов Ba в ХФ и СП ПСФО. Влияние корреляций велико.

Рис. 2.4_Ba_e2 (CD, 147) изображает недипольный параметр угловой анизотропии $\delta_{4d}^C(\omega)$ для $4d$ -электронов Ba в приближении ХФ и ПСФО. Видно сильное влияние корреляций.

Рис. 2.4_Ba_e3 (CD, 148) даёт магическую комбинацию недипольных параметров угловой анизотропии $(\gamma_{4d}^C + 3\delta_{4d}^C)$ $4d$ -электронов Ba в приближении ХФ и ПСФО. Влияние корреляций велико. В ПСФО появляется дополнительный максимум при $\omega \approx 92$ эВ.

Рис. 2.4_Ba_e4 (CD, 148) представляет недипольный параметр угловой анизотропии $\gamma_{3d, 5/2; 3d, 3/2}^C(\omega)$ для $3d_{5/2}$ - и $3d_{3/2}$ -электронов Ba в приближении ХФ и ПСФО (см. [31]). Весьма заметно влияние $3/2$ -электронов на электроны $5/2$.

Рис. 2.4_Ba_e5 (CD, 149) изображает недипольный параметр угловой анизотропии $\delta_{3d, 5/2; 3d, 3/2}^C(\omega)$ для $3d_{5/2}$ - и $3d_{3/2}$ -электронов Ba в приближении ХФ и СП ПСФО (см. [31]). Воздействие электронов $3/2$ на $5/2$ приводит к заметному максимуму.

Рис. 2.4_Ba_e6 (CD, 149) даёт магическую комбинацию недипольных параметров угловой анизотропии $(\gamma_{4d}^C + 3\delta_{4d}^C)$ для $3d_{5/2}$ - и $3d_{3/2}$ -электронов Ba в приближении ХФ и СП ПСФО (см. [31]). Влияние корреляций весьма велико.

Рис. 2.2_Ba_f1 (CD, 150) изображает параметры спиновой поляризации $A^i(\omega)$, $\zeta^j(\omega)$ и $\xi^j(\omega)$ для $3d_{5/2}$ - и $3d_{3/2}$ -электронов в ПСФО (см. [43]). Всюду видно влияние $3/2$ -электронов на характеристики $5/2$.

Рисунки 2.4_Ba* содержат результаты вычислений для атома бария в возбужденном состоянии (Ba*) с внешней подоболочкой $7s^2$, $8s^2$, $9s^2$.

Рис. 2.4_Ba*_a3 (CD, 151) приводит полное сечение фотоионизации атома Ba* с заполненной внешней подоболочкой уровней $7s^2$, $8s^2$, $9s^2$ в приближениях ХФ-д, ХФ-с и ПСФО. Видно смещение гигантского резонанса в сторону меньших ω при переходе от $7s^2$ к $9s^2$ и значительное усиление дискретных переходов $4d \rightarrow 6p$, $7p$, $8p$.

Рис. 2.4_Ba*_d1 (CD, 151) изображает дипольные параметры угловой анизотропии $\beta_{5p}(\omega)$ для возбуждённых состояний $7s^2$, $8s^2$, $9s^2$ Ba* в СП ПСФО. Все кривые близки друг к другу.

Рис. 2.4_Ba*_d2 (CD, 152) приводит дипольные параметры угловой анизотропии $\beta_{4d}(\omega)$ для возбуждённых состояний $7s^2$, $8s^2$, $9s^2$ Ba* в СП ПСФО. Все кривые близки друг к другу.

Таблица к п. 2.4 (CD, 280) включает расчетные значения сил осцилляторов g_{if} в приближениях ХФ-д, ХФ-с, ПСФО-д-с

(в некоторых случаях ОПСФО) для нескольких самых низких дискретных уровней возбуждения и всех рассмотренных подоболочек атомов этого раздела. Таблица содержит также значения расчетных энергий перехода ω_{ij} .

2.5. Атомы и ионы элементов III группы периодической системы

В этом разделе мы представляем наши результаты для внешней и промежуточных подоболочек ионов и некоторых атомов элементов III группы. Мы сконцентрировались в основном на ионах, имеющих все заполненные или одну полузаполненную подоболочки, а именно: В ($Z = 5$) $1s^2, 2s^2, 2p$; В* ($Z = 5$) $1s\uparrow, 2s\uparrow, 2p^3\uparrow$, В⁺ ($Z = 5$) $1s^2, 2s^2$; Al⁺ ($Z = 13$) $2s^2, 2p^6, 3s^2$; Sc³⁺ ($Z = 21$) $2p^6, 3s^2, 3p^6$; In⁺ ($Z = 49$) $3d^{10}, 4s^2, 4p^6, 4d^{10}, 5s^2$; La ($Z = 57$) $4d^{10}, 5s^2, 5p^6, 5d, 6s^2$; Eu ($Z = 63$) $3d^{10}, 4d^{10}, 5s^2, 5p^6, 4f^7\uparrow, 5d, 6s^2$; Eu⁺ $3d^{10}, 4d^{10}, 5s^2, 5p^6, 4f^7\uparrow, 6s^2$; Eu²⁺ $3d^{10}, 4d^{10}, 5s^2, 5p^6, 4f^7\uparrow, 6s$. Формулы, с помощью которых получены данные, и обозначения на рисунках те же самые, что и для благородных газов, и приведены в п. 2.1. Здесь стрелка $\uparrow$ обозначает «вверх»-электроны для СП ПСФО (см. п. 1.10).

Рисунки 2.5_В представляет данные для атома бора (В).

Рис. 2.5_BB*_a1 (CD, 152) сопоставляет полные сечения фотоионизации атомов В и В*, рассчитанные в ПСФОН и ПСФО. Интерес к данному возбужденному состоянию В* обусловлен тем, что оно не может распасться вследствие электронных переходов без переворота спина. Сохраняющие спин переходы запрещены принципом Паули.

Рисунки 2.5_В* представляют данные для атома бора в возбужденном состоянии (В*).

Рис. 2.5_В*_a1 (CD, 153) приводит полное сечение фотоионизации атома В* в приближениях ХФ-д, ХФ-с и СП ПСФО. Первый максимум относится к $2p^3\uparrow$ -электронам, а второй — к электрону $2s\uparrow$.

Рис. 2.5_В*_d1 (CD, 153) изображает дипольный параметр угловой анизотропии $\beta_{2p}(\omega)$ для $2p$ -электронов В* в приближениях ХФ-д, ХФ-с и СП ПСФО. Параметр быстро нарастает от порога и затем меняется мало.

Рисунки 2.5_В⁺ представляют данные для иона В⁺.

Рис. 2.5_V⁺_a1 (CD, 154) приводит полное сечение фотоионизации иона В⁺ в приближениях ХФ-д, ХФ-с и ПСФО. Вторым максимумом изображает сечение для 1s²-электронов.

Рисунки 2.5_Al⁺ представляют данные для иона Al⁺.

Рис. 2.5_Al⁺_a1 (CD, 154) изображает полное сечение фотоионизации иона Al⁺ в приближениях ХФ-д, ХФ-с и ПСФО. Доминирует 2p⁶-переход.

Рис. 2.5_Al⁺_d1 (CD, 155) приводит дипольный параметр угловой анизотропии $\beta_{2p}(\omega)$ для 2p-электронов иона Al⁺ в приближении ХФ и ПСФО. Параметр растёт от порога и быстро достигает насыщения.

Рисунки 2.5_Sc³⁺ представляют данные для иона Sc³⁺.

Рис. 2.5_Sc³⁺_a1 (CD, 155) изображает полное сечение фотоионизации иона Sc³⁺ в ПСФО. Изучена в качестве примера область автоионизационных резонансов. Данные по расчёту методом R-матрицы взяты из [43].

Рис. 2.5_Sc³⁺Ca²⁺K⁺_a2 (CD, 156) сравнивает полные сечения фотоионизации ионов Sc³⁺, Ca²⁺ и K⁺ в ПСФО. Начиная с $\omega \approx 4.5$ Ry все сечения по величине близки. Сечение Sc³⁺ отличается серией резонансов — следов дискретных возбуждений.

Рис. 2.5_Sc³⁺Ca²⁺K⁺Ar_b1 (CD, 156) сопоставляет сечения фотоионизации 3s-электронов Sc³⁺, Ca²⁺, K⁺ и Ar в ПСФО. Кривые начиная с $\omega \approx 4.5$ Ry подобны.

Рис. 2.5_Sc³⁺_d1 (CD, 157) приводит дипольный параметр угловой анизотропии $\beta_{3p}(\omega)$ для 3p-электронов Sc³⁺ в приближениях ХФ-д, ХФ-с и ПСФО. Параметр быстро возрастает от порога и вскоре насыщается.

Рисунки 2.5_In⁺ содержат результаты вычислений для иона In⁺.

Рис. 2.5_In⁺_a1 (CD, 157) изображает полное сечение фотоионизации In⁺ в приближениях ХФ-д, ХФ-с и ПСФО. В сечении доминирует гигантский резонанс 4d¹⁰-подоболочки.

Рис. 2.5_In⁺_d1 (CD, 158) представляет дипольные параметры угловой анизотропии $\beta_{4d, 4p, 3d}(\omega)$ для 4d-, 4p-, 3d-электронов иона In⁺ в ПСФО. Наиболее сложен $\beta_{4d}(\omega)$ с его двумя глубокими минимумами и небольшим максимумом, обусловленным влиянием 3d-электронов. Параметры $\beta_{4d}(\omega)$ и $\beta_{4p}(\omega)$ начиная со 100 эВ близки.

Рисунки 2.5_La содержат результаты вычислений для атома лантана (La).

Рис. 2.5_La_b1 (CD, 158) изображает сечение фотоионизации 4d-электронов атома La в ПСФО и ОПСФО (см. [46, 47]). Данные эксперимента --- см. из [45]).

Рисунки 2.5_Eu содержат результаты вычислений для атома европия (Eu).

Рис. 2.5_Eu_b1 (CD, 159) приводит сечения фотоионизации $4f$ -«вверх»- и $5p$ -«вверх»- и «вниз»-электронов Eu в СП ПСФО (см. [48, 49]). Данные эксперимента взяты из [50] и [51].

Важно заметить, что экспериментальные сечения фотопоглощения $\sigma(\omega)$ на пути от La к Eu в области $4d$ -порога имеют большой и почти одинаковый максимум. Хотя по виду эти резонансы похожи, их природа в различных атомах полностью различна: в I, Cs, Ba — это гигантский резонанс, который «распадается» испуская электроны относительно низких энергий вследствие $4d \rightarrow \epsilon f'(\epsilon p)$ -перехода, а в Eu — это *гигантский автоионизационный резонанс*, созданный взаимодействием дискретного возбуждения $4d \downarrow \rightarrow 4f \downarrow$ в полупустую $4f \downarrow$ -подоболочку, которая распадается очень быстро в непрерывный спектр $4f \uparrow \rightarrow \epsilon g(\epsilon d) \uparrow$ с эмиссией быстрых фотоэлектронов. Эта особенность была предсказана в [52, 2].

Матричный элемент взаимодействия дискретного возбуждения со сплошным спектром велик вследствие близости волновых функций занятого $4f$ -«вверх»- и свободного $4f$ -«вниз»-состояний. Сечение в окрестности резонанса описывается непосредственно формулами СП ПСФО, тогда как вблизи нормального автоионизационного резонанса сечение описывается (1.50).

Рис. 2.5_Eu_b2 (CD, 159) приводит сечения фотоионизации $4f \uparrow$ -электронов Eu (см. [49]).

Рис. 2.5_Eu_b3 (CD, 160) приводит сечения фотоионизации $5s$ -«вверх»- и «вниз»-электронов Eu, Eu^+ , Eu^{2+} в СП ПСФО (см. [49]).

Рис. 2.5_Eu_d1 (CD, 160) изображает дипольные параметры угловой анизотропии $\beta_{4d, 4f, 5p}(\omega)$ для $4d$ -, $4f$ -, $5p$ -электронов атома Eu в ПСФО. Все кривые — осциллирующие.

Рис. 2.5_Eu_e1 (CD, 161) представляет недипольные параметры угловой анизотропии $6s$ -электронов атома Eu в приближении ХФ и СП ПСФО.

Рис. 2.5_Eu_f1 (CD, 162) даёт дипольные параметры $4f$ -электронов Eu: а) угловой анизотропии $\beta_{4f}(\omega)$ и спиновой поляризации: б) $A_{4f}^{7/2}(\omega)$, в) $\alpha_{4f}^{7/2}(\omega)$, г) $\xi_{4f}^{7/2}(\omega)$.

Рисунки 2.5_Eu⁺ содержат результаты вычислений для иона Eu^+ .

Рис. 2.5_Eu⁺_a1 (CD, 163) приводит полное сечение фотоионизации иона Eu^+ в СП ПСФО (см. [49]). Эксперимент — из [53].

Рис. 2.5_Eu⁺_b1 (CD, 163) изображает сечение фотоионизации $5p$ -электронов Eu^+ в СП ПСФО. Виден максимум, связанный с распадом дискретного возбуждения $4d\uparrow \rightarrow 4f$ в сплошной спектр ионизации $5p$ -электронов.

Рис. 2.5_Eu⁺_b2 (CD, 164) представляет сечение фотоионизации $4d$ -электронов Eu^+ в СП ПСФО-д и СП ПСФО-с. Сечение это весьма сложно по форме, но мало.

Рис. 2.5_Eu⁺_b3 (CD, 164) даёт сечение фотоионизации $4f$ -электронов Eu^+ в СП ПСФО, которое мало отличается от аналогичного сечения нейтрального атома.

Рис. 2.5_Eu⁺_d1 (CD, 165) изображает дипольный параметр угловой анизотропии $5p$ -«вверх»- и «вниз»- и $4f$ -«вверх»-электронов иона Eu^+ в СП ПСФО. Все кривые имеют максимумы на пороге, почти общий минимум, с последующим выходом на насыщение. Там, однако, $\beta_{4d\uparrow}$ гораздо меньше двух других.

Рис. 2.5_Eu⁺_d2 (CD, 165) приводит дипольный параметр угловой анизотропии $4d$ -«вверх»- и «вниз»-электронов иона Eu^+ в СП ПСФО.

Рисунки 2.5_Eu²⁺ содержат результаты вычислений для иона Eu^{2+} .

Рис. 2.5_Eu²⁺_a1 (CD, 166) изображает сечение фотоионизации иона Eu^{2+} в окрестности $4d$ -оболочки в СП ПСФО-д и СП ПСФО-с. От нейтрального Eu отличие составит лишь в большей интенсивности дискретных переходов.

Рис. 2.5_Eu²⁺_b1 (CD, 166) представляет сечение фотоионизации $5s$ -«вверх»- и «вниз»-электронов иона Eu^{2+} в СП ПСФО. Отличие от нейтрального атома, как и на предыдущем рисунке, невелико.

Рис. 2.5_Eu²⁺_b2 (CD, 167) приводит сечение фотоионизации $5p$ -«вверх»- и «вниз»-электронов иона Eu^{2+} в СП ПСФО. Данное сечение близко к аналогичной величине для Eu^+ .

Рис. 2.5_Eu²⁺_b3 (CD, 167) представляет сечение фотоионизации $4d$ -электронов иона Eu^{2+} в СП ПСФО. В нём доминируют дискретные возбуждения.

Рис. 2.5_Eu²⁺_b4 (CD, 168) изображает сечение фотоионизации $4f$ -«вверх»-электронов иона Eu^{2+} в СП ПСФО. Сравнение с Рис. 2.5_Eu²⁺_a1 показывает, что ионизация $4f$ даёт главный вклад в полное сечение.

Рис. 2.5_Eu²⁺_d1 (CD, 168) представляет дипольный параметр угловой анизотропии $4f$ -«вверх»- и $5p$ -«вверх» и «вниз»-электронов иона Eu^{2+} . В основных чертах да и по абсолют-

ным величинам эти параметры близки к изображённым на Рис. 2.5_Eu⁺_d1.

Рис. 2.5_Eu²⁺_d2 (CD, 169) приводит дипольный параметр угловой анизотропии 4d-«вверх»- и «вниз»-электронов иона Eu²⁺. Кривые весьма близки друг к другу, за исключением дополнительного максимума при 180 эВ в β_{4d1} .

Таблица к п. 2.5 (CD, 285) включает расчетные значения сил осцилляторов g_{if} в приближениях ХФ-д, ХФ-с, ПСФО-д-с (в некоторых случаях — ОПСФО) для нескольких самых низких дискретных уровней возбуждения всех рассмотренных подболочек каждого атома и иона этого раздела. Таблица даст также значения расчетных энергий перехода ω_{if} .

2.6. Атомы и ионы элементов IV группы периодической системы

В этом разделе мы представляем наши результаты для внешней и промежуточных подболочек ионов и некоторых атомов элементов IV группы. Здесь мы сконцентрировались в основном на ионах, имеющих все заполненные или одну полузаполненную подболочку, а именно: C* ($Z = 6$) $1s^2, 2s^1, 2p^3^{\uparrow}$; C⁻ ($Z = 6$) $1s^2, 2s^2, 2p^3^{\uparrow}$; Si* ($Z = 14$) $2s^2, 2p^6, 3s^1, 3p^3^{\uparrow}$; Si⁻ ($Z = 14$) $2s^2, 2p^6, 3s^2, 3p^3^{\uparrow}$; Ge⁻ ($Z = 32$) $2p^6, 3s^2, 3p^6, 3d^{10}, 4s^2, 4p^3^{\uparrow}$. Формулы, с помощью которых получены данные, и обозначения на рисунках те же самые, что и для благородных газов, и приведены в п. 2.1.

Здесь $\uparrow$ обозначает «вверх»-электроны для СП ПСФО (см. п. 1.10).

Краткие комментарии к рисункам п. 2.6

Рисунки 2.6_C* содержат результаты вычислений для атома углерода в возбужденном состоянии (C*).

Рис. 2.6_C*_a1 (CD, 169) представляет полное сечение фотоионизации атома C в возбужденном состоянии C*.

Рис. 2.6_C*_d1 (CD, 170) даёт дипольный параметр угловой анизотропии 2p-электронов возбуждённого атома C* в приближениях ХФ-д, ХФ-с и СП ПСФО. Роль корреляций невелика.

Рисунки 2.6_C⁻ содержат результаты вычислений для иона C⁻.

Рис. 2.6_C⁻_a1 (CD, 170) изображает полное сечение фотоотрыва иона C⁻ в приближениях ХФ-д, ХФ-с и ПСФО.

Рис. 2.6_C⁻_d1 (CD, 171) даёт дипольный параметр угловой анизотропии 2*p*-электронов иона C⁻ в приближениях ХФ-д, ХФ-с и СП ПСФО. Параметр имеет минимум сразу за порогом и затем быстро выходит на почти постоянное значение.

Рисунки 2.6_Si* содержат результаты вычислений для атома кремния в возбужденном состоянии Si*.

Рис. 2.6_Si*_a1 (CD, 171) изображает полное сечение фотоионизации атома Si* в приближениях ХФ-д, ХФ-с и ПСФО. Сечение быстро нарастает за порогом и затем убывает до порога внутренней оболочки. На склонах видны квазисечения дискретных возбуждений.

Рис. 2.6_Si*_d1 (CD, 172) представляет дипольный параметр угловой анизотропии 3*d*-, 3*p*-электронов атома Si* в возбужденном состоянии.

Рисунки 2.6_Si⁻ содержат результаты вычислений для иона Si⁻.

Рис. 2.6_Si⁻_a1 (CD, 172) представляет полное сечение фотоотрыва иона в приближениях ХФ-д, ХФ-с и СП ПСФО.

Рис. 2.6_Si⁻_b1 (CD, 173) изображает сечение фотоотрыва 3*p*-электронов Si⁻. *Сплошная линия* — СП ПСФО с учетом влияния 3*s* [54, 55]; *пунктир* — сечение 3*p* в СП ПСФО. Экспериментальные данные взяты из [56]. В отрицательных ионах нет дискретных возбуждений, однако картина сечения подобна имеющей место в окрестности автоионизационного резонанса (1.50) при малых *q*.

Рис. 2.6_Si⁻_d1 (CD, 173) приводит дипольный параметр угловой анизотропии для 3*p*, 2*p*-электронов иона Si⁻ в ПСФО. Как обычно, особенно сложна зависимость у наружной (3*p*) подоболочки, где у самого порога имеется чрезвычайно быстрая вариация. У самого порога параметр β_{2*p*} имеет узкий и высокий максимум, а затем, достигнув минимума, он начинает снова плавно расти.

Рис. 2.6_Si⁻_P_d2 (CD, 174) сравнивает сечения фотоионизации и дипольные параметры угловой анизотропии иона Si⁻ и атома Р. Электронные конфигурации у этих объектов одинаковы. Результаты для иона и атома, в особенности для параметра β_{3*p*}, сходны.

Рис. 2.6_Si⁻_P_e1 (CD, 175) приводит недипольные параметры угловой анизотропии γ^с 3*s*-электронов иона Si⁻ и атома Р в приближениях ХФ-д, ХФ-с и СП ПСФО. Как и на Рис. 2.6_Si⁻_d2,

результаты для иона и атома близки. Примечательно, что ПСФО-корреляции существенно сглаживают кривые.

Рис. 2.6_Si⁻P_e2 (CD, 176) даёт недипольные параметры угловой анизотропии и их магическую комбинацию для 3*p*-электронов иона Si⁻ и атома P. Опять-таки, ион и атом имеют близкие характеристики.

Рисунок 2.6_Ge⁻_b1 (CD, 177) содержит результаты вычислений для иона германия (Ge⁻). Он представляет сечение фотоотрыва 3*d*-электронов Ge⁻. *Сплошная линия* изображает результаты ОПСФО.

Таблица к п. 2.6 (CD, 289) включает расчетные значения сил осцилляторов g_{if} в приближениях ХФ-д, ХФ-с, ПСФО-д-с (в некоторых случаях — ОПСФО) нескольких самых низких дискретных уровней возбуждения каждой рассмотренной подоболочки атома, приведенного в этом разделе. Таблица дает также значения расчетных энергий переходов ω_{if} .

2.7. Атомы и ионы элементов V группы периодической системы

В этом разделе мы представляем наши результаты для внешней и промежуточных подоболочек некоторых атомов и ионов элементов V группы. Здесь мы сконцентрировались в основном на атомах и ионах, имеющих все заполненные или одну полузаполненную подоболочку, а именно: N ($Z = 7$) $1s^2, 2s^2, 2p^3 \uparrow$; P ($Z = 15$) $2s^2, 2p^6, 3s^2, 3p^3 \uparrow$; As ($Z = 33$) $3d^{10}, 4s^2, 4p^3 \uparrow$; Sb ($Z = 51$) $4d^{10}, 5s^2, 5p^3 \uparrow$. Формулы, с помощью которых получены данные, и обозначения на рисунках те же самые, что и для благородных газов, и приведены в п. 2.1.

Здесь $\uparrow$ обозначает «вверх»-электроны для СП ПСФО (см. п. 1.10).

Краткие комментарии к рисункам п. 2.7

Рисунки 2.7_N содержат результаты вычислений для атома азота (N).

Рис. 2.7_N_a1 (CD, 178) представляет полное сечение фотоионизации атома N в приближениях ХФ-д, ХФ-с и ПСФО. Роль корреляций вполне заметна. Основной вклад вносит сечение наружных 2*p*³-электронов.

Рис. 2.7_N_d1 (CD, 178) изображает дипольные параметры угловой анизотропии для $2p$ -электронов N в СП ПСФО-д и СП ПСФО-с.

Рис. 2.7_N_d2, f1 (CD, 179) приводит дипольные параметры для $2p$ -электронов N: а) угловой анизотропии $\beta_{2p}(\omega)$; спиновой поляризации: б) $A_{2p}^{3/2}(\omega)$, в) $\alpha_{2p}^{3/2}(\omega)$, г) $\xi_{2p}^{3/2}(\omega)$.

Рисунки 2.7_P содержат результаты вычислений для атома фосфора (P).

Рис. 2.7_P_a1 (CD, 180) изображает полное сечение фотоионизации атома P в приближениях ХФ-д, ХФ-с и ПСФО. Роль корреляций малосущественна.

Рис. 2.7_P_d1 (CD, 180) приводит дипольный параметр угловой анизотропии β для $3p$ -электронов P в СП ПСФО. Параметр имеет: один узкий максимум вблизи порога и второй, широкий, в 10 эВ от порога, полминимума на пороге и ещё два минимума — при более высоких энергиях.

Рис. 2.7_P_e1 (CD, 181) сопоставляет недипольные параметры угловой анизотропии для $3s$ -«вниз»- и «вверх»-электронов P в приближении ХФ и СП ПСФО. Имеется вполне значительная разница в околороговых областях. Роль корреляций ПСФО велика.

Рис. 2.7_P_e2 (CD, 182) изображает недипольные параметры угловой анизотропии γ^C , δ^C и их магическую комбинацию ($\gamma^C + + 3\delta^C$) для $3p$ -электронов P в приближении ХФ и СП ПСФО. Роль корреляций ПСФО невелика.

Рис. 2.7_P_f1 (CD, 183) представляет дипольные параметры $3p$ -«вниз»-электронов P: а) угловой анизотропии $\beta_{3p}(\omega)$; спиновой поляризации: б) $A_{3p}^{3/2}(\omega)$, в) $\alpha_{3p}^{3/2}(\omega)$, г) $\xi_{3p}^{3/2}(\omega)$ в СП ПСФО.

Рисунки 2.7_As содержат результаты вычислений для атома мышьяка (As).

Рис. 2.7_As_a1 (CD, 184) даёт полное сечение фотоионизации атома As в приближениях ХФ-д, ХФ-с и СП ПСФО. Имея максимум на пороге, сечение довольно быстро убывает до нуля, а затем при 10 Ry образует широкий максимум.

Рис. 2.7_As_d1 (CD, 184) представляет дипольный параметр угловой анизотропии $4p$ -«вверх»- и $3d$ -«вверх»- и «вниз»-электронов атома As в СП ПСФО. Качественно все кривые похожи, а β_{3d1} и β_{3d1} очень близки.

Рис. 2.7_As_f1 (CD, 185) изображает дипольные параметры для $4p$ -электронов As: а) угловой анизотропии $\beta_{4p}(\omega)$; спиновой поляризации: б) $A_{4p}^{3/2}(\omega)$, в) $\alpha_{4p}^{3/2}(\omega)$, г) $\xi_{4p}^{3/2}(\omega)$ в СП ПСФО.

Рис. 2.7_As_f2 (CD, 186) даёт дипольные параметры для $3d$ -электронов As: *а*) угловой анизотропии $\beta_{3d}(\omega)$; спиновой поляризации: *б*) $A_{3d}^{3/2}(\omega)$, *в*) $\alpha_{3d}^{3/2}(\omega)$, *г*) $\xi_{3d}^{3/2}(\omega)$ в СП ПСФО. Результаты для всех, кроме β_{3d} параметров сильно отличаются для $5/2$ - и $3/2$ -электронов.

Рисунки 2.7_Sb содержат результаты вычислений для атома сурьмы (Sb).

Рис. 2.7_Sb_a1 (CD, 187) представляет полное сечение фотоионизации атома Sb в приближениях ХФ-д, ХФ-с и ПСФО. Виден гигантский резонанс $4d^{10}$ -электронов и отмечена большая роль ПСФО-корреляций. Примечательно и наличие второго максимума при 20 Ry.

Рис. 2.7_Sb_d1 (CD, 187) приводит дипольные параметры угловой анизотропии для $5p$ -«вверх»- и $4d$ -«вверх»- и «вниз»-электронов атома Sb в СП ПСФО. Виден осциллирующий характер параметров β и качественное сходство всех кривых.

Рис. 2.7_Sb_f1 (CD, 188) изображает дипольные параметры для $5p$ -электронов Sb: *а*) угловой анизотропии $\beta_{5p}(\omega)$; спиновой поляризации: *б*) $A_{5p}(\omega)$, *в*) $\alpha_{5p}(\omega)$, *г*) $\xi_{5p}(\omega)$ в СП ПСФО.

Рис. 2.7_Sb_f2 (CD, 189) даёт дипольные параметры для $4d$ -электронов Sb: *а*) угловой анизотропии $\beta_{4d}(\omega)$; спиновой поляризации: *б*) $A_{4d}(\omega)$, *в*) $\alpha_{4d}(\omega)$, *г*) $\xi_{4d}(\omega)$ в СП ПСФО. Все параметры, кроме β_{4d} , буквально зеркально отличаются для $5/2$ - и $3/2$ -электронов.

Таблица к п. 2.7 (CD, 290) включает расчетные значения сил осцилляторов g_{if} в приближениях ХФ-д, ХФ-с, ПСФО-д-с (в некоторых случаях — ОПСФО) нескольких самых низких дискретных уровней возбуждения каждой рассмотренной подоболочки атомов, приведенных в этом разделе. Таблица даёт также значения расчетных энергий перехода ω_{if} .

2.8. Атомы и ионы элементов VI группы периодической системы

В этом разделе мы представляем наши результаты для внешней и промежуточных подоболочек ионов и некоторых атомов элементов VI группы. Здесь мы сконцентрировались в основном на ионах, имеющих все заполненные или полузаполненные подоболочки, а именно: $O^+ (Z = 8) 1s^2, 2s^2, 2p^3 \uparrow$; $Cr (Z = 24) 2p^6, 3s^2,$

$3p^6, 3d^5 \uparrow 4s \uparrow$; $\text{Cr}^* (Z = 24) 2p^6, 3s^2, 3p^6, 3d^5 \uparrow 4s \downarrow$; $\text{Cr}^+ (Z = 24) 2p^6, 3s^2, 3p^6, 3d^5 \uparrow$; $\text{Mo}^* (Z = 42) 3d^{10}, 4s^2, 4p^6, 4d^5 \uparrow, 5s \downarrow$. Формулы, с помощью которых получены данные, и обозначения на рисунках те же самые, что и для благородных газов, и приведены в п. 2.1.

Здесь $\uparrow$ обозначает «вверх»-электроны для СП ПСФО (см. п. 1.10).

Краткие комментарии к рисункам п. 2.8

Рисунки 2.8_O⁺ содержат результаты вычислений для иона кислорода O⁺.

Рис. 2.8_O⁺_a1 (CD, 190) представляет полное сечение фотоионизации в приближениях ХФ-д, ХФ-с и СП ПСФО. Роль корреляций мала. Сечения велики на порогах и быстро монотонно убывают с ростом ω .

Рис. 2.8_O⁺_d1 (CD, 190) изображает дипольный параметр угловой анизотропии для 2p-электронов O⁺ в СП ПСФО. Параметр быстро достигает максимума за порогом и далее монотонно убывает.

Рисунки 2.8_Cr содержат результаты вычислений для атома хрома (Cr).

Рис. 2.8_Cr_a1 (CD, 191) приводит полное сечение фотоионизации атома Cr в приближениях ХФ-д, ХФ-с и СП ПСФО. При $\omega \approx 3.5 \text{ Ry}$ виден, как и в Mn, гигантский автоионизационный резонанс — максимум, возникающий вследствие сильного взаимодействия дискретного перехода $3p \downarrow - 3d \downarrow$ со сплошным спектром $3d \uparrow - \epsilon f \uparrow$ (см. [57]).

Рис. 2.8_Cr_d1 (CD, 191) изображает дипольный параметр угловой анизотропии для 3d-«вверх»- и 3p-«вверх»- и «вниз»-электронов атома Cr в СП ПСФО (см. [58]). Обращает внимание качественное сходство кривых для 3p-«вверх»- и «вниз»-электронов.

Рис. 2.8_Cr Cr*_e1 (CD, 192) представляет недипольные параметры γ^C угловой анизотропии для 4s-«вверх»-электрона атома Cr и 4s-«вниз»-электрона атома хрома в возбуждённом состоянии Cr* в приближении ХФ и ПСФО (см. [59]). Отличие между кривыми — весьма велико. СП ПСФО корреляции существенны лишь для «вверх»-электрона. Параметры для «вниз»-электронов отличает осцилляция буквально на пороге.

Рис. 2.8_Cr_e2 (CD, 193) изображает недипольные параметры угловой анизотропии γ^C и δ^C и их магическую комбинацию $(\gamma^C + 3\delta^C)$ для $3d$ -электронов атома Cr в СП ПСФО (см. [59, 60]).

Рис. 2.8_Cr_df1 (CD, 194) даёт дипольные параметры для $3p$ -«вверх»- и «вниз»-электронов атома Cr: а) угловой анизотропии $\beta_{3p}(\omega)$; спиновой поляризации: б) $A_{3p}(\omega)$, в) $\alpha_{3p}(\omega)$, г) $\xi_{3p}(\omega)$.

Рис. 2.8_Cr_df2 (CD, 195) представляет дипольные параметры для $3d$ -электронов Cr и Cr*: а) угловой анизотропии $\beta_{3p}(\omega)$; спиновой поляризации: б) $A_{3d}^{5/2}(\omega)$, в) $\alpha_{3d}^{5/2}(\omega)$, г) $\xi_{3d}^{5/2}(\omega)$ (см. [60, 61]). Рассмотренное возбуждение в общем мало сказывается на параметрах.

Рисунки 2.8_Cr⁺ содержат результаты вычислений для иона Cr⁺.

Рис. 2.8_Cr⁺_a1 (CD, 196) приводит полное сечение фотоионизации иона Cr⁺. Виден мощный максимум, связанный с возбуждением $3p^3\downarrow$ -электронов.

Рис. 2.8_Cr⁺_d1 (CD, 196) изображает дипольный параметр угловой анизотропии для $3d$ -«вверх»- и $3p$ -«вверх»- и «вниз»-электронов иона Cr⁺. У порогов вариации параметров очень сильны (см. [61]).

Рисунки 2.8_Mo содержат результаты вычислений для атома молибдена (Mo).

Рис. 2.8_Mo_a1 (CD, 197) приводит полное сечение фотоионизации атома Mo в приближениях ХФ-д, ХФ-с и СП ПСФО. Роль ПСФО корреляций велика. Первый максимум — это сечение фотоионизации $4d^5\uparrow$ -электронов, а второй — след автоионизационного резонанса $4p\downarrow \rightarrow 4d\downarrow$, распадающегося с удалением $4d\uparrow$ -электронов.

Рис. 2.8_Mo_b1 (CD, 197) изображает дипольный параметр угловой анизотропии для $4d$ -«вверх»- и $4p$ -«вверх»- и «вниз»-электронов атома Mo. Параметр β_{4d} отличает минимум сразу за порогом и небольшой максимум у порога $4p$. При больших энергиях все β близки.

Рис. 2.8_Mo_df1 (CD, 198) представляет дипольные параметры для $4p$ -«вверх»- и «вниз»-электронов Mo: а) угловой анизотропии $\beta_{4p}(\omega)$ и спиновой поляризации: б) $A_{4p}(\omega)$, в) $\alpha_{4p}(\omega)$, г) $\xi_{4p}(\omega)$ (см. [61]).

Рис. 2.8_MoMo*_df2 (CD, 199) приводит дипольные параметры $4d$ -электронов Mo и Mo*: а) угловой анизотропии $\beta_{4d}(\omega)$;

спиновой поляризации: б) $A_{4d}^{5/2}(\omega)$, в) $\alpha_{4d}^{5/2}(\omega)$, з) $\xi_{4d}^{5/2}(\omega)$ (см. [59], [61]).

Таблица к п. 2.8 (CD, 294) включает расчетные значения сил осцилляторов g_{if} в приближениях ХФ-д, ХФ-с, ПСФО-д-с (в некоторых случаях — ОПСФО) нескольких самых низких дискретных уровней возбуждения каждой рассмотренной подболочки атома, приведенного в этом разделе. Таблица дает также значения расчетных энергий перехода ω_{if} .

2.9. Атомы и ионы элементов VII и VIII групп периодической системы

В этом разделе мы представляем наши результаты для внешней и промежуточных подболочек ионов и некоторых атомов элементов VII и VIII групп. Здесь мы сконцентрировались на атомах с незаполненной подболочкой и на их ионах, имеющих все заполненные или полузаполненные подболочки, а именно F ($Z = 9$) $1s^2, 2s^2, 2p^5$; F* ($Z = 9$) $1s^1, 2s^1, 2p^3, 3s^1, 3p^3$ все ↑; F²⁺ ($Z = 9$) $1s^2, 2s^2, 2p^3↑$; F⁻ ($Z = 9$) $1s^2, 2s^2, 2p^6$; Cl ($Z = 17$) $2p^6, 3s^2, 3p^5$; Cl⁻ ($Z = 17$) $2p^6, 3s^2, 3p^6$; Mn ($Z = 25$) $3s^2, 3p^6, 3d^5↑, 4s^2$; Mn⁺ ($Z = 25$) $3s^2, 3p^6, 3d^5↑, 4s↑$; Br⁻ ($Z = 35$) $3s^2, 3p^6, 3d^{10}, 4s^2, 4p^6$; Tc ($Z = 43$) $3p^6, 3d^{10}, 4s^2, 4p^6, 4d^5↑, 5s^2$; I ($Z = 53$) $4s^2, 4p^6, 4d^{10}, 5s^2, 5p^5$; I⁺ ($Z = 53$) $4s^2, 4p^6, 4d^{10}, 5s^2, 5p^4$; I²⁺ ($Z = 53$) $4s^2, 4p^6, 4d^{10}, 5s^2, 5p^3↑$; I⁻ ($Z = 53$) $4s^2, 4p^6, 4d^{10}, 5s^2, 5p^6$; Pd ($Z = 46$) $3s^2, 3p^6, 3d^{10}, 4s^2, 4p^6, 4d^{10}$. Формулы, с помощью которых получены данные, и обозначения на рисунках те же самые, что и для благородных газов, и приведены в п. 2.1.

Здесь ↑ обозначает «вверх»-электроны для СП ПСФО (см. п. 1.10).

Краткие комментарии к рисункам п. 2.9

Рисунки 2.9_F содержат результаты вычислений для атома фтора (F).

Рис. 2.9_F_a1 (CD, 200) изображает полное сечение фотоионизации атома F в ПСФО для незаполненных оболочек (ПСФОН) с раздельными вкладами конечных состояний с термами $^2S, ^2P, ^2D$ и с их суммой.

Рисунки 2.9_F* содержат результаты вычислений для атома фтора в возбужденном состоянии (F*).

Рис. 2.9_F*_a1 (CD, 200) представляет полное сечение фотоионизации атома F* в приближениях ХФ-д, ХФ-с, СП ПСФО. При $\omega \approx 1.7 \text{ Ry}$ виден второй максимум сечения.

Рис. 2.9_F*_a2 (CD, 201) сравнивает сечения фотоионизации атома F в основном и возбуждённом (F*) состояниях в СП ПСФО. Возбуждение атома формирует максимум в сплошном спектре при $\omega \approx 8 \text{ Ry}$.

Рис. 2.9_F*_d1 (CD, 201) даёт недипольный параметр 3p- и 2p-электронов F* в СП ПСФО. Обращает внимание максимум при 75 эВ, возникающий вследствие воздействия электронов 2p на 3p.

Рисунки 2.9_F²⁺ содержат результаты вычислений для иона F²⁺.

Рис. 2.9_F²⁺_a1 (CD, 202) приводит полное сечение фотоионизации иона F²⁺ в приближении СП ПСФО.

Рис. 2.9_F²⁺_a2 (CD, 202) даёт квазисечения возбуждения дискретных уровней иона F²⁺.

Рис. 2.9_F²⁺_d1 (CD, 203) изображает дипольный параметр угловой анизотропии β_{2p} для 2p-электронов F²⁺.

Рисунки 2.9_F⁻ содержат результаты вычислений для иона F⁻.

Рис. 2.9_F⁻_a1 (CD, 203) приводит полное сечение фотоионизации иона F⁻ в ПСФО. Обращает внимание быстрый, почти скачкообразный рост сечения внешней оболочки на пороге, что делает ситуацию, подобной имеющей место в нейтральных атомах.

Рис. 2.9_F⁻_d1 (CD, 204) изображает дипольный параметр угловой анизотропии β_{2p} для 2p-электронов F⁻. За узким минимумом после порога параметр сначала быстро нарастает, уже с 30 эВ рост быстро замедляется.

Рисунки 2.9_Cl содержат результаты вычислений для атома хлора (Cl).

Рис. 2.9_Cl_a1 (CD, 204) изображает полное сечение фотоионизации атома Cl в ПСФОН, с отдельными вкладами конечных состояний с термами ²S, ²P, ²D и с их суммой (см. [62]). В сечении доминирует широкий максимум при $\omega \approx 1.5 \text{ Ry}$.

Рис. 2.9_Cl_b1 (CD, 205) даёт сечение фотоионизации 3p-электронов атома Cl. Эксперимент взят из [63]. Пороги ионизации взяты экспериментальными по термам ³P – $I_{3p} = 0.959 \text{ Ry}$, ¹D – $I_{1D} = 1.060 \text{ Ry}$, ¹S – $I_{1S} = 1.207 \text{ Ry}$.

Рисунки 2.9_Cl⁻ содержат результаты вычислений для иона Cl⁻.

Рис. 2.9_C1_a1 (CD, 205) приводит полное сечение фотоионизации иона Cl^- в приближениях ХФ-д, ХФ-с и ПСФО. Сечение очень быстро растёт от порога, достигая максимума при $\omega \approx 1.25 \text{ Ry}$, после чего довольно быстро убывает.

Рис. 2.9_C1_b1 (CD, 206) представляет сечение фотоионизации $2p$ -электронов иона Cl^- в приближении ХФ, ПСФО, ОХФ и ОПСФО. Сечение очень быстро, практически скачком, растёт на пороге. В приближении ХФ и ПСФО имеется очень высокий и узкий максимум, отсутствующий в ОПСФО.

Рис. 2.9_C1_d1 (CD, 206) изображает дипольный параметр угловой анизотропии для $2p$ -, $3p$ -электронов иона Cl^- в приближении ХФ-д, ХФ-с и ОПСФО. Параметры $\beta_{3p, 2p}(\omega)$ имеют острый максимум у своих порогов. Заметно влияние $2p$ -электронов на $3p$ вблизи порога $2p$.

Рис. 2.9_C1_d2 (CD, 207) изображает дипольный параметр угловой анизотропии $2p$ -электронов иона Cl^- в ПСФО и ОПСФО. В ОПСФО исчезает узкий максимум вблизи порога, имеющийся в ПСФО.

Рисунки 2.9_Mn содержат результаты вычислений для атома марганца (Mn).

Рис. 2.9_Mn_a1 (CD, 207) приводит полное сечение фотоионизации атома Mn в приближениях ХФ-д, ХФ-с и СП ПСФО. Видна богатая резонансная структура.

Рис. 2.9_Mn_b1 (CD, 208) даёт гигантский автоионизационный резонанс в сечении фотоионизации $3d$ -«вверх»-электронов Mn [64]. *Сплошная линия* учитывает вклад дискретного возбуждения $3p \rightarrow 3d$. Данные эксперимента взяты из [65, 66].

Рис. 2.9_Mn_d1 (CD, 208) приводит дипольный параметр угловой анизотропии для $3d$ -«вверх»- и $3p$ -«вверх»- и «вниз»-электронов Mn (см. [58]). Параметр для $3p$ -электронов имеет минимум вблизи порога, тогда как для $2p$ -электронов у порогов имеется острый максимум. Начиная со 120—130 эВ кривые довольно близки.

Рис. 2.9_Mn_e1 (CD, 209) изображает недипольные параметры угловой анизотропии для $4s$ -«вверх»- и «вниз»-электронов Mn в приближениях ХФ-д, ХФ-с и СП ПСФО (см. [59]). Роль корреляций невелика.

Рис. 2.9_Mn_e2 (CD, 210) приводит недипольные параметры угловой анизотропии γ^C и δ^C и их магическую комбинацию $(\gamma^C + 3\delta^C)$ для $3d$ -электронов Mn в СП ПСФО. Параметры быст-

ро нарастают от порога. Затем выходят на существенно более медленную линейную зависимость от ω (см. [61]).

Рис. 2.9_Mn_f1 (CD, 211) даёт дипольные параметры для $3d$ -«вверх»- электронов Mn: а) угловой анизотропии $\beta_{3d}(\omega)$; спиновой поляризации: б) $A_{3d}^{5/2}(\omega)$, в) $\alpha_{3d}^{5/2}(\omega)$, г) $\xi_{3d}^{5/2}(\omega)$ в СП ПСФО (см. [60, 61]). В спиновой поляризации виден след влияния возбуждений $3p$ -электронов.

Рис. 2.9_Mn_f2 (CD, 212) изображает дипольный параметр $3p^3$ -электронов Mn: а) угловой анизотропии $\beta_{3p}(\omega)$; спиновой поляризации: б) $A_{3p}(\omega)$, в) $\alpha_{3p}(\omega)$, г) $\xi_{3p}(\omega)$ в СП ПСФО (см. [61]).

Рисунки 2.9_Mn⁺ содержат результаты вычислений для иона Mn⁺.

Рис. 2.9_Mn⁺_a1 (CD, 213) представляет полное сечение фотоионизации иона Mn⁺ в приближениях ХФ-д, ХФ-с и СП ПСФО. Гигантский автоионизационный резонанс расположен при энергии 4 Ry. Ему предшествует (при энергии ~ 2.3 Ry) максимум в сечении $3p^6$ -электронов.

Рис. 2.9_Mn⁺_d1 (CD, 213) изображает дипольный параметр угловой анизотропии $3d$ -«вверх»-, $3p$ -«вверх»- и «вниз»-электронов иона Mn⁺. Различие параметров $3p\uparrow$ и $3p\downarrow$ велико: $\beta_{3p\downarrow}(\omega)$ имеет дополнительный по сравнению с $\beta_{3p\uparrow}(\omega)$ максимум за порогом. Резкие изменения в $\beta_{3d\uparrow}(\omega)$ явно коррелируют с особенностями сечения фотоионизации Рис. 2.9_Mn⁺_a1.

Рис. 2.9_Mn⁺_d2 (CD, 214) даёт дипольный параметр угловой анизотропии для $3d$ -электронов Mn⁺ в СП ПСФО (см. [67]). Видна мощная осцилляция, обусловленная влиянием $3p\downarrow - 3d\downarrow$. Кривая более подробно представляет резкие изменения $\beta_{3d\uparrow}(\omega)$ по сравнению с Рис. 2.9_Mn⁺_d1.

Рисунки 2.9_Br⁻ содержат результаты вычислений для иона брома (Br⁻).

Рис. 2.9_Br⁻_a1 (CD, 214) изображает полное сечение фотоионизации иона Br⁻ в приближениях ХФ-д, ХФ-с и ПСФО. Видны два максимума у порога: при 1 Ry — от $4p^6$ -электронов и при 15 Ry. Влияние корреляций электронов вблизи порога велико.

Рис. 2.9_Br⁻_d1 (CD, 215) представляет дипольный параметр угловой анизотропии $3p$ -, $4p$ -электронов иона Br⁻. Как в очень многих случаях, β отличается осцилляция, начинающаяся сразу за порогом ионизации.

Рисунки 2.9_Tc содержат результаты вычислений для атома технеция (Tc).

Рис. 2.9_Tc_a1 (CD, 216) представляет полное сечение фотоионизации атома Tc в приближениях XF-д, XF-с и СП ПСФО. Видно, что в СП ПСФО возникает как отражение дискретного возбуждения $4p \downarrow \rightarrow 4d \downarrow$ гигантский автоионизационный резонанс — глубокий минимум при $\omega \approx 2.5 \text{ Ry}$, за которым следует максимум при $\omega \approx 3 \text{ Ry}$. Ситуация подобна имеющей место в Mn (см. Рис. 2.9_Mn_a1).

Рис. 2.9_Tc_d1 (CD, 216) изображает дипольный параметр угловой анизотропии для $4d$ -«вверх»-, $4p$ -«вверх»- и «вниз»-электронов атома Tc в СП ПСФО. Начиная с примерно 80 эВ кривые подобны. Параметр β_{4d1} имеет дополнительный минимум сразу за порогом.

Рис. 2.9_Tc_f1 (CD, 217) даёт дипольные параметры для $4d$ -«вверх»-электронов атома Tc: а) угловой анизотропии $\beta_{4d}(\omega)$; спиновой поляризации: б) $A_{4d}^{5/2}(\omega)$, в) $\alpha_{4d}^{5/2}(\omega)$, г) $\xi_{4d}^{5/2}(\omega)$. За исключением $\beta_{4d}(\omega)$, остальные параметры подобны аналогичным зависимостям в Mn — см. Рис. 2.9_Mn_f1; $\beta_{4d}(\omega)$ имеет дополнительный максимум при 90 эВ.

Рис. 2.9_Tc_f2 (CD, 218) представляет дипольные параметры для $4p$ -«вверх»- и «вниз»-электронов атома Tc: а) угловой анизотропии $\beta_{4p}(\omega)$; спиновой поляризации: б) $A_{4p}(\omega)$, в) $\alpha_{4p}(\omega)$, г) $\xi_{4p}(\omega)$ (см. [61]). Зависимости от энергии фотона качественно подобны аналогичным зависимостям в Mn — см. Рис. 2.9_Mn_f2.

Рисунки 2.9_I содержат результаты вычислений для атома иода (I).

Рис. 2.9_I_a1 (CD, 219) изображает полное сечение фотоионизации атома I в ПСФОН. Виден симметричный гигантский резонанс и представлены формирующие его вклады термов 2S , 2P , 2D и их сумма (см. [68]).

Рисунки 2.9_I⁺ содержат результаты вычислений для иона I⁺.

Рис. 2.9_I⁺_a1 (CD, 219) представляет полное сечение фотоионизации иона I⁺ в ПСФОН и в ОПСФО (с учётом перестройки) (см. [68]). Экспериментальные данные взяты из [69]. Учёт перестройки заметно улучшает согласие с опытом.

Рис. 2.9_I⁺_a2 (CD, 220) изображает выход двукратных ионов при поглощении фотонов ионом I⁺, рассчитанный в ПСФОН (см. [68]). Экспериментальные данные взяты из [69]. Виден максимум при 80 эВ, качественно подобный наблюдаемому в Xe (см. Рис. 2.2_Xe_b5).

Рис. 2.9_I⁺_b1 (CD, 220) даёт сечение фотоионизации 5*s*-электронов иона I⁺ в окрестности интерференционного резонанса, рассчитанное в приближениях ХФ-д, ХФ-с и ПСФОН. Максимум качественно подобен тому, что имеет место в сечении фотоионизации 5*s*-электронов Хе (Рис. 2.2_Хе_b2) и вызван, как и в Хе, воздействием 4*d*-гигантского резонанса.

Рис. 2.9_I⁺_d1 (CD, 221) приводит дипольный параметр угловой анизотропии 4*d*-, 5*p*-электронов иона I⁺. Кривые качественно похожи, но β_{5p} имеет дополнительный максимум при $\omega \approx 68$ эВ.

Рисунки 2.9_I²⁺ содержат результаты вычислений для иона I²⁺.

Рис. 2.9_I²⁺_a1 (CD, 221) изображает полное сечение фотоионизации иона I²⁺ в приближениях ХФ-д, ХФ-с и СП ПСФО. Виден сильно асимметричный гигантский резонанс 4*d*-подоболочки, которому предшествуют дискретные уровни возбуждения с большой силой осцилляторов.

Рис. 2.9_I²⁺_a2 (CD, 222) представляет выход трехкратных ионов при поглощении фотонов ионом I²⁺ в СП ПСФО. Экспериментальные данные взяты из [69]. Видно подобие ситуации для двукратного иона Рис. 2.9_I⁺_a2.

Рис. 2.9_I²⁺_b1 (CD, 222) даёт сечение фотоионизации 4*d*-электронов иона I²⁺ в приближениях ХФ-д, ХФ-с и СП ПСФО. Примечательно, что корреляции устраняют максимум на пороге в приближении ХФ, сдвигая его существенно за порог. Видно, что гигантский резонанс в сплошном спектре — сильно асимметричен. Эта асимметрия усилена в сравнении с ситуацией в I⁺, изображённой на Рис. 2.9_I⁺_a1.

Рис. 2.9_I²⁺_d1 (CD, 223) изображает дипольный параметр угловой анизотропии для 4*d*-, 5*p*-электронов иона I²⁺.

Рисунки 2.9_I⁻ содержат результаты вычислений для иона I⁻.

Рис. 2.9_I⁻_a1 (CD, 223) приводит полное сечение фотоионизации иона I⁻ в приближениях ХФ-д, ХФ-с и ПСФО. Видны три максимума: при 1, 7 и 20 Ry. Максимум при 7 Ry есть гигантский резонанс (см. [70]).

Рис. 2.9_I⁻_a2 (CD, 224) даёт гигантский резонанс в полном сечении фотоионизации иона I⁻ в ПСФО (см. [70]). Экспериментальные данные взяты из [71].

Рис. 2.9_I⁻_a3 (CD, 224) сравнивает полные сечения фотоионизации в окрестности 4*d*-гигантского резонанса иона I⁻

(ПСФО), атома I (ПСФОН) и иона I^+ (ПСФОН) (см. [68]). Видно увеличение вклада дискретных уровней с ростом степени ионности.

Рис. 2.9_I_a4 (CD, 225) сравнивает сечения фотоионизации иона I^- , атома Xe и иона Cs^+ в ПСФО. Видна систематическая деформация первого максимума и гигантского резонанса с ростом заряда ядра.

Рис. 2.9_I_b1 (CD, 225) приводит сечение фотоотрыва электрона из $5p$ -оболочки иона I^- (см. [68]).

Рис. 2.9_I_b2 (CD, 226) даёт сечение фотоотрыва электрона из $5s^2$ -оболочки иона I^- в приближении ХФ-д (*пунктир*), ПСФО с учётом $4d$ (*штрихпунктир*), ПСФО с учётом воздействия $4d$ - и $5p$ -электронов (*сплошная линия*). Происходит, как и для $5s^2$ -электронов Xe, их полная «коллективизация» под влиянием «соседей» $5p^6$ - и $4d^{10}$ -электронов.

Рис. 2.9_I_b3 (CD, 226) представляет сечение фотоотрыва $4d$ -электронов от иона I^- в приближении ХФ (переход $4d - \epsilon f$), ПСФО (переходы $4d - \epsilon f$, ϵp и их сумма) — гигантский резонанс.

Рис. 2.9_I_d1 (CD, 227) изображает дипольный параметр угловой анизотропии для $4d$ -, $5p$ -электронов атома I^- . Примечателен узкий глубокий минимум на пороге β_{5p} , тогда как β_{4d} имеет почти сразу на пороге максимум. Заметен небольшой максимум в β_{5p} при 67 эВ. Ионизационные потенциалы равны $I_{I^-, 4d} = 57.39$ и $I_{I^-, 5p} = 3.56$ эВ.

Рис. 2.9_I_e1 (CD, 227) даёт недипольные параметры угловой анизотропии для $5p$ -электронов иона I^- в околопороговой области в приближении ХФ и ПСФО. Небольшая вариация быстро сменяется линейной зависимостью (см. [72]).

Рис. 2.9_I_e2 (CD, 228) представляет недипольные параметры угловой анизотропии γ^C , δ^C и их магическую комбинацию ($\gamma^C + 3\delta^C$) для $5p$ -электронов иона I^- в сравнении с аналогичными данными Xe (см. [72]).

Рис. 2.9_I_e3 (CD, 229) приводит недипольный параметр угловой анизотропии γ^C для $5s$ -электронов иона I^- в околопороговой области в приближении ХФ и ПСФО.

Рис. 2.9_I_e4 (CD, 229) даёт недипольный параметр для угловой анизотропии γ^C $5s$ -электронов иона I^- в сравнении с Xe (см. [72, 73]). Эксперимент по Xe взят из [73].

Рис. 2.9_I_e5 (CD, 230) изображает недипольные параметры угловой анизотропии γ^C , δ^C и их магическую комбинацию

$(\gamma^C + 3\delta^C)$ для $4d$ -электронов иона Γ в сравнении с аналогичными данными по Xe (см. [72]).

Рис. 2.9_Г_е6 (CD, 231) представляет недипольный параметр угловой анизотропии γ^C и магическую комбинацию $(\gamma^C + 3\delta^C)$ для $4d$ -электронов иона Γ в околопороговой области энергий фотона.

Рисунки 2.9_Pd содержат результаты вычислений для атома палладия (Pd).

Рис. 2.9_Pd_a1 (CD, 231) изображает полное сечение фотоионизации атома Pd в приближениях ХФ-д, ХФ-с и СП ПСФО. Доминирует сечение наружной $4d^{10}$ -подоболочки. Роль ПСФО корреляций велика.

Рис. 2.9_Pd_b1 (CD, 232) приводит сечение фотоионизации $4p$ - и $4d$ -электронов Pd в приближениях ХФ-д и СП ПСФО. Видно, что сечение $4d^{10}$ образует гигантский резонанс, почти не уступающий по высоте гигантскому $4d$ -резонансу в Xe .

Рис. 2.9_Pd_d1 (CD, 232) изображает дипольный параметр угловой анизотропии для $3d$ -, $4d$ -, $4p$ -электронов атома Pd.

Таблица к п. 2.9 (CD, 296) включает расчетные значения сил осцилляторов g_{if} в приближениях ХФ-д, ХФ-с, ПСФО-д-с (в некоторых случаях — ОПСФО) нескольких самых низких дискретных уровней возбуждения для каждой рассмотренной подоболочки приведенного в данном разделе атома. Таблица дает также значения расчетных энергий перехода ω_{if} .

2.10. Эндоэдральные атомы $A@C_{60}$

В этом разделе мы представляем наши результаты для сечений фотоионизации, дипольного и недипольных параметров угловой анизотропии внешней и промежуточных подоболочек некоторых эндоэдральных атомов $A@C_{60}$. Данные приведены для следующих объектов: $\text{Ne}@C_{60}$ $2s^2$, $2p^6$; $\text{Ar}@C_{60}$ $3s^2$, $3p^6$; $\text{Kr}@C_{60}$ $4s^2$, $4p^6$; $\text{Xe}@C_{60}$ $3d^{10}$, $4d^{10}$, $5s^2$, $5p^6$; $\text{Cs}@C_{60}$ $3d^{10}$, $4d^{10}$, $5s^2$, $5p^6$, $6s$. Формулы, с помощью которых получены эти результаты, упомянуты в начале этой главы, в п. 2.1.

Для расчёта сечений эндоэдральных атомов и параметров анизотропии фотоэлектронов необходимо знание фактора усиления электромагнитного излучения фуллерена C_{60} — $S_{C_{60}}(\omega) \equiv |G_{C_{60}}(\omega)|^2$ и фазы $G_{C_{60}}(\omega) - \arg G_{C_{60}}(\omega)$, определённых в (1.116)

и (1.117). Подробности, связанные с вычислением этих характеристик, можно найти в [74—76] и в списках литературы к этим работам. Результаты по *np*-подоболочкам взяты из [74, 75], а по *ns* — из [76]. Данные взяты: по 4*d* Хе из [77, 78], по 3*d* Хе из [77], по 3*d* Хе, Cs, Ва из [78], а по Eu из [79].

Краткие комментарии к рисункам п. 2.10

Рисунки 2.10_С₆₀ содержат результаты вычислений для фуллерена С₆₀.

Рис. 2.10_С₆₀_g1 (CD, 233) представляет фактор усиления электромагнитного излучения электронной оболочки С₆₀ — $S(\omega) \equiv |G(\omega)|^2$, абсолютное значение их амплитуды $\tilde{G}^d \equiv |G(\omega)|$ и фазы $\eta^d \equiv \arg G(\omega)$. Стрелки отмечают пороги соответствующих внешних *np*-подоболочек. Энергетическая зависимость модуля фактора усиления и его фазы довольно сложны (см. [74]).

Рис. 2.10_С₆₀_g2 (CD, 234) изображает фактор усиления электромагнитного излучения электронной оболочки С₆₀ — $S(\omega) \equiv |G(\omega)|^2$. Стрелки отмечают пороги соответствующих субвалентных *ns*-подоболочек (см. [74]).

Рисунки 2.10_Ne@C₆₀ содержат результаты вычислений для Ne@C₆₀ и Ne.

Рис. 2.10_Ne@C₆₀_b1 (CD, 234) даёт сечение фотоионизации 2*p*-электронов Ne@C₆₀ с учётом отражения фотоэлектрона оболочкой С₆₀, что приводит к осцилляциям по сравнению с гладким сечением свободного Ne и поляризации С₆₀-оболочки, которая эти осцилляции многократно усиливает.

На рисунках пунктиром изображена кривая для изолированного атома; *штрихпунктирная* линия даёт результаты лишь с учётом отражения фотоэлектрона электронной оболочкой фуллерена; *сплошная линия* — ПСФО для эндодрального атома. Видно резкое увеличение сечения, в котором появляются три максимума, величина которых определяется поляризацией электронной оболочки фуллерена (см. п. 1.14).

Рис. 2.10_Ne@C₆₀_b2 (CD, 235) представляет сечение фотоионизации 2*s*-электронов Ne@C₆₀ с учётом отражения фотоэлектрона оболочкой С₆₀ и Ne. Учтены те же факторы, что и на Рис. 2.10_Ne@C₆₀_b1. Роль фактора усиления электромагнитного излучения невелика.

Рис. 2.10_Ne@C₆₀_d1 (CD, 235) изображает дипольный параметр угловой анизотропии β_{2p} для 2p-электронов Ne@C₆₀ и Ne. Видны осцилляции, обусловленные отражением фотоэлектрона оболочкой фуллерена. На дипольный параметр поляризация оболочки фуллерена не влияет.

Рис. 2.10_Ne@C₆₀_e1 (CD, 236) даёт недипольный параметр угловой анизотропии γ_{2p}^C для 2p-электронов Ne@C₆₀ и Ne. Роль отражения фотоэлектрона оболочкой фуллерена очень велика. Влиянием поляризации фуллерена пренебрегаем.

Рис. 2.10_Ne@C₆₀_e2 (CD, 236) представляет недипольный параметр угловой анизотропии γ_{2s}^C для 2s-электронов Ne@C₆₀ и Ne. Осцилляции параметра особо сильны у порога, но быстро убывают с ростом ω . Влиянием поляризации фуллерена пренебрегаем.

Рис. 2.10_Ne@C₆₀_e3 (CD, 237) изображает недипольный параметр угловой анизотропии β_{1s} для 1s-электронов Ne@C₆₀ и Ne. Осцилляции параметра очень сильны у порога и быстро убывают с ростом ω . Влиянием поляризации фуллерена пренебрегаем.

Рисунки 2.10_Ag@C₆₀ содержат результаты вычислений для Ag@C₆₀ и Ag.

Рис. 2.10_Ag@C₆₀_b1 (CD, 237) изображает сечение фотоионизации 3p-электронов Ag и Ag@C₆₀ с учётом отражения фотоэлектрона оболочкой C₆₀, что приводит к осцилляциям по сравнению с гладким сечением свободного Ag и поляризации C₆₀-оболочки, многократно усиливающей эти осцилляции. Виден *гигантский эндодральный резонанс* с силой осциллятора в 20 ед., с основным максимумом при 21 эВ.

Рис. 2.10_Ag@C₆₀_b2 (CD, 238) даёт сечение фотоионизации 3s-электронов Ag и Ag@C₆₀ с учётом отражения фотоэлектрона оболочкой C₆₀, что приводит к осцилляциям по сравнению с гладким сечением свободного Ag и поляризации C₆₀-оболочки, заметно усиливающей эти осцилляции. В Ag@C₆₀ сечение 3s примерно в 400 раз меньше, чем 3p.

Рис. 2.10_Ag@C₆₀_d1 (CD, 238) приводит дипольный параметр угловой анизотропии β для 3p-электронов Ag@C₆₀ и Ag. Роль отражения фотоэлектрона значительна на самом пороге и после 50 эВ.

Рис. 2.10_Ag@C₆₀_e1 (CD, 239) представляет недипольный параметр угловой анизотропии для 3p-электронов Ag@C₆₀ и Ag. Отражение фотоэлектрона приводит к умеренным осцилляциям.

Рис. 2.10_Ar@C₆₀_e2 (CD, 239) даёт недипольный параметр угловой анизотропии для 3s-электронов Ar@C₆₀ и Ar. Влияние фуллерена ограничивается областью, близкой к порогу.

Рисунки 2.10_Kr@C₆₀ содержат результаты вычислений для Kr@C₆₀.

Рис. 2.10_Kr@C₆₀_b1 (CD, 240) изображает сечение фотоионизации 4p-электронов Kr и Kr@C₆₀ с учётом отражения фотоэлектрона оболочкой C₆₀, что приводит к осцилляциям по сравнению с гладким сечением свободного Kr и к поляризации C₆₀-оболочки; эти осцилляции многократно усиливаются. Наиболее впечатляющий результат — появление, как и в Ar@C₆₀, гигантского эндоэдрального резонанса с силой осциллятора в 23 эВ с максимумом при 19 эВ.

Рис. 2.10_Kr@C₆₀_b2 (CD, 240) представляет сечение фотоионизации 4s-электронов Kr и Kr @C₆₀ с учётом отражения фотоэлектрона оболочкой C₆₀, что приводит к осцилляциям по сравнению с гладким сечением свободного Kr и к поляризации C₆₀-оболочки, многократно усиливающей эти осцилляции. В Kr@C₆₀ сечение 4s примерно в 400 раз меньше чем 4p, т. е. ситуация подобна имеющей место в Ar@C₆₀. Имеется, помимо порогового, ещё и максимум при 47 эВ.

Рис. 2.10_Kr@C₆₀_d1 (CD, 241) даёт дипольный параметр угловой анизотропии β_{4p} для 4p-электронов Kr@C₆₀ и Kr. Осцилляции за счёт оболочки фуллерена невелики.

Рис. 2.10_Kr@C₆₀_e1 (CD, 241) представляет недипольный параметр угловой анизотропии γ^c для 4p-электронов Kr@C₆₀ и Kr. Влиянием поляризации фуллерена на недипольные параметры пренебрегаем.

Рис. 2.10_Kr@C₆₀_e2 (CD, 242) даёт недипольный параметр угловой анизотропии для 4s-электронов Kr@C₆₀ и Kr. Оболочка фуллерена существенно меняет параметр, у которого появляется резкий максимум на пороге ионизации.

Рисунки 2.10_Xe@C₆₀ содержат результаты вычислений для Xe@C₆₀.

Рис. 2.10_Xe@C₆₀_b1 (CD, 242) даёт сечение фотоионизации 5p-электронов Xe и Xe@C₆₀ с учётом отражения фотоэлектрона оболочкой C₆₀, что приводит к осцилляциям по сравнению с гладким сечением свободного Xe и к поляризации C₆₀-оболочки, многократно усиливающей эти осцилляции. Как в Ne и Ar, наиболее яркий результат — появление гигантского эндоэдрального резонанса с силой осциллятора в 25 эВ с максимумом при 17 эВ.

Рис. 2.10_He@C₆₀_b2 (CD, 243) изображает сечение фотоионизации 5s-электронов Хе и Хе@C₆₀ с учётом отражения фотоэлектрона оболочкой C₆₀, что приводит к осцилляциям по сравнению с гладким сечением свободного Хе и к поляризации C₆₀-оболочки, многократно усиливающей эти осцилляции. Как в Хе и Аг, в Хе@C₆₀ сечение 5s примерно в 400 раз меньше, чем 5p, т. е. ситуация подобна имеющей место в Аг@C₆₀ и Кг@C₆₀. По сравнению с изолированным атомом появляется еще один максимум, при 47 эВ.

Рис. 2.10_He@C₆₀_b3 (CD, 243) даёт сечение фотоионизации 4d-электронов Хе@C₆₀ и Хе (см. [77, 78]). Видно, что отражение фотоэлектрона приводит к полному разрушению гигантского резонанса, вместо которого появляются четыре максимума.

Рис. 2.10_He@C₆₀_b4 (CD, 244) приводит сечение фотоионизации 3d_{3/2}-электронов Хе@C₆₀ и Хе, 3d – εf-переход (см. [79, 80]). Поляризация фуллереновой оболочки при таких энергиях фотона незначительна. Отражение фотоэлектрона приводит к сильным осцилляциям в сечении.

Рис. 2.10_He@C₆₀_b5 (CD, 245) даёт сечение фотоионизации 3d_{5/2}-электронов Хе@C₆₀ и Хе, 3d – εf-переход (см. [79, 80]). Поляризация фуллереновой оболочки при таких энергиях фотона незначительна. Отражение фотоэлектрона приводит к сильным осцилляциям в сечении, которые в значительной мере маскируют дополнительный максимум, отражающий в изолированном атоме воздействие 3/2-электронов на 5/2.

Рис. 2.10_He@C₆₀_d1 (CD, 245) представляет дипольный параметр угловой анизотропии β_{5p} для 5p-электронов Хе@C₆₀ и Хе. Отражение фотоэлектронов приводит к заметным осцилляциям параметра β_{5p} (см. [79, 80]). Примечателен дополнительный минимум сразу за порогом.

Рис. 2.10_He@C₆₀_d2 (CD, 246) представляет дипольный параметр угловой анизотропии для 4d-электронов Хе@C₆₀ и Хе (см. [77, 78]). Отражение фотоэлектрона ведет к дополнительному минимуму вблизи порога и осцилляции вдали от него.

Рис. 2.10_He@C₆₀_d3 (CD, 246) даёт дипольный параметр угловой анизотропии β для 3d_{3/2}-электронов Хе@C₆₀ и Хе (см. [79, 80]). Обращает внимание сложная структура с узкими минимумами и максимумом сразу за порогом.

Рис. 2.10_He@C₆₀_d4 (CD, 247) представляет дипольный параметр угловой анизотропии β для 3d_{5/2}-электронов Хе@C₆₀ и

Хе. У самого порога возникли в $\text{Xe}@\text{C}_{60}$ дополнительные минимум и максимум.

Рис. 2.10_Хе@C₆₀_e1 (CD, 247) даёт недипольный параметр угловой анизотропии γ_{5p}^C для $5p$ -электронов $\text{Xe}@\text{C}_{60}$. Роль отражения фотоэлектронов фуллереновой оболочкой велика.

Рис. 2.10_Хе@C₆₀_e2 (CD, 248) представляет недипольный параметр угловой анизотропии γ_{5s}^C для $5s$ -электронов $\text{Xe}@\text{C}_{60}$ и Хе. Отражение фотоэлектронов резко увеличивает амплитуду околопороговой осцилляции параметра.

Рис. 2.10_Хе@C₆₀_e3 (CD, 248) изображает недипольный параметр угловой анизотропии γ_{4d}^C для $4d$ -электронов $\text{Xe}@\text{C}_{60}$ и Хе (см. [78]). Отражение фотоэлектрона приводит к дополнительному минимуму приблизительно при 85 эВ и небольшим осцилляциям.

Рис. 2.10_Хе@C₆₀_e4 (CD, 249) изображает недипольный параметр угловой анизотропии δ^C для $4d$ -электронов $\text{Xe}@\text{C}_{60}$ и Хе (см. [78]). Отражение фотоэлектрона оболочкой фуллерена приводит к вполне заметным осцилляциям.

Рис. 2.10_Хе@C₆₀_e5 (CD, 249) изображает недипольный параметр угловой анизотропии γ^C для $3d_{3/2}$ -электронов $\text{Xe}@\text{C}_{60}$ и Хе. Отражение фотоэлектронов создаёт «рябь» на кривой параметра.

Рис. 2.10_Хе@C₆₀_e6 (CD, 250) приводит недипольный параметр угловой анизотропии δ^C для $3d_{3/2}$ -электронов $\text{Xe}@\text{C}_{60}$ и Хе. Отражение фотоэлектрона приводит к значительному максимуму у самого порога.

Рис. 2.10_Хе@C₆₀_e7 (CD, 250) даёт магическую комбинацию недипольных параметров угловой анизотропии ($3\delta^C + \gamma^C$) для $3d_{3/2}$ -электронов $\text{Xe}@\text{C}_{60}$ и Хе. Отражение фотоэлектрона заметно проявляется лишь у самого порога.

Рис. 2.10_Хе@C₆₀_e8 (CD, 251) изображает недипольный параметр угловой анизотропии γ^C для $3d_{5/2}$ -электронов $\text{Xe}@\text{C}_{60}$ и Хе. Отражение заметно проявляется на расстоянии в ~ 10 эВ за порогом.

Рис. 2.10_Хе@C₆₀_e9 (CD, 251) приводит недипольный параметр угловой анизотропии δ^C для $3d_{5/2}$ -электронов $\text{Xe}@\text{C}_{60}$ и Хе. Рисунок весьма похож на Рис. 2.10_Хе@C₆₀_e4.

Рис. 2.10_Хе@C₆₀_e10 (CD, 252) предлагает магическую комбинацию недипольных параметров угловой анизотропии ($3\delta^C + \gamma^C$) для $3d_{5/2}$ -электронов $\text{Xe}@\text{C}_{60}$ и Хе. Влияние отражения фотоэлектронов особенно велико у самого порога.

Рис. 2.10_Хе@C₆₀_g1 (CD, 252) приводит параметр отражения $F_r(\omega)$ (1.106) фотоэлектронов из $4d$ -уровня в $\text{Xe}@\text{C}_{60}$. Имен-

но его осцилляции определяют структуру сечения фотоионизации $4d$ -подоболочки в Xe@C_{60} .

Рисунки 2.10_Cs@C₆₀ содержат результаты вычислений для Cs@C_{60} .

Рис. 2.10_Cs@C₆₀_b1 (CD, 253) даёт сечение фотоионизации $3d_{3/2}$ - и $3d_{5/2}$ -электронов Cs@C_{60} и Cs (см. [80]). Видно множество максимумов, на фоне которых почти полностью маскируется влияние $3/2$ -электронов на $5/2$ -электроны.

Рис. 2.10_Cs@C₆₀_d1 (CD, 254) изображает дипольный параметр угловой анизотропии β для $3d_{3/2}$, $5/2$ -электронов Cs@C_{60} и Cs . Как и в сечениях, сложные вариации параметров затушевывают влияние $3/2$ -электронов на $5/2$ -электроны.

Рис. 2.10_Cs@C₆₀_e1 (CD, 255) представляет недипольный параметр угловой анизотропии γ^C для $3d_{3/2}$, $5/2$ -электронов Cs@C_{60} и Cs . Подобно изображённому на Рис. 2.10_Cs@C₆₀_d1, сложные вариации параметров затушевывают влияние $3/2$ -электронов на $5/2$ -электроны.

Рисунки 2.10_Ba@C₆₀ содержат результаты вычислений для Ba@C_{60} .

Рис. 2.10_Ba@C₆₀_b1 (CD, 256) даёт сечение фотоионизации $3d_{3/2}$ - и $3d_{5/2}$ -электронов Ba@C_{60} и Ba (см. [80]). Видно много максимумов, вызванных отражением фотоэлектрона оболочкой фуллерена.

Рис. 2.10_Ba@C₆₀_d1 (CD, 257) изображает дипольный параметр угловой анизотропии β для $3d_{3/2}$, $5/2$ -электронов Ba@C_{60} и Ba . Отражение фотоэлектрона добавляет довольно резкие изменения в поведение параметров как функций ω .

Рис. 2.10_Ba@C₆₀_e1 (CD, 258) представляет недипольный параметр угловой анизотропии γ^C для $3d_{3/2}$, $5/2$ -электронов Ba@C_{60} и Ba . Дополнительные вариации существенно изменяют параметры.

Рис. 2.10_Ba@C₆₀_e2 (CD, 259) приводит недипольный параметр угловой анизотропии δ^C для $3d_{3/2}$, $5/2$ -электронов Ba@C_{60} и Ba . Отражение фотоэлектрона не только заметно усиливает максимум, обусловленный влиянием $3/2$ -электронов на электроны $5/2$, но и создаёт новые осцилляции.

Рисунки 2.10_Eu@C₆₀ содержат результаты вычислений для Eu@C_{60} .

Рис. 2.10_Eu@C₆₀_b1 (CD, 260) приводит сечение фотоионизации $5p$ -«вниз»-электронов Eu@C_{60} и Eu . Поляризация остова создаёт эндоэдральный резонанс при $\omega \approx 2.7 \text{ Ry}$.

Рис. 2.10_Eu@C₆₀_b2 (CD, 260) даёт сечение фотоионизации *5p*-«вверх»-электронов Eu@C₆₀ и Eu. Поляризация остова создаёт, как и для *5p*-«вниз»-электронов, эндоэдральный резонанс при чуть большей энергии — 2.8 Ry. Отметим, что усиление сечения в Eu@C₆₀ гораздо меньше, чем в наружных *np*-подоболочках Ar@C₆₀, Kr@C₆₀ и Xe@C₆₀.

Рис. 2.10_Eu@C₆₀_b3 (CD, 261) представляет сечение фотоионизации *5s*-«вниз»-электронов Eu. Сечение изменилось в основном за счёт эффекта отражения фотоэлектронов оболочкой фуллерена.

Рис. 2.10_Eu@C₆₀_b4 (CD, 261) изображает сечение фотоионизации *5s*-«вверх»-электронов Eu@C₆₀ и Eu. Это сечение, как и для «вниз»-электронов, изменилось в основном за счёт эффекта отражения фотоэлектронов оболочкой фуллерена.

Рис. 2.10_Eu@C₆₀_b5 (CD, 262) приводит сечение фотоионизации *4f*-«вверх»-электронов Eu@C₆₀ и Eu. В сечении резко усилен, более чем на порядок, резонанс при $\omega \approx 2.1$ Ry, достигающий 130 Мб.

Рис. 2.10_Eu@C₆₀_b6 (CD, 262) даёт сечение фотоионизации *4d*-«вниз»-электронов Eu@C₆₀ и Eu. Этот переход заметно усилен за счёт отражения фотоэлектрона, но вносит небольшой вклад в сечение фотоионизации.

Рис. 2.10_Eu@C₆₀_b7 (CD, 263) представляет сечение фотоионизации *4d*-«вверх»-электронов Eu@C₆₀ и Eu. Отражения фотоэлектрона создают несколько максимумов на кривой сечения в интервале энергий фотона в 12—16 Ry.

Рис. 2.10_Eu@C₆₀_b8 (CD, 263) приводит сечение фотоионизации в окрестности гигантского автоионизационного резонанса Eu и Eu@C₆₀. Видно, что оболочка фуллерена мало сказывается на гигантском автоионизационном резонансе, расположенном при $\omega \approx 10.5$ Ry.

Рис. 2.10_Eu@C₆₀_d1 (CD, 264) изображает дипольный параметр угловой анизотропии $\beta_{5p}(\omega)$ для *5p*-электронов Eu@C₆₀ и Eu. Влияние оболочки фуллерена невелико и проявляется в относительно небольших осцилляциях $\beta_{5p}(\omega)$.

Рис. 2.10_Eu@C₆₀_d2 (CD, 264) даёт дипольный параметр угловой анизотропии $\beta_{4f}(\omega)$ для *4f*-электронов Eu@C₆₀ и Eu. Влияние оболочки фуллерена проявляется лишь в пределах первых 3.5 Ry от порога ионизации.

Рис. 2.10_Eu@C₆₀_d3 (CD, 265) изображает дипольный параметр угловой анизотропии β_{4d} для *4d*-электронов Eu@C₆₀.

Рис. 2.10_Eu@C₆₀_g1 (CD, 265) представляет параметр отражения $F_I(\omega)$ (1.106) фотоэлектронов из 4*d*-подоболочки в Eu@C₆₀. Именно его осцилляции определяют структуру сечения фотоионизации 4*d*-подоболочки в Eu@C₆₀ и появление там гигантского эндоэдрального резонанса (см. [81]).

Результаты наших расчетов продемонстрируем на примере блока рисунков, относящихся к атому Хе — элемента VIII группы периодической системы.*

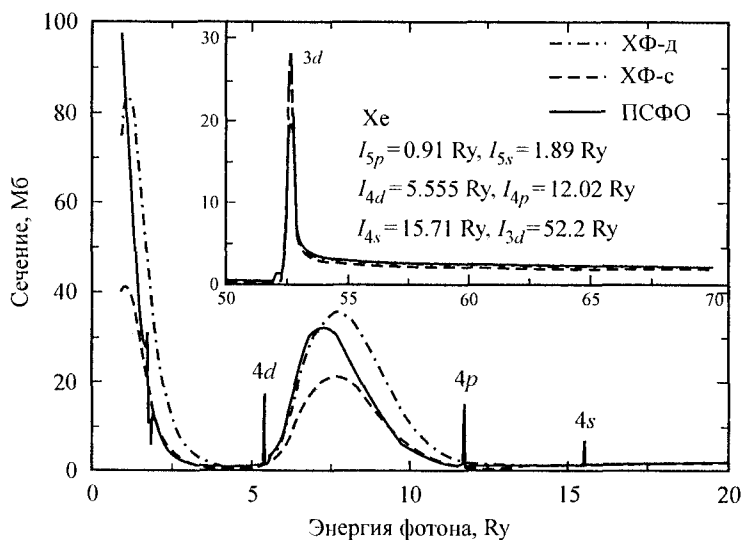


Рис. 2.2_Xe_a1. Полное сечение фотоионизации атома ксенона в приближениях ХФ-д, ХФ-с и ПСФО.

* Уведомляем наших читателей, что ссылки на литературу, использованные в подписях к рисункам, содержат указание на номер главы, в которой они представлены.

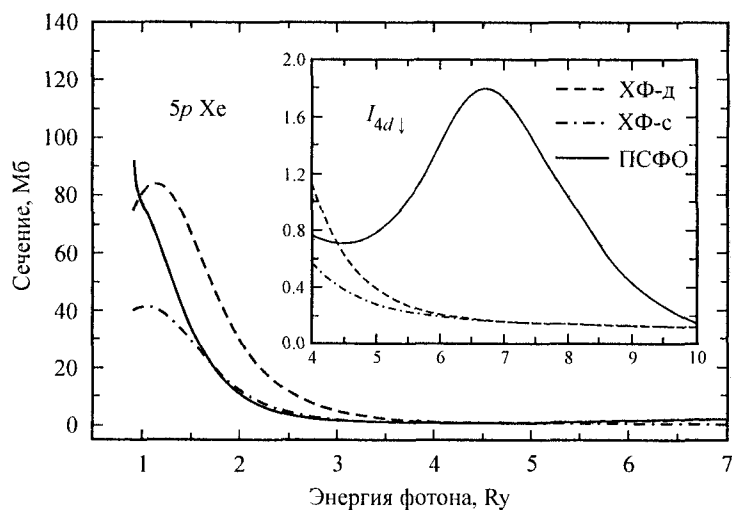


Рис. 2.2_Xe_b1. Сечение фотоионизации $5p$ -электронов атома ксенона в приближениях ХФ-д, ХФ-с и ПСФО. Влияние $4d$ -электронов велико (см. вставку).

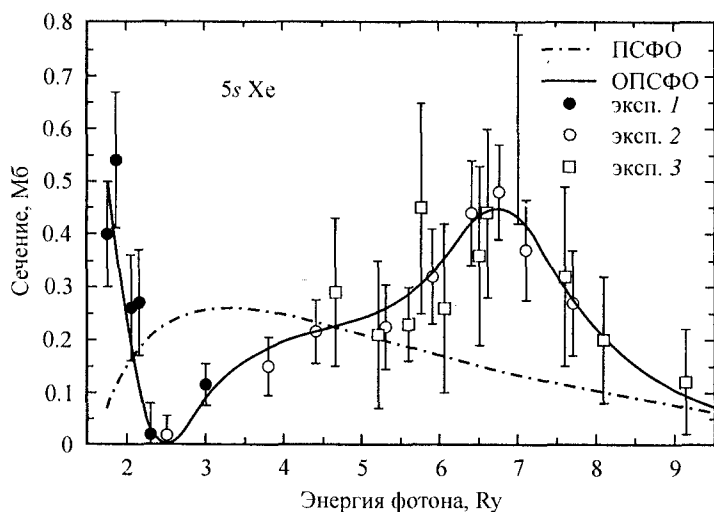


Рис. 2.2_Xe_b2. Сечение фотоионизации $5p$ -электронов атома ксенона в приближениях ХФ-д, ХФ-с и ПСФО. Эксперимент 1, 2, 3 из [2.19, 2.20, 2.21].

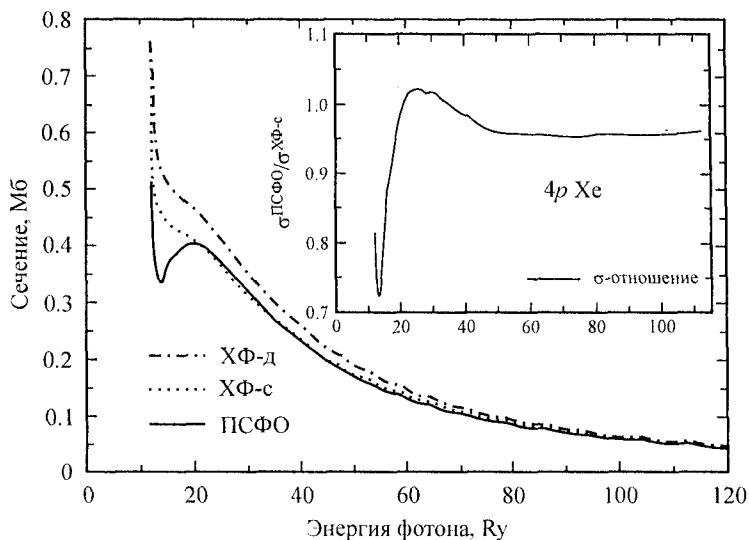


Рис. 2.2_Хе_b3. Сечение фотоионизации $4p$ -электронов атома ксенона в приближениях ХФ-д, ХФ-с и ПСФО.

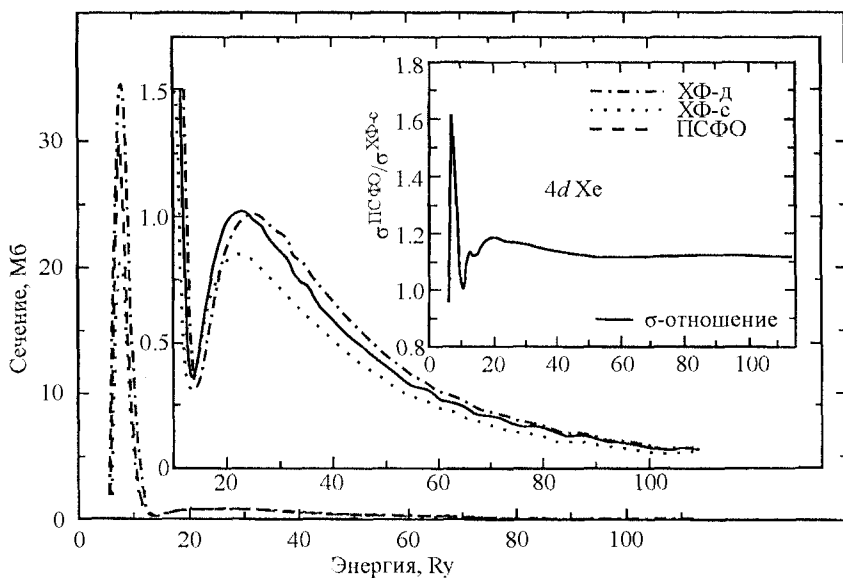


Рис. 2.2_Хе_b4. Сечение фотоионизации $4d$ -электронов атома ксенона в приближениях ХФ-д, ХФ-с и ПСФО.

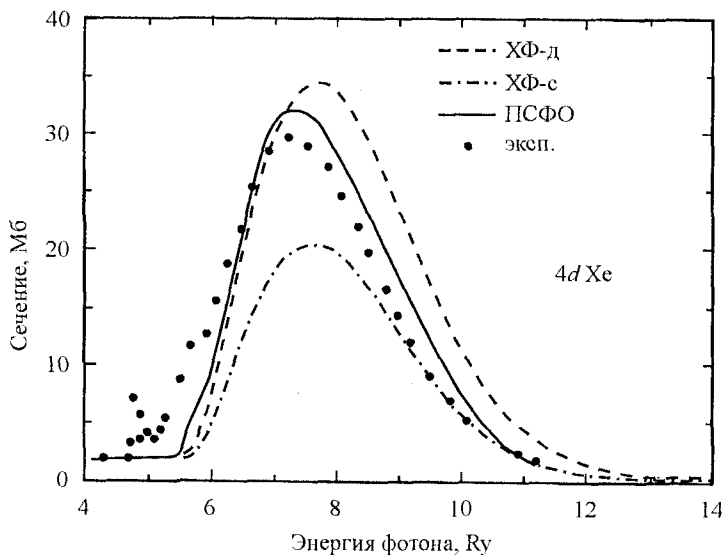


Рис. 2.2_Хе_b5. Сечение фотоионизации $4d$ -электронов атома ксенона в окрестности гигантского резонанса в приближениях ХФ-д, ХФ-с и ПСФО. Эксперимент из [2.22].

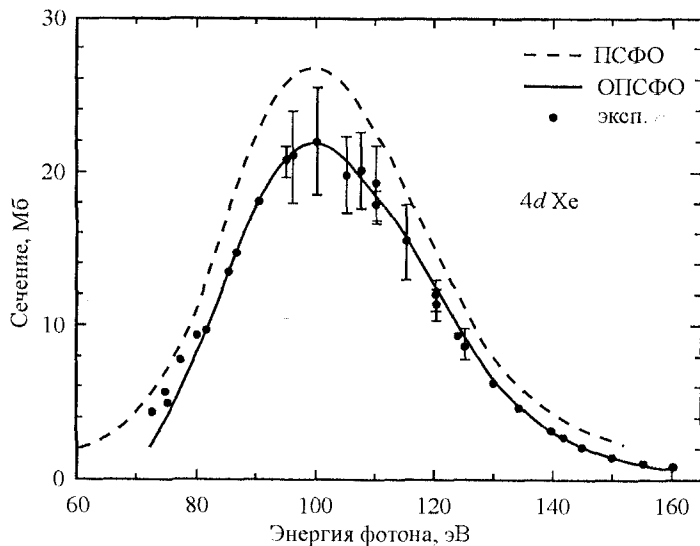


Рис. 2.2_Хе_b6. Сечение однократной ионизации $4d$ -электронов атома ксенона в ПСФО и ОПСФО. Эксперимент из [2.23].

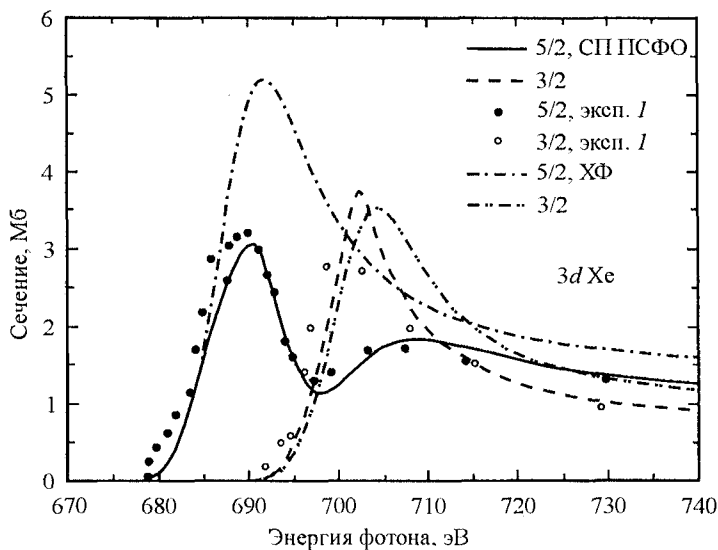


Рис. 2.2_Xe_b7. Сечение фотоионизации $3d$ -электронов атома ксенона в приближениях ХФ-д, ХФ-с и СП ПСФО.

Эксперимент из [2.25].

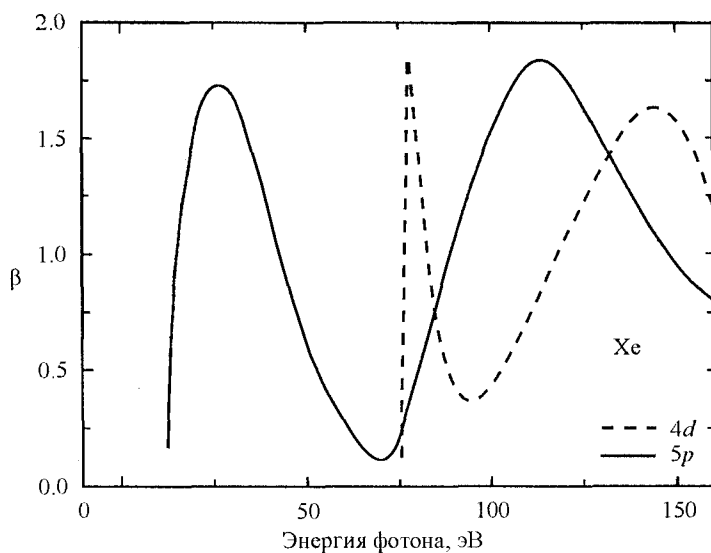


Рис. 2.2_Xe_d1. Параметр угловой анизотропии $5p$ - и $4d$ -электронов атома ксенона в ПСФО.

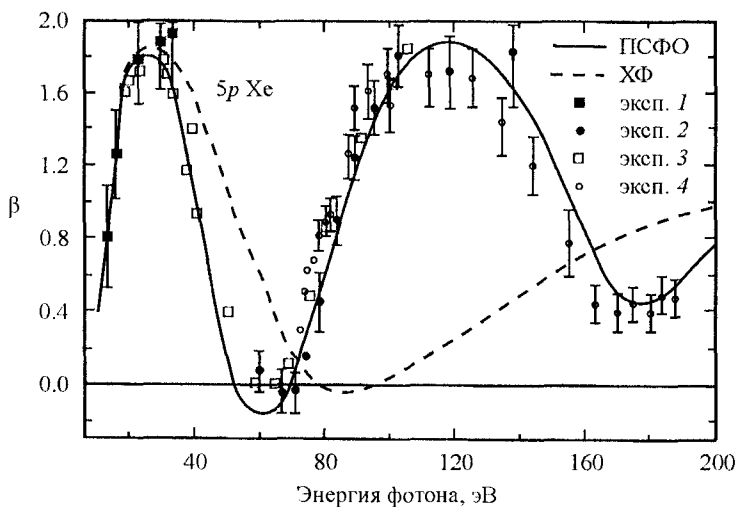


Рис. 2.2_Хе_d2. Параметр угловой анизотропии $5p$ -электронов атома ксенона в приближении ХФ и ПСФО.
Эксперименты 1, 2, 3, 4 из [2.27—2.30] соответственно.

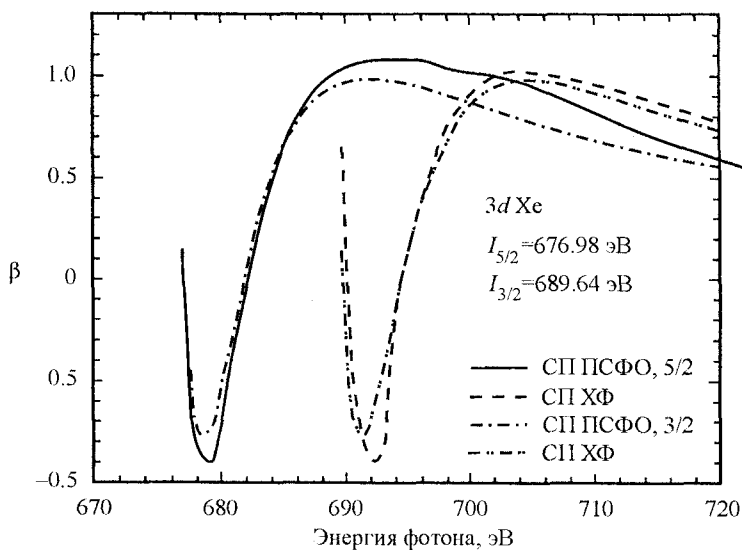


Рис. 2.2_Хе_d3. Дипольный параметр угловой анизотропии $3d_{3/2}$ -электронов атома ксенона в СП ХФ и СП ПСФО. (см. [2.3]).

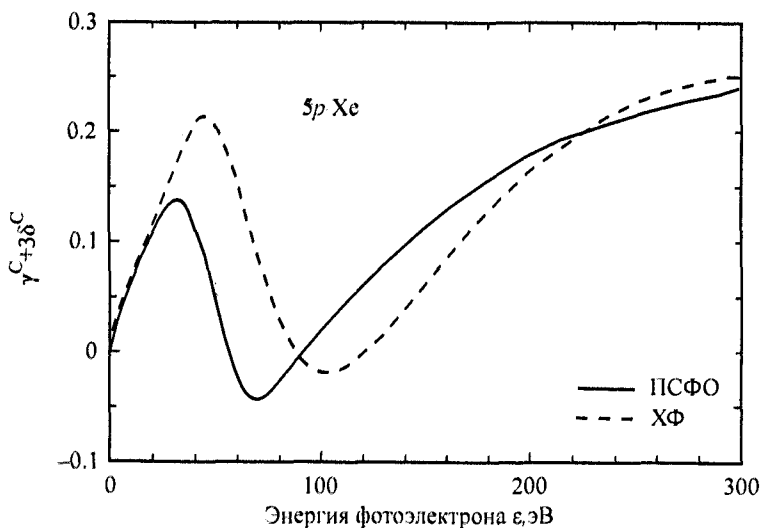


Рис. 2.2_Xe_e1. Магическая комбинация недипольных параметров для $5p$ -электронов атома ксенона в приближении ХФ и ПСФО.

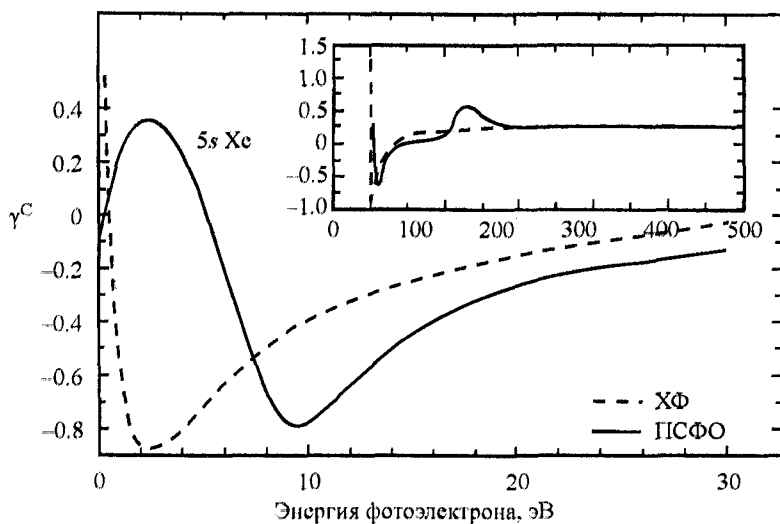


Рис. 2.2_Xe_e2. Недипольный параметр угловой анизотропии $5s$ -электронов атома ксенона в приближении ХФ и ПСФО.

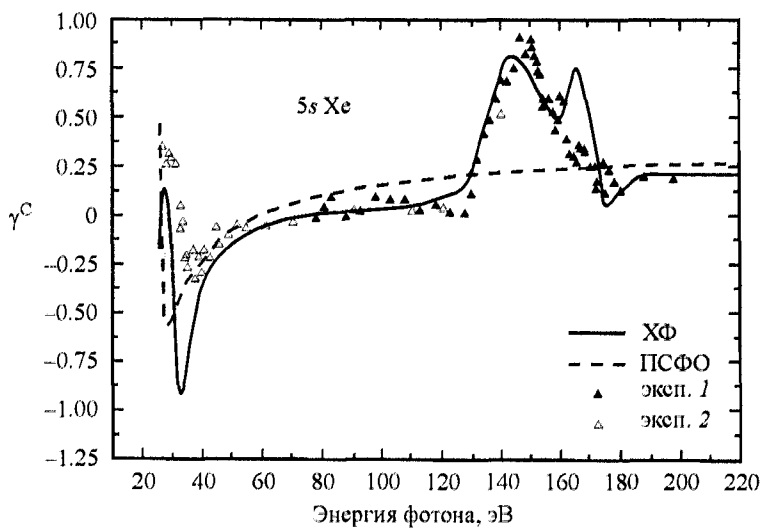


Рис. 2.2_Xe_e3. Недипольный параметр угловой анизотропии 5s-электронов атома ксенона в приближении ХФ и ПСФО.

Эксперимент из [2.32].

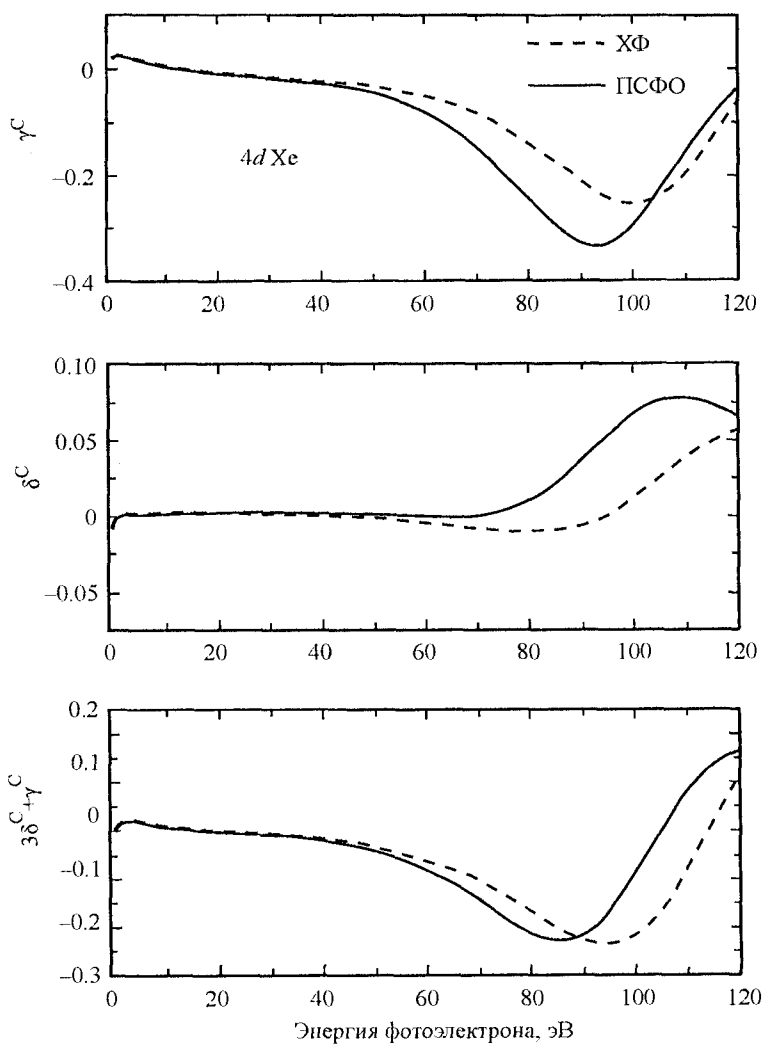


Рис. 2.2_Xe_e4. Недипольные параметры угловой анизотропии и их магическая комбинация 4d-электронов атома ксенона в приближении ХФ и ПСФО.

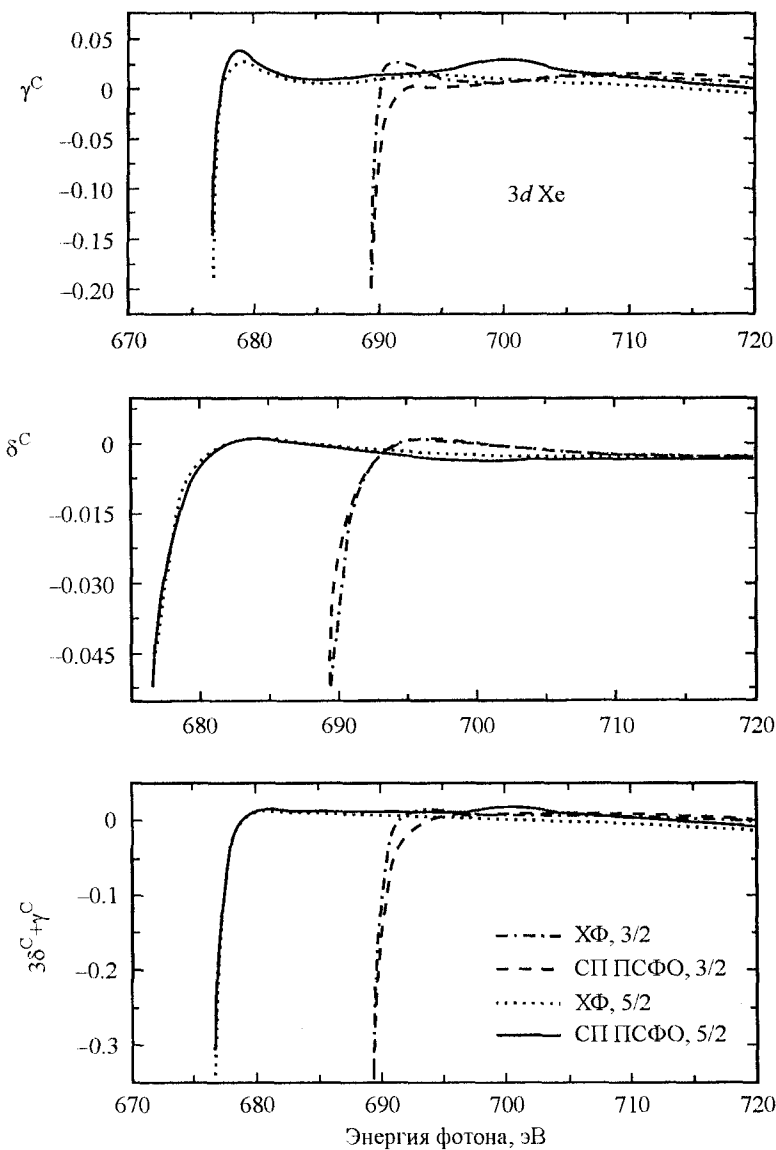


Рис. 2.2 $\text{Xe } e5$. Недипольные параметры угловой анизотропии и их магнитическая комбинация $3d_{5/2^-}$ и $3d_{3/2^-}$ -электронов атома ксенона в СП ХФ и СП ПСФО.

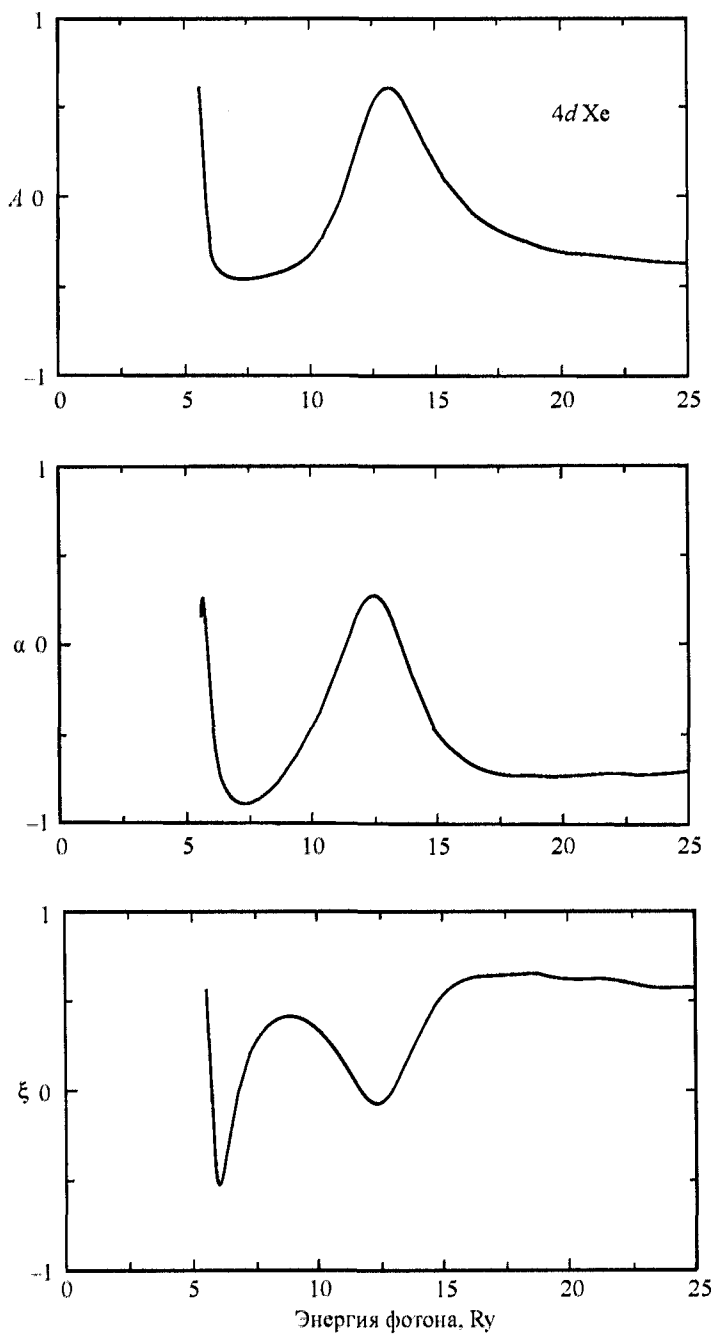


Рис. 2.2_Xe_f1. Параметры спиновой поляризации $4d$ -электронов атома ксенона.

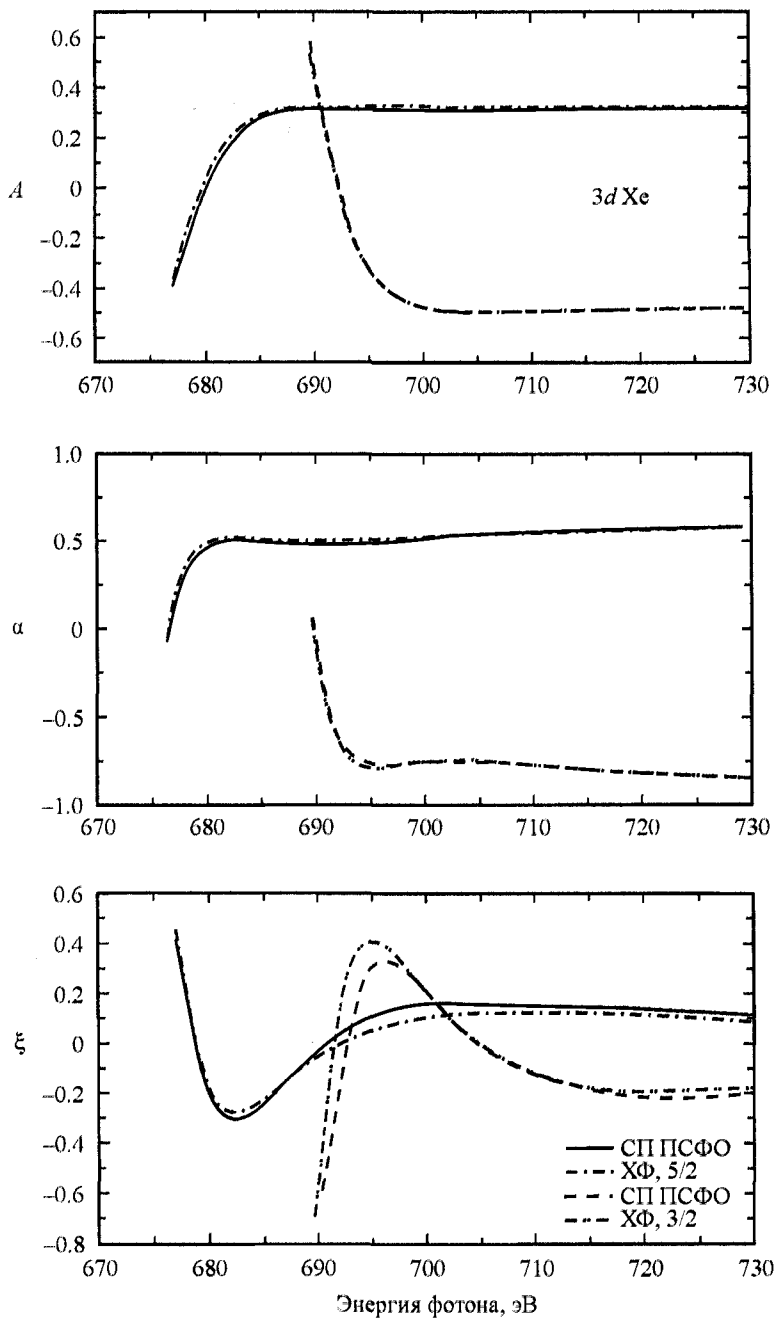


Рис. 2.2_Xe_f2. Параметры спиновой поляризации $3d_{5/2}$ - и $3d_{3/2}$ -электронов атома ксенона в СП ХФ и СП ПСФО.

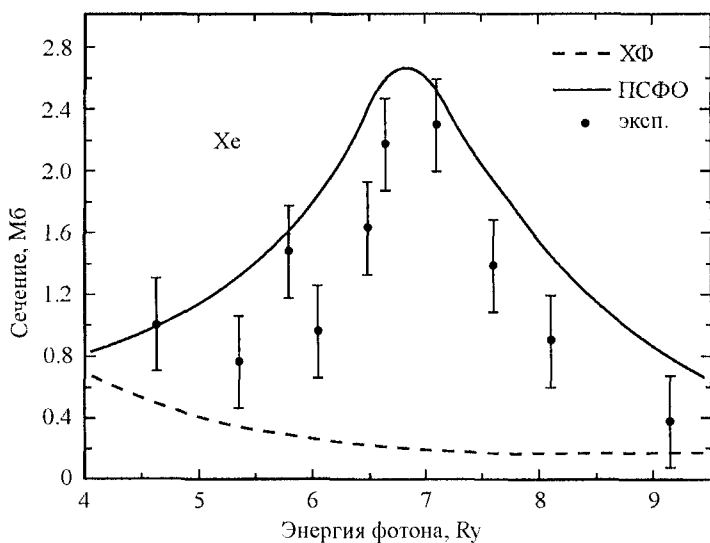


Рис. 2.2_Xe_g1. Выход однократных ионов при поглощении фотонов атомами ксенона в приближении ХФ и ПСФО. (см. [2.34]).

Данные эксперименты из [2.11].

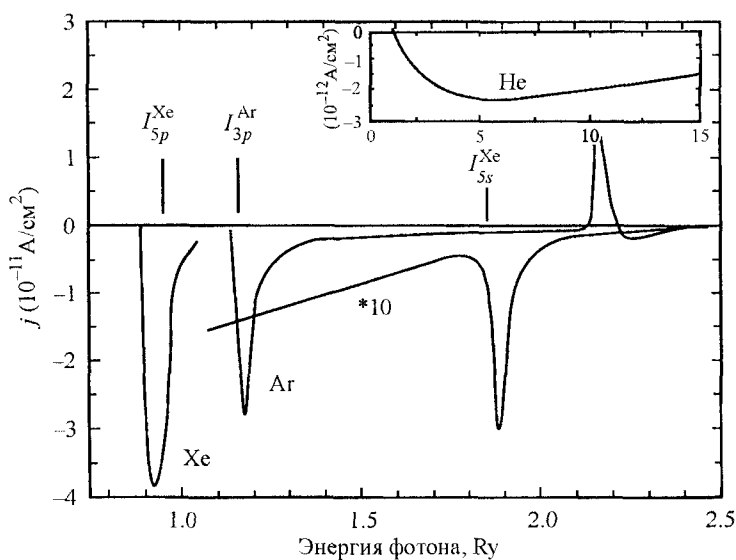


Рис. 2.2_Xe_g2. Токи увлечения атома ксенона в сравнении с атомами аргона и гелия (см. [2.7]).

Литература

1. Амусья М. Я., Иванов В. К., Долматов В. К. // Письма в ЖТФ АН СССР. 1978. Т. 4, № 21. С. 1305—1309.
2. Амусья М. Я., Долматов В. К., Иванов В. К., Шефтель С. И. // Труды II научного семинара. Автоионизационные явления в атомах. М.: Изд-во МГУ, 1981. С. 235—242.
3. Amusia M. Ya., Chernysheva L. V., Manson S. T., Msezane A. Z., Radojevich V. // Phys. Rev. Lett. 2002. Vol. 88, N 9. P. 093002.
4. Bizau J. M., Wuilleumier F. J. // J. Electron Spectr. Rel. Phenom. 1995. Vol. 71, N 3. P. 205—224.
5. Amusia M. Ya., Baltenkov A. S., Chernysheva L. V., Felfli Z., Msezane A. Z., Nordgren J. // Phys. Rev. A. 2001. Vol. 63. P. 052512.
6. Амусья М. Я., Черепков Н. А., Шаниро С. Г. // ЖЭТФ. 1972. Т. 63, № 3(9). С. 889.
7. Амусья М. Я., Балтенков А. С., Гринберг А. А., Шаниро С. Г. // ЖЭТФ. 1975. Т. 68. С. 28—35.
8. Dias E., Chakraborty H., Deshmukh P. et al. // Phys. Rev. Lett. 1997. Vol. 78. P. 4553.
9. Amusia M. Ya., Baltenkov A. S., Chernysheva L. V., Felfli Z., Msezane A. Z. // Phys. Rev. A. 2001. Vol. 63. P. 052506.
10. Амусья М. Я., Черепков Н. А., Чернышева Л. В. // ЖЭТФ. 1971. Т. 60, № 1. С. 160—174.
11. West J. B., Woodruff P. R., Codling K., Houlgate R. G. // J. Phys. B: At. Mol. Phys. 1976. Vol. 9. P. 407—410.
12. Tan K. H., Brion C. E. // J. Electron Spectr. Rel. Phenom. 1978. Vol. 13. P. 77—82.
13. Амусья М. Я. // Изв. АН СССР. Сер. физ. 1981. Т. 45, № 12. С. 2242—2254.
14. Амусья М. Я. // Изв. АН СССР. Сер. физ. 1984. Т. 48, № 4. С. 642—650.
15. Shnopper H. W. // Phys. Rev. 1963. Vol. 131. P. 2558—2560.
16. Houlgate R. G., West J. B., Codling K., Marr G. V. // J. Phys. B. 1974. Vol. 7. P. L470—L473; J. Electron Spectr. Rel. Phenom. 1976. Vol. 9. P. 205—209.
17. Dehmer J. L., Chupka W. A., Berkowitz J., Jivory W. T. // Phys. Rev. A. 1975. Vol. 12. P. 1966—1977.
18. Амусья М. Я., Иванов В. К., Черепков Н. А., Чернышева Л. В. // ЖЭТФ. 1974. Т. 66, № 5. С. 1537—1549.
19. West J. B., Woodruff P. R., Codling K., Houlgate R. G. // J. Phys. B: At. Mol. Phys. 1976. Vol. 9. P. 407—410.
20. Samson J. A. R., Gardner J. L. // Phys. Rev. Lett. 1974. Vol. 33. P. 671—674.
21. Adam M. Y., Wuilleumier F., Sandner N. et al. // Jap. J. Appl. Phys. 1978. Vol. 17. P. 170—180.
22. Haensel R., Keitel G., Kosuch N. et al. // J. De Physique. 1971. Vol. 32-C4. P. 236—245.

23. Kammerling B., Kossman H., Schmidt V. // J. Phys. B. 1989. Vol. 22. P. 841—854.
24. Amusia M. Ya. // Rad. Phys. Chem. 2004. Vol. 70. P. 237—251.
25. Kivimaki A., Hergenhahn U., Kempgens B. // Phys. Rev. A. 2000. Vol. 63. P. 012716.
26. Amusia M. Ya., Ivanov V. K. // Phys. Lett. 1976. Vol. 59, N 3. P. 194—196.
27. Lynch M. J., Gardner J. L., Codling K., Marr G. V. // Phys. Lett. A. 1973. Vol. 43. P. 237—238.
28. Torop L., Morton J., West J. B. // J. Phys. B. 1976. Vol. 9. P. 2035—2041.
29. Krause M. O., Carlson T. A., Woodruff P. R. // Phys. Rev. A. 1981. Vol. 24. P. 1374—1385.
30. Southworth S., Becker U., Truesdale C. M. et al. // Phys. Rev. A. 1983. Vol. 28. P. 261—273.
31. Amusia M. Ya., Baltenkov A. S., Chernysheva L. V. et al. // INFN Frascati Physics Series. 2003. Vol. 32. P. 3—8.
32. Hemmers O., Guillemin R., Kanter E. P. et al. // Phys. Rev. Lett. 2003. Vol. 91, N 5. P. 053002.
33. Amusia M. Ya., Baltenkov A. S., Chernysheva L. V. et al. // Phys. Rev. A. 2003. Vol. 67, N 6. P. 060702.
34. Amusia M. Ya., Ivanov V. K., Chernysheva L. V. // Phys. Lett. A. 1973. Vol. 43, N 3. P. 243.
35. Amusia M. Ya., Cherepkov N. A., Chernysheva L. V., Manson S. T. // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 2000. Vol. 33, N 1. P. L37—L42.
36. Koizumi K. et al. // Phys. Sci. 1997. Vol. 73. P. 131—142.
37. Иванов В. К., Лапкин К. В., Кулов М. А. // Письма в ЖТФ. 2003. Vol. 29, N 15. P. 9—16.
38. Berrah N., Bozek J. D., Wills A. A. et al. // Phys. Rev. Lett. 2001. Vol. 87, N 25. P. 253002-1/4.
39. Kjeldsen H., Andersen P., Folkmann F., Kristensen B., Andersen T. // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 2001. Vol. 34, N 10. P. L353—L357.
40. Kjeldsen H., Folkmann F., Knudsen H. et al. // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 1999. Vol. 32, N 18. P. 4457—4465.
41. van Kampen P., O'Sullivan G., Ivanov V. K. et al. // Phys. Rev. Lett. 1997. Vol. 78. P. 3082.
42. Amusia M. Ya., Baltenkov A. S., Chernysheva L. V. et al. // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 2004. Vol. 37. P. 937—944.
43. Amusia M. Ya., Cherepkov N. A., Chernysheva L. V. et al. // Phys. Rev. A. 2004. Vol. 70. P. 062709.
44. Wilson N. J., Donnelly D., Bell K. L., Hibbert A. // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 1999. Vol. 32, N 18. P. 4495—4508.
45. Rabe A., Radler K., Wolf H.-W. Vacuum Ultraviolet Radiation Physics. Pergamon & Vieweg. 1974. P. 247.
46. Amusia M. Ya., Ivanov V. K., Kupchenko V. A. // J. Phys. B: At. Mol. Phys. 1985. Vol. 18, N 19. P. 3871—3879.

47. *Amusia M. Ya., Chernysheva L. V., Ivanov V. K., Kupchenko V. A.* // *Z. Phys. D: At. Mol. Clust.* 1989. Vol. 14, N 3. P. 215—217.
48. *Amusia M. Ya., Ivanov V. K., Kupchenko V. A.* // *Z. Phys. D: At. Mol. Clust.* 1989. Vol. 14, N 3. P. 219—221.
49. *Amusia M. Ya., Chernysheva L. V., Ivanov V. K.* // *Rad. Phys. Chem.* 2000. Vol. 59. P. 137—143.
50. *Becker U., Kerkhoff H. G., Lindle D. W. et al.* // *Phys. Rev. A.* 1986. Vol. 34. P. 2858—2864.
51. *Richter M., Meyer M., Pahler M. et al.* // *Phys. Rev. A.* 1989. Vol. 40. P. 7007—7019.
52. *Амусья М. Я., Чернышева Л. В., Шефтель С. И.* // *ЖТФ.* 1981. Т. 51, № 11. С. 2411.
53. *Kojima T. M., Oura M., Itoh Y. et al.* // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 1998. Vol. 31. P. 1463—1468.
54. *Amusia M. Ya., Gribakin G. F., Ivanov V. K., Chernysheva L. V.* // *J. Phys. B.* 1990. Vol. 23. P. 385—391.
55. *Gribakin G. F., Gribakina A. A., Gultsev B. V., Ivanov V. K.* // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 1992. Vol. 25. P. 1757—1772.
56. *Balling P., Kristensen P., Stapelfeldt H. et al.* // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 1993. Vol. 26. P. 3531—3539.
57. *Амусья М. Я., Долматов В. К., Иванов В. К.* // *ЖЭТФ.* 1983. Т. 85, № 1. С. 115—123.
58. *Amusia M. Ya., Dolmatov V. K., Ivanov V. K., Shapiro S. G.* // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 1983. Vol. 16, N 24. P. L753—L756.
59. *Амусья М. Я., Долматов В. К., Иванов В. К.* // *ЖТФ.* 1986. Т. 56, № 1. С. 8—15.
60. *Amusia M. Ya., Dolmatov V. K., Mansurov M. M.* // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 1990. Vol. 22. P. L491—L494.
61. *Amusia M. Ya., Chernysheva L. V.* <http://arxiv.org/abs/physics/0701040>, 2007.
62. *Черепков Н. А., Чернышева Л. В.* // *Изв. АН СССР. Сер. физ.* 1977. Т. 41, N 12. С. 2518—2528.
63. *Samson J. A. R., Shefer Y., Angel G. C.* // *Phys. Rev. Lett.* 1986. Vol. 56. P. 2020—2024.
64. *Amusia M. Ya., Ivanov V. K., Chernysheva L. V.* // *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* 1981. Vol. 14. P. L19—L23.
65. *Bruhn R., Schmidt E., Schroder H., Sonntag B.* // *Phys. Lett. A.* 1982. Vol. 90, P. 41—44.
66. *Kobrin P. H., Becker U., Truesdale C. M. et al.* // *J. Electr. Spectr. Rel. Phenom.* 1984. Vol. 34. P. 129—139.
67. *Dolmatov V. K., Amusia M. Ya.* // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 1994. Vol. 27. P. L281—L285.
68. *Amusia M. Ya., Cherepkov N. A., Chernysheva L. V., Manson S. T.* // *Phys. Rev. A.* 2000. Vol. 61. P. R207—R211.
69. *Kieldsen H., Andersen P., Folkmann F. et al.* // *Phys. Rev. A.* 2000. Vol. 62. P. 020702.

70. Амусья М. Я., Грибакин Г. Ф., Иванов В. К., Чернышева Л. В. // Изв. АН СССР. Сер. физ. 1986. Т. 50, № 7. С. 1274—1278.
71. Kjeldsen H., <http://physics.nist.gov>.
72. Amusia M. Ya., Baltenkov A. S., Chernysheva L. V. et al. // Phys. Rev. A. 2005. Vol. 72. P. 032727.
73. Hemmers O., Guillemin R., Kanter E. et al. // Phys. Rev. Lett. 2003. Vol. 91, N 5. P. 053002.
74. Amusia M. Ya., Baltenkov A. S., Chernysheva L. V. // JETP Lett. 2008. Vol. 87, N 4. P. 230—233.
75. Amusia M. Ya., Baltenkov A. S., Chernysheva L. V. // JETP. 2008. Vol. 134, N 2 (8). P. 221—230.
76. Amusia M. Ya., Baltenkov A. S., Chernysheva L. V. // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 2008. Vol. 41. P. 165—201.
77. Amusia M. Ya., Baltenkov A. S., Chernysheva L. V. et al. // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 2005. Vol. 38. P. L169—L173.
78. Амусья М. Я., Балтенков А. С., Чернышева Л. В. и др. // ЖЭТФ. 2006. Vol. 129, N 1. P. 63—70.
79. Amusia M. Ya., Baltenkov A. S., Chernysheva L. V. // Phys. Rev. A. 2007. Vol. 75. P. 043201.
80. Amusia M. Ya., Baltenkov A. S., Chernysheva L. V. // Central European Journal of Physics. 2008. Vol. 6, N 1. P. 14—25.
81. Amusia M. Ya., Baltenkov A. S., Chernysheva L. V. // Письма в ЖЭТФ. 2009. Т. 89, № 6. С. 322—326.

РАЗДЕЛ II

РАССЕЯНИЕ ЭЛЕКТРОНОВ

ГЛАВА 3

ОСНОВНЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ ТЕОРИИ

3.1. Наиболее важное о рассеянии частиц на атомах

Рассеяние электронов — это процесс, который происходит и в естественных условиях, и в лаборатории. Данные о характеристиках этого процесса востребованы и в других областях физики и технологии. Они также служат источником информации относительно строения атомов и их свойств, равно как и относительно эффективности различных теоретических подходов, которые используются при описании процесса рассеяния электрона на атоме.

Теоретическое исследование рассеяния электронов даже на наиболее простом, водородном, атоме представляет значительные трудности, так как является, в сущности, проблемой трёх тел, поскольку требует описания состояний двух электронов, двигающихся в кулоновском поле ядра. Эта проблема имеет только численное решение, в отличие от фотоионизации водорода, сечение которой может быть получено чисто аналитически. Качественное усложнение по сравнению с фотоионизацией объясняет, почему именно $e + H$ -процесс — наиболее часто рассматриваемый случай при изучении рассеяния электрона на атоме.

Для многоэлектронных атомов ситуация становится ещё более сложной. Следующим объектом по частоте исследования после водорода является гелий. Также существуют данные относительно рассеяния на более сложных атомах.

Рассеяние может быть *упругим*, *неупругим* и *сверхупругим* [ЛЛ]. В упругом рассеянии энергия налетающей на атом частицы-снаряда до и после рассеяния остаётся той же самой. В неупругом рассеянии энергия, потерянная снарядом, может или ис-

пуститься в виде фотона, или быть передана атому-мишени, ведя к его возбуждению или ионизации. Ионизация — это процесс, в котором один или несколько электронов могут покинуть атом-мишень или ион, в то время как остаточный ион окажется в состоянии с минимально возможной энергией. Ионизация с возбуждением — это процесс, в котором один или несколько электронов удаляются из *атома-мишени*, и последний остается в возбужденном состоянии, на одном из дискретных возбужденных уровней *иона-остатка*. В сверхупругом рассеянии, происходящем лишь на возбуждённой частице-мишени, энергия снаряда увеличивается на величину энергии возбуждения частицы-мишени.

При поглощении фотонов одновременная ионизация с возбуждением или ионизация с возбуждением двух и большего числа электронов может произойти только благодаря межэлектронному взаимодействию. В рассеянии же электрона (или любой другой заряженной частицы) все эти процессы могут идти даже без учета взаимодействия между атомными электронами, только благодаря взаимодействию снаряда со всеми атомными электронами одновременно.

Любые неупругие процессы, кроме испускания фотона и сверхнеупругого рассеяния, начинаются с небольшой минимальной, так называемой *пороговой энергии I*.

Рассеяние электрона можно рассмотреть в одноэлектронном приближении и с учетом взаимодействия между атомными электронами. Несмотря на ограниченную точность одноэлектронного приближения, мы выполним и представим результаты вычислений в его рамках. Во многих случаях они могут служить хорошим первым шагом главным образом для ориентировки. В качестве одноэлектронного будет использоваться приближение Хартри-Фока, которое является лучшим методом, совместимым с идеей относительно независимого движения всех атомных электронов в так называемом самосогласованном поле. Мы описывали главные особенности приближения ХФ в п. 1.2.

Однако почти во всех процессах, которые рассматриваются в этой книге, роль межэлектронного взаимодействия существенна и во многих случаях решающе важна. Учёт межэлектронного взаимодействия ведёт к *корреляциям* в движении атомных электронов и существенно изменяет процесс рассеяния электронов на атомах (или ионах). Чтобы учесть межэлектронное взаимодействие, или, как их часто называют, *многоэлектронные корреляции*,

в этой книге мы будем использовать приближение случайных фаз с обменом (ПСФО), кратко описанное в применении к фотоионизации в разд. 1.5, или многочастичную теорию возмущения (МТВ). В сущности, ПСФО учитывает динамическое изменение самосогласованного поля, действующего на каждый электрон вне рамок МТВ, поскольку оно ведёт к большим поправкам [АМ]. В ряде случаев, чтобы рассмотреть атомные процессы, однако, может использоваться и МТВ, потому что межэлектронное взаимодействие иногда можно рассматривать как относительно малое возмущение.

Даже исследуя упругое рассеяние, взаимодействие снаряд-мишень не может быть сведено к простому, не зависящему от энергии, локальному потенциалу. Фактически, это взаимодействие нелокально, энергетически-зависимо, и только со значительным упрощением может быть представлено как некий *оптический потенциал*, который зависит лишь от координаты r и спина σ снаряда и его энергии $E = p^2 / 2$ [1]:

$$U(r, \sigma, E) = V(r, \sigma, E) + iW(r, \sigma, E), \quad (3.1)$$

где $V(r, \sigma, E)$ и $W(r, \sigma, E)$ — вещественные функции, последняя из которых прежде всего ответственна за поглощение частицы, описываемой волновой функцией $\psi_E(\mathbf{r}, \sigma)$. Уравнение для $\psi_E(\mathbf{r}, \sigma)$ выглядит следующим образом:

$$\left[-\frac{\Delta}{2} - \frac{Z}{r} + V(r, \sigma, E) + iW(r, \sigma, E) \right] \times \\ \times \psi_E(\mathbf{r}, \sigma) = E \psi_E(\mathbf{r}, \sigma). \quad (3.2)$$

Это уравнение может быть представлено в интегральной форме [2]:

$$\psi_E(\mathbf{r}) = \varphi_E(\mathbf{r}) + \int G_{E(0)}^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') U(r, \sigma, E) \psi_E(\mathbf{r}') d\mathbf{r}', \quad (3.3)$$

где $\varphi_E(\mathbf{r})$ — функция свободного движения налетающей частицы с энергией E ; $G_{E(0)}^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ — функция Грина кулоновского потенциала с зарядом Z . Эта функция Грина является решением уравнения [2]

$$\left[-\frac{\Delta}{2} - \frac{Z}{r} - E \right] G_{E(0)}^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (3.4)$$

Если на «снаряд» действует дополнительный потенциал $\delta U(r)$, то имеем вместо (3.3) следующее интегральное уравнение (см. [ЛЛ]):

$$\psi_E^{\delta U}(\mathbf{r}) = \psi_E(\mathbf{r}) + \int G_E^{(U)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \delta U(r, \boldsymbol{\sigma}, E) \psi_E^{\delta U}(\mathbf{r}') d\mathbf{r}', \quad (3.5)$$

где $G_E^{(U)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ — решение (3.4) с $U(r, \boldsymbol{\sigma}, E)$, добавленным к $-Z/r$.

Выражение (3.1) значительно упрощается в двух предельных случаях: при очень высоких энергиях $E = p^2/2 \gg I$ и очень низких $0 < E \ll I$, где I — потенциал ионизации мишени. В обоих случаях можно положить $W(r, \boldsymbol{\sigma}, E) = 0$. Что касается $V(r, \boldsymbol{\sigma}, E)$, он становится энергетически независимым, и при $E \rightarrow \infty$ равен [3]

$$V(r, \boldsymbol{\sigma}, E)|_{E \rightarrow \infty} = -\frac{Z}{r} + \int \frac{\rho(r')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}' \quad (3.6)$$

где Z — заряд ядра и $\rho(r)$ — атомная электронная плотность.

При $E \ll I$ потенциал $V(r, \boldsymbol{\sigma}, E)$ на больших расстояниях r убывает как [3]

$$V(r, \boldsymbol{\sigma}, E) = -\frac{\alpha_d}{2r^4}, \quad (3.7)$$

где α_d — дипольная поляризуемость мишени [см. (1.86)]. Спиновой зависимостью потенциала (3.1), обычно слабой, мы пренебрегаем, так что $U = U(r, E)$.

Сечение рассеяния выражается через сдвиг фаз $\delta_l(E)$ электронных парциальных волн, которые соответствуют данному угловому моменту l . Из-за рассеяния радиальная часть волновой функции $\psi_E(\mathbf{r}, \boldsymbol{\sigma}) = P_{El}(r)$ [см. (1.57)] — может быть представлена при $r \rightarrow \infty$ как

$$P_{El}(r)|_{r \rightarrow \infty} \rightarrow \frac{1}{\sqrt{\pi l}} \sin[pr - l\pi/2 + \delta_l(E)] \quad (3.8)$$

вместо

$$P_{El}^{(0)}(r)|_{r \rightarrow \infty} \rightarrow \frac{1}{\sqrt{\pi l}} \sin(pr - l\pi/2). \quad (3.9)$$

Фазовый сдвиг $\delta_l(E)$ определяется или асимптотикой волновой функции [см. (3.8)], или из следующего соотношения:

$$e^{i\delta_l(E)} \sin \delta_l(E) = [\langle j_l(pr) | U(r, E) | P_{El}(r) \rangle], \quad (3.10)$$

где сферическая функция Бесселя $j_l(pr)$ описывает радиальную часть волновой функции свободного электрона.

Интересна формула, которая дает дополнительный фазовый сдвиг $\Delta\delta_l(E)$, если на налетающую частицу действует дополнительный потенциал $\delta U(r, E)$ [ЛЛ]:

$$e^{i\Delta\delta_l(E)} \sin \Delta\delta_l(E) = \\ = [\langle P_{El}^{(U)}(r) | \delta U(r, E) | P_{El}^{(U+\delta U)}(r) \rangle], \quad (3.11)$$

где $P_{El}^{(U)}(r)$ и $P_{El}^{(U+\delta U)}(r)$ — радиальные части волновых функций частицы, полученные в потенциалах $U(r, E)$ и $\delta U(r, E)$ соответственно.

Вообще говоря, сдвиги фаз $\delta_l(E)$ комплексны

$$\delta_l(E) = \eta_l(E) + i\mu_l(E). \quad (3.12)$$

Дифференциальное по углу θ сечение упругого рассеяния $d\sigma_E^{\text{упр}}(\theta) / d\Omega$ выражается через фазовые сдвиги $\delta_l(E)$ с помощью следующей формулы [ЛЛ]:

$$\frac{d\sigma_E^{\text{упр}}(\theta)}{d\Omega} = \sum_{l, l'=0}^{\infty} \frac{1}{E} (2l+1)(2l'+1) (e^{2i\eta_l(E)-2\mu_l(E)} - 1) \times \\ \times (e^{-2i\eta_{l'}(E)-2\mu_{l'}(E)} - 1) P_l(\cos\theta) P_{l'}(\cos\theta). \quad (3.13)$$

Полное сечение упругого рассеяния получаем после интегрирования (3.13) по $d\Omega$:

$$\sigma^{\text{упр}}(E) \equiv \sum_{l=0}^{\infty} \sigma_l^{\text{ел}}(E) = \frac{2\pi}{E} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \eta_l(E) e^{-2\mu_l(E)}. \quad (3.14)$$

Аналогично можно получить выражения для сечений неупругого и полного рассеяния [ЛЛ]:

$$\sigma^{\text{неупр}}(E) \equiv \sum_{l=0}^{\infty} \sigma_l^{\text{неупр}}(E) = \frac{2\pi}{E} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) (1 - e^{-4\mu_l(E)}). \quad (3.15)$$

$$\sigma^{\text{полн}}(E) \equiv \sum_{l=0}^{\infty} \sigma_l^{\text{полн}}(E) = \\ = \frac{2\pi}{E} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) [1 - \cos \eta_l(E) e^{-2\mu_l(E)}]. \quad (3.16)$$

Если фазы $\delta_l(E)$ чисто вещественны, что случается, когда каналы неупругого рассеяния закрыты, сечение упругого рассеяния даётся формулой

$$\sigma^{\text{упр}}(E) = \frac{2\pi}{E} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l(E). \quad (3.17)$$

В расчётах, чтобы описать упругое рассеяние, очень часто используется *первое борновское приближение*. Оно учитывает поправки первого порядка по $U(r, E)$ к движению свободного «снаряда». Соответствующий фазовый сдвиг $\delta_l^{(B)}(E)$ получается с помощью (3.11) и имеет вид

$$\delta_l^{(B)}(E) = \langle j_l(pr) | U(r, E) | j_l(pr) \rangle. \quad (3.18)$$

Поправки первого порядка к фазам $\Delta \delta_l(E)$ из-за малого дополнительного потенциала $\delta U(r, E)$ получаются из (3.11) и имеют вид

$$\Delta \delta_l(E) = [\langle P_{El}^{(U)}(r) | \delta U(r, E) | P_{El}^{(U)}(r) \rangle]. \quad (3.19)$$

Так как при $E \rightarrow \infty$ можно пренебречь взаимодействием атома и снаряда, естественно определить фазу таким способом, чтобы при $E \rightarrow \infty$ она обращалась в ноль: $\delta_l(E)|_{E \rightarrow \infty} \rightarrow 0$. Тогда есть две возможности для записи $\delta_l(0)$. Если нет никакого обмена между налетающими частицами и атомными электронами, то есть они неидентичны, имеем [ЛЛ]:

$$\delta_l(0) = n_l \pi, \quad (3.20)$$

где n_l — число свободных дискретных уровней с угловым моментом l в потенциале $U(r, E)$ мишени.

Если налетающая частица — электрон и обмен с электронами мишени учтен, имеем вместо (3.20) совершенно другое соотношение, а именно [4]:

$$\delta_l(0) = (n_l + q_l) \pi, \quad (3.21)$$

где q_l — число занятых уровней с моментом l в мишени.

При $E \rightarrow 0$ для сдвига фаз верно следующее выражение [ЛЛ, 3]:

$$\delta_l(E) - \delta_l(0) \approx a_l p^{2l+1} (1 + b_l p + \dots), \quad (3.22)$$

где для электрона $p = \sqrt{2E}$.

Таким образом, мы видим, что сечение упругого рассеяния в пределе $E \rightarrow 0$ постоянно. Однако сечение рассеяния, обуслов-

ленное квантово-механической природой процесса, может отличаться, и обычно существенно отличается, от своей геометрической величины $4\pi r_A^2$, где r_A — радиус мишени. Сечение может также изменяться очень быстро даже при малом изменении p . В качестве примера здесь служит так называемый минимум Рамзауэра [4, 5], который появляется в сечениях рассеяния на всех, кроме гелия, благородных газах, при довольно малых энергиях. Там s -фазы растут, с ростом E от $E = 0$, но очень скоро достигают максимума и затем начинают уменьшаться. Они достигают второго нулевого значения при $E > 0$, где p -фаза все еще очень мала. Вариация типа Рамзауэра означает, что реальный параметр разложения в (3.22) — не просто $r_A p \ll 1$, но величина, которая существенно зависит от размера и формы $U(r, E)$.

Вычисление сечения неупругого рассеяния — вообще довольно сложная проблема, которая, однако, очень упрощается при высоких энергиях $E \gg I$ или, точнее, при $p \gg \sqrt{I}$. В этом случае первое борновское приближение справедливо и задача рассеяния «снаряд—мишень» значительно упрощается. Действительно, при высокой энергии E взаимодействие снаряда и мишени слабо. В результате, полная волновая функция системы «снаряд + мишень» может быть представлена в начальном i (конечном f)-состоянии как произведение плоской волны, описывающей снаряд, и волновой функции мишени $\Psi_{i(f)}^{At}(x_1, \dots, x_N)$:

$$\Psi_E^{i(f)}(x, x_1, \dots, x_N) = e^{i\mathbf{p}_i \mathbf{r}} \Psi_{i(f)}^{At}(x_1, \dots, x_N). \quad (3.23)$$

Амплитуда $i \rightarrow f$ перехода $M_{i \rightarrow f}$ дается выражением

$$M_{i \rightarrow f}(q) = \left\langle e^{i\mathbf{p}_i \mathbf{r}} \Psi_i^{At}(x_1, \dots, x_N) \times \right. \\ \left. \times \left| \sum_{j=1}^N \frac{1}{|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}|} \right| e^{-i\mathbf{p}_f \mathbf{r}} \Psi_f^{At}(x_1, \dots, x_N) \right\rangle. \quad (3.24)$$

После интегрирования по r получаем следующее выражение [ЛЛ]:

$$M_{i \rightarrow f}(q) = \frac{4\pi}{q^2} \sum_{j=1}^N \left\langle \Psi_i^{At}(x_1, \dots, x_j, \dots, x_N) \times \right. \\ \left. \times \left| e^{i\mathbf{q} \mathbf{r}_j} \right| \Psi_f^{At}(x_1, \dots, x_j, \dots, x_N) \right\rangle =$$

$$= \frac{4\pi}{q^2} \sum_{j=1}^N \int \psi_i^{*A_i}(x_1, \dots, x_j, \dots, x_N) \times \\ \times e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_j} \psi_i^{A_i}(x_1, \dots, x_j, \dots, x_N) dx_1, \dots, dx_j, \dots, dx_N, \quad (3.25)$$

где $\mathbf{q} = \mathbf{p}_f - \mathbf{p}_i$.

Сечение рассеяния выражается через амплитуду $M_{i \rightarrow f}(q)$ с помощью формулы

$$\frac{d^2\sigma_{i \rightarrow f}(q)}{d\Omega d\omega_{if}} = \frac{4p_f}{q^2 p_i \omega_{if}} |M_{i \rightarrow f}(q)|^2. \quad (3.26)$$

Следующее выражение называют обобщенной силой осцилляторов (ОСО):

$$G_{i \rightarrow f} = \frac{2\omega_{if}}{q^2} |M_{i \rightarrow f}(q)|^2, \quad (3.27)$$

так как при $q \rightarrow 0$ имеем $G_{i \rightarrow f}(q) \rightarrow G_{i \rightarrow f}^R$ с выражением $G_{i \rightarrow f}^R$, совпадающим с оптической силой осциллятора, данной (1.6). Если состояние f принадлежит непрерывному спектру, величину $G_{i \rightarrow f}(q)$ называют плотностью ОСО.

ОСО удовлетворяют правилу сумм, подобному существующему для $g_{i \rightarrow f}$ и $\sigma(\omega)$, т. е. выражению (1.7):

$$\sum_f \int G_{i \rightarrow f}(q) = N. \quad (3.28)$$

Отметим, что суммирование по f в (3.28) подразумевает и интегрирование по ε .

Очень часто, чтобы описать рассеяние не слишком быстро го электрона на атоме, используется *борновское приближение искаженных волн* (БПИВ). В этом приближении начальные и конечные состояния снаряда представлены не плоскими волнами, а решениями (3.2) с потенциалом $V(r, \sigma, E)$, вообще говоря, разным для начальных и конечных состояний, $V_i(r, \sigma, E) \neq V_f(r, \sigma, E)$. Соответствующие волновые функции заменяют плоскую волну в (3.23) и (3.24) на (3.2), переопределяя тем самым через (3.26) сечение неупругого рассеяния в БПИВ.

Если атом-мишень находится в возбужденном состоянии A^* , наряду с упругим и неупругим рассеянием может иметь место сверхупругое рассеяние, в котором налетающая частица увеличивает свою энергию на энергию возбуждения мишени. Определенная особенность сверхупругих процессов состоит в том, что их сечение $\sigma^{\text{sup}}(E)$ стремится к бесконечности с уменьшением $p = \sqrt{2E} \rightarrow 0$ как $1/p$ (см., к примеру, [ЛЛ]):

$$\sigma^{\text{sup}}(E)|_{p \rightarrow 0} = a/p. \quad (3.29)$$

3.2. Упругое рассеяние в одноэлектронном приближении

В одноэлектронном приближении сечение электрон-атомного упругого рассеяния описывается с использованием относительно простого потенциала, который независим от энергии E и не имеет мнимой части, так что вместо (3.1) есть просто вещественный потенциал $V(r)$. Зависимость от спина налетающего электрона s появляется как релятивистская поправка порядка v/c к $V(r)$, где v — скорость налетающего электрона и c — скорость света. В сферически-симметричном потенциале атома вектор углового момента $\mathbf{l}$ характеризует электронные состояния. Поэтому *спин-орбитальный* потенциал представлен (см., к примеру, [ИС]) в следующей форме:

$$V_{ls}(r) = \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial r} V(r)(\mathbf{l}s). \quad (3.30)$$

Таким образом, волновая функция налетающего электрона в одноэлектронном приближении определяется следующим уравнением:

$$\left[-\frac{\Delta}{2} - \frac{Z}{r} + V(r) + \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial r} V(r)(\mathbf{l}s) \right] \varphi_E(\mathbf{r}, \sigma) = E \varphi_E(\mathbf{r}, \sigma). \quad (3.31)$$

В наших вычислениях в качестве одноэлектронного мы используем ХФ-приближение, которое рассматривает на равных основаниях налетающий и атомные электроны. Это приближе-

ние было описано выше, в п. 1.2. Волновая функция налетающего электрона $\varphi_E(x)$ есть решение уравнения

$$-\frac{\Delta}{2} \varphi_E(x) - \frac{Z}{r} \varphi_E(x) + \sum_{k=1}^N \int dx' \varphi_k^*(x') \frac{1}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|} \times \\ \times [\varphi_k(x') \varphi_E(x) - \varphi_E(x') \varphi_k(x)] = E \varphi_E(x). \quad (3.32)$$

Волновые функции занятых состояний $\varphi_k(x)$ ($1 \leq k \leq N$; $x \equiv \mathbf{r}, s$) определены уравнением, подобным (3.32):

$$-\frac{\Delta}{2} \varphi_j(x) - \frac{Z}{r} \varphi_j(x) + \sum_{k=1}^N \int dx' \varphi_k^*(x') \frac{1}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|} \times \\ \times [\varphi_k(x') \varphi_j(x) - \varphi_j(x') \varphi_k(x)] = \varepsilon_j \varphi_j(x). \quad (3.33)$$

Здесь j принадлежит занятым состояниям в атоме-мишени.

Чтобы получить физические результаты, т. е. фазовые сдвиги и затем сечения, должны быть выполнены аналитические и затем численные расчеты. Как первый шаг, одноэлектронные волновые функции $\varphi_k(x) \equiv \varphi_{\varepsilon(n)lm\sigma}(\mathbf{r}, s)$ — решения ХФ-уравнений (3.32) и (3.33) — должны быть представлены в виде произведений радиальных $R_{\varepsilon(n)l}(r) \equiv r^{-1}P_{\varepsilon(n)l}(r)$, угловых $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$ и спиновых χ_σ функций:

$$\varphi_{\varepsilon(n)lm\sigma}(\mathbf{r}, s) = r^{-1}P_{\varepsilon(n)l}(r)Y_{lm}(\vartheta, \varphi)\chi_\sigma, \quad (3.34)$$

где $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$ — так называемая сферическая функция; χ_σ — спиновая функция; $\varepsilon(n)$ — одноэлектронная энергия (главное квантовое число); l — квантовое число углового момента; m — его проекция на избранную ось; σ — проекция спина электрона, ϑ и φ — полярные и азимутальные углы координаты электрона $\mathbf{r}$. Интегрирование по полярному углу и суммирование по проекции спина могут быть выполнены аналитически, в то время как интегрирование по r — численно.

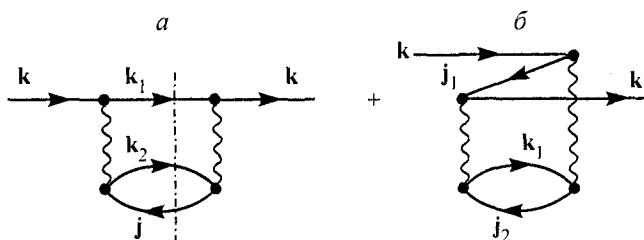
3.3. Поляризационное взаимодействие

Поляризационное взаимодействие между электроном-снарядом и мишенью-атомом есть результат деформации мишени в ходе процесса столкновения. Налетающий электрон вызывает смещение заряда в атоме-мишени, которое приводит к созданию дипольного момента. Этот дипольный момент действует на налетающий электрон непосредственно.

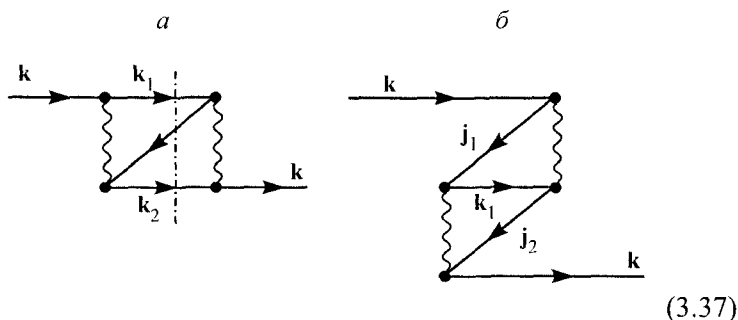
Поляризационное взаимодействие может быть описано классически и представлено потенциалом, который на больших расстояниях от мишени убывает, согласно (3.7), как $\sim 1/r^4$. При малых r , $r < r_A$ (r_A — атомный радиус), сингулярности $1/r^4$ в (3.7) не существует, так как $V(r, \sigma, E) \rightarrow \text{const}$ при $r \rightarrow 0$. Поэтому при любых r потенциал $V(r, \sigma, E)$ можно представить полупеноменологически в следующем виде:

$$V(r, \sigma, E) = \frac{-\alpha_d}{2(r^2 + b^2)^2}, \quad (3.35)$$

где $b^4 = -\alpha_d / 2V(0)$ Статическая дипольная поляризуемость α_d атома-мишени (см. (1.86) при $\omega \rightarrow 0$) может быть или рассчитана, или взята из эксперимента. Параметр b может быть выбран таким образом, чтобы обеспечить возможно хорошее описание рассеяния электронов при низкой энергии. Однако в таком подходе исчезает энергетическая зависимость потенциала, так же как и существование его мнимой части. Вот почему в ряде статей, начинающихся со старых вычислений в [6] и [7], при определении поляризационного взаимодействия использовались многочастичные подходы теории многих тел. Диаграммы, представленные ниже, описывают это взаимодействие в самом низком порядке теории возмущения — по межэлектронному взаимодействию:



$$(3.36)$$



Эти диаграммы в принципе должны быть дополнены поправками более высоких порядков. В качестве таких мы включаем взаимодействие между атомным возбужденным электроном и вакансией j . Можно показать, что только вклад диаграммы (3.36, *a*) определяет $\sim 1/r^4$ поведение поляризационного взаимодействия. Все другие диаграммы влияют лишь на короткодействующую часть поляризационного взаимодействия. Оказалось, однако, что сдвиг фаз (3.10) определяется всеми четырьмя членами диаграмм (3.36) и (3.37). Мнимая часть сдвига фаз происходит от части вклада диаграмм (3.36, *a*) и (3.37, *a*), возникающего, когда промежуточные состояния, обозначенные вертикальными пунктирными линиями, становятся реальными физическими состояниями. Заметим, что, как нетрудно убедиться, промежуточные состояния диаграмм (3.36, *б*) и (3.37, *б*) могут быть только виртуальными.

Оказалось, что в широкой области энергий налетающих электронов: $E = p_k^2 / 2$ (где p_k — импульс в состоянии k), для неплохого описания процесса электрон-атомного рассеяния взаимодействие между налетающими (уходящими) и атомными электронами достаточно учесть во втором порядке теории возмущения [7, 8]. Как было упомянуто выше, взаимодействие между атомными электронами при этом весьма часто следует учитывать и в более высоких порядках, включая некоторое суммирование бесконечных последовательностей диаграмм. В результате, получаем матрицу поляризационного взаимодействия, которая представлена в следующей форме $\langle k_i | \hat{\Sigma}(E) | k_f \rangle$ [8].

Во втором порядке аналитические выражения, соответствующие диаграммам (3.36), (3.37), представлены следующим образом:

$$\langle E_i l | \hat{\Sigma}(E) | E_f l \rangle = \frac{1}{(2l+1)} \times$$

$$\times \sum_{\substack{j \leq F, L \\ \varepsilon_1 l_1, \varepsilon_2 l_2 > F}} \int_0^{\infty} \frac{\langle E_i l, \varepsilon_j l_j \| V_L \| \varepsilon_1 l_1, \varepsilon_2 l_2 \rangle}{(2L+1)(E - \varepsilon_1 - \varepsilon_2 + \varepsilon_1 + i\delta)} \times \\ \times \langle \varepsilon_1 l_1, \varepsilon_2 l_2 \| U_L \| E_f l, \varepsilon_j l_j \rangle d\varepsilon_1 d\varepsilon_2; \quad (3.38)$$

$$\langle E_i l \| \hat{\Sigma}^l(E) \| E_f l \rangle = \frac{1}{(2l+1)} \times \\ \times \sum_{\substack{j_1, j_2 \leq F, L \\ \varepsilon_2 l_2 > F}} \int_0^{\infty} \frac{\langle E_i l, \varepsilon_{j_2} l_{j_2} \| V_L \| \varepsilon_{j_1} l_{j_1}, \varepsilon_2 l_2 \rangle}{(2L+1)(E - \varepsilon_{j_1} + \varepsilon_2 - \varepsilon_{j_2})} \times \\ \times \langle \varepsilon_{j_1} l_{j_1}, \varepsilon_2 l_2 \| U_L \| E_f l, \varepsilon_{j_2} l_{j_2} \rangle d\varepsilon_2. \quad (3.39)$$

Здесь $E_{i(f)}l$ — энергия и угловой момент начального (конечного) состояния налетающего электрона; $\varepsilon_1 l_1, \varepsilon_2 l_2$ — энергии электронов и угловые моменты в промежуточном состоянии $\varepsilon_{j_1} l_{j_1}, \varepsilon_{j_2} l_{j_2}$ — соответствующие значения для вакансий. Волновые функции электронов и вакансий определены в приближении ХФ решением уравнений (3.32) и (3.33) соответственно. Включение ПСФО поправок более высоких порядков в (3.38) и (3.39) обсуждается подробно в [АС]. Приведенные кулоновские матричные элементы, которые обозначены двойными вертикальными линиями, также определены в [АС].

Поляризационное взаимодействие нелокально, энергетически зависимо и является комплексной функцией

$$\Sigma(\mathbf{r}, \mathbf{r}', E) \equiv \text{Re}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', E) + i \text{Im}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', E). \quad (3.40)$$

Мнимая часть $\Sigma(\mathbf{r}, \mathbf{r}', E)$ определена членом $i\delta$ в (3.38):

$$\text{Im} \langle E_i l \| \hat{\Sigma}^l(E) \| E_f l \rangle = \frac{\pi}{(2l+1)} \sum_{\substack{j \leq F, L \\ \varepsilon_1 l_1, \varepsilon_2 l_2 > F}} \frac{1}{(2L+1)} \times \\ \times \int_0^{\infty} \langle E_i l, \varepsilon_j l_j \| V_L \| \varepsilon_1 l_1, \tilde{\varepsilon}_2 l_2 \rangle \langle \varepsilon_1 l_1, \tilde{\varepsilon}_2 l_2 \| U_L \| E_f l, \varepsilon_j l_j \rangle d\varepsilon_1, \quad (3.41)$$

где $\tilde{\varepsilon}_2 = E - \varepsilon_1 + \varepsilon_j$.

Выражения (3.38) и (3.39) определяют поляризационное взаимодействие в так называемом упрощенном ПСФО (УПСФО) [9, 10, 11].

3.4. Уравнение Дайсона

Уравнение Дайсона определяет точную одноэлектронную волновую функцию. Оно включает поляризационное взаимодействие, не определяя его форму. Так как поляризационное взаимодействие является дополнительным по отношению к ХФ, уравнение Дайсона для электрон-атомного рассеяния может быть представлено следующим образом:

$$\begin{aligned}
 -\frac{\Delta}{2} \psi_E(x) - \frac{Z}{r} \psi_E(x) + \sum_{k=1}^N \int dx' \psi_k^*(x') \frac{1}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|} \times \\
 \times [\psi_k(x') \psi_E(x) - \psi_E(x') \psi_k(x)] + \\
 + \int dx' \Sigma(x, x', E) \psi_E(x') = E \psi_E(x). \quad (3.42)
 \end{aligned}$$

Благодаря E -зависимости функции $\psi_E(x)$ имеют необычную нормировку:

$$\int dx \psi_E^*(x) \psi_{E'}(x) = Z(E) \delta(E - E'), \quad (3.43)$$

где Z , которую называют перенормировочной константой или спектроскопическим фактором, определяется соотношением [12]

$$Z(E) = 1 / [1 - \partial < E | \hat{\Sigma}(E) | E > / \partial E] < 1. \quad (3.44)$$

В реальных численных расчетах, однако, отклонением Z от 1 пренебрегают и $\psi_k(x)$ для $k \leq F$ заменяется ХФ-волновой функцией $\phi_k(x)$.

Уравнение (3.42) удобно решить в интегральной форме и в энергетическом представлении, которое для парциальной волны l имеет вид [8]:

$$\begin{aligned}
 \left\langle El \left| \hat{\Sigma}^l(E_1) \right| E'l \right\rangle = \left\langle El \left| \hat{\Sigma}^l(E_1) \right| E'l \right\rangle + \sum_{E''} \left\langle El \left| \hat{\Sigma}^l(E_1) \right| E''l \right\rangle \times \\
 \times \frac{1}{E_1 - E'' + i\delta} \left\langle El \left| \hat{\Sigma}^l(E_1) \right| E'l \right\rangle, \quad (3.45)
 \end{aligned}$$

где сумма по E'' включает и интегрирование по сплошному спектру.

Дополнительная фаза рассеяния, обусловленная поляризационным взаимодействием $\hat{\Sigma}(E)$, $\Delta\delta_l(E)$, связана с диагональным матричным элементом (3.45) [8]:

$$e^{i\Delta\delta_l(E)} \sin \Delta\delta_l(E) = \left\langle El \left\| \hat{\Sigma}^l(E) \right\| El \right\rangle. \quad (3.46)$$

Если в (3.45) используются такие матричные элементы, как $\langle El | \hat{\Sigma}^l(E_1) | E''l \rangle$ (см. 3.38) и (3.39), то выражение (3.46) определяет поправки к фазам рассеяния в УПСФО.

При малом поляризационном взаимодействии поправка к фазе определяется вместо (3.46) следующим соотношением [10]:

$$\Delta\delta_l(E) = \left\langle El \left\| \hat{\Sigma}^l(E) \right\| El \right\rangle. \quad (3.47)$$

Методы, описанные выше, наиболее удобны для атомов с заполненными оболочками. Так же как в фотоионизации, присутствие открытых оболочек добавляет много сложностей. Однако существует группа атомов (см. п. 1.10), рассмотрение которых почти столь же просто и последовательно, как для атомов с закрытыми оболочками. Мы имеем в виду атомы с полузаполненными оболочками.

Идея подхода, используемого для их рассмотрения в процессах рассеяния, аналогична описанной в п. 1.10 [13]. Все электроны, включая налетающий, представлены как «вверх»- или «вниз»-частицы и обозначаются стрелками $\uparrow$ и $\downarrow$ соответственно. Чтобы проиллюстрировать отличие от атомов с заполненными подоболочками, рассмотрим поляризационное взаимодействие во втором порядке теории возмущений по межэлектронному взаимодействию, которое для «вверх» («вниз») налетающего электрона представлено диаграммами, подобными (3.36) и (3.37):

$$+ \quad (3.48)$$

a

б

$$(3.49)$$

Заметим, что линии налетающего электрона соответствует состояние «вверх» или «вниз».

Матричные элементы, которые даются аналитическими формулами, соответствующими (3.48, 3.49), представляют выражения так называемого упрощенного спин-поляризованного ПСФО для матричных элементов $\langle E_l \uparrow(\downarrow) | \hat{\Sigma}_{l \uparrow(\downarrow)}^l(E_1) | E'' l \uparrow(\downarrow) \rangle$ поляризационного взаимодействия. Таким образом, уравнение (3.45) разделяется на два независимых, которые соответствуют «вверх»- и «вниз»-электронам. Уравнение (3.46) дает два отдельных фазовых сдвига $\Delta \delta_{l \uparrow(\downarrow)}(E)$, которые после добавления к соответствующим спин-поляризованным ХФ-фазам позволяют получать с помощью (3.13)—(3.17) все сечения электрон-атомного рассеяния $\sigma_{\uparrow(\downarrow)}^{\text{упр}}(E) \sigma_{\uparrow(\downarrow)}^{\text{неупр}}(E) \sigma_{\uparrow(\downarrow)}^{\text{полн}}(E)$ соответственно.

3.5. Неупругое рассеяние электронов низких и средних энергий

Этот процесс обычно рассматривают в так называемом *борновском приближении искаженных волн e*. Следующая диаграмма представляет соответствующую амплитуду

$$(3.50)$$

Состояния налетающего и уходящих, так же как атомных электронов, определены в ХФ-приближении. Амплитуда, которая соответствует (3.50), дается матричным элементом

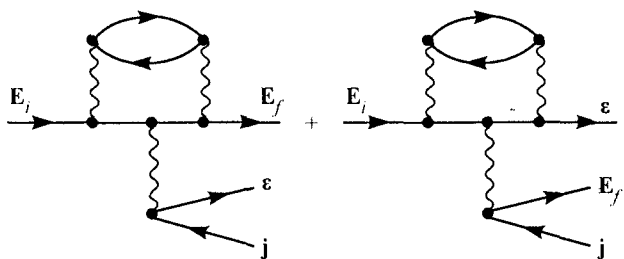
$$F_{i \rightarrow f \epsilon j} \equiv \langle E_i j | V | E_f \epsilon \rangle - \langle E_i j | V | \epsilon E_f \rangle. \quad (3.51)$$

Следующее отношение определяет сечение неупругого рассеяния $\sigma_i^{\text{неупр}}$ в этом приближении [ЛЛ]

$$\sigma_i^{\text{неупр}} = \frac{2\pi}{E_i} \sum_{i \leq F} \int_0^{\infty} |F_{i \rightarrow f \epsilon j}|^2 \delta(E_i - E_f - \epsilon + \epsilon_j) dE_f d\epsilon. \quad (3.52)$$

Одноэлектронные волновые функции могут быть рассчитаны с учетом поляризационного взаимодействия. Относительно легко учесть также взаимодействие между одним из электронов в конечном состоянии и вакансией j в рамках ПСФО. Намного более сложно учесть одновременно взаимодействие между обоими электронами и вакансией.

Техника диаграмм многих тел наглядно демонстрирует, что взаимодействие между электронами в начальном и конечном состояниях существует и в принципе может стать важным фактором. В качестве примера представим следующую поправку:



$$(3.53)$$

Однако все такие поправки находятся вне рамок нашего рассмотрения в этой книге.

3.6. Неупругое рассеяние быстрых частиц

Сечение неупругого рассеяния любой налетающей быстрой частицы (3.27) можно выразить через обобщенные силы осцилляторов (ОСО). Это следует из определения ОСО (3.27). Поскольку при $q \rightarrow 0$ ОСО совпадают с оптическими силами осцилляторов (1.5), (3.27), то в области малых q они просто пропорциональны либо сечению фотоионизации (1.4), либо силе осциллятора, в зависимости от конечного состояния: является ли оно дискретным возбуждением или принадлежит непрерывному

представлено символически аналогично (1.41a) в следующем виде:

$$\hat{A}_R(\omega, q) = \hat{A}(q) + \hat{A}_R(\omega, q) \times \hat{\chi}(\omega) \times \hat{U}, \quad (3.59)$$

где функция распространения (пропагатор) пары «электрон—вакансия» $\hat{\chi}(\omega, q)$ и комбинация прямого и обменного межэлектронного кулоновского взаимодействия $\hat{U}(q)$ определены как в (1.41a). Однако теперь они зависят в принципе от q . Подобно (1.41a), решение уравнения (3.57) может быть представлено также символически в виде следующего выражения:

$$\hat{A}_R(\omega, q) = \frac{\hat{A}(q)}{\hat{1} - \hat{\chi}(\omega, q) \times \hat{U}(q)}. \quad (3.60)$$

Это уравнение позволяет качественно исследовать общие особенности коллективных многоэлектронных эффектов в ОСО так же, как это было сделано в п. 1.5 для фотоионизации. Действительно, мы ищем случаи сильного увеличения ОСО, которые соответствуют нулям знаменателя в (3.60). Частоты $\Omega(q)$, которые являются решениями уравнения

$$\hat{1} - \hat{\chi}(\Omega_q, q) \times \hat{U}(q) = 0, \quad (3.61)$$

можно назвать гигантскими резонансами ОСО, которые при $q \rightarrow 0$ совпадают с гигантским резонансом в фотоионизации.

Как и в фотоионизации (см. п. 1.5), многоэлектронные корреляции могут проявиться также в *интерференционных резонансах* (ИР) и *корреляционных минимумах* (КМ). В ИР, например, полная амплитуда удаления электрона из внешней атомной подболочки $\hat{A}_R^{(0)}(\omega_{\text{ИР}}, q)$ намного больше, чем $A^{(0)}(q)$. Это обусловлено большой амплитудой $\hat{A}_R^{(i)}(\omega_{\text{ИР}}, q)$ взаимодействия быстрых заряженных частиц со внутренней подболочкой, которая сильно связана с внешним межбололочечным взаимодействием $\hat{U}^{(i\omega)}$ [см. (1.47)]:

$$\begin{aligned} \hat{A}_R^{(0)}(\omega_{\text{ИР}}, q) &= \\ &= \hat{A}_R^{(i)}(\omega_{\text{ИР}}, q) \times \hat{\chi}^{(i)}(\omega) \times \hat{U}^{(i\omega)} \gg A^{(0)}(q). \end{aligned} \quad (3.62)$$

Проявлением деструктивной интерференции является КМ, такой что $\hat{A}_R(\omega_{\text{КМ}}, q) = 0$, в то время как $A^{(0)}(q) \neq 0$.

Не символически ур-е (3.59) обычно представляют в матричной форме, в которой оно, естественно, выглядит более сложно (для дипольной амплитуды фотоионизации это иллюстрируется (1.37):

$$\begin{aligned} \langle f | \hat{A}_R(\omega, q) | i \rangle &= \langle f | \hat{A}^{r, \nu}(q) | i \rangle + \left(\sum_{n' \leq F, k' > F} - \sum_{n' > F, k' \leq F} \right) \times \\ &\times \frac{\langle k' | \hat{A}_R(\omega, q) | n' \rangle \langle n' f | U | k' i \rangle}{\omega - \varepsilon_{k'} + \varepsilon_{n'} + i\eta(1 - 2n_{k'})}. \end{aligned} \quad (3.63)$$

Здесь, как и в (1.37), $\leq F(> F)$ обозначает занятые (свободные) ХФ-состояния; ε_n — одноэлектронные ХФ-энергии; $\eta \rightarrow 0$ и $n_k = 1(0)$ для $k \leq F(> F)$ соответственно; $\langle nf | U | ki \rangle = \langle nf | V | ki \rangle - \langle nf | V | ik \rangle$. Результаты ПСФО для форм *длины* и *скорости* должны быть теми же самыми, и поэтому $\hat{A}_R(\omega, q)$ не имеет верхнего индекса r или ν .

Процедура решения этого уравнения детально описана в [АЧ], [АМ] и для фотоионизации ПСФО-уравнение представлено в разд. 1.7. Единственное отличие состоит в том, что оператор $\hat{A}^{r, \nu}(q)$ следует разложить в бесконечный ряд и дипольной его компонентой можно ограничиться далеко не всегда:

$$\hat{A}^{r, \nu}(\mathbf{q}) = \sum_{L=0}^{\infty} A_L^{r, \nu}(q) P_L(\cos \theta), \quad (3.64)$$

где $P_L(\cos \theta)$ — полином Лежандра L -того порядка; θ — угол между векторами $\mathbf{r}$ и $\mathbf{q}$. После выполнения аналитического интегрирования по θ в (3.63) получаем систему уравнений, отдельную для каждого L . Заметим, что рассматриваемые q обычно заметно больше, чем $k = \omega/c$, т. е. импульса фотона той же переданной энергии ω .

С помощью (3.58) и (3.63) можно представить ОСО с учетом многоэлектронных ПСФО-корреляций в следующей форме:

$$G_{fi}^R(\omega, q) = \frac{2\omega}{q^2} \left| \langle f | \hat{A}_R(\omega, q) | i \rangle \right|^2. \quad (3.65)$$

Здесь $\langle f |$ и $| i \rangle$ — соответственно конечное и начальное ХФ-состояние.

Чтобы учесть многоэлектронные корреляции в ПСФО, следует решить систему уравнений (3.63), которая после разделения компонент с отличным L для r -формы имеет вид

$$\begin{aligned} \langle f | \hat{A}_R^L(q, \omega) | i \rangle = & \langle f | j_L(qr) | i \rangle + \left(\sum_{n' \leq F, k' > F} - \sum_{n' < F, k' \leq F} \right) \times \\ & \times \frac{\langle k' | \hat{A}_R^L(q, \omega) | n' \rangle \langle n' f | U | k' i \rangle_L}{\omega - \varepsilon_{k'} + \varepsilon_{n'} + i\eta(1 - 2n_{k'})}. \end{aligned} \quad (3.66)$$

Процедура решения этого уравнения детально описана в [АЧ] и разд. 1.7.

Соотношение, подобное (3.57), которое следует из (3.55), определяет L -компоненту ОСО в ПСФО $G_{fi}^L(q, \omega_{fi}^R)$:

$$G_{fi}^L(q, \omega) = \frac{2\omega_{fi}}{q^2} \left| \langle f | A_R^L(q, \omega) | i \rangle \right|^2. \quad (3.67)$$

Вычисляя ОСО для дискретных переходов и сопоставляя результаты с данными опытов, можно очень надежно определять мультипольности переходов [15]. Эта интерпретация особенно интересна для недипольных переходов, так как они не могут быть наблюдаемы в фотопоглощении. Но даже оптически разрешенные дипольные переходы могут в принципе иметь значимую примесь других мультипольностей, например октупольных, которая обнаруживается при изучении их ОСО и выполнении достаточно точных вычислений.

Зависимость от ω для дипольных ОСО при $q = 0$ хорошо известна, так как при $q = 0$ ОСО прямо пропорционально интенсивно изучаемым сечениям фотоионизации, результаты для которых представлены в гл. 2. Чрезвычайно сильные многоэлектронные эффекты были найдены в очень широкой области частоты фотона — от внешних подболочек до значений ω далеко над порогом внутренних подболочек. Известно, что целый набор разнообразных корреляционных эффектов, а именно внутри- и межбололочного взаимодействия очень важны в фотоионизации. Наиболее видный среди этих эффектов — дипольные гигантские корреляционные резонансы. Однако почти ничего не известно о вариации этих резонансов в ОСО с ростом q даже в дипольном канале. Что касается монопольных и квадрупольных ОСО, они вообще не были изучены с этой точки зрения.

Наиболее просто вычисляются ОСО для атомов и ионов с заполненными подоболочками. Для полузаполненных оболочек мы будем применять метод, описанный в п. 1.10. Приведенные там формулы будут использованы, однако, не только для дипольной, но и других компонент, заменяя в ф-лах (1.96), (1.97) и аналогичных им дипольный оператор $\hat{D}_{\uparrow(\downarrow)}(\omega)$ на $A_{R\uparrow(\downarrow)}^L(q, \omega)$. Последний получается решением уравнений, подобных (1.93) с $j_l(qr)$ вместо $\hat{d}$ из (1.91, 1.92).

Рассмотрение ОСО для спин—орбитальных дублетов будет приведено подобно тому, как это сделано в гл. 2 при описании Рис. 2.2Хе_b7, но с учетом наличия не только дипольного перехода, но и переходов других мультипольностей.

ОСО незаполненных оболочек следует рассматривать таким же образом, как это описано для дипольного перехода в п. 1.11, с очевидным обобщением и на переходы других мультипольностей.

3.7. Эффект Комптона

В этом разделе будет показано, что сечение комптоновского рассеяния может быть при некоторых условиях выражено через ОСО. Оператор, который описывает взаимодействие фотонов с N атомными электронами в нерелятивистском приближении, выглядит следующим образом [БЛП]:

$$\hat{K} = \sum_{i=1}^N \left(-\frac{1}{c} \hat{\mathbf{p}}_i \mathbf{A}(\mathbf{r}_i) + \frac{1}{2c^2} \mathbf{A}^2(\mathbf{r}_i) \right), \quad (3.68)$$

где $\mathbf{A}(\mathbf{r}_i)$ — векторный потенциал электромагнитного поля; $\mathbf{r}_i$ и $\hat{\mathbf{p}}_i$ — координаты импульса i -го электрона; c — скорость света. Сечение неупругого или комптоновского, рассеяния фотонов выражается через вторую степень оператора $\hat{\mathbf{p}}_i \mathbf{A}(\mathbf{r}_i)/c$ и первую степень $\mathbf{A}^2(\mathbf{r}_i)/2c^2$. Но вклад члена $\hat{\mathbf{p}}_i \mathbf{A}(\mathbf{r}_i)/c$ в комптоновское рассеяние нерелятивистскими электронами мал, поскольку содержит множитель $(v/c)^2 \ll 1$, так что основной вклад в сечение комптоновского рассеяния происходит от оператора $\mathbf{A}^2(\mathbf{r}_i)/2c^2$.

Для внешнего электромагнитного поля имеем выражение $\mathbf{A}(\mathbf{r}_i) \sim \mathbf{e} \exp(ikr_i)$, где $\mathbf{e}$ — вектор поляризации излучения [БЛП]. Поэтому дифференциальное по углу рассеяния фотона

$d\Omega$ сечение комптоновского рассеяния $d\sigma_{if}^C(\omega)/d\Omega$, сопровождающегося атомным переходом из начального состояния $\langle i |$ в конечное $| f \rangle$, может быть выражено через матричные элементы оператора $\exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}_i)$:

$$\frac{d\sigma_{if}^C(\omega)}{d\Omega} = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_0 \frac{E - \omega}{E} \sum_f \left| \left\langle i \left| \sum_{j=1}^N e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}_j} \right| f \right\rangle \right|^2. \quad (3.69)$$

Здесь E — энергия налетающего фотона и ω — энергия, переданная атому в процессе рассеяния; $(d\sigma/d\Omega)_0$ — классическое дифференциальное томпсоновское сечение рассеяния света на электроны (см. [БЛП, 16]); вектор $\mathbf{q}$ — импульс, переданный атому в процессе комптоновского рассеяния; $\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{k}'$, $\mathbf{k}'$ — импульс улетающего фотона. Угол θ определяет направление вылета фотона. Суммирование по конечным состояниям f выполняется с учетом закона сохранения энергии $\omega = E_f - E_i$, где E_f и E_i — энергии атома в начальном состоянии и системы «ионизованный электрон—остаточный ион» в конечном состоянии.

Последний член справа в (3.68) может быть выражен через ОСО, данные ф-лой (3.27), которая определяет неупругое сечение рассеяния быстрой заряженной частицы на атоме. Тогда (3.69) может быть записано следующим образом:

$$\frac{d\sigma_{if}^C(\omega)}{d\Omega} = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_0 \frac{E - \omega}{E} \frac{q^2}{2\omega} \sum_f G_{fi}(\omega, q). \quad (3.70)$$

Комптоновское рассеяние представляет интерес при высоких энергиях E , для средних и тяжёлых атомов приблизительно при десятках и даже сотнях килоэлектронвольт, где оно начинает доминировать в полном сечении взаимодействия «фотон—атом» над фотопоглощением [16]. Имея в виду, что с точки зрения понимания структуры атомов интересны не слишком большие ω , $\omega \leq 100 \text{ Ry}$, получаем ограничение $\omega / E \ll 1$. Пренебрегая поправками порядка $\omega / E \ll 1$, получаем следующее соотношение:

$$q = \frac{2E}{c} \left(1 - \frac{\omega}{2E} \right)^{1/2} \sin \vartheta, \quad (3.71)$$

где $\vartheta = \theta / 2$ и θ — угол рассеяния улетающего фотона.

В ХФ-приближении сечение комптоновского рассеяния дается (3.70) с ОСО, определенными (3.58):

$$\frac{d\sigma_{HF}^C(\omega)}{d\Omega} = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_0 \frac{E - \omega}{E} \frac{q^2}{2\omega} \sum_{s>F, t \leq F} g_{st}(\omega, q). \quad (3.72)$$

Здесь суммирование выполняется по всем одноэлектронным состояниям $t \leq E$, занятым в начальном состоянии i атома и возбужденным $s > F$, которые удовлетворяют закону сохранения энергии $\epsilon_s = \omega + \epsilon_t$.

Сечение упругого классического томсоновского рассеяния дается следующим выражением [БЛП]:

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_0 = \frac{1}{2c^4} (1 + \cos^2 \theta) \approx \frac{1}{c^4} \left[1 - \frac{1}{2} \left(\frac{qc}{E} \right)^2 \right], \quad (3.73)$$

где θ — угол рассеяния фотона. Второй шаг упрощения в (3.73) действителен для малых углов рассеяния.

Далее рассмотрение комптоновского рассеяния обязательно должно учитывать многоэлектронные корреляции в рамках ПСФО. Соответствующее выражение получается заменой g_{st} в (3.72) на G_{st} , определяемое (3.67).

Уравнение (3.63) для $\hat{A}_R(\omega, q)$ с помощью (3.65) переходит в систему независимых уравнений для парциальных вкладов с данным угловым моментом L — $\hat{A}_R^L(\omega, q)$, которые должны быть решены численно, как описано в [АЧ] и в гл. 2, давая в результате матричные элементы $\langle nl | \hat{A}_R^L(\omega, q) | \epsilon l' \rangle$. С помощью этих матричных элементов можно получить парциальные по L значения в ПСФО:

$$G_{nl, \epsilon l'}^{RL}(\omega, q) = \frac{2\omega}{q^2} \left| \langle nl | \hat{A}_R^L(\omega, q) | \epsilon l' \rangle \right|^2. \quad (3.74)$$

Затем значениями $G_{nl, \epsilon l'}^{RL}(\omega, q)$ следует заменить $g_{st}(\omega, q)$ в (3.71), что приводит к соотношению

$$\frac{d\sigma_R^C(\omega, q)}{d\Omega} = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_0 \frac{E - \omega}{E} \frac{q^2}{2\omega} \sum_{s>F, t \leq F, L \geq 0} G_{nl, \epsilon l', L}^R(\omega, q), \quad (3.75)$$

которое есть комптоновское сечение рассеяния в ПСФО (см. [17] и ссылки там).

В комптоновском рассеянии могут быть возбуждены и дискретные уровни атома-мишени. Соответствующее сечение дается выражением, подобным (3.75) [18]:

$$\frac{d\sigma_{i \rightarrow f, L_{if}}^{CR}(\omega_{if}, q)}{d\Omega} = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_0 \frac{E - \omega_{if}}{E} \frac{q^2}{2\omega_{if}} G_{if, L_{if}}^R(\omega_{if}, q). \quad (3.76)$$

Здесь $i \rightarrow f$ обозначает дискретный переход из состояния i в состояние f , с энергией возбуждения ω_{if} и угловым моментом L_{if} .

В вычислениях сечения комптоновского рассеяния мы ограничимся монопольным, дипольным, квадрупольным и октупольным, $L = 0, 1, 2, 3$, переходами. Мы вычисляем $g_{nl, \epsilon l'}^L(\omega, q)$ и $G_{nl, \epsilon l'}^{RL}(\omega, q)$ в довольно широкой области значений q , $0 \leq q \leq 8$ а. е. и ω до 100—120 Ry. Для разумных значений E , $E > 1000$ Ry с точностью 1—2 %, можно упростить (3.71), сведя его к $q = (E/c)\theta$. Тогда вместо (3.75) получаем:

$$\left(\frac{d\sigma_{nl, \epsilon}^{RC}(\omega, q)}{d\Omega} \right) / \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_0 = \frac{q^2}{2\omega} G_{nl, \epsilon}(\omega, q) \equiv \zeta_{nl, \epsilon}^R(\omega, q) = \sum_{L=0}^3 \zeta_{nl, \epsilon, L}^R(\omega, q); \quad (3.77)$$

$$G_{nl, \epsilon}(\omega, q) = \sum_{L=0}^3 \sum_{l'} G_{nl, \epsilon l'}^L(\omega, q);$$

$$\epsilon = \omega - I_{nl}, \quad q = E\theta / c.$$

Величину $\zeta_{nl, \epsilon}^L(\omega, q)$ в гл. 4 мы будем называть относительным сечением комптоновского рассеяния. Для дискретного перехода удобно ввести аналогичную величину

$$\zeta_{nl, n'l'}^{RL}(\omega_{nl, n'l'}, q) \equiv q^2 G_{nl, n'l'}^{RL}(\omega_{nl, n'l'}, q) / 2\omega_{nl, n'l'}. \quad (3.78)$$

Относительная роль ПСФО-корреляций в ионизации атома в комптоновском рассеянии определяется, в соответствии с (3.76) и (3.72), следующим отношением:

$$\left(\frac{d\sigma_{nl,\varepsilon}^{CR}(\omega)}{d\Omega} \right) / \left(\frac{d\sigma_{nl,\varepsilon}^{C, HF}}{d\Omega} \right) =$$

$$= G_{nl,\varepsilon}(\omega, q) / g_{nl,\varepsilon}(\omega, q). \quad (3.79)$$

Вычислим также полные сечения комптоновского рассеяния. Для данного переданного углового момента L имеем в приближении ХФ и ПСФО (обозначен R) следующие формулы:

$$\frac{d^2\sigma^{CHF, L}(\omega, q)}{d\omega dq} = \frac{q^2}{2\omega c^4} \left[1 - \frac{1}{2} \left(\frac{qc}{E} \right)^2 \right] \sum_{nl, l'} g_{nl, \varepsilon l'}^L(\omega, q), \quad (3.80)$$

$$\frac{d^2\sigma^{CR, L}(\omega, q)}{d\omega dq} = \frac{q^2}{2\omega c^4} \left[1 - \frac{1}{2} \left(\frac{qc}{E} \right)^2 \right] \sum_{nl, l'} G_{nl, \varepsilon l'}^L(\omega, q). \quad (3.81)$$

Дифференциальное по ω и q сечение комптоновского рассеяния нужно суммировать по всем угловым моментам L , принятым во внимание при расчетах:

$$\frac{d^2\sigma^{CR, HF}(\omega, q)}{d\omega dq} = \sum_{L=0}^3 \frac{d^2\sigma^{CR, HF, L}(\omega, q)}{d\omega dq}. \quad (3.82)$$

Дифференциальное только по ω сечение получается из (3.81) и (3.82) после интегрирования по q :

$$\frac{d\sigma^{CHF}(\omega)}{d\omega} =$$

$$= \frac{1}{2\omega c^2 E^2} \int_0^{q_{\max}} q^3 \left[1 - \frac{1}{2} \left(\frac{qc}{E} \right)^2 \right] \sum_{nl, l'L} g_{nl, \varepsilon l'}^L(\omega, q) dq; \quad (3.83)$$

$$\frac{d\sigma^{CR}(\omega)}{d\omega} =$$

$$= \frac{1}{2\omega c^2 E^2} \int_0^{q_{\max}} q^3 \left[1 - \frac{1}{2} \left(\frac{qc}{E} \right)^2 \right] \sum_{nl, l'L} G_{nl, \varepsilon l'}^L(\omega, q) dq. \quad (3.84)$$

Здесь $q_{\max}$ — верхний предел по q , который в наших вычислениях будет взят равным 8 а. е., что достаточно высоко; заметим, что $q_{\max} c/E \ll 1$.

Сечения комптоновского сечения возбуждения дискретных уровней подобны (3.83) и (3.84):

$$\sigma_{nl, n'l'}^{CHF}(\omega_{nl, n'l'}) = \frac{1}{2\omega_{nl, n'l'} c^2 E^2} \times \\ \times \int_0^{q_{\max}} q^3 \left[1 - \frac{1}{2} \left(\frac{qc}{E} \right)^2 \right] g_{nl, \epsilon l'}^L(\omega_{nl, n'l'}, q) dq; \quad (3.85)$$

$$\sigma_{nl, n'l'}^{CR}(\omega_{nl, n'l'}) = \frac{1}{2\omega_{nl, n'l'} c^2 E^2} \times \\ \times \int_0^{q_{\max}} q^3 \left[1 - \frac{1}{2} \left(\frac{qc}{E} \right)^2 \right] G_{nl, \epsilon l'}^L(\omega_{nl, n'l'}, q) dq. \quad (3.86)$$

При суммировании (3.85) и (3.86) по всем $n'l'$ и L получаем полный вклад в сечение комптоновского рассеяния от возбуждения дискретных уровней nl электронов $\sigma_{nl}^{CHF, R}(\omega)$. Ф-лы (3.85) и (3.86) будут использоваться ниже, в гл. 4, чтобы получить полное сечение возбуждения дискретных уровней в комптоновском рассеянии и сравнить его с полным классическим томпсоновским сечением рассеяния света на электроне σ_0 :

$$\sigma_0 = \frac{8\pi}{3c^4} \approx 2.3755 \cdot 10^{-8} \text{ а. е.} \quad (3.87)$$

Заметим, что вклад группы дискретных уровней уменьшается с ростом E как $1/E^2$, в то время как полное комптоновское сечение от E почти не зависит. Это означает, что с увеличением E главный вклад в комптоновское сечение происходит не от возбуждения, а от ионизации атомных электронов.

Значения сечений $\sigma_{nl}^R(\omega)$, согласно (3.85) и (3.86) [18], могут быть представлены как

$$\sigma_{nl}^{CHF, R}(\omega) = \frac{c^2}{E^2} \sigma_0 A_{nl}^{CHF, R}(\omega). \quad (3.88)$$

В качестве примера, факторы $A_{nl}^{CHF, R}(\omega)$ были рассчитаны в [19] и оказались равными $A_{2p}^R \approx 0.2210$ для Ne, $A_{3p}^R \approx 0.1454$ для

Ar, $A_{4p}^R \approx 0.2084$ для Kr и $A_{5p}^R \approx 0.2413$ для Xe. Для энергий, которые представляют интерес в комптоновском рассеянии, а именно для E больше чем десятки килоэлектронвольт, имеем $c/E \ll 1$. Напомним, что мы пользуемся атомной системой единиц. Как видно, $A_{nl}(\omega) \ll Z$ и поэтому сечение возбуждения дискретных уровней намного меньше, чем полное атомное классическое томпсоновское сечение, данное ф-лой (3.87).

3.8. Рассеяние позитрона на атомах с учетом поляризационного взаимодействия

Здесь мы обсудим специфические особенности рассеяния позитрона на атоме. Изучение рассеяния «позитрон—атом» и «позитрон—молекула» — весьма активная область исследований (см. [20] и ссылки там). Интересно сравнить этот процесс с электронными столкновениями на тех же самых объектах. Влияние взаимодействия «мишень-снаряд» наиболее сильно при низких энергиях столкновения. Поэтому мы концентрируемся здесь на этой области энергий.

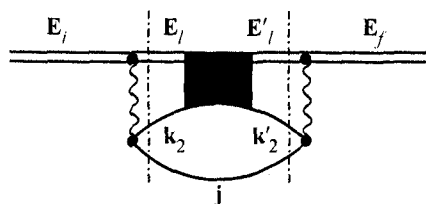
В обоих случаях, а именно для электронного и позитронного рассеяния, сечение определяется электростатическими потенциалами и потенциалами поляризации, посредством которых мишень действует на снаряд. Однако для налетающих электронов важен обмен с электронами мишени. Для позитронов обмен вообще не существует. Поэтому, на первый взгляд, процесс рассеяния позитрона выглядит более простым, чем электронов. Кроме того, позитрон-атомный статический потенциал, будучи вообще отталкивающим, вынуждает позитрон двигаться в области мишени, где потенциал наименьший, таким образом, ослабляя его полное действие. Это противоположно случаю столкновения «электрон—атом (молекула)». Контраст выглядит еще более сильным, если учесть, что, как обычно считается, потенциал поляризации для обеих частиц, электрона и позитрона, притягивающий.

Таким образом, для электронов полный потенциал должен быть более сильным, чем для позитронов. На первый взгляд поэтому, кажется, что любой простой подход, который хорош для электронов, должен быть применим, по крайней мере с не меньшей точностью, и для позитронов. Например, использование приближения второго порядка при вычислении поляризационного взаимодействия, обсуждённое в п. 3.3 и 3.4, должно при-

вести к успеху и при рассмотрении рассеяния позитрона на атоме. При этом ненулевой вклад вносит лишь диаграмма (3.36, а). Можно было ожидать, что этот подход по крайней мере одинаково хорош в описании как рассеяния позитрона на атоме, так и рассеяния электрона на атоме. Оказалось, однако, что эта точка зрения неверна [21].

Действительно, позитрон, который «выталкивается» потенциалом атома из мишени, может сильно взаимодействовать с виртуально-возбужденным электроном, который также находится вне мишени. Они формируют своего рода связанное состояние, которое можно назвать *виртуальным позитронием*. Это — очень важный механизм, который сильно влияет на величину сечения рассеяния [21, 22—26].

Схематически, этот механизм учитывается, поскольку (3.36, а) — единственная диаграмма второго порядка, которая описывает поляризационное взаимодействие позитрона, следующим образом:


(3.89)

где затемненный квадрат обозначает взаимодействие позитрона с виртуально-возбужденным электроном, принимая во внимание и образование *виртуального позитрония*, учитываемого вне рамок МТВ. Сам позитрон представлен двойной линией.

В наиболее низком порядке по взаимодействию между позитроном и атомным электроном аналитическое выражение для поляризационного взаимодействия при рассеянии позитрона дается вместо (3.38) следующим выражением:

$$\begin{aligned}
 & \left\langle E_i l \left\| \hat{\Sigma}^l(E) \right\| E_f l \right\rangle = \frac{1}{(2l+1)} \times \\
 & \times \sum_{\substack{j \leq F, L \\ \epsilon_2 l_2 > F}} \int_0^\infty \frac{\langle E_i l, \epsilon_j l_j \left\| V_L \right\| E_l l_1, \epsilon_2 l_2 \rangle}{(2L+1)(E - E_l - \epsilon_2 + \epsilon_j + i\delta)} \times \\
 & \times \langle E_l l_1, \epsilon_2 l_2 \left\| V_l \right\| E_f l, \epsilon_j l_j \rangle dE_l d\epsilon_2,
 \end{aligned} \tag{3.90}$$

где второй член V_L заменяет U_L в (3.38), поскольку для позитрона нет обмена.

Оказалось, что взаимодействие между позитроном и виртуально-возбужденным атомным электроном чрезвычайно важно. Здесь мы опишем метод, который позволяет значительно улучшить согласие с экспериментом и дает простое качественное объяснение большого различия позитронных сечений рассеяния для благородных газов и их соседей — щелочных атомов. Сам метод был впервые предложен в [21] и развивался далее в [22—24]. Идея его состоит в том, чтобы учесть всю сложнейшую совокупность диаграмм, входящих в (3.89), просто вводя энергию связи реального позитрония P_s , I_{P_s} , в энергетический знаменатель в (3.90):

$$\begin{aligned} \langle E_i l \| \hat{\Sigma}'_{P_s}(E) \| E_f l \rangle &= \frac{1}{(2l+1)} \times \\ &\times \sum_{\substack{j \leq F, L \\ \epsilon_2 l_2 > F}} \int_0^\infty \frac{\langle E_i l, \epsilon_j l_j \| V_L \| E_1 l_1, \epsilon_2 l_2 \rangle}{(2L+1)(E - E_1 - \epsilon_2 + \epsilon_j + I_{P_s} + i\delta)} \times \\ &\times \langle E_1 l_1, \epsilon_2 l_2 \| V_l \| E_f l, \epsilon_j l_j \rangle dE_1 d\epsilon_2. \end{aligned} \quad (3.91)$$

Начиная с введения этого подхода в [21] был выполнен и ряд более сложных вычислений (например, [25, 26]), которые используют идею образования *виртуального позитрония*, но заменяют позитрон-электронную волновую функцию $|E_1 l_1, \epsilon_2 l_2\rangle$ в (3.91) волновой функцией свободного позитрония, на который не действует поле иона-остатка.

Упругое $\sigma^{el+}(E)$, неупругое $\sigma^{in+}(E)$ и полное $\sigma^{tot+}(E)$ сечения рассеяния позитрона с энергией E , выраженные через парциальные фазы рассеяния $\delta_l(E)$, даются выражениями (3.14)—(3.16).

Первый шаг использованного в этой книге подхода — ХФ-расчеты, что означает приближение ХФ для атома-мишени и замороженного остова для налетающего позитрона, естественно без обмена между позитроном и атомными электронами. Таким образом, чтобы вычислить ХФ-сдвиг фаз $\delta_l^{X\Phi}(E)$ позитрона, должно быть решено следующее уравнение для волновой функции $\varphi_{e+}(\mathbf{r})$ позитрона:

$$\left[-\frac{\Delta}{2} + \frac{Z}{r} - \int \frac{d\mathbf{r}' \rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \right] \varphi_{e+}(\mathbf{r}) = E \varphi_{e+}(\mathbf{r}). \quad (3.92)$$

Здесь $\rho(r)$ — плотность электронов в атоме. Асимптотика по r радиальной части $P_{El}^{e+}(r)$ функции $\varphi_{e+}(\mathbf{r})$ определяет фазовый сдвиг (3.8).

Значительное различие между ХФ- и экспериментальными результатами при низких энергиях позитрона в позитрон-атомном упругом рассеянии существует для почти всех до сих пор рассмотренных атомов, например в He. Поэтому поляризационное взаимодействие должно быть учтено. Полагая, что поляризационное взаимодействие $\hat{\Sigma}_{ps}$ слабо, можно выразить поправку $\Delta\delta_l(E)$ к ХФ-парциальной фазе рассеяния позитрона, возникающую вследствие действия $\hat{\Sigma}_{ps}$, следующей формулой:

$$\Delta\delta_l(E) = -\pi \langle El \| \Sigma_{ps}^l(E) \| El \rangle, \quad (3.93)$$

где $\hat{\Sigma}_{ps}^l(E)$ — l -компонента $\hat{\Sigma}_{ps}$, определенная из (3.91).

Сечение рассеяния с учетом поляризационного взаимодействия определено уравнениями (3.14—3.16), где $\delta_l^{X\Phi}(E)$ заменяется фазами $\delta_l(E) = \delta_l^{X\Phi}(E) + \Delta\delta_l(E)$ для E до $E < I$, где I есть потенциал ионизации атома-мишени. Для более высоких энергий позитрона фазы рассеяния (3.91) комплексны и их мнимая часть $\text{Im } \Delta\delta_l(E) \equiv \mu_l(E)$ определяет сечение неупругого рассеяния позитрона на атоме.

Сечение упругого рассеяния для $E > I$ описывается (3.14).

Фактически, метод, описанный в [21, 24], так же как и ф-лой (3.91), справедлив, в некотором смысле, и вне рамок второго порядка простой МТВ по межэлектронному взаимодействию. А именно, вычисляя ХФ-волновую функцию $\epsilon_2 l_2$ в атомном поле с вакансией i , мы учитываем тем самым важные поправки высших порядков.

Улучшенное таким образом поляризационное взаимодействие, даже в его самом низком порядке, дает хорошие результаты для упругого рассеяния электронов на благородных газах. Это взаимодействие зависит от энергии снаряда, нелокально и не содержит свободных подгоночных параметров. Далеко от атома оно может быть аппроксимировано как поляризационный потенциал

$$V_{pol} = -\alpha(\epsilon) / 2r^4, \quad (3.94)$$

где $\alpha(\epsilon)$ в отличие от (3.7) и (3.35) есть дипольная динамическая поляризуемость атома; ϵ — средняя энергия возбуждения налетающего электрона в промежуточном состоянии.

Следующим шагом после ХФ-приближения, в рассмотрении рассеяния позитрона на атоме мы учитываем поляризационное взаимодействие (3.38) в самом низком порядке, так же как это сделано для рассеяния электрона на атоме. Полученные результаты немного улучшают ситуацию в смысле соответствия экспериментальным данным, однако требуется учесть образование виртуального позитрония, что достигается использованием (3.89) как поляризационного взаимодействия.

Учёт связанного состояния виртуального позитрония выполняется с помощью (3.90), что приводит вместо (3.94) к следующему поляризационному потенциалу:

$$V_{pol}^{+} = -\alpha (\epsilon - I_{ps}) / 2r^4. \quad (3.95)$$

Это выражение позволяет предсказать интересное явление — возможность того, что поляризационное взаимодействие может быть не только притягивающим, как это обычно считается, но и отталкивающим [27, 28]. Причина этого явления — возможность изменения знака поляризуемости. Действительно, статическая поляризуемость всегда положительна. А для отрицательной эффективной энергии $(\epsilon - I_{ps})$ поляризуемость может стать отрицательной, что ведет к отталкивающему вместо притягивающего характера поляризационного взаимодействия (3.95). В таком случае поляризационный потенциал усилит действие потенциала ХФ. Это может повлиять на сечение рассеяния очень существенно.

Отталкивающий поляризационный потенциал V_{pol}^{+} имеет место атомах щелочных металлов. Этим, вероятно, объясняется тот факт, что сечение рассеяния позитрона на атоме при малых энергиях на атомах щелочных металлов гораздо больше, чем на соседних благородных газах.

В заключение данной главы считаем уместным привести несколько ссылок на сравнительно недавние работы обзорного характера, описывающие современное состояние и развивающие методы, используемые здесь [29—32].

Литература

1. Ходгсон П. Е. Оптическая модель упругого рассеяния. М.: Атомиздат, 1966.
2. Базь А. И., Зельдович Я. Б., Переломов А. М. Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике. М.: Наука, 1971.

3. Друкaрев Г. Ф. Столкновения электронов с атомами и молекулами. М.: Наука, 1978.
4. Галицкий В. М., Никитин Е. Е., Смирнов Б. М. Теория столкновений атомных частиц. М.: Наука, 1981.
5. Мотт Н., Месси Г. Теория атомных столкновений / Пер. с англ.; под ред. Е. Е. Никитина. М.: Мир, 1968.
6. Kelly H. P. // Phys. Rev. 1968. Vol. 171. N 1. P. 54—60.
7. Amusia M. Ya., Cherepkov N. A. // Case Stud. Atom. Phys. 1975. Т. 5. С. 47—179.
8. Чернышева Л. В., Амусья М. Я., Давидович Д., Черепков Н. А. Препринт ФТИ № 663. Л.: ЛИЯФ, 1980.
9. Amusia M. Ya., Cherepkov N. A., Chernysheva L. V., Shapiro S. G. // Phys. Lett. A. 1974. Vol. 46, N 6. P. 387—388.
10. Амусья М. Я., Танчик А., Черепков Н. А., Чернышева Л. В., Шапиро С. Г. // ЖЭТФ. 1975. Т. 68, № 6. С. 2023—2031.
11. Amusia M. Ya., Cherepkov N. A., Chernysheva L. V., Shapiro S. G. // Phys. Lett. A. 1974. Vol. 46, N 6. P. 387.
12. Абрикосов А. А., Горьков Л. П., Дзялошинский И. Е. Методы квантовой теории поля в статистической физике. М. Изд-во «Книжный дом». Университет, 2006.
13. Амусья М. Я., Долматов В. К. // ЖЭТФ. 1990. Т. 97, № 4. С. 1129—1139.
14. Amusia M. Ya., Cherepkov N. A., Sheftel S. I. et al. // J. Phys. B: At. Mol. Phys. 1973. Vol. 6. P. 1028.
15. Amusia M. Ya., Chernysheva L. V., Felfli Z., Msezane A. Z. // Phys. Rev. A. 2002. Vol. 65, N 5. P. 54701.
16. Pratt R. H. // Rad. Phys. Chemi. 2008. Vol. 74, N. 6. P. 411—418.
17. Amusia M. Ya., Chernysheva L. V., Felfli Z., Msezane A. Z. // Surf. Rev. Lett. 2002. Vol. 9, N 2. P. 1155—1160.
18. Amusia M. Ya., Chernysheva L. V., Felfli Z., Msezane A. Z. // Phys. Rev. A. 2002. Vol. 65, N 6. P. 62705.
19. Amusia M. Ya., Chernysheva L. V., Felfli Z., Msezane A. Z. // Phys. Rev. A. 2007. Vol. 75. P. 062703.
20. Gribakin G. F., Ludlow J. // Phys. Rev. A. 2004. Vol. 70. P. 032720.
21. Amusia M. Ya., Cherepkov N. A., Chernysheva L. V., Shapiro S. G. // J. Phys. B. 1976. Vol. 9. P. L531.
22. Ficocelli Varracchio E. // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 1990. Vol. 23. P. L779—L785.
23. Ficocelli Varracchio E., Parcell L. A. // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 1992. Vol. 25. P. 3037—3048.
24. Amusia M. Ya., Cherepkov N. A., Chernysheva L. V. // JETP. 2003. Vol. 124, N 1(7) P. 1—9.
25. Gribakin G. F., King W. A. // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 1994. Vol. 27. P. 2639.
26. Dzuba V. A., Flambaum V. V., Gribakin G. F., King W. A. // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 1996. Vol. 29. P. 3151.

27. *Amusia M. Ya., Taulbjerg K.* Abstract of ICPEAC-XVII. 1995.
28. *Batty C. J., Friedman E., Gal A.* // *Phys. Reports.* 1998. Vol. 287. P. 385.
29. *Amusia M. Ya.* The Many-body approach to electron-atom collisions // *Many-body atomic physics* // Ed. J. J. Boyle and M. S. Pindzola. Cambridge University Press, 1997.
30. *Amusia M. Ya.* Many-body theory of atomic structure and processes // *Atomic, molecular and optical physics handbook. Second edition* / Ed. G. Drake, Springer. Chapter 23. 2006.
31. *Amusia M. Ya.* Photoionization and vacancy decay of endohedral atoms, *review* // *J. Electron. Spectr. Rel. Phenom.* 2007. Vol. 161. P. 112—120.
32. *Amusia M. Ya.,* Fast Electron scattering as a tool to study target's structure, *review* // *J. Electron Spectr. Rel. Phenom.* 2007. Vol. 159. P. 81—90.

ГЛАВА 4

РЕЗУЛЬТАТЫ ВЫЧИСЛЕНИЙ

4.1. Способ представления данных и используемые формулы

В этой главе мы даем описание рисунков и таблиц, которые представляют данные, полученные в исследовании упругих и неупругих сечений рассеяния медленных, средней энергии и быстрых электронов e^- и позитронов e^+ . Мы представим полные и парциальные, дифференциальные по углу и энергии сечения упругого и неупругого рассеяния, сечение комптоновского рассеяния, для ряда атомов и ионов, и положительных, и отрицательных. Приведенные обобщённые силы осцилляторов позволяют описать рассеяние любых быстрых заряженных частиц — e^- , протонов и т. п. В ряде случаев будут представлены и экспериментальные данные.

Нумерация рисунков,* как и в гл. 2, организована следующим образом: сначала идет номер соответствующего раздела; следующие буквы обозначают атом согласно Периодической системе элементов Менделеева. Маленькая буква отвечает за соответствующую рассматриваемую характеристику, обозначая:

а — полные сечения упругого и неупругого рассеяния в приближении Хартри—Фока (ХФ) и упрощенном варианте приближения случайных фаз с обменом (ПСФО) — УПСФО;

б — парциальные, соответствующие определенной волне налетающей частицы, сечения упругого рассеяния в приближении ХФ и УПСФО;

с — дифференциальные по углу сечения упругого рассеяния в тех же самых приближениях;

* Рисунки находятся на компакт-диске, на страницах, указанных в соответствующих параграфах гл. 4 (CD, 000).

d — s -, p -, d - и f -фазы рассеяния;

e — плотности обобщенных сил осцилляторов (ОСО) различных мультипольностей в приближениях ХФ и ПСФО;

f — ОСО дискретных уровней, дипольных и октупольных, квадрупольных и монопольных;

g — дифференциальные по углу сечения комптоновского рассеяния с ионизацией или возбуждением дискретных уровней;

h — сечения комптоновского рассеяния для дискретных уровней;

i — сечения упругого и неупругого рассеяния позитрона на атоме.

Последняя цифра представляет номер рисунка в рассмотренной группе. Например, Рис. 4.2_Ar_a1 обозначает первый рисунок характеристики «а» атома Ar.

Однако не все упомянутые выше данные доступны для каждого атома. В таких случаях не все буквы будут использоваться в приведенных рисунках. В некоторых случаях мы сравним результаты наших вычислений с экспериментальными данными.

Приведем перечень формул, которые использовались, чтобы описать различные характеристики рассеяния электрона и позитрона.

Упругие и неупругие полные сечения рассеяния определены с помощью соотношений (3.14), (3.15), (3.16) и (3.17) соответственно. Дифференциальные по углу сечения рассеяния получены из ф-лы (3.13). Фазовые сдвиги s -, p -, d - и f -волн найдены из асимптотического представления волновых функций (3.8) или по ф-ле (3.10).

Поляризационные поправки в рамках упрощенного ПСФО (УПСФО) получены из (3.46), решая (3.45) с поляризационным взаимодействием, взятым из (3.38) и (3.39).

Полные и парциальные плотности ОСО получены в приближении ХФ из (3.58), в то время как в ПСФО — из (3.65) и (3.66).

Дифференциальные по углу испускания фотона, полные и парциальные сечения комптоновского рассеяния определены из (3.70) и (3.71). Парциальные по переданному атому-мишени угловому моменту сечения комптоновского рассеяния получены, используя (3.79) и (3.80). Сечение для дискретного уровня комптоновского возбуждения дается ф-лой (3.76). Отношения сечений комптоновского рассеяния получены с использованием ф-л (3.77) и (3.79). Интегральные по углу испускаемого фотона и

дифференциальные по его энергии ω сечения комптоновского рассеяния в приближении ХФ и ПСФО даются ф-лами (3.83) и (3.84). Сечения комптоновского сечения возбуждения дискретных уровней определяются в (3.85) и (3.86). Относительные сечения комптоновского возбуждения дискретных уровней даются в (3.78)

Полные упругие и неупругие сечения рассеяния позитрона получены с использованием ф-л (3.14)—(3.16) с хартриевскими фазами и поляризационными поправками к ним, данными в (3.89), где поляризационное взаимодействие определяется ф-лой (3.91). Существенно, что в ф-ле (3.91) приближенно учтена возможность образования виртуального позитрония Ps.

Напомним, что, как уже отмечалось в гл. 2, нашей целью является не возможно более точное теоретическое описание данных опыта по конкретному атому или иону, а проведение массовых расчётов. Мы выбираем наилучшее, пригодное для такой цели приближение, — ПСФО или упрощённое ПСФО (УПСФО), его различные обобщения. Нашей целью является также и демонстрация, попутно, путём сравнения с результатами в приближении ХФ, важности межэлектронных корреляций. Фактически, главная цель — это создание нового исходного приближения, что стимулировало бы последующее проведение более точных измерений и необходимых для их интерпретации более сложных расчётов.

На самих рисунках использованы аббревиатуры русских названий приближений, соответствующих своим английским аналогам, а именно: ХФ — HF (Hartree—Fock), ПСФО — RPAE (Random Phase Approximation with Exchange) и УПСФО — SRPAE.

Как и в гл. 2, для удобства читателя и последовательности изложения мы располагаем рассмотренные атомы и ионы в соответствии с Периодической системой элементов Менделеева, с тем только изменением, что начнём с атомов и некоторых ионов благородных газов.

Как правило, результаты, даже ранее полученные в рамках используемых здесь теоретических подходов, опубликованные результаты, как и в гл. 2, специально пересчитывались для этой книги. Поэтому ссылка на них даётся не просто номером в списке литературы, к примеру [1], но указанием (см. [1]).

Расчеты сечений электронного (позитронного) и комптоновского рассеяния гораздо более трудоёмки, чем для фотоионизации, а потому проведены для меньшего числа атомов.

4.2. Атомы благородных газов

В этом разделе представлены результаты наших уже известных и новых вычислений полных и парциальных сечений упругого рассеяния электронов и позитронов на всех атомах благородных газов в приближении ХФ и с учётом поляризационного взаимодействия в упрощённом приближении случайных фаз с обменом — УПСФО (см. п. 3.3 и 3.4 и [АИЧЧ]) и виртуального образования позитрония (см. п. 3.8). В формировании поляризационного взаимодействия учтены возбуждения электронов $1s^2$ в He, $2s^2, 2p^6$ в Ne, $3s^2, 3p^6$ в Ar, $3d^{10}, 4s^2, 4p^6$ в Kr и $4d^{10}, 5s^2, 5p^6$ в Xe. В этом же приближении вычислены s -, p -, d -, f -фазы рассеяния и соответствующие парциальные сечения. Представлены результаты дифференциальных по углу рассеяния сечений для некоторых энергий. Приведены обобщённые силы осцилляторов (ОСО) и сечения комптоновского рассеяния фотонов с учётом ПСФО-корреляций упомянутых выше электронов. Приведены ОСО и сечения комптоновского возбуждения нескольких первых дискретных уровней некоторых атомов благородных газов. Даются также ОСО для $3d_{5/2}$ -, $3d_{3/2}$ -электронов Хе.

Краткие комментарии к рисункам п. 4.2

Рисунки 4.2_He представляют результаты вычислений для атома гелия (He).

Рис. 4.2_He_a1 (CD, 351) изображает сечение упругого (в приближении ХФ и УПСФО) и неупругого (в УПСФО) рассеяния электронов на атоме He (см. [1, 2]). Эксперимент из [3—5]. Видна значительнейшая роль УПСФО-поправок, убывающих по мере уменьшения энергии налетающего электрона от 30 эВ до 0.

Рис. 4.2_He_b1 (CD, 352) представляет вклад s -, p -, d -, f -парциальных волн в сечение упругого рассеяния электронов на атоме He. Как и должно быть, при малых энергиях доминирует вклад s -волны. Вклады других волн растут от $E = 0$.

Рис. 4.2_He_c1 (CD, 353) даёт дифференциальное по углу сечение рассеяния электронов с различными импульсами p на атоме He. В сечении доминирует максимум рассеяния вперёд и имеется максимум в рассеянии назад.

Рис. 4.2_He_d1 (CD, 353) приводит фазы различных парциальных волн в рассеянии электронов на атоме He. При им-

пульсе электрона $p \rightarrow 0$ все фазы, кроме δ_s , как и должно быть, стремятся к нулю. При $p \rightarrow 0$ фаза s -волны отличается от других знаком производной — она отрицательна.

Рис. 4.2_He_e1 (CD, 354) представляет плотности монополярных обобщенных сил осцилляторов атома He в ПСФО как функции переданной атому энергии при различных q (см. [6, 7]). С ростом q в ОСО возникает максимум на пороге, смещающийся затем в сторону больших энергий ω .

Рис. 4.2_He_e2 (CD, 354) изображает плотности дипольных обобщенных сил осцилляторов атома He в ПСФО как функции переданной атому энергии при различных q (см. [7]). Видно, как с ростом q формируется второй максимум и подавляется первый, вплоть до исчезновения его при $q = 0$.

Рис. 4.2_He_e3 (CD, 355) даёт плотности квадрупольных обобщенных сил осцилляторов атома He в ПСФО как функции переданной атому энергии при различных q (см. [7]). Заслуживает внимания максимум, который сдвигается в сторону больших ω с ростом q .

Рис. 4.2_He_f1 (CD, 355) приводит обобщенные силы осцилляторов дискретных монополярных возбуждений He из $1s$ -состояния ($1s - 2s$, $1s - 3s$, $1s - 4s$) как функции момента переданного атому (см. [7]). Экспериментальные данные взяты из [8]. Обращает внимание согласие с опытом, оказавшимся способным различить сравнительно близко лежащие дискретные уровни.

Рис. 4.2_He_f2 (CD, 356) изображает обобщенные силы осцилляторов дискретных дипольных возбуждений He из $1s$ -состояния ($1s - 2p$, $1s - 3p$, $1s - 4p$) как функции момента, переданного атому. Экспериментальные данные взяты из [8]. Согласие «эксперимент—расчёт» хорошее.

Рис. 4.2_He_f3 (CD, 356) представляет обобщенные силы осцилляторов дискретных квадрупольных возбуждений He из $1s$ -состояния ($1s - 3d$, $1s - 4d$, $1s - 5d$) как функции момента, переданного атому. Виден квадрупольный максимум.

Рис. 4.2_He_f4 (CD, 357) даёт обобщенные силы осцилляторов дискретных дипольного $1s - 3d$ и квадрупольного $1s - 3d$ возбуждений He как функции момента, переданного атому, и их суммы. Экспериментальные данные взяты из [8]. Комбинацию дипольного и квадрупольного уровней полезно рассмотреть потому, что они экспериментально почти неразличимы из-за близости энергий. Однако влияние квадрупольного перехода пренебрежимо мало.

Рис. 4.2_Ne_f5 (CD, 357) изображает обобщенные силы осцилляторов дискретных дипольного $1s - 4p$ и квадрупольного $1s - 4d$ -возбуждений He как функций переданного атому момента и их суммы. Экспериментальные данные взяты из [8]. Обсуждение см. при Рис. 4.2_Ne_f4.

Рис. 4.2_Ne_i1 (CD, 358) даёт сечение упругого (в приближении ХФ и УПСФО) и неупругого (в УПСФО) рассеяния позитронов на атоме Ne. Заметим, что УПСФО для $(e^+ + A)$ -рассеяния включает учёт образования виртуального позитрония (см. [9, 10]). Вклад неупругого рассеяния вплоть до энергии позитрона 16 эВ пренебрежимо мал. Эксперимент взят из [11].

Рисунки 4.2_Ne приводят результаты вычислений для атома неона (Ne).

Рис. 4.2_Ne_a1 (CD, 358) изображает сечение упругого (в приближении ХФ и УПСФО) (см. [1, 2]) и неупругого (в УПСФО) рассеяния электронов на атоме Ne. Роль корреляций при малых энергиях электрона $E < 25$ эВ становится всё более значительной.

Рис. 4.2_Ne_b1 (CD, 359) представляет вклады парциальных волн в сечение упругого рассеяния электронов на атоме Ne. Наибольший вклад вносит максимум в p -волне, определяющий форму сечения упругого рассеяния при малых E . С ростом энергии электронов всё более значителен вклад высоких парциальных волн.

Рис. 4.2_Ne_c1 (CD, 359) даёт дифференциальное по углу сечение рассеяния электронов с различными моментами на атоме Ne. Экспериментальные данные взяты из [12].

Рис. 4.2_Ne_d1 (CD, 360) приводит ХФ-фазы различных парциальных волн в рассеянии электронов на атоме Ne. Здесь не только s -, но и p -фаза имеют отрицательную производную во всём рассмотренном диапазоне энергий.

Рис. 4.2_Ne_e1 (CD, 360) даёт плотности монополярных обобщенных сил осцилляторов атома Ne в ПСФО как функции переданной атому энергии при различных q (см. [13]). Видно, как с ростом q монополярная обобщенная сила осциллятора быстро растёт и явственно проступает максимум в ОСО, смещающийся с ростом q в сторону больших энергий.

Рис. 4.2_Ne_e2 (CD, 361) изображает плотности дипольных обобщенных сил осцилляторов атома Ne в ПСФО как функции переданной атому энергии при различных q (см. [14]). В отличие от Рис. 4.2_Ne_e1, максимум присутствует при всех q , смещаясь слегка в сторону больших переданных энергий, и несколько убывая при этом по величине.

Рис. 4.2_Ne_e3 (CD, 361) представляет плотности квадрупольных обобщенных сил осцилляторов атома Ne в ПСФО как функции переданной атому энергии при различных q (см. [13]). Поведение второго максимума (на вставке) резко отличается от случая дипольных ОСО (ср. вставку на Рис. 4.2_Ne_e2).

Рис. 4.2_Ne_e4 (CD, 362) приводит плотности октупольных обобщенных сил осцилляторов атома Ne в ПСФО как функции переданной атому энергии при различных q (см. [14]). Здесь рост q имеет своим результатом весьма значительное увеличение энергии максимума.

Рис. 4.2_Ne_f1 (CD, 362) даёт обобщенные силы осцилляторов двух очень близких по энергии дискретных монопольного и квадрупольного возбуждений $2p-3p$ атома Ne как функции квадрата переданного атому момента q в ПСФО (см. [13]). Видно, что второй максимум есть только у квадрупольного уровня. На эксперименте различить столь близкие уровни крайне сложно, а потому приводится сумма ОСО двух уровней.

Рис. 4.2_Ne_f2 (CD, 363) изображает обобщенные силы осцилляторов дискретных монопольного и квадрупольного возбуждений $2p-4p$ атома Ne как функции квадрата переданного атому момента q в ПСФО (см. [13]). Картина близка к изображённой на Рис. 4.2_Ne_f1.

Рис. 4.2_Ne_f3 (CD, 363) представляет обобщенные силы осцилляторов дискретных квадрупольных возбуждений $2p-4f$ и $2p-5f$ атома Ne как квадрата переданного атому момента q в ПСФО (см. [13]). Виден быстрый рост ОСО с увеличением q^2 вплоть до достижения максимума при $q^2 \approx 0.3$.

Рис. 4.2_Ne_f4 (CD, 364) сопоставляет обобщенные силы осцилляторов дискретных дипольных возбуждений $2p-3s$, $2p-4s$ атома Ne как функции квадрата переданного атому момента q в приближении ХФ и ПСФО (см. [14]). Формы подобны, а величины заметно различаются. При $q^2 \approx 9$ обобщенные силы осцилляторов для обоих уровней имеют максимум, хотя и уступающий ОСО при $q^2 = 0$ более, чем на два порядка.

Рис. 4.2_Ne_f5 (CD, 364) даёт обобщенные силы осцилляторов дискретных дипольных возбуждений $2p-3d$, $2p-4d$ атома Ne как функции квадрата переданного атому момента q в приближении ХФ и ПСФО (см. [14]). ОСО с ростом q убывают монотонно и заметно меньше, чем у $p-s$ -переходов, изображённых на Рис. 4.2_Ne_f4.

Рис. 4.2_Ne_f6 (CD, 365) изображает обобщенные силы осцилляторов дискретных октупольных возбуждений $2p - 3d$, $2p - 4d$ атома Ne как функции квадрата переданного атому момента q в приближении ХФ и ПСФО (см. [14]). Формы ОСО для обоих переходов просты и совпадают.

Рис. 4.2_Ne_f7 (CD, 365) представляет обобщенные силы осцилляторов дискретных дипольного и октупольного возбуждений $2p - 3d$ атома Ne как функции квадрата переданного атому момента q в ПСФО (см. [14]). Хотя поведение уровней существенно различно, они столь близки по энергии, что стоит говорить лишь о сумме их ОСО.

Рис. 4.2_Ne_f8 (CD, 366) даёт обобщенные силы осцилляторов дискретных дипольного и октупольного возбуждений $2p - 4d$ атома Ne как функции квадрата переданного атому момента q в ПСФО (см. [13]).

Рис. 4.2_Ne_g1 (CD, 366) приводит сечение монопольного комптоновского рассеяния γ -квантов энергии $E = 2000 \text{ Ry}$ на атоме Ne в ПСФО как функцию переданного атому момента q различных энергиях ω (переданный угловой момент $L = 0$) (см. [15]). Обращаем внимание на большой диапазон рассмотренных значений q , $0 < q < 8$. С ростом ω максимум снижается и перемещается в сторону больших q .

Рис. 4.2_Ne_g2 (CD, 367) изображает сечение дипольного комптоновского рассеяния γ -квантов энергии $E = 2000 \text{ Ry}$ на атоме Ne в ПСФО как функцию переданного атому момента q , при различных энергиях ω (переданный угловой момент $L = 1$) (см. [15]). Второй максимум с ростом ω уходит в сторону больших q .

Рис. 4.2_Ne_g3 (CD, 367) представляет сечение квадрупольного комптоновского рассеяния γ -квантов энергии $E = 2000 \text{ Ry}$ на атоме Ne в ПСФО как функцию переданного атому момента q при различных энергиях ω (переданный угловой момент $L = 2$) (см. [15]). Второй максимум с ростом ω уходит в сторону больших q .

Рис. 4.2_Ne_g4 (CD, 368) даёт сечение октупольного комптоновского рассеяния γ -квантов энергии $E = 2000 \text{ Ry}$ на атоме Ne в ПСФО как функцию переданных атому момента q при различных энергиях ω (переданный угловой момент $L = 3$) (см. [15]). Второй максимум находится вне пределов рисунка.

Рис. 4.2_Ne_h1 (CD, 368) приводит относительное сечение комптоновского возбуждения дипольных уровней $2p - 3s$ и

$2p - 4s$ атома Ne в ПСФО (см. [16]). Обращает внимание наличие двух максимумов в сечении.

Рис. 4.2_Ne_h2 (CD, 369) изображает относительное сечение комптоновского возбуждения дипольного и октупольного уровней $2p - 3d$ атома Ne в ПСФО (см. [16]). Здесь, в отличие от Рис. 4.2_Ne_h1, максимум в сечении один.

Рис. 4.2_Ne_h3 (CD, 369) представляет относительное сечение комптоновского возбуждения квадрупольного и монопольного, почти точно вырожденных уровней $2p - 3p$ атома Ne в ПСФО (см. [16]). Отчётливо видны два максимума в сечении.

Рис. 4.2_Ne_h4 (CD, 370) даёт относительное сечение комптоновского возбуждения ряда близких по энергии дипольных, монопольных, октупольных и квадрупольных уровней $2p - 3d$, $2p - 4p$, $2p - 4d$, $2p - 4s$ атома Ne в ПСФО (см. [16]). Как и в Рис. 4.2_Ne_h3, видны два максимума в сечении.

Рис. 4.2_Ne_i1 (CD, 370) приводит сечение упругого и неупругого рассеяния позитронов на атоме Ne в приближении ХФ и УПСФО (см. [10]). Поляризационное взаимодействие учитывает возбуждение $2s$ -, $2p$ -подоболочек и образование виртуального позитрония. Экспериментальные данные взяты из [17] и согласие с ними очень хорошее.

Рисунки 4.2_Ar содержат результаты вычислений для атома аргона (Ar).

Рис. 4.2_Ar_a1 (CD, 371) приводит сечение упругого (в приближении ХФ и УПСФО) и неупругого (в УПСФО) рассеяния электронов на атоме Ar (см. [1, 2]). Экспериментальные данные взяты из [18, 19]. Минимум в сечении, именуемый *минимумом Рамзауэра* [20], возникает лишь при учёте поляризационного взаимодействия.

Рис. 4.2_Ar_b1 (CD, 371) изображает вклад парциальных волн в сечение упругого рассеяния электронов на атоме Ar в УПСФО. Обращает на себя внимание мощный максимум в d -волне, который с дальнейшим ростом заряда ядра переходит в связанный $3d$ -уровень. Именно он определяет сечение упругого рассеяния за минимумом Рамзауэра.

Рис. 4.2_Ar_c1 (CD, 372) даёт дифференциальное по углу сечение рассеяния электронов на атоме Ar. Имеется три максимума — при 0° , 100° и 180° . Экспериментальные данные взяты из [21]. Согласие их с результатами расчёта хорошее.

Рис. 4.2_Ar_c2 (CD, 372) представляет дифференциальное по углу сечение рассеяния электронов на атоме Ar. Результаты

близки к представленным на Рис. 4.2_Ag_c1. Данные эксперимента взяты из [12]. Роль корреляций заметна и улучшает согласие с опытом.

Рис. 4.2_Ag_d1 (CD, 373) приводит ХФ-фазы различных парциальных волн в рассеянии электронов на атоме Ag. Как и должно быть в соответствии с (3.21), при нулевой энергии электрона s -фаза равна 3π , p -фаза — 2π , а d -, f -фазы обращаются в ноль, если их все определить так, что при $E \rightarrow \infty$ фазы $\delta_l \rightarrow 0$.

Рис. 4.2_Ag_e1 (CD, 373) изображает плотности монополярных обобщенных сил осцилляторов атома Ag в ПСФО как функции переданной атому энергии при различных q (см. [7]). Видно увеличение энергии максимума с ростом q .

Рис. 4.2_Ag_e2 (CD, 374) даёт плотности дипольных обобщенных сил осцилляторов атома Ag в ПСФО как функции переданной атому энергии при различных q (см. [7]). Величина дипольных ОСО на порядок больше и монополярных (Рис. 4.2_Ag_e1), и квадрупольных (Рис. 4.2_Ag_e3).

Рис. 4.2_Ag_e3 (CD, 374) представляет плотности квадрупольных обобщенных сил осцилляторов атома Ag в ПСФО как функции переданной атому энергии при различных q (см. [7]). Отчётливо видно движение максимума в сторону больших энергий с ростом q .

Рис. 4.2_Ag_e4 (CD, 375) приводит плотности октупольных обобщенных сил осцилляторов атома Ag в ПСФО как функции переданной атому энергии при различных q (см. [7]). Отмечается смещение максимума к более высоким энергиям с ростом q .

Рис. 4.2_Ag_f1 (CD, 375) содержит обобщенные силы осцилляторов дискретных монополярного и квадрупольного возбуждений $3p - 4p$ атома Ag как функции квадрата переданного электроном атому момента q в ПСФО (см. [13]). Квадрупольные ОСО имеют два максимума, но вследствие близости монополярного и квадрупольного уровней измеримы лишь суммы ОСО, где следом максимума остаётся небольшой перегиб (см. вставку).

Рис. 4.2_Ag_f2 (CD, 376) изображает обобщенные силы осцилляторов дискретных монополярного и квадрупольного возбуждений $3p - 4p$ атома Ag как функции переданного атому момента q в ПСФО (см. [13]). В рассмотренной области q ОСО имеет один максимум. Экспериментальные данные взяты из [22]. Видно заметное различие по величине, увеличивающееся с ростом $q^2 > 0.5$.

Рис. 4.2_Ag_f3 (CD, 376) изображает обобщенные силы осцилляторов дискретных монопольного и квадрупольного возбуждений $3p - 5p$ атома Ag как функции квадрата момента q , переданного электроном атому в ПСФО (см. [13]). Оба перехода имеют максимум при $q^2 < 0.5$, тогда как в квадрупольной ОСО имеется второй, малый, максимум при $q^2 < 10$.

Рис. 4.2_Ag_f4 (CD, 377) сопоставляет обобщенные силы осцилляторов дискретных квадрупольных возбуждений $3p - 4f$ и $3p - 5f$ атома Ag как функции квадрата переданного электроном атому момента q в ПСФО (см. [13]). В рассмотренной области q ОСО имеет один максимум.

Рис. 4.2_Ag_f5 (CD, 377) приводит обобщенные силы осцилляторов дискретных дипольных возбуждений $3p - 4s$ и $3p - 5s$ атома Ag как функции квадрата переданного электроном атому момента q в ПСФО (см. [14]). В обоих уровнях ОСО имеют характерный при одинаковых q^2 максимум.

Рис. 4.2_Ag_f6 (CD, 378) изображает обобщенные силы осцилляторов дискретных дипольных возбуждений $3p - 3d$ и $3p - 4d$ атома Ag как функции квадрата переданного электроном атому момента q в приближении ХФ и ПСФО (см. [14]). ОСО монотонно убывает с ростом q .

Рис. 4.2_Ag_f7 (CD, 378) даёт обобщенные силы осцилляторов дискретных октупольных возбуждений $3p - 3d$ и $3p - 4d$ атома Ag как функции квадрата переданного электроном атому момента q в приближении ХФ и ПСФО (см. [14]). Как и все, кроме дипольной, данная ОСО растёт с увеличением q от $q = 0$, достигая максимума при $q^2 \approx 1.7$.

Рис. 4.2_Ag_f8 (CD, 379) представляет обобщенные силы осцилляторов дискретных дипольных и октупольных возбуждений $3p - 3d$ атома Ag как функции квадрата переданного электроном атому момента q в ПСФО (см. [14]). Поскольку уровни по энергии очень близки, представлена также и сумма их ОСО. Октупольная ОСО имеет один максимум при $q^2 \approx 1.25$, а дипольная стремительно убывает с ростом q^2 до 3, с тем чтобы образовать широкий и небольшой максимум при $q^2 \approx 17$.

Рис. 4.2_Ag_f9 (CD, 379) приводит обобщенные силы осцилляторов дискретных дипольного и октупольного возбуждений $3p - 4d$ атома Ag как функции квадрата момента q , переданного электроном атому, в ПСФО (см. [14]). Из-за близости уровней наблюдаемой величиной является по сути лишь сумма их ОСО.

Рис. 4.2_Ar_f10 (CD, 380) изображает обобщенные силы осцилляторов дискретных дипольных возбуждений $3p - 3d$, $5s$ атома Ar как функции переданного атому момента q в ПСФО (см. [14]). ОСО быстро убывает с ростом q до $q^2 \approx 1$, а затем выходит на плато. Экспериментальные данные взяты из [22]. Согласие представляется удовлетворительным.

Рис. 4.2_Ar_f11 (CD, 380) даёт обобщенную силу осциллятора дискретного дипольного возбуждения $3p - 4s$ атома Ar как функцию квадрата момента q , переданного электроном атому, в приближении ХФ и ПСФО (см. [23]). Экспериментальные данные взяты из [22]. Расчёт хорошо передаёт положение минимума в ОСО. Различие в его глубине может быть отчасти связано с разрешающей способностью экспериментальной установки в [22], но может быть и отражением необходимости выхода в окрестности минимума за рамки первого борновского приближения.

Рис. 4.2_Ar_f12 (CD, 381) изображает обобщенную силу осциллятора дискретного монополярного возбуждения $3p - 4p$ атома Ar как функцию квадрата переданного электроном атому момента q в приближении ХФ и ПСФО (см. [13]). Экспериментальные данные взяты из [24]. Имеется качественное согласие, но существенное количественное различие.

Рис. 4.2_Ar_f13 (CD, 381) представляет обобщенную силу осциллятора дискретного квадрупольного возбуждения $3p - 4p$ атома Ar как функцию квадрата переданного электроном атому момента q в приближении ХФ и ПСФО (см. [13]). ОСО имеет два максимума, первый из которых, при меньшем q , на порядок больше второго. Экспериментальные данные взяты из [24]. Имеется качественное согласие, но существенное количественное различие.

Рис. 4.2_Ar_g1 (CD, 382) приводит сечение монополярного комптоновского рассеяния γ -квантов энергии $E = 2000$ Ry на атоме Ar в ПСФО как функцию переданного атому момента q при различных энергиях ω и при переданном угловом моменте $L = 0$ (см. [15]). Обращаем внимание на большой диапазон рассмотренных значений q , $0 < q < 8$, и систематическое смещение максимума в сторону больших q с ростом ω .

Рис. 4.2_Ar_g2 (CD, 382) изображает сечение дипольного комптоновского рассеяния γ -квантов энергии $E = 2000$ Ry на атоме Ar в ПСФО как функцию переданного атому момента q при различных энергиях ω и при переданном угловом моменте $L = 1$ (см. [15]). Максимум с ростом ω переходит в сторону больших q .

Рис. 4.2_Ar_g3 (CD, 383) представляет сечение квадрупольного комптоновского рассеяния γ -квантов энергии $E = 2000$ Ry на атоме Ar в ПСФО как функцию переданного атому момента q при различных энергиях ω и при переданном угловом моменте $L = 2$ (см. [15]). Сечение имеет два максимума, которые с ростом ω уходят в сторону больших q .

Рис. 4.2_Ar_g4 (CD, 383) даёт сечение октупольного комптоновского рассеяния γ -квантов энергии $E = 2000$ Ry на атоме Ar в ПСФО как функцию переданного атому момента q при различных энергиях ω и при переданном угловом моменте $L = 3$ (см. [15]). Виден один максимум, который с ростом ω уменьшается по величине и перемещается, как и на предыдущих рисунках, в сторону больших q .

Рис. 4.2_Ar_h1 (CD, 384) приводит относительные сечения комптоновского возбуждения дипольных уровней $3p - 4s$, $3p - 5s$ атома Ar в ПСФО (см. [16]). Отчётливо видна двугорбая структура ОСО. При переходе от уровня $3p - 4s$ к уровню $3p - 5s$ ОСО значительно убывает.

Рис. 4.2_Ar_h2 (CD, 384) изображает относительные сечения комптоновского возбуждения дипольных и октупольных уровней $3p - 3d$ атома Ar в ПСФО (см. [16]).

Рис. 4.2_Ar_h3 (CD, 385) представляет относительные сечения комптоновского возбуждения квадрупольного и монопольного $3p - 4p$ -уровней, почти точно вырожденных, атома Ar в ПСФО (см. [16]). Виден след квадрупольного максимума в сечении.

Рис. 4.2_Ar_h4 (CD, 385) даёт относительные сечения комптоновского возбуждения квадрупольного и монопольного $3p - 5p$ -уровней, почти точно вырожденных, атома Ar в ПСФО (см. [16]). Виден след квадрупольного максимума в сечении.

Рис. 4.2_Ar_h5 (CD, 386) приводит относительное сечение комптоновского возбуждения ряда уровней: монопольного, дипольного, квадрупольного и октупольного, $3p - 5p$, $3p - 3d$, $3p - 4d$, $3p - 5s$ соответственно, — и некоторых их комбинаций для атома Ar в ПСФО (см. [16]). Уровни близки по энергии. Обращает внимание наличие двух максимумов в «дипольном + октупольном»- сечении, незаметных после суммирования по другим близким переходам и разным мультипольностям.

Рис. 4.2_Ar_i1 (CD, 386) даёт сечение упругого рассеяния позитронов на атоме Ar в приближении ХФ и УПСФО (см. [10]). Экспериментальные данные взяты из [17]. Поляризационное

взаимодействие учитывает возбуждение $3s$ -, $3p$ -подоболочек и образование виртуального позитрония. Однако отличие от данных эксперимента велико, хотя расчёт и воспроизводит значительное изменение в скорости убывания сечения при 2—2.5 эВ.

Рисунки 4.2_Kr содержат результаты вычислений для атома криптона (Kr).

Рис. 4.2_Kr_a1 (CD, 387) изображает сечение упругого (в приближении ХФ и УПСФО) и неупругого (в УПСФО) рассеяния электронов на атоме Kr (см. [1, 2]). Роль электронных корреляций велика вплоть до энергии электрона в 20 эВ. Минимум Рамзауэра [20] возникает лишь при учёте поляризационного взаимодействия. В вычислениях полагалось, что вклад в него вносят подоболочки $3d$, $4s$, $4p$.

Рис. 4.2_Kr_b1 (CD, 387) представляет вклад парциальных волн в сечение упругого рассеяния электронов на атоме Kr. Обращает на себя внимание мощный максимум в d -волне, который с дальнейшим ростом заряда ядра переходит в связанный $4d$ -уровень. Именно он определяет глубину минимума Рамзауэра. Учитывался вклад в поляризационное взаимодействие от подоболочек $3d$, $4s$, $4p$.

Рис. 4.2_Kr_c1 (CD, 388) даёт дифференциальное по углу сечение упругого рассеяния электронов с различными моментами на атоме Kr. Помимо максимумов в рассеянии вперёд и назад, дифференциальное сечение имеет ещё два максимума против одного в аргоне — см. Рис. 4.2_Ar_c1.

Рис. 4.2_Kr_d1 (CD, 388) изображает в приближении ХФ фазы различных парциальных волн в рассеянии электронов на атоме Kr. Как и должно быть в соответствии с (3.21), при нулевой энергии электрона s -фаза равна 4π , p -фаза — 3π , d -фаза — 2π , а f -фаза обращается в ноль, если их определить так, что при $E \rightarrow \infty$ все фазы $\delta_l \rightarrow 0$.

Рис. 4.2_Kr_e1 (CD, 389) приводит плотности монополярных обобщенных сил осцилляторов атома Kr в ПСФО как функции переданной атому энергии при различных q (см. [7]). Кривые довольно сложные. Их максимумы с ростом q перемещаются в сторону больших энергий.

Рис. 4.2_Kr_e2 (CD, 389) представляет плотности дипольных обобщенных сил осцилляторов атома Kr в ПСФО как функции переданной атому энергии при различных q (см. [7]). Величина дипольных ОСО на порядок больше и монополярных (Рис. 4.2_Kr_e1), и квадрупольных (Рис. 4.2_Kr_e3). Максимумы

с ростом q уменьшаются и перемещаются в сторону больших энергий.

Рис. 4.2_Kr_e3 (CD, 390) даёт плотности квадрупольных обобщенных сил осцилляторов атома Кг в ПСФО как функции переданной атому энергии при различных q (см. [7]). Кривые ОСО в рассмотренной области q и ω имеют два максимума. Первый, на порядок больший, с ростом q смещается в сторону больших энергий. Второй показан на вставке. Видно перемещение максимума в сторону больших энергий с ростом q .

Рис. 4.2_Kr_e4 (CD, 390) изображает плотности октупольных обобщенных сил осцилляторов атома Кг в ПСФО как функции переданной атому энергии при различных q (см. [7]). Поведение ОСО весьма экзотично и характеризуется многими максимумами, притом для высоких энергий весьма большими.

Рис. 4.2_Kr_f1 (CD, 391) приводит обобщенные силы осцилляторов дискретных монопольного и квадрупольного возбуждений $4p - 5p$ атома Кг как функции квадрата переданного атому момента q в ПСФО (см. [13]). Квадрупольные ОСО имеют два максимума, но вследствие близости монопольного и квадрупольного уровней измеримы лишь суммы ОСО, где следом максимума остаётся очень небольшой перегиб (см. вставку).

Рис. 4.2_Kr_f2 (CD, 391) изображает обобщенные силы осцилляторов дискретных монопольного и квадрупольного возбуждений $4p - 6p$ атома Кг как функции квадрата переданного атому момента q в ПСФО (см. [13]). Квадрупольный максимум фактически невидим в полном уровне ОСО.

Рис. 4.2_Kr_f3 (CD, 392) даёт обобщенные силы осцилляторов дискретных квадрупольных возбуждений $4p - 4f$ и $4p - 5f$ атома Кг как функции квадрата переданного атому момента q в ПСФО (см. [13]).

Рис. 4.2_Kr_f4 (CD, 392) представляет обобщенные силы осцилляторов дискретных дипольных возбуждений $4p - 5s$ и $4p - 6s$ атома Кг как функции квадрата переданного атому момента q в приближении ХФ и ПСФО (см. [14]). Примечательно, что в обоих уровнях ОСО имеют характерный, при одинаковых q^2 , максимум.

Рис. 4.2_Kr_f5 (CD, 393) приводит обобщенные силы осцилляторов дискретных дипольных возбуждений $4p - 4d$ и $4p - 5d$ атома Кг как функции квадрата переданного атому момента q в приближении ХФ и ПСФО (см. [14]). Роль корреляций незначительна.

Рис. 4.2_Kr_f6 (CD, 393) изображает обобщенные силы осцилляторов дискретных октупольных возбуждений $4p - 4d$ и $4p - 5d$ атома Kr как функции квадрата переданного атому момента q в приближении ХФ и ПСФО (см. [14]). Кривые имеют один максимум, при $q^2 \approx 1.25$. Роль корреляций заметна, но невелика.

Рис. 4.2_Kr_f7 (CD, 394) даёт обобщенные силы осцилляторов дискретных дипольного и октупольного возбуждений $4p - 4d$ атома Kr как функции квадрата переданного атому момента q в ПСФО (см. [14]). В октупольном переходе есть максимум при $q^2 \approx 1$, а в дипольном он расположен в нуле. Поскольку уровни по энергии очень близки, представлена сумма их ОСО, максимум которой находится лишь в нуле.

Рис. 4.2_Kr_f8 (CD, 394) представляет обобщенные силы осцилляторов дискретных дипольного и октупольного возбуждений $4p - 5d$ атома Kr как функции квадрата переданного атому момента q в ПСФО (см. [14]). Из-за близости уровней наблюдаемой величиной является по сути лишь сумма их ОСО.

Рис. 4.2_Kr_f9 (CD, 395) приводит в приближении ХФ и ПСФО обобщенные силы осцилляторов и их отношение для $3d$ -электронов Kr (см. [7]). Видна заметная роль ПСФО-поправок, достигающая по абсолютной величине 20 %.

Рис. 4.2_Kr_f10 (CD, 396) даёт в приближении ХФ и ПСФО обобщенные силы осцилляторов и их отношение для $4s$ -электронов Kr (см. [7]). Роль ПСФО-поправок гораздо больше, чем на Рис. 4.2_Kr_f9. При малых энергиях и больших q отношение достигает 4.

Рис. 4.2_Kr_f11 (CD, 397) изображает в приближении ХФ и ПСФО обобщенные силы осцилляторов и их отношение для $4p$ -электронов Kr (см. [7]). Роль ПСФО-поправок гораздо больше, чем на Рис. 4.2_Kr_f9.

Рис. 4.2_Kr_g1 (CD, 398) приводит сечение монопольного комптоновского рассеяния γ -квантов энергии $E = 2000$ Ry на атоме Kr в ПСФО как функцию переданного атому момента q при различных энергиях ω (переданный угловой момент $L = 0$) (см. [15]). Сечение характеризуется максимумом, уменьшающимся по величине с ростом энергии и перемещающимся при этом в сторону больших q . Обращаем внимание на большой диапазон рассмотренных значений q , $0 < q < 8$.

Рис. 4.2_Kr_g2 (CD, 398) изображает сечение дипольного комптоновского рассеяния γ -квантов энергии $E = 2000$ Ry на

атоме Kr в ПСФО как функцию переданного атому момента q при различных энергиях ω (переданный угловой момент $L = 1$) (см. [15]). Максимум с ростом ω уходит в сторону больших q .

Рис. 4.2_Kr_g3 (CD, 399) представляет сечение квадрупольного комптоновского рассеяния γ -квантов энергии $E = 2000$ Ry на атоме Kr в ПСФО как функцию переданного атому момента q при различных энергиях ω (переданный угловой момент $L = 2$) (см. [15]). Второй максимум с ростом ω уходит в сторону больших q .

Рис. 4.2_Kr_g4 (CD, 399) даёт сечение октупольного комптоновского рассеяния γ -квантов энергии $E = 2000$ Ry на атоме Kr в ПСФО как функцию переданного атому момента q при различных энергиях ω (переданный угловой момент $L = 3$) (см. [15]). Второй максимум находится вне пределов рисунка.

Рис. 4.2_Kr_h1 (CD, 400) изображает относительное сечение комптоновского возбуждения дипольного и октупольного уровней $4p - 4d$ атома Kr в ПСФО (см. [16, 25]). Здесь, в отличие от Рис. 4.2_Kr_h1, максимум в сечении один.

Рис. 4.2_Kr_h2 (CD, 400) представляет относительное сечение комптоновского возбуждения квадрупольного и монопольного уровней, почти точно вырожденных, $4p - 5p$ атома Kr в ПСФО (см. [16, 25]). Отчётливо видны два максимума в квадрупольном сечении, сливающиеся в один в ОСО.

Рис. 4.2_Kr_i1 (CD, 401) даёт сечение упругого рассеяния позитронов на атоме Kr в приближении ХФ и УПСФО (см. [10]). Экспериментальные данные взяты из [17, 26, 27], результаты более сложных расчётов можно найти в [28]. Поляризационное взаимодействие учитывает возбуждение $4s$ -, $4p$ -подоболочек и образование виртуального позитрония.

Рисунки 4.2_ Xe содержат результаты вычислений для атома ксенона (Xe).

Рис. 4.2_Xe_a1 (см. с. 225) (CD, 401) приводит сечение упругого рассеяния электронов на атоме Xe в приближении ХФ и УПСФО (см. [1, 2]). Роль электронных корреляций велика. Вслед за узким минимумом Рамзауэра идёт двугорбый максимум. Экспериментальные данные взяты из [29]. Минимум Рамзауэра [20] возникает лишь при учёте поляризационного взаимодействия. В вычислениях полагалось, что вклад в него вносят подоболочки $4d$, $5s$, $5p$.

Рис. 4.2_Xe_b1 (см. с. 225) (CD, 402) изображает вклад отдельных парциальных волн в сечение упругого рассеяния элект-

ронов на атоме Хе в УПСФО. Минимум Рамзауэра узок и глубок из-за большой величины максимума в d -волне, хотя максимум есть и в p -волне, а в f -волне их два. Как и в Рис. 4.2_Хе_a1, учитывалось поляризационное взаимодействие.

Рис. 4.2_Хе_d1 (см. с. 226) (CD, 402) даёт в приближении ХФ-фазы различных парциальных волн в рассеянии электронов на атоме Хе. Как и должно быть в соответствии с (3.21), при нулевой энергии электрона s -фаза равна 5π , p -фаза — 4π , d -фаза — 2π , а f -фаза обращается в ноль, если их определить так, что при $E \rightarrow \infty$ все фазы $\delta_l \rightarrow 0$.

Рис. 4.2_Хе_e1 (см. с. 226) (CD, 403) приводит плотности монополярных обобщенных сил осцилляторов атома Хе в ПСФО как функции переданной атому энергии при различных q (см. [7]). Максимум с ростом q перемещается в сторону больших энергий.

Рис. 4.2_Хе_e2 (см. с. 227) (CD, 403) содержит плотности дипольных обобщенных сил осцилляторов атома Хе в ПСФО как функции переданной атому энергии при различных q (см. [7]). Величина дипольных ОСО на порядок больше и монополярных (Рис. 4.2_Хе_e1), и квадрупольных (Рис. 4.2_Хе_e3). Максимум с ростом q перемещается в сторону больших энергий. В районе $\omega = 7 \text{ Ry}$ виден гигантский дипольный резонанс, проявляющийся при всех q .

Рис. 4.2_Хе_e3 (см. с. 227) (CD, 404) приводит плотности квадрупольных обобщенных сил осцилляторов атома Хе в ПСФО как функции переданной атому энергии при различных q (см. [7]). Видно перемещение максимума в сторону больших энергий с ростом q . Структура ОСО как функции ω весьма сложна. Так, при значительных q есть три максимума.

Рис. 4.2_Хе_e4 (см. с. 228) (CD, 404) изображает плотности октупольных обобщенных сил осцилляторов атома Хе в ПСФО как функции переданной атому энергии при различных q (см. [7]). Как и в Кг, поведение ОСО весьма экзотично и характеризуется многими максимумами, притом весьма большими.

Рис. 4.2_Хе_e5 (см. с. 229) (CD, 405) приводит плотности монополярных обобщенных сил осцилляторов $3d_{5/2}$ - и $3d_{3/2}$ -электронов атома Хе в приближении ХФ и СП ПСФО как функции переданной атому энергии при различных q (см. [30]). Расчёт проведен согласно описанию в самом конце разд. 3.6 и в разд. 1.10. Видно сильное воздействие электронов уровня $3/2$ на ОСО уровня $5/2$ при малых q .

Рис. 4.2_Хе_e6 (см. с. 230) (CD, 406) изображает плотности дипольных обобщенных сил осцилляторов $3d_{5/2}$ - и $3d_{3/2}$ -электронов атома Хе в приближении ХФ и СП ПСФО как функции переданной атому энергии при различных q (см. [30]). Как и на Рис. 4.2_Хе_e1, результаты получены согласно описанному в разд. 1.10 и 3.6. Воздействие $3/2$ -электронов приводит к дополнительному максимуму в СП ПСФО ОСО электронов $5/2$ -уровня при ~ 52 эВ при всех рассмотренных q . Ситуация подобна имеющей место в фотоэффекте — см. Рис. 2.2_Хе_b7.

Рис. 4.2_Хе_e7 (см. с. 231) (CD, 407) даёт плотности квадрупольных обобщенных сил осцилляторов $3d_{5/2}$ - и $3d_{3/2}$ -электронов атома Хе в приближении ХФ и СП ПСФО как функции переданной атому энергии при различных q (см. [30]). Роль взаимодействия $5/2$ - и $3/2$ -уровней сводится лишь к появлению небольшого дополнительного максимума при ~ 50.6 эВ в ОСО уровня $5/2$.

Рис. 4.2_Хе_f1 (см. с. 232) (CD, 408) представляет обобщенные силы осцилляторов дискретных монопольного и квадрупольного возбуждений $5p - 6p$ атома Хе как функции квадрата переданного атому момента q в ПСФО (см. [13]). Два квадрупольных максимума видны и в полной ОСО.

Рис. 4.2_Хе_f2 (см. с. 232) (CD, 408) даёт обобщенные силы осцилляторов дискретных монопольного и квадрупольного возбуждений $5p - 7p$ атома Хе как функции квадрата переданного атому момента q в ПСФО (см. [13]). Квадрупольный максимум виден и в полной ОСО.

Рис. 4.2_Хе_f3 (см. с. 233) (CD, 409) приводит обобщенные силы осцилляторов дискретных квадрупольных возбуждений $5p - 4f$ и $5p - 5f$ атома Хе как функции квадрата переданного атому момента q в приближении ХФ и ПСФО (см. [13]).

Рис. 4.2_Хе_f4 (см. с. 233) (CD, 409) представляет обобщенные силы осцилляторов дискретных дипольных возбуждений $5p - 6s$ и $5p - 7s$ атома Хе как функции квадрата переданного атому момента q в приближении ХФ и ПСФО (см. [14]). Примечательно, что, как и в Кг (см. Рис. 4.2_Кг_f4), в обоих уровнях ОСО имеет характерный при одинаковых q^2 максимум.

Рис. 4.2_Хе_f5 (см. с. 234) (CD, 410) изображает обобщенные силы осцилляторов дискретных дипольных возбуждений $5p - 5d$ и $5p - 6d$ атома Хе как функции квадрата переданного атому момента q в ПСФО (см. [14]).

Рис. 4.2_Хе_f6 (см. с. 234) (CD, 410) даёт обобщенные силы осцилляторов дискретных октупольных возбуждений $5p - 5d$ и

$5p - 6d$ атома Хе как функции квадрата переданного атому момента q в ПСФО (см. [14]). ОСО обоих уровней имеет максимумы при примерно тех же q .

Рис. 4.2_Хе_f7 (см. с. 235) (CD, 411) приводит обобщенные силы осцилляторов дискретных дипольного и октупольного возбуждений $5p - 5d$ атома Хе как функции квадрата переданного атому момента q в ПСФО (см. [14]). Поскольку уровни по энергии очень близки, представлена сумма их ОСО. Октупольный максимум маскируется в полном ОСО.

Рис. 4.2_Хе_f8 (см. с. 235) (CD, 411) приводит обобщенные силы осцилляторов дискретных дипольного и октупольного возбуждений $5p - 6d$ атома Хе как функции квадрата переданного атому момента q в ПСФО (см. [14]). Из-за близости уровней, наблюдаемой величиной является по сути лишь сумма их ОСО. Как и на Рис. 4.2_Хе_f7, октупольный максимум маскируется в полном ОСО.

Рис. 4.2_Хе_f9 (см. с. 236) (CD, 412) приводит в приближении ХФ и ПСФО обобщенные силы осцилляторов и их отношение для $4d$ -электронов Хе. Видна заметная роль ПСФО-поправок.

Рис. 4.2_Хе_f10 (см. с. 237) (CD, 413) даёт в приближении ХФ и ПСФО обобщенные силы осцилляторов и их отношение для $5s$ -электронов Хе. Роль ПСФО-поправок гораздо больше, чем на Рис. 4.2_Хе_f9.

Рис. 4.2_Хе_f11 (см. с. 238) (CD, 414) изображает в приближении ХФ и ПСФО обобщенные силы осцилляторов и их отношение для $5p$ -электронов Хе. Роль ПСФО-поправок значительна, достигая фактора 1.7.

Рис. 4.2_Хе_g1 (см. с. 239) (CD, 415) представляет сечение монопольного комптоновского рассеяния γ -квантов энергии $E = 2000$ Ру на атоме Хе в ПСФО как функцию переданного атому момента q при различных энергиях ω (переданный угловой момент $L = 0$) (см. [15]). Обращаем внимание на большой диапазон рассмотренных значений q , $0 < q < 8$. С ростом ω максимум перемещается в сторону больших q .

Рис. 4.2_Хе_g2 (см. с. 239) (CD, 415) изображает сечение дипольного комптоновского рассеяния γ -квантов энергии $E = 2000$ Ру на атоме Хе в ПСФО как функцию переданного атому момента q при различных энергиях ω (переданный угловой момент $L = 1$) (см. [15]). Второй максимум с ростом ω уходит в сторону больших q . Как и на Рис. 4.2_Хе_g1, с ростом ω максимум перемещается в сторону больших q .

Рис. 4.2_Хе_g3 (см. с. 240) (CD, 416) содержит сечение квадрупольного комптоновского рассеяния γ -квантов энергии $E = 2000$ Ry на атоме Хе в ПСФО как функцию переданного атому момента q при различных энергиях ω (переданный угловой момент $L = 2$) (см. [15]). Максимумы с ростом ω уходят в сторону больших q , причем второй оказывается за границей рисунка.

Рис. 4.2_Хе_g4 (см. с. 240) (CD, 416) даёт сечение октупольного комптоновского рассеяния γ -квантов энергии $E = 2000$ Ry на атоме Хе в ПСФО как функцию переданного атому момента q при различных энергиях ω (переданный угловой момент $L = 3$) (см. [15]). Второй максимум находится вне пределов рисунка.

Рис. 4.2_Хе_h1 (см. с. 241) (CD, 417) изображает относительное сечение комптоновского возбуждения дипольных уровней $5p - 6s$ и $5p - 7s$ атома Хе в ПСФО (см. [25]). Здесь, в отличие от Рис. 4.2_Хе_h1, максимумов в сечении — два.

Рис. 4.2_Хе_h2 (см. с. 241) (CD, 417) приводит относительное сечение комптоновского возбуждения дипольного и октупольного уровней $5p - 5d$ атома Хе в ПСФО (см. [25]). Обращает внимание наличие асимметричного максимума в сечении.

Рис. 4.2_Хе_h3 (см. с. 242) (CD, 418) представляет относительное сечение комптоновского возбуждения — дипольного и октупольного, почти точно вырожденных уровней $5p - 6d$ атома Хе в ПСФО (см. [25]). Отчётливо видны два максимума в сечении.

Рис. 4.2_Хе_h4 (см. с. 242) (CD, 418) даёт относительное сечение комптоновского возбуждения ряда близких по энергии монопольного и квадрупольного уровней $5p - 7p$ атома Хе в ПСФО (см. [25]). Как и на Рис. 4.2_Хе_h3, видны следы двух максимумов в сечении, второй из которых обусловлен квадрупольным переходом.

Рис. 4.2_Хе_h5 (см. с. 243). (CD, 419) приводит относительное сечение комптоновского возбуждения дипольных, октупольных, монопольных и квадрупольных уровней $5p - 7s$, $5p - 6d$, $5p - 7p$ атома Хе в ПСФО (см. [25]). И здесь, как и на Рис. 4.2_Хе_h3 и Рис. 4.2_Хе_h4, виден след второго — октупольного максимума.

Рис. 4.2_Хе_i1 (см. с. 243) (CD, 419) представляет сечение упругого рассеяния позитронов на атоме Хе в приближении ХФ и УПСФО (см. [10]). Экспериментальные данные взяты из [17, 31]. Поляризационное взаимодействие учитывает возбуждение

4d-, 5s-, 5p-подоболочек и образование виртуального позитрония. Обращаем внимание на сильное расхождение УПСФО с экспериментом.

Таблица к п. 4.2. (CD, 482) Обобщенные силы осцилляторов при $q = 0.00001$.

Приведены ОСО Ne, Ar, Kr, Xe. При столь малых q ОСО близки к оптическим, т.е. дипольным, силам осциллятора. Роль ПСФО корреляций значительна.

4.3. Атомы и ионы элементов I группы периодической системы

В этом разделе представлены результаты наших уже известных и новых вычислений полных и парциальных сечений упругого рассеяния электронов и позитронов на некоторых атомах и ионах элементов I группы периодической системы элементов в приближении ХФ и с учётом поляризационного взаимодействия в упрощённом приближении случайных фаз с обменом — УПСФО (см. п. 3.3 и 3.4 и [АИЧЧ]) и виртуального образования позитрония (см. п. 3.8). В формировании поляризационного взаимодействия учтены возбуждения электронов: $1s^2, 2s$ в Li; $1s^2$ в Li^+ ; $1s^2, 2s^2$ в Li^- ; $2s^2, 2p^6, 3s$ в Na; $2s^2, 2p^6$ в Na^+ ; $3s^2, 3p^6, 4s$ в K; $3s^2, 3p^6$ в K^+ . В этом же приближении вычислены s -, p -, d -, f -фазы рассеяния и соответствующие парциальные сечения. Приведены обобщённые силы осцилляторов с учётом ПСФО- корреляций упомянутых выше электронов. Даются также ОСО для $3d_{5/2}$ -, $3d_{3/2}$ -электронов Cs.

Краткие комментарии к рисункам п. 4.3

Рисунки 4.3_Li содержат результаты вычислений для атома лития (Li).

Рис. 4.3_Li_a1 (CD, 420) изображает сечение упругого (в приближении ХФ и УПСФО) и неупругого (в УПСФО) рассеяния электронов на атоме Li. Учитываемый неупругий канал — ионизация $2s$ -электронов Li.

Рис. 4.3_Li_b1 (CD, 420) представляет вклад парциальных волн в сечение упругого рассеяния электронов на атоме Li. Вклад s -волны доминирует только при очень малой энергии.

Резко растёт вклад p и d , а затем уже с 5 эВ и d -волны, который, однако, уступает вкладу p и d . Отметим небольшой максимум при 2 эВ в s -волне.

Рис. 4.3_Li_d1 (CD, 421) даёт в приближении ХФ фазы различных парциальных волн в рассеянии электронов на атоме Li. Здесь s -фаза имеет отрицательную производную во всём рассмотренном диапазоне энергий. Как и должно быть в соответствии с (3.21), при нулевой энергии электрона s -фаза равна 2π , а p -, d -, f -фазы обращаются в ноль, если их все определить так, что при $E \rightarrow \infty$ фазы $\delta_l \rightarrow 0$.

Рис. 4.3_Li_e1 (CD, 421) приводит плотности монополярных обобщенных сил осцилляторов атома Li в ПСФО как функции переданной атому энергии при различных q . Большой радиус атома и, как следствие, быстрые осцилляции фактора $\exp(i \mathbf{q} \mathbf{r})$ уже при сравнительно малых q приводят к весьма сложному поведению ОСО.

Рис. 4.3_Li_e2 (CD, 422) содержит плотности дипольных обобщенных сил осцилляторов атома Li в ПСФО как функции переданной атому энергии при различных q . Первый максимум, от $2s$ -электрона, смещается в сторону больших энергий с ростом q , тогда как второй, происходящий от ионизации $1s$ -электронов, стоит на месте. Дипольные ОСО значительно больше монополярных и квадрупольных.

Рис. 4.3_Li_e3 (CD, 422) изображает плотности квадрупольных обобщенных сил осцилляторов атома Li в ПСФО как функции переданной атому энергии при различных q . Примечательно, что с ростом q первый максимум убывает, тогда как второй — растёт.

Рис. 4.3_Li_i1 (CD, 423) даёт сечение упругого (в приближении ХФ и УПСФО) и неупругого (в УПСФО) рассеяния позитронов на атоме Li (см. [10]). Поляризационное взаимодействие, в котором учитывается образование виртуального позитрония, резко увеличивает сечение (см. обсуждение в конце разд. 3.8).

Рисунки 4.3_Li⁺ содержат результаты вычислений для иона Li⁺.

Рис. 4.3_Li⁺_a1 (CD, 423) приводит сечение упругого рассеяния электронов на ионе Li⁺ в приближении ХФ и УПСФО. Включены вклады s -, p -, d -, f -волн.

Рис. 4.3_Li⁺_b1 (CD, 424) изображает полное сечение и парциальные вклады s -, p -, d -, f -волн упругого рассеяния электронов

на ионе Li^+ в УПСФО. В сечении явно виден второй максимум, складывающийся в основном из сечений d -, f -волн.

Рис. 4.3_Li⁺_d1 (CD, 424) представляет в приближении ХФ фазы различных парциальных волн в рассеянии электронов на ионе Li^+ . Поведение всех фаз как функций энергии похоже.

Рис. 4.3_Li⁺_e1 (CD, 425) даёт плотности монополярных обобщенных сил осцилляторов иона Li^+ в ПСФО как функции переданной атому энергии при различных q . С ростом q проявляется максимум в ОСО.

Рис. 4.3_Li⁺_e2 (CD, 425) приводит плотности дипольных обобщенных сил осцилляторов иона Li^+ в ПСФО как функции переданной иону энергии при различных q . Вклад дипольных ОСО примерно на порядок превосходит вклад монополярных и квадрупольных.

Рис. 4.3_Li⁺_e3 (CD, 426) отражает плотности квадрупольных обобщенных сил осцилляторов атома Li^+ в ПСФО как функции переданной атому энергии при различных q . С ростом q формируется максимум, который смещается в сторону больших ω .

Рис. 4.3_Li⁺_i1 (CD, 426) изображает полное сечение упругого рассеяния позитрона на ионе Li^+ и вклад в него парциальных s -, p -, d -, f -волн. Примечателен второй максимум, формируемый вкладом d -, f -волн.

Рис. 4.3_Li⁺_i2 (CD, 427) дает фазы различных парциальных волн в рассеянии позитронов на ионе Li^+ . Зависимости всех рассмотренных фаз от энергии позитрона подобны. С ростом орбитального момента фазы увеличиваются.

Рисунки 4.3_Li⁻ содержат результаты вычислений для иона Li^- .

Рис. 4.3_Li⁻_a1 (CD, 427) изображает сечение упругого (в приближении ХФ и УПСФО) и неупругого (в УПСФО) рассеяния электронов на ионе Li^- . Сечение чрезвычайно быстро убывает с ростом энергии электрона. При 5 эВ имеется небольшой минимум.

Рис. 4.3_Li⁻_b1 (CD, 428) представляет вклад парциальных волн в сечение упругого рассеяния электронов на ионе Li^- . Наибольший вклад вносят волны рассеяния с большим орбитальным моментом.

Рис. 4.3_Li⁻_d1 (CD, 428) дает фазы различных парциальных волн в рассеянии электронов на ионе Li^- . Поведение s - и p -фаз как функций энергии довольно сложное.

Рисунки 4.3_Na содержат результаты вычислений для атома натрия Na.

Рис. 4.3_Na_a1 (CD, 429) изображает сечение упругого (в приближении ХФ и УПСФО) и неупругого (в УПСФО) рассеяния электронов на атоме Na. Поляризационное взаимодействие определяется вкладом $2p$ -, $3s$ -электронов. Сечение упругого рассеяния быстро убывает с ростом энергии налетающего электрона.

Рис. 4.3_Na_b1 (CD, 429) даёт вклад s -, p -, d -, f -парциальных волн в сечение упругого рассеяния электронов на атоме Na. Примечательно, сколь быстро убывает вклад s -волны.

Рис. 4.3_Na_d1 (CD, 430) представляет фазы различных парциальных волн в рассеянии электронов на атоме Na. УПСФО-поправки происходят от поляризационного взаимодействия, создаваемого виртуальным возбуждением $2p$ -, $3s$ -электронов. Как и должно быть в соответствии с (3.21), при нулевой энергии электрона s -фаза равна 3π , p -фаза — π , а d -, f -фазы обращаются в ноль, если их все определить так, что при $E \rightarrow \infty$ фазы $\delta_l \rightarrow 0$.

Рис. 4.3_Na_i1 (CD, 430) приводит вклад парциальных волн в сечение упругого рассеяния позитронов на атоме Na. Заметив, что при очень малой энергии позитрона сечение на атоме Li гораздо больше (см. Рис.4.3_Li_i1) (см. [10]).

Рис. 4.3_Na_i2 (CD, 431) изображает фазы различных парциальных волн в рассеянии позитронов на атоме Na.

Рисунки 4.3_Na⁺ содержат результаты вычислений для иона Na⁺.

Рис. 4.3_Na⁺_a1 (CD, 431) представляет сечение упругого рассеяния электронов на ионе Na⁺ в приближении ХФ и УПСФО. Имеется очевидное сходство с Рис. 4.3_Li_a1 — сечением упругого рассеяния электронов на атоме Li.

Рис. 4.3_Na⁺_a2 (CD, 432) изображает вклад s -, p -, d -, f -парциальных волн в сечение упругого рассеяния электронов на ионе Na⁺. Примечателен дополнительный максимум в s -волне и по два максимума во вкладах других волн. Отметим рост вклада с увеличением углового момента парциальной волны.

Рис. 4.3_Na⁺_a3 (CD, 432) даёт фазы различных парциальных волн в рассеянии электронов на ионе Na⁺. Отмечается естественный для кулоновского поля рост фазы при $E \rightarrow 0$.

Рис. 4.3_Na⁺_i1 (CD, 433) приводит полное сечение упругого рассеяния позитрона на ионе Na⁺ и вклад в него парциальных s -, p -, d -, f -волн. Примечателен второй максимум, формируемый

вкладом d -, f -волн. Сечение Na^+ весьма похоже на сечение Li^+ (см. Рис. 4.3_Li⁺_i1).

Рис. 4.3_Na⁺_i2 (CD, 433) дает фазы различных парциальных волн в рассеянии позитронов на ионе Na^+ . Примечательно, что фазы увеличиваются с ростом углового момента.

Рисунки 4.3_K содержат результаты вычислений для атома калия (K).

Рис. 4.3_K_a1 (CD, 434) дает полное сечение упругого (в приближении ХФ и УПСФО) и неупругого (в УПСФО) рассеяния электронов на атоме K. ХФ-максимум упругого рассеяния исчезает в УПСФО.

Рис. 4.3_K_b1 (CD, 434) изображает вклад s -, p -, d -, f -парциальных волн в сечение упругого рассеяния электронов на атоме K. Наибольший вклад — от высших орбитальных моментов.

Рис. 4.3_K_d1 (CD, 435) представляет фазы s -, p -, d -, f -парциальных волн в рассеянии электронов на атоме K. При нулевой энергии электрона s -фаза равна 4π , p -фаза — 2π , а d -, f -фазы обращаются в ноль, если их все определить так, что при $E \rightarrow \infty$ $\delta_l \rightarrow 0$. Фазы существенно меняются при малых энергиях.

Рис. 4.3_K_i1 (CD, 435) приводит полное и парциальные s -, p -, d -, f -сечения упругого рассеяния позитронов на атоме K. Учитываются s -, p -, d -, f -волны и вклад $3s$ -, $3p$ -, $4s$ -подоболочек в поляризационное взаимодействие, которое находится с учётом образования виртуального позитрония.

Рис. 4.3_K_i2 (CD, 436) даёт фазы различных парциальных волн в рассеянии позитронов на атоме K.

Рисунки 4.3_K⁺ содержат результаты вычислений для иона K^+ .

Рис. 4.3_K⁺_a1 (CD, 436) изображает сечение упругого (в приближении ХФ и УПСФО) и неупругого (в УПСФО) рассеяния электронов на ионе K^+ . Учитываются s -, p -, d -, f -волны и вклад $3s$ -, $3p$ -, $4s$ -подоболочек в поляризационное взаимодействие.

Рис. 4.3_K⁺_b1 (CD, 437) предлагает вклад s -, p -, d -, f -парциальных волн в сечение упругого рассеяния электронов на ионе K^+ в УПСФО. Поляризационное взаимодействие происходит от $3s$ -, $3p$ -подоболочек. При малых E доминирует вклад f -, d -парциальных волн.

Рис. 4.3_K⁺_d1 (CD, 437) приводит фазы s -, p -, d -, f -парциальных волн в рассеянии электронов на ионе K^+ . Поляризационное взаимодействие происходит от $3s$ -, $3p$ -подоболочек.

Рис. 4.3_K⁺_e1 (CD, 438) даёт плотности монополярных обобщенных сил осцилляторов иона K⁺ в приближении ХФ и ПСФО как функции переданной ему энергии при различных q . ОСО растут с ростом q .

Рис. 4.3_K⁺_e2 (CD, 439) предлагает плотности дипольных обобщенных сил осцилляторов иона K⁺ в приближении ХФ и ПСФО как функции переданной атому энергии при различных q . При $\omega \leq 3 \text{ Ry}$ дипольные ОСО превосходят монополярные и квадрупольные более чем на порядок (ср. с Рис. 4.3_K⁺_e1 и Рис. 4.3_K⁺_e3).

Рис. 4.3_K⁺_e3 (CD, 440) представляет плотности квадрупольных обобщенных сил осцилляторов иона K⁺ в приближении ХФ и ПСФО как функции переданной атому энергии при различных q . ОСО увеличивается с ростом q .

Рис. 4.3_K⁺_i1 (CD, 441) изображает вклады s -, p -, d -, f -парциальных волн и полное сечение упругого рассеяния позитронов на ионе K⁺. Примечателен второй максимум, формируемый вкладом d -, f -волн. Сечение K⁺ весьма похоже на сечение Li⁺ и Na⁺ (см. Рис. 4.3_Li⁺_i1 и Рис. 4.3_Na⁺_i1).

Рисунки 4.3_Cs содержат результаты вычислений для атома цезия (Cs).

Рис. 4.3_Cs_e1 (CD, 442) приводит плотности монополярных обобщенных сил осцилляторов $3d_{5/2}$ - и $3d_{3/2}$ -электронов атома Cs в приближении ХФ и СП ПСФО как функции переданной атому энергии при различных q (см. [30]). Расчёт проведен согласно описанию в самом конце п. 3.6 и в п. 1.10. Видно сильное воздействие $3/2$ - на $5/2$ -уровень при малых q .

Рис. 4.3_Cs_e2 (CD, 443) изображает плотности дипольных обобщенных сил осцилляторов $3d_{5/2}$ - и $3d_{3/2}$ -электронов атома Cs в приближении ХФ и СП ПСФО как функции переданной атому энергии при различных q (см. [30]). Как и на Рис. 4.3_Cs_e1, результаты получены согласно описанному в п. 1.10 и 3.6. Воздействие $3/2$ -электронов приводит к дополнительному максимуму в СП ПСФО ОСО-электронов $5/2$ -уровня при ~ 55 эВ при всех рассмотренных q .

Рис. 4.3_Cs_e3 (CD, 444) даёт плотности квадрупольных обобщенных сил осцилляторов $3d_{5/2}$ - и $3d_{3/2}$ -электронов атома Cs в приближении ХФ и СП ПСФО как функции переданной атому энергии при различных q (см. [30]). Роль взаимодействия $5/2$ - и $3/2$ -уровней сводится лишь к появлению небольшого дополнительного максимума при ~ 54.2 эВ в ОСО уровня $5/2$.

Таблица к п. 4.3 (CD, 483) содержит квадрупольные и монопольные обобщенные силы осцилляторов Li и Li^+ при $q = 0.00001$.

Из-за малой величины ОСО погрешность расчёта велика.

4.4. Атомы элементов II группы периодической системы

В этом разделе представлены результаты наших уже известных и новых вычислений полных и парциальных сечений упругого рассеяния электронов на атомах элементов II группы в приближении ХФ и с учётом поляризационного взаимодействия в упрощённом приближении случайных фаз с обменом — УПСФО (см. п. 3.3 и 3.4 и [АИЧЧ]). В формировании поляризационного взаимодействия учтены возбуждения электронов $1s^2$ в Be; $2s^2$, $2p^6$, $3s^2$ в Mg; $3s^2$, $3p^6$, $4s^2$ в Ca; $3p^6$, $3d^{10}$, $4s^2$ в Zn; $4p^6$, $4d^{10}$, $5s^2$ в Cd и $4d^{10}$, $5s^2$, $5p^6$, $5s^2$ в Ba. В этом же приближении вычислены s -, p -, d -, f -фазы рассеяния и их парциальные вклады в сечение. Приведены обобщённые силы осцилляторов (ОСО) с учётом ПСФО-корреляций упомянутых выше электронов. Приведены ОСО и сечения комптоновского возбуждения нескольких первых дискретных уровней некоторых атомов благородных газов. Для Be и Mg даются сечения рассеяния позитронов. Приведены также ОСО для $3d_{5/2}$ -, $3d_{3/2}$ -электронов Ba.

Краткие комментарии к рисункам п. 4.4

Рисунки 4.4_Вe содержат результаты вычислений для атома бериллия (Be).

Рис. 4.4_Вe_a1 (CD, 445) изображает сечение упругого (в приближении ХФ и УПСФО) и неупругого (в УПСФО) рассеяния электронов на атоме Be. Включён вклад s -, p -, d -, f -волн. Поляризационный потенциал учтён решением уравнения Дайсона из п. 3.4, тогда как само поляризационное взаимодействие находится приближённо, согласно принятому в УПСФО. Сечение имеет мощный максимум при 0.5 эВ и резкий перегиб при ~1 эВ.

Рис. 4.4_Вe_b1 (CD, 445) представляет вклады s -, p -, d -, f -парциальных волн в сечение упругого рассеяния электронов на атоме Be. Видно, что главный максимум при 0.5 эВ образуется

вкладом p -волны, а вклад d -волны имеет максимум при 5 эВ, след которого виден и в полном сечении (Рис.4.4_Вe_a1).

Рис. 4.4_Вe_d1 (CD, 446) приводит фазы различных парциальных волн в рассеянии электронов на атоме Ве, вычисленные в результате решения уравнения Дайсона. На вставке s -фаза при $E = 0$ равна 2π , тогда как остальные фазы равны нулю в соответствии с (3.21). На основном рисунке s -фаза сдвинута для компактности кривых на 2π .

Рис. 4.4_Вe_e1 (CD, 446) даёт плотности монополярных обобщенных сил осцилляторов атома Ве в ПСФО как функции переданной атому энергии при различных q . С ростом q ОСО приобретает явный, почти симметричный максимум при $E \approx 0.9$ эВ.

Рис. 4.4_Вe_e2 (CD, 447) приводит плотности дипольных обобщенных сил осцилляторов атома Ве в ПСФО как функции переданной атому энергии при различных q (см. [32]). С ростом q зависимость ОСО от энергии становится весьма сложной.

Рис. 4.4_Вe_e3 (CD, 447) изображает плотности квадрупольных обобщенных сил осцилляторов атома Ве в ПСФО как функции переданной атому энергии при различных q . Как и на Рис. 4.4_Вe_e2, с ростом q первый максимум в ОСО смещается в сторону больших ω .

Рис. 4.4_Вe_i1 (CD, 448) представляет сечение упругого рассеяния позитронов на атоме Ве (см. [10]). Изображены вклады различных парциальных волн в сечение и фазы s -, p -, d -, f -парциальных волн атома Ве.

Рисунки 4.4_Mg содержат результаты вычислений для атома магния (Mg).

Рис. 4.4_Mg_a1 (CD, 449) даёт сечение упругого (в приближении ХФ и УПСФО) и неупругого (в УПСФО) рассеяния электронов на атоме Mg. Учитывается вклад s -, p -, d -, f -волн.

Рис. 4.4_Mg_b1 (CD, 449) приводит вклады парциальных волн в сечение упругого рассеяния электронов на атоме Mg. Видно, что уже при малых E доминирует f -волна, вклад которой имеет максимум при 0.7 эВ, а вклад d -волны имеет максимум при 3.5 эВ.

Рис. 4.4_Mg_d1 (CD, 450) представляет s -, p -, d -, f -фазы различных парциальных волн в рассеянии электронов на атоме Mg. Фазы определены в рамках приближения УПСФО. В соответствии с (3.21), при нулевой энергии электрона s -фаза равна 3π , p -фаза — π , а d -, f -фазы обращаются в ноль, если их все определить так, что при $E \rightarrow \infty$ фазы $\delta_l \rightarrow 0$. Вблизи $E = 0$ p -фаза быст-

ро нарастает, что говорит о приближении $3p$ -уровня уже в соседнем атоме — Al. Уточнение поляризационного потенциала приводит к резонансу в сечении упругого рассеяния — предвестнику образования отрицательного иона Mg^- .

Рис. 4.4_Mg_i1 (CD, 450) изображает сечение упругого (в приближении ХФ и УПСФО) и неупругого (в УПСФО) рассеяния позитрона на атоме Mg.

Рис. 4.4_Mg_i2 (CD, 451) даёт вклады парциальных s -, p -, d -, f -волн в сечение упругого рассеяния позитронов на атоме Mg. Доминирует вклад s -волны.

Рис. 4.4_Mg_i3 (CD, 451) приводит фазы s -, p -, d -, f -парциальных волн в рассеянии позитронов на атоме Mg в приближении УПСФО. Обращает внимание вариация в s -фазе в 2.5 рад. при энергии от 0—3 эВ.

Рисунки 4.4_Ca содержат результаты вычислений для атома кальция (Ca).

Рис. 4.4_Ca_a1 (CD, 452) представляет сечение упругого (в приближении ХФ и УПСФО) и неупругого (в УПСФО) рассеяния электронов на атоме Ca. Учтён вклад s -, p -, d -, f -волн (см. также [33, 34]).

Рис. 4.4_Ca_b1 (CD, 452) изображает вклад парциальных волн в сечение упругого рассеяния электронов на атоме Ca. Учтён вклад s -, p -, d -, f -волн. Вычисления проведены в рамках приближения УПСФО путём решения уравнения Дайсона (3.45) с использованием (3.46) (см. также [35, 36]). Поляризационный потенциал включает вклады s -, p -, d -, f -электронов.

Рис. 4.4_Ca_d1 (CD, 453) приводит фазы различных парциальных волн в рассеянии электронов на атоме Ca в приближении УПСФО. Фазы при нулевой энергии, в согласии с (3.21), равны: s -фаза — 4π а p -фаза — 2π . Обратим внимание на то, что p -фаза очень быстро нарастает, почти достигая 3π . Это означает, что при несколько более сильном поляризационном взаимодействии возможно образование связанного состояния $e^- + Ca$, т. е. отрицательного иона Ca^- . На основном рисунке фазы нормированы так, что все они обращаются в ноль при $E = 0$. Более аккуратный расчёт поляризационного взаимодействия и использование уравнения Дайсона (п. 3.4) позволили описать отрицательные ионы Ca и ряда других атомов второй группы [35, 36].

Рис. 4.4_Ca_e1 (CD, 454) даёт плотности монополярных обобщенных сил осцилляторов атома Ca в приближении ХФ и ПСФО

как функции переданной атому энергии при различных q . С ростом q первый максимум смещается в сторону больших ω .

Рис. 4.4_Ca_e2 (CD, 455) изображает плотности дипольных обобщенных сил осцилляторов атома Ca в приближении ХФ и ПСФО как функции переданной атому энергии при различных q .

Рис. 4.4_Ca_e3 (CD, 456) представляет плотности квадрупольных обобщенных сил осцилляторов атома Ca в приближении ХФ и ПСФО как функции переданной атому энергии при различных q .

Рисунки 4.4_Zn содержат результаты вычислений для атома цинка (Zn).

Рис. 4.4_Zn_a1 (CD, 457) изображает сечение упругого (в приближении ХФ и УПСФО) и неупругого (в УПСФО) рассеяния электронов на атоме Zn. Учитывается вклад s -, p -, d -, f -волн, а вклад в поляризационное взаимодействие вносят $3d$ -, $4s$ -электроны. Заметно влияние электронных корреляций, приводящих к отличию УПСФО от приближения ХФ.

Рис. 4.4_Zn_b1 (CD, 457) Вклад парциальных волн s , p , d , f в сечение упругого рассеяния электронов на атоме Zn. Поляризационное взаимодействие создаётся виртуальным возбуждением $3d$ -, $4s$ -электронов. Основным является максимум в p -волне, сигнализирующий о появлении связанного $4p$ -электрона в соседнем галлии. Остальные максимумы гораздо меньше.

Рис. 4.4_Zn_d1 (CD, 458) приводит фазы s -, p -, d -, f -парциальных волн в рассеянии электронов на атоме Zn в приближении УПСФО. Фазы (на вставке) при нулевой энергии, в согласии с (3.21), равны: s -фаза — 4π , p -фаза обращается 2π , а d -фаза — в π . На основном рисунке фазы нормированы так, что все обращаются в ноль при $E = 0$.

Рисунки 4.4_Cd содержат результаты вычислений для атома кадмия (Cd).

Рис. 4.4_Cd_a1 (CD, 458) изображает сечение упругого (в приближении ХФ и УПСФО) и неупругого (в УПСФО) рассеяния электронов на атоме Cd. Учитывается вклад s -, p -, d -, f -волн, а вклад в поляризационное взаимодействие вносят $4d$ -, $5s$ -электроны. Весьма заметно влияние электронных корреляций, приводящих к отличию УПСФО от приближения ХФ.

Рис. 4.4_Cd_b1 (CD, 459) представляет вклад парциальных s -, p -, d -, f -волн в сечение упругого рассеяния электронов на ато-

ме Cd. Поляризационное взаимодействие создаётся виртуальным возбуждением $4d$ -, $5s$ -электронов. Основным, как и в других элементах II группы, является максимум в p -волне. Вполне заметен и вклад широкого d -максимума. Примечательно наличие второго максимума в s -волне.

Рис. 4.4_Cd_d1 (CD, 459) даёт фазы s -, p -, d -, f -парциальных волн в рассеянии электронов на атоме Cd. Фазы (на вставке) при нулевой энергии, в согласии с (3.21), равны: s -фаза — 5π , p -фаза обращается в 3π , а d -фаза — в 2π . На основном рисунке фазы нормированы так, что все обращаются в ноль при $E = 0$.

Рисунки 4.4_Ba содержат результаты вычислений для атома бария (Ba).

Рис. 4.4_Ba_a1 (CD, 460) изображает сечение упругого (в приближении ХФ и УПСФО) и неупругого (в УПСФО) рассеяния электронов на атоме Ba. Очень велико влияние электронных корреляций, приводящих к появлению минимума (типа минимума Рамзауэра [20]) и максимума в УПСФО-сечении в отличие от ХФ.

Рис. 4.4_Ba_b1 (CD, 460) представляет вклад s -, p -, d -, f -парциальных волн в сечение упругого рассеяния электронов на атоме Ba. Поляризационное взаимодействие создаётся виртуальным возбуждением $5d$ -, $6s$ -электронов. Основным является максимум в p - и d -волнах, вполне заметен и вклад широкого f -максимума. Как и в Cd, имеется второй максимум в s -волне.

Рис. 4.4_Ba_d1 (CD, 461) предлагает фазы различных парциальных волн в рассеянии электронов на атоме Ba. Фазы при нулевой энергии, в согласии с (3.21), равны: s -фаза — 6π , p -фаза — 4π и d -фаза — 2π . Обратим внимание на то, что p -фаза около $E = 0$ стремительно нарастает, почти достигая 5π . Это означает, что при несколько более сильном поляризационном взаимодействии возможно образование связанного состояния $e + \text{Ba}$, т. е. отрицательного иона Ba^- [35, 36]. На основном рисунке фазы нормированы так, что все обращаются в ноль при $E = 0$.

Рис. 4.4_Ba_e1 (CD, 462) приводит плотности монополярных обобщенных сил осцилляторов атома Ba в приближении ХФ и ПСФО как функции переданной атому энергии при различных q . С ростом энергии, при $\omega \geq 2 R_y$ начинают доминировать вклады больших q .

Рис. 4.4_Ba_e2 (CD, 463) даёт плотности дипольных обобщенных сил осцилляторов атома Ba в приближении ХФ и ПСФО как функции переданной атому энергии при различных q . С ростом q ОСО при данной энергии убывают.

Рис. 4.4_Ba_e3 (CD, 464) изображает плотности квадрупольных обобщенных сил осцилляторов атома Ba в приближении ХФ и ПСФО как функции переданной атому энергии при различных q . При практически любых ω начинают доминировать вклады всё больших q .

Рис. 4.4_Ba_e4 (CD, 465) предлагает плотности монополярных обобщенных сил осцилляторов $3d_{5/2}$ - и $3d_{3/2}$ -электронов атома Ba в приближении ХФ и СП ПСФО как функции переданной атому энергии при различных q (см. [30]). Расчёт проведен согласно описанию в самом конце п. 3.6 и в п. 1.10. Видно сильное воздействие $3/2$ - на $5/2$ -уровень при малых q .

Рис. 4.4_Ba_e5 (CD, 466) приводит плотности дипольных обобщенных сил осцилляторов $3d_{5/2}$ - и $3d_{3/2}$ -электронов атома Ba в приближении ХФ и СП ПСФО как функции переданной атому энергии при различных q (см. [30]). Как и на Рис. 4.4_Ba_e1, результаты получены согласно описанному в разд. 1.10 и 3.6. Воздействие $3/2$ -электронов приводит к дополнительному максимуму в СП ПСФО ОСО-электронов $5/2$ -уровня в районе $\approx 58.3 \div 59$ эВ для всех рассмотренных q .

Рис. 4.4_Ba_e6 (CD, 467) изображает плотности квадрупольных обобщенных сил осцилляторов $3d_{5/2}$ - и $3d_{3/2}$ -электронов атома Ba в приближении ХФ и СП ПСФО как функции переданной атому энергии при различных q (см. [30]). Роль взаимодействия $5/2$ - и $3/2$ -уровней сводится лишь к появлению небольшой дополнительной осцилляции при ≈ 58.2 эВ в ОСО уровня $5/2$.

4.5. Атомы и ионы элементов IV и V групп периодической системы

В этом разделе представлены результаты наших вычислений обобщённых сил осцилляторов (ОСО) в приближении ХФ и с учётом ПСФО-корреляций в следующих взаимодействующих подоболочках: $2p^6, 3s^2, 3p^3 \uparrow$ в Si^- ; $2s^2, 2p^3 \uparrow$ в N и $2p^6, 3s^2, 3p^3 \uparrow$ в P.

Краткие комментарии к рисункам п. 4.5

Рисунки 4.5_Si⁻ содержат результаты вычислений для иона Si^- .

Рис. 4.5_Si⁻_e1 (CD, 468) изображает плотности монополярных обобщенных сил осцилляторов иона Si^- в приближении ХФ

и СП ПСФО как функции переданной ему энергии при различных q . С ростом q максимум ОСО смещается в сторону высоких энергий.

Рис. 4.5_Si_e2 (CD, 469) представляет плотности дипольных обобщенных сил осцилляторов иона Si^- в приближении ХФ и СП ПСФО как функции переданной ему энергии при различных q . Влияние корреляций электронов, учитываемых в рамках СП ПСФО, велико. Как обычно, дипольные ОСО больше монопольных и квадрупольных.

Рис. 4.5_Si_e3 (CD, 470) даёт плотности квадрупольных обобщенных сил осцилляторов иона Si^- в приближении ХФ и СП ПСФО как функции переданной ему энергии при различных q . С ростом q формируется высокий максимум, а затем снижается и смещается в сторону больших ω .

Рисунки 4.5_N содержат результаты вычислений для иона атома азота (N).

Рис. 4.5_N_e1 (CD, 471) изображает плотности монопольных обобщенных сил осцилляторов атома N в приближении ХФ и СП ПСФО как функции переданной атому энергии при различных q . С ростом q ОСО при данном ω растёт.

Рис. 4.5_N_e2 (CD, 472) представляет плотности дипольных обобщенных сил осцилляторов атома N в приближении ХФ и СП ПСФО как функции переданной атому энергии при различных q . Как это весьма характерно для ОСО, максимум с ростом q смещается в сторону больших переданных энергий. Как обычно, дипольные ОСО больше монопольных (см. Рис. 4.5_N_e1) и квадрупольных (см. Рис. 4.5_N_e3) примерно на порядок. В отличие от монопольных и квадрупольных ОСО, дипольные ОСО убывают с ростом q .

Рис. 4.5_N_e3 (CD, 473) даёт плотности квадрупольных обобщенных сил осцилляторов атома N в приближении ХФ и СП ПСФО как функции переданной атому энергии при различных q . С ростом q ОСО при данном ω растёт.

Рисунки 4.5_P содержат результаты вычислений для атома фосфора (P).

Рис. 4.5_P_e1 (CD, 474) предлагает плотности монопольных обобщенных сил осцилляторов атома P в приближении ХФ и СП ПСФО как функции переданной атому энергии при различных q . С ростом q картина поведения ОСО упрощается и в ней появляется главный максимум, смещающийся в сторону больших энергий с ростом q .

Рис. 4.5_P_e2 (CD, 475) изображает плотности дипольных обобщенных сил осцилляторов атома Р в приближении ХФ и СП ПСФО как функции переданной атому энергии при различных q . Под влиянием электронных корреляций возникает чёткая структура с двумя максимумами, относительная сила которых меняется с ростом q . Дипольные ОСО примерно на порядок превосходят монопольные (Рис. 4.5_P_e1) и квадрупольные (Рис. 4.5_P_e3).

Рис. 4.5_P_e3 (CD, 476) представляет плотности квадрупольных обобщенных сил осцилляторов атома N в приближении ХФ и СП ПСФО как функции переданной атому энергии при различных q . Роль корреляций невелика. С ростом q появляется максимум, сначала нарастающий, а затем — убывающий.

4.6. Ионы элементов VII группы периодической системы

В этом разделе представлены результаты наших вычислений полного и парциальных сечений упругого рассеяния электронов на отрицательном ионе фтора F^- в приближении ХФ и с учётом поляризационного взаимодействия в упрощённом приближении случайных фаз с обменом — УПСФО (см. п. 3.3, 3.4 и [АИЧЧ]). В формировании поляризационного взаимодействия учтены возбуждения электронов. В этом же приближении вычислены s -, p -, d -, f -фазы рассеяния. Приведены обобщённые силы осцилляторов (ОСО) с учётом ПСФО-корреляций электронов $4d^{10}$, $5s^2$, $5p^6$ в F^- .

Краткие комментарии к рисункам п. 4.6

Рисунки 4.6_F⁻ содержат результаты вычислений для отрицательного иона фтора (F^-).

Рис. 4.6_F_a1 (CD, 477) изображает сечение упругого (в приближении ХФ и УПСФО) и неупругого (в УПСФО) рассеяния электронов на отрицательном ионе F^- . При 5 эВ имеется небольшой максимум, связанный с резонансом в d -волне.

Рис. 4.6_F_b1 (CD, 477) представляет вклады парциальных s -, p -, d -, f -волн в сечение упругого рассеяния электронов на отрицательном ионе F^- в ПСФО. В p -, d -, f -волнах имеется по два максимума в сечениях.

Рис. 4.6_F_d1 (CD, 478) даёт фазы s -, p -, d -, f -парциальных волн в рассеянии электронов на отрицательном ионе F^- . Как и должно быть, все кулоновские фазы расходятся при $E = 0$.

Рисунки 4.6_Г содержат результаты вычислений для отрицательного иона иода (I^-).

Рис. 4.6_Г_e1 (CD, 479) предлагает плотности монополярных обобщенных сил осцилляторов отрицательного иона I^- в приближении ХФ и ПСФО как функции переданной атому энергии при различных q . Видно смещение максимумов с ростом q в сторону больших энергий. Примечательно крайне малое значение ОСО при $q = 2$ вплоть до $\omega \approx 4 \text{ Ry}$.

Рис. 4.6_Г_e2 (CD, 480) даёт плотности дипольных обобщенных сил осцилляторов отрицательного иона I^- в приближении ХФ и ПСФО как функции переданной атому энергии при различных q . В кривых доминируют два резонанса, связанные с ионизацией внешней $5p^6$ - и многоэлектронной промежуточной $4d^{10}$ -подоболочек. Оба максимума весьма мощны и выглядят как два, а не один, как в Хе, гигантский резонанс. Дипольные ОСО, как обычно, примерно на порядок больше монополярных (Рис. 4.6_Г_e1) и квадрупольных (Рис. 4.6_Г_e3).

Рис. 4.6_Г_e3 (CD, 481) изображает плотности квадрупольных обобщенных сил осцилляторов отрицательного иона I^- в приближении ХФ и ПСФО как функции переданной атому энергии при различных q . Здесь с ростом q ОСО сначала растут и в них доминирует один максимум. При $q > 0.7$ ОСО начинают убывать, а максимум — расширяться и уменьшаться.

4.7. Краткое обсуждение результатов вычислений

В данной главе объектов исследования заметно меньше, чем в гл. 2. Это понуждает провести несколько подробнее общее обсуждение полученных результатов.

Сечения упругого и неупругого рассеяния были получены в приближении ХФ и в ПСФО (УПСФО) для ряда атомов с заполненными и полузаполненными оболочками.

Как видно, во всех случаях только включение электронных корреляций, то есть выход за рамки одноэлектронного приближения ХФ, позволил воспроизвести наблюдаемые на опыте минимумы Рамзауэра в сечениях.

тальными данными из [8]. Аналогично, Рис. 4.2_Ar_f8 представляет сумму дипольных и октупольных вкладов $3p-3d$, в то время как Рис. 4.2_Ar_f9 дает то же самое для $(3p-4d)$ -переходов. Подобные суммы даны также для $4p-4d$, $4p-5d$ -переходов в Kr и $5p-5d$, $5p-6d$ -переходов Xe. Область рассмотренных значений q весьма широка, до $q \leq 4$ а. е.

Заметим, что энергия возбуждения ω , входящая в ф-лы (3.58, 3.65, 3.67) для дискретного $i-f$ -перехода, в ПСФО обозначается ω_{fi}^R и отличается от ХФ-значения $\omega_{fi}^{X\Phi} \equiv \epsilon_f - \epsilon_i$. Процедура вычисления ω_{fi}^R описана в [АЧ]. Энергии в ПСФО для вышеупомянутых переходов Ne, Ar, Kr и Xe собраны в табл. 4.2.

В наших вычислениях энергии возбуждения с различным полным моментом $j = 3/2$ и $1/2$ из остова с вакансией $3p$ принимались одинаковыми.

Обсудим более подробно результаты для Ar, где возможно сравнение с экспериментальными данными [22, 24]. ПСФО энергии рассмотренных возбуждений есть $\omega_{3p-4s}^R = 12.01$ эВ, $\omega_{3p-4p}^{R0} = 13.45$ эВ монопольных и $\omega_{3p-4p}^{R2} = 13.70$ эВ квадрупольных уровней $3p-4p$. Энергии дипольных уровней $3p-5s$ и $3p-3d$ соответственно: $\omega_{3p-5s}^R = 14.46$ эВ и $\omega_{3p-3d}^R = 14.53$ эВ. Эти значения можно сравнить с экспериментальными значениями: $\omega_{3p-4s}^{\text{эксп}} = 11.8$ эВ, $\omega_{3p-4p}^{\text{эксп}} = 13.4$ эВ и $\omega_{3p-5s, 3d}^{\text{эксп}} = 14.2$ эВ. Видно, что согласие довольно хорошее.

Монопольные и квадрупольные уровни отличаются только на 0.25 эВ и поэтому, как очевидно из анализа экспериментальных данных, их чисто экспериментальное разделение весьма трудно. То же самое верно для $3p-5s$ и $3p-3d$ -уровней, где различие еще меньше, только 0.07 эВ. Расчетные ОСО (в приближении ХФ и ПСФО) и измеренные значения [24] представлены вместе на Рис. 4.2_Ar_f2 и Рис. 4.2_Ar_f10. На Рис. 4.2_Ar_f2 изображена сумма $G_{3p-4p}^0(q, \omega_{3p-4p}^{R0})$ и $G_{3p-4p}^2(q, \omega_{3p-4p}^{R2})$ (см. определение (3.67)). Она сравнивается с измеренной ОСО уровня $3p-4p$ в 13.4 эВ. Рис. 4.2_Ar_f10 сопоставляет сумму $G_{3p-5s}(q, \omega_{3p-5s})$ и $G_{3p-3d}(q, \omega_{3p-3d}^R)$ с ОСО-уровня при 14.2 эВ. Видно, что в обоих случаях согласие с экспериментом удовлетворительное.

Рис. 4.2_Ar_f1 (CD, 375) представляет монопольные $G_{3p-4p}^0(q, \omega_{3p-4p}^{R0})$ и квадрупольные $G_{3p-4p}^2(q, \omega_{3p-4p}^{R2})$ ОСО. Видно, что вклад монопольного ОСО больше, демонстрируя что

в сумме расчетных значений, представленных на Рис. 4.2_Ar_f2, главным является вклад монопольного перехода. Следовательно, экспериментально наблюдаемый максимум при 13.4 эВ — это не квадрупольный уровень, как утверждалось в [22], а смесь уровней — монопольного и квадрупольного, причём монопольный вклад является доминирующим [13]. Заметим, что при $q > 1.3$ а.е. квадрупольные ОСО начинают увеличиваться, в то время как монопольный член уменьшается. При $q > 2$ а.е. доминирует уже квадрупольный член.

Недавно были вновь измерены ОСО нескольких первых уровней Ar [24]. Были рассмотрены дипольные $3p - 4s$ - и комбинация монопольного и квадрупольного переходов $3p - 4p$. Вклад монопольного и квадрупольного уровней был разделён с помощью расчётных множителей. Полученные ОСО сравнивались с результатами расчета: для монопольного возбуждения — на Рис. 4.2_Ar_f12, а для квадрупольного — на Рис. 4.2_Ar_f13. Имеется качественное согласие и заметное количественное различие. Однако нет совпадения и суммарного результата, приведенного в [22] с суммой соответствующих ОСО из [24]. Определённо более высокая точность требуется от данных эксперимента.

Рис. 4.2_Ar_f11 (CD, 380) демонстрирует разумное согласие с имеющимися данными опыта для $G_{3p-4s}(q, \omega_{3p-4s}^R)$. Эта ОСО как функция q идет в минимум при $q = 1.25$ и затем начинает увеличиваться. Заметим, что наиболее затронутый электронными корреляциями — это $3p - 5s$ -переход, хотя его ОСО значительно меньше, чем для $3p - 3d$ -перехода.

Смесь компонентов, соответствующих различным мультипольностям, тесно связана со временем жизни дискретных возбуждений. Например, монопольный уровень может распасться с испусканием по меньшей мере двух фотонов, в то время как квадрупольный уровень распадается намного быстрее, испуская единственный квадрупольный фотон. Изменяя q , можно изменить относительный вес различных вкладов, таким образом увеличивая или уменьшая скорость распада возбуждаемого при рассеянии с данным q состояния. В смеси компонент, сформированной при данном значении q , короткоживущая компонента исчезает быстрее, с ростом времени увеличивая относительный вес другой компоненты.

Важная проблема состоит в улучшении экспериментального разрешения, которое помогло бы отличать близко расположен-

принимая, что, будучи почти не затрагиваемым действием остова, этот электрон и позитрон могут формировать связанное состояние, почти идентичное свободному позитронию P_s . Это меняет энергию промежуточного состояния, сдвигая её на I_{P_s} — энергию связи позитрония, и изменяет волновую функцию промежуточного состояния, которое не является в действительности произведением ХФ-волновых функций позитрона, возбужденного электрона и вакансии, созданной после виртуального возбуждения атомного электрона. Вместо этого движение позитрона относительно электрона сильно изменено благодаря их связи.

Чтобы учесть сдвиг энергии, величина I_{P_s} должна быть вычтена из суммы энергий позитрона и электрона $E_1 + \epsilon_2$ в знаменателе поляризационного взаимодействия второго порядка, что и сделано в (3.91). Существенно иметь в виду, что если энергия связи позитрония больше энергии атома-мишени, $I_{P_s} > I$, то дипольная поляризуемость атома $\alpha(I_{P_s})$ есть комплексная величина, обычно со значительной мнимой частью.

Было бы намного проще использовать (3.94) вместо (3.93); но асимптотическое выражение (3.94) справедливо только на таких больших расстояниях от атома, вклад от которых в полный фазовый сдвиг мал. Вот почему в наших вычислениях использовались ф-лы (3.91) и (3.93).

Результаты упругого рассеяния позитронов на He, полученные с помощью ф-л (3.91), (3.93), демонстрируются на Рис. 4.2_He_i1. Видно, что сдвиг энергии из-за формирования позитрония ведет к заметному уменьшению сечения при низких энергиях. Чтобы получить приведенный результат, были учтены вклады s -, p -, d -, f -фаз парциальных волн позитрона. Заметим, что образование виртуального позитрония ведет к заметным вариациям во всех вкладах парциальных волн.

Сечение упругого рассеяния для $(e^+ + \text{He})$ при низкой энергии намного меньше, чем для $(e^- + \text{He})$. Качественно это можно объяснить следующим образом. Самосогласованное поле V_{cc} , действующее на налетающий позитрон, является отталкивающим, тогда как поляризационный потенциал $V_{пол}$, который на больших расстояниях от атома r убывает как $[-\alpha(I_{P_s}) / 2r^4]$ — притягивающий. Это происходит потому, что для He поляризуемость $\alpha(I_{P_s})$, так же как $\alpha(0)$, положительна. Отметим, что для He потенциалы V_{cc} и $V_{пол}$ — величины одного и того же порядка. Таким образом, вклады V_{cc} и $V_{пол}$ компенсируют друг

друга, уменьшая сечение упругого рассеяния. Что касается рассеяния электрона, то $V_{\text{св}}$ является притягивающим, так же как $-V_{\text{пол}}$, и вместо компенсации соответствующие весьма большие вклады складываются друг с другом, резко увеличивая сечение.

В этой связи значительный интерес представляет сравнение рассеяния ($e^+ + \text{He}$) и ($e^+ + \text{Li}$), потому что $\alpha_{\text{Li}}(I_{\text{Ps}})$ отрицательно, комплексно и по абсолютной величине намного больше, чем $\alpha_{\text{He}}(I_{\text{Ps}})$. Отрицательный знак $\alpha_{\text{Li}}(I_{\text{Ps}})$ означает, согласно (3.95), что поляризационный потенциал, вместо того чтобы быть притягивающим, может оказаться также отталкивающим, как это было уже упомянуто в п. 3.8. Данный факт имеет общее значение в физике. Действительно, если «снаряд» и элемент мишени могут формировать связанную частицу в промежуточном состоянии, поляризационное взаимодействие может изменить свой знак, становясь притягивающим.

Оказывается, подобный случай можно найти, например, и в ядерной физике, а именно в π -мезон-ядерном рассеянии, где система (π -мезон + нуклон) формирует так называемый Δ_{33} -резонанс, ведущий к изменению знака в поляризационном взаимодействии [3.28]. Что касается мнимой части, с точки зрения упругого рассеяния оно может быть существенным, отталкивающим или притягивающим, в зависимости от его величины. Таким образом, нужно ожидать, что благодаря тому что $V_{\text{св}}$ и $V_{\text{пол}}$ имеют один и тот же знак, они вносят существенный вклад, приводя к очень большому сечению, того же размера или даже больше, чем сечение ($e^- + \text{Li}$).

Результаты для ($e^- + \text{Li}$)-сечения представлены на Рис. 4.3_Li_11. Видно, что учёт сдвига энергии на величину, соответствующую формированию позитрония в виртуальном состоянии, значительно влияет на сечение при низких энергиях.

Картина, описанная выше для рассеяния позитрона на He и Li, качественно справедлива также для пары Ne—Na. Действительно, ($e^+ + \text{Ne}$)-сечение малое, значительно меньше геометрического, а сечение упругого рассеяния ($e^+ + \text{Ne}$) очень велико.

Для более тяжелых атомов благородных газов, а именно Ar, Kr, Xe, поляризационное взаимодействие гораздо больше и сечения растут с ростом атомного номера. Для соседних атомов щелочных металлов, подобно ситуации в паре Li—He, сечения рассеяния позитрона на них намного больше, чем на благородных газах. Результаты для Kr и Xe находятся в качественном согла-

сии с полученными в работе [28], в которой используется намного более сложный метод.

Специального внимания заслуживает изучение мнимой части фаз рассеяния $\Delta\delta'_l(E)$. Она описывает соответствующие вклады парциальных волн в сечение неупругого рассеяния $e^+ + A \rightarrow \text{Ps} + A^+$. Это сечение $\sigma_{\text{неупр}}(E)$ выражается через мнимую часть фазового сдвига $\mu_l(E)$ согласно (3.14). Так же как в вычислениях $\sigma(E)$, мы ограничиваемся учетом четырех первых парциальных волн: с $l = 0, 1, 2, 3$. Соответствующие результаты для Li и Mg приводятся на Рис. 4.3 Li_i1 и Рис. 4.4 Mg_i1 соответственно.

Интересно узнать, можно ли в рамках простого подхода, который мы использовали здесь, описать связанные состояния в $(e^+ + A)$ -системе. Действительно, далеко не тривиально, что при отталкивающем характере $V_{\text{св}}$ и возможности также отталкивающего характера $V_{\text{пол}}$ может вообще существовать связанное состояние. Так, уместно было бы ожидать связанные состояния позитронов с теми атомами, для которых $\alpha_A(I_{\text{Ps}})$ является большим (гораздо больше, чем в благородных газах) и положительным $\alpha_A(I_{\text{Ps}}) > 0$, т. е. потенциал $V_{\text{пол}}$ достаточно сильный и притягивающий. Интересной и привлекательной является возможность того, что $(e^+ + A)$ -связанное состояние является результатом действия мнимой части $\text{Im}(V_{\text{пол}})$.

С другой стороны, связь может возникнуть вследствие взаимодействия Ps и A^+ за счет сил Ван дер Ваальса. Эта связь особенно велика, если ион A^+ имеет электронную структуру, подобную структуре атома элемента I группы периодической системы, то есть если A относится ко II группе ПС. Чтобы обнаружить возможность формирования связанного состояния, следует изучить сдвиг фазы рассеяния при нулевой энергии: если он достигает π , связанное состояние в рассматриваемом канале образуется. Однако следует проверить, устойчиво ли это состояние относительно распада в канал $(\text{Ps} + A^+)$. Это требует знания энергии связанного состояния. Найти ее намного более сложно, чем вычислить фазовые сдвиги при нулевой энергии позитрона e^+ .

Результаты наших расчетов продемонстрируем на примере блока рисунков, относящихся к атому Xe — элемента VIII группы периодической системы.

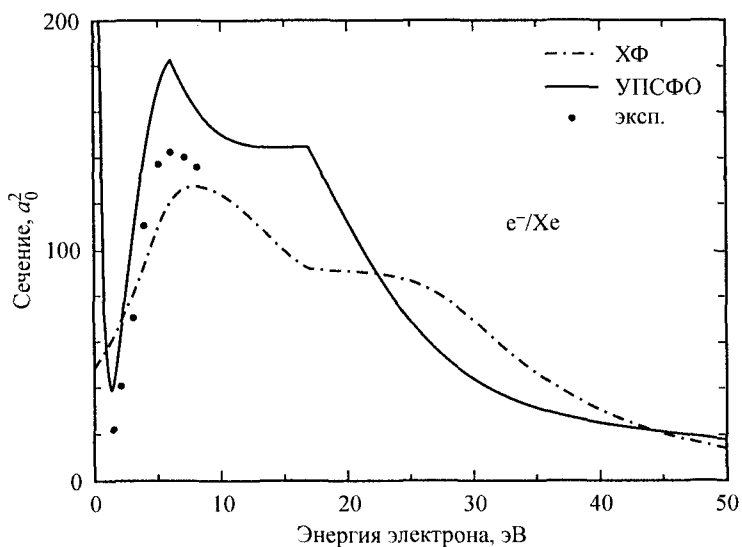


Рис. 4.2_Xe_a1. Сечение упругого рассеяния электронов на атоме ксенона в приближении ХФ и УПСФО (см. [4.1, 4.2]).
Экспериментальные данные из [4.29].

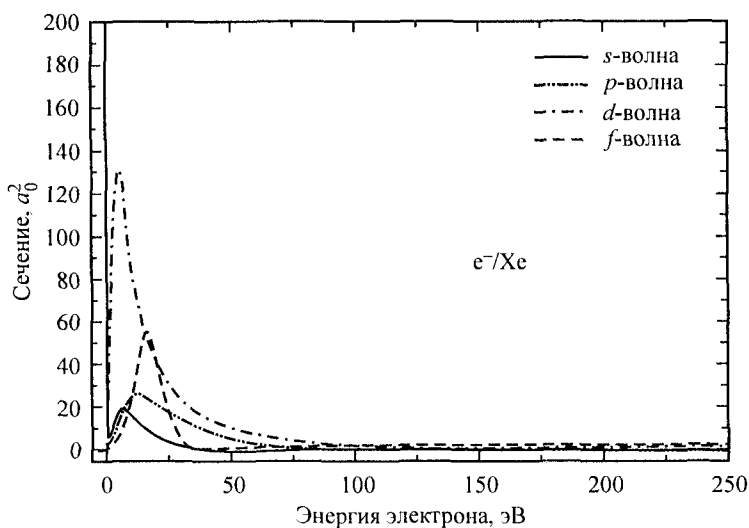


Рис. 4.2_Xe_b1. Вклад парциальных волн в сечение упругого рассеяния электронов на атоме ксенона.

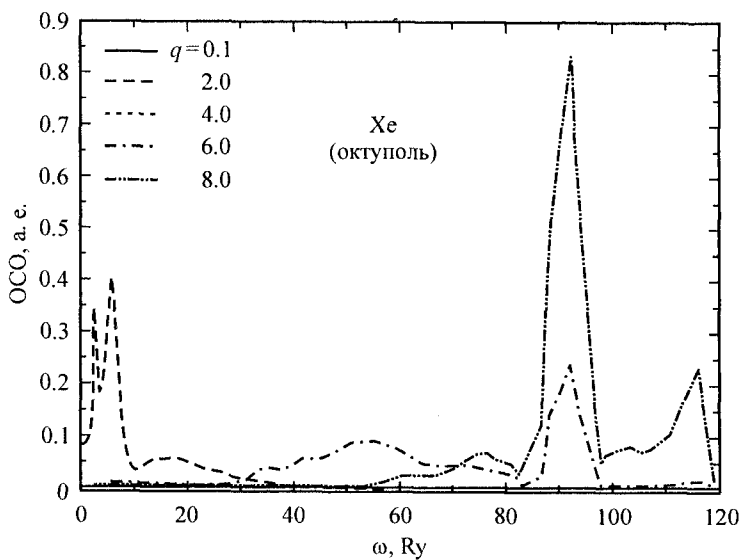


Рис. 4.2_Xe_e4. Плотности октупольных обобщенных сил осцилляторов атома ксенона в ПСФО как функции энергии, переданной атому, при различных значениях импульса q (см. [4.7]).

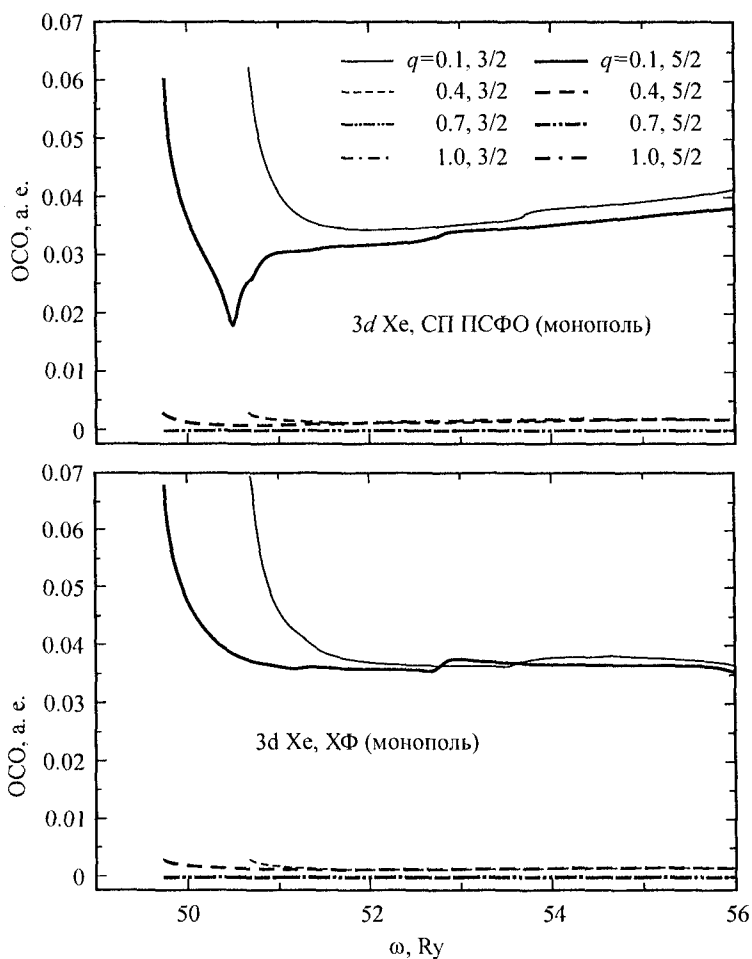


Рис. 4.2_Хе_e5. Плотности монополярных обобщенных сил осцилляторов атома ксенона в СП ПСФО как функции энергии, переданной атому, при различных значениях импульса q (см. [4.30]).

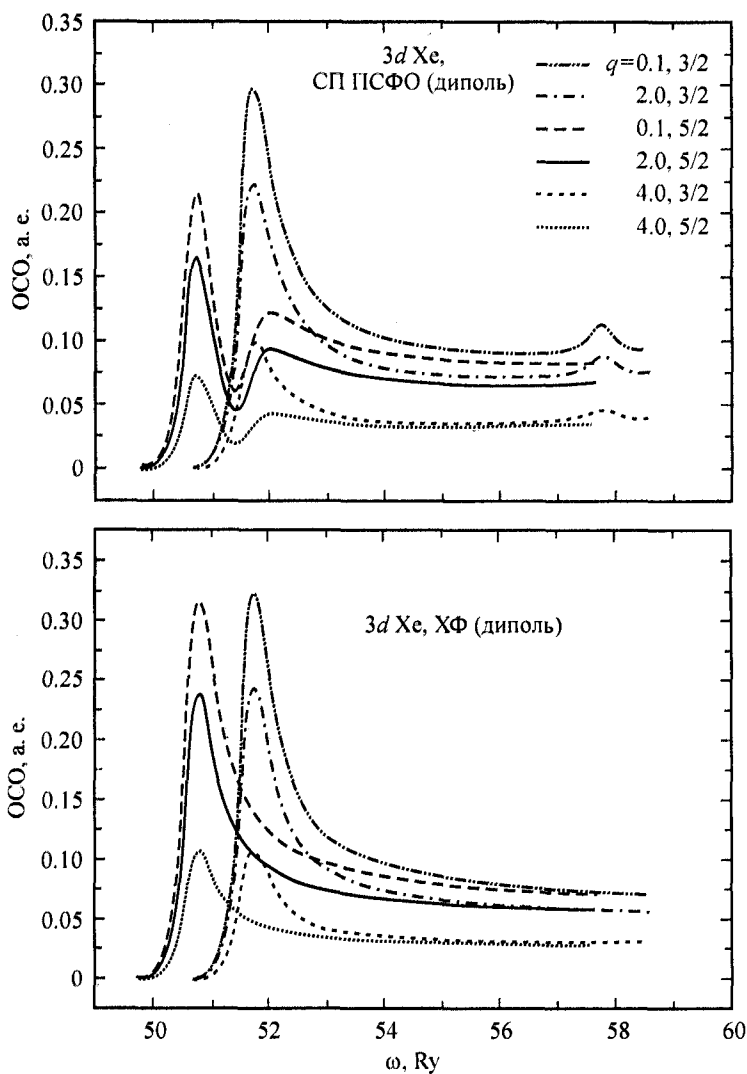


Рис. 4.2_Хе_еб. Плотности дипольных обобщенных сил осцилляторов атома ксенона в СП ПСФО как функции энергии, переданной атому, при различных значениях импульса q (см. [4.30]).

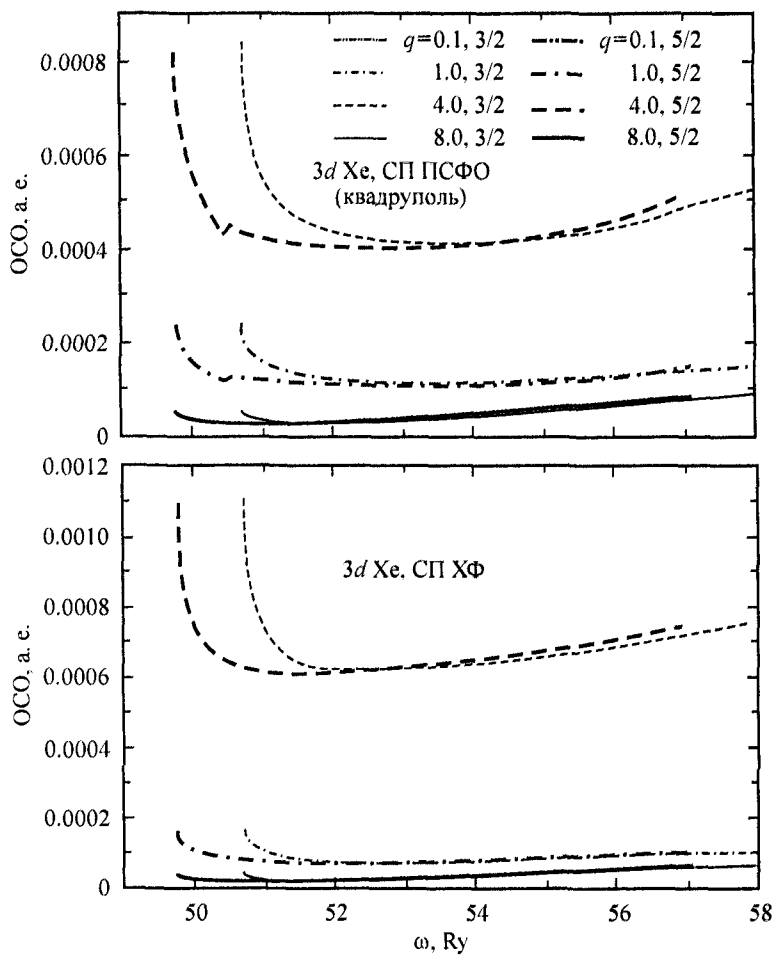


Рис. 4.2_Xe_e7. Плотности квадрупольных обобщенных сил осцилляторов атома ксенона в СП ПСФО как функции энергии, переданной атому, при различных значениях импульса q (см. [4.30]).

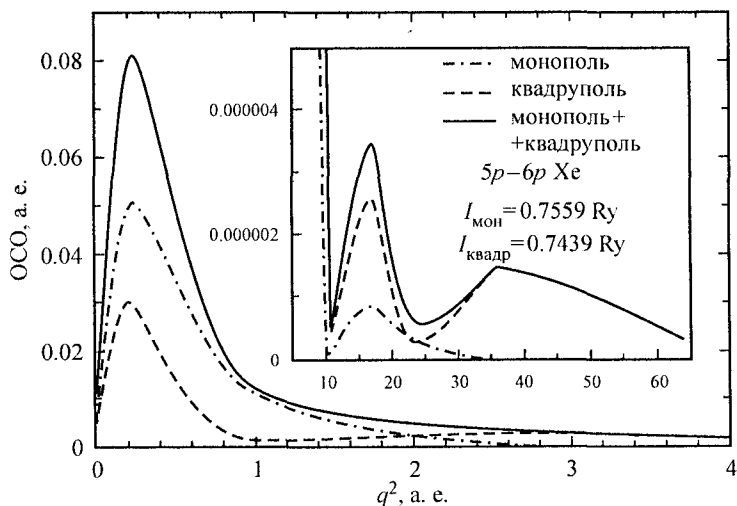


Рис. 4.2_Xe_f1. Обобщенные силы осцилляторов дискретных монопольного и квадрупольного возбуждений $5p-6p$ атома ксенона как функции квадрата импульса q , переданного атому, в ПСФО (см. [4.13]).

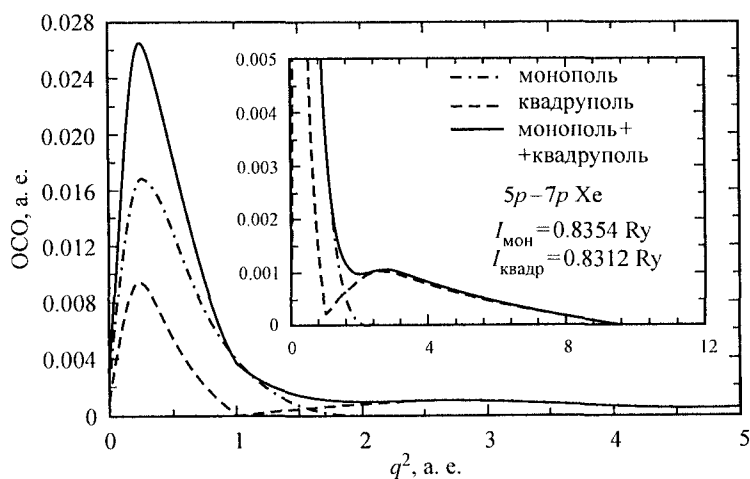


Рис. 4.2_Xe_f2. Обобщенные силы осцилляторов дискретных монопольного и квадрупольного возбуждений $5p-7p$ атома ксенона как функции квадрата импульса q , переданного атому, в ПСФО (см. [4.13]).

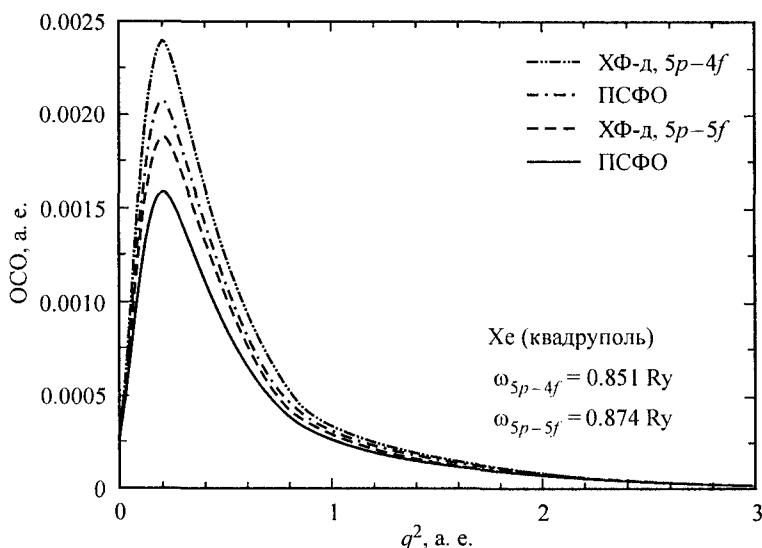


Рис. 4.2 Хе f3. Обобщенные силы осцилляторов дискретных квадрупольных возбуждений $5p-4f$ и $5p-5f$ атома ксенона как функции квадрата импульса q , переданного атому, в приближении ХФ и ПСФО (см. [4.13]).

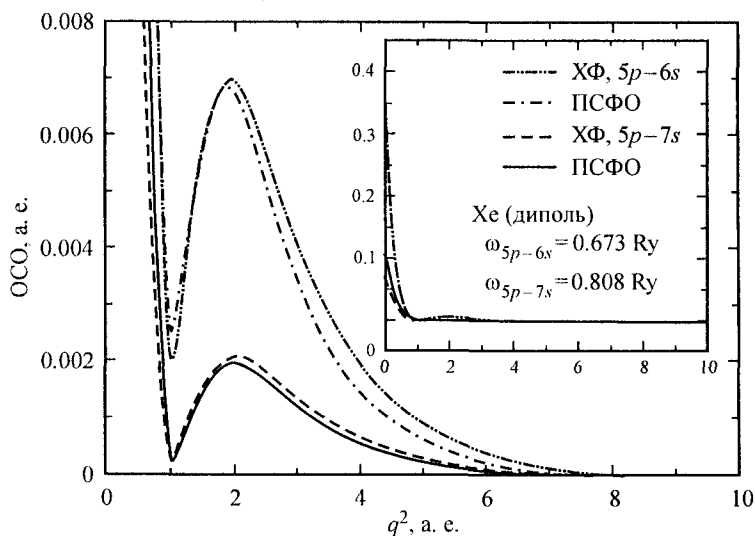


Рис. 4.2 Хе f4. Обобщенные силы осцилляторов дискретных дипольных возбуждений $5p-6s$ и $5p-7s$ атома ксенона как функции квадрата импульса q , переданного атому, в ПСФО (см. [4.14]).

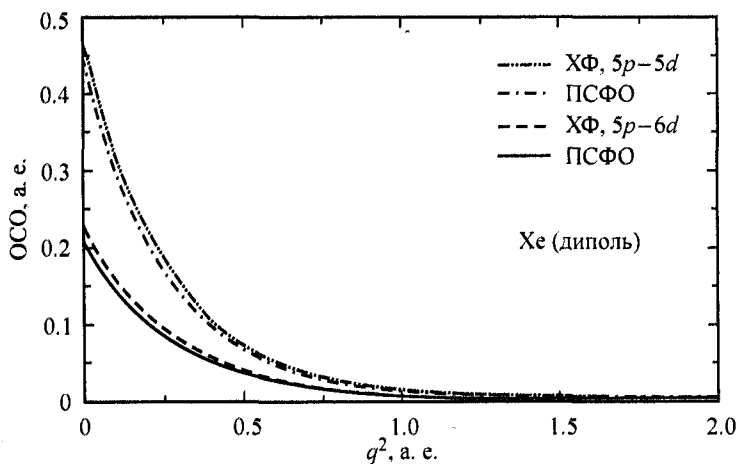


Рис. 4.2_Хе_f5. Обобщенные силы осцилляторов дискретных дипольных возбуждений $5p - 5d$ и $5p - 6d$ атома ксенона как функции квадрата импульса q , переданного атому, в ПСФО (см. [4.14]).

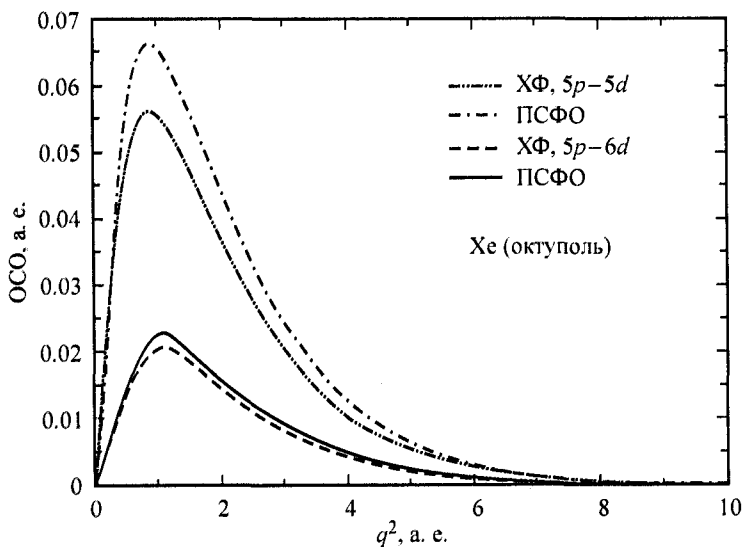


Рис. 4.2_Хе_f6. Обобщенные силы осцилляторов дискретных октупольных возбуждений $5p - 5d$ и $5p - 6d$ атома ксенона как функции квадрата импульса q , переданного атому, в ПСФО (см. [4.13]).

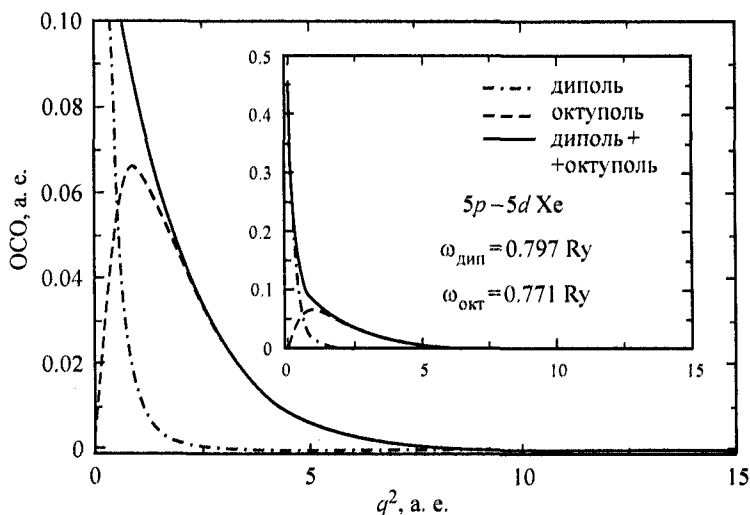


Рис. 4.2_Xe_f7. Обобщенные силы осцилляторов дискретных дипольного и октупольного возбуждений $5p-5d$ атома ксенона как функции квадрата импульса q , переданного атому, в ПСФО (см. [4.14]).

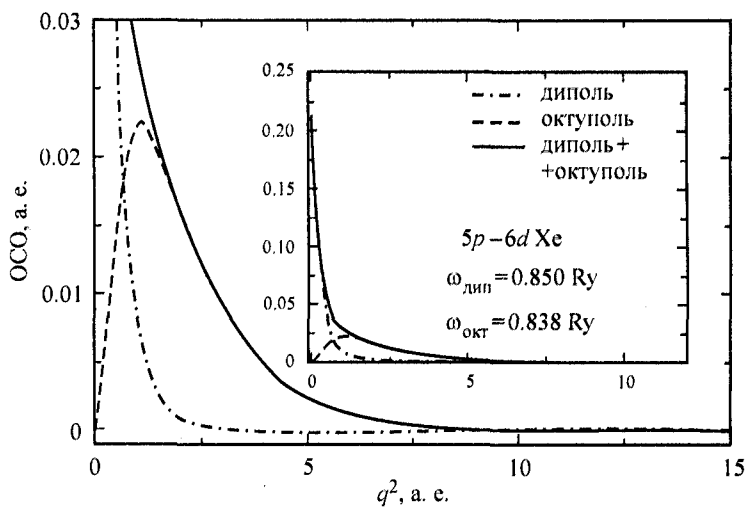


Рис. 4.2_Xe_f8. Обобщенные силы осцилляторов дискретного и октупольного возбуждений $5p-6d$ атома ксенона как функции квадрата импульса q , переданного атому, в ПСФО (см. [4.14]).

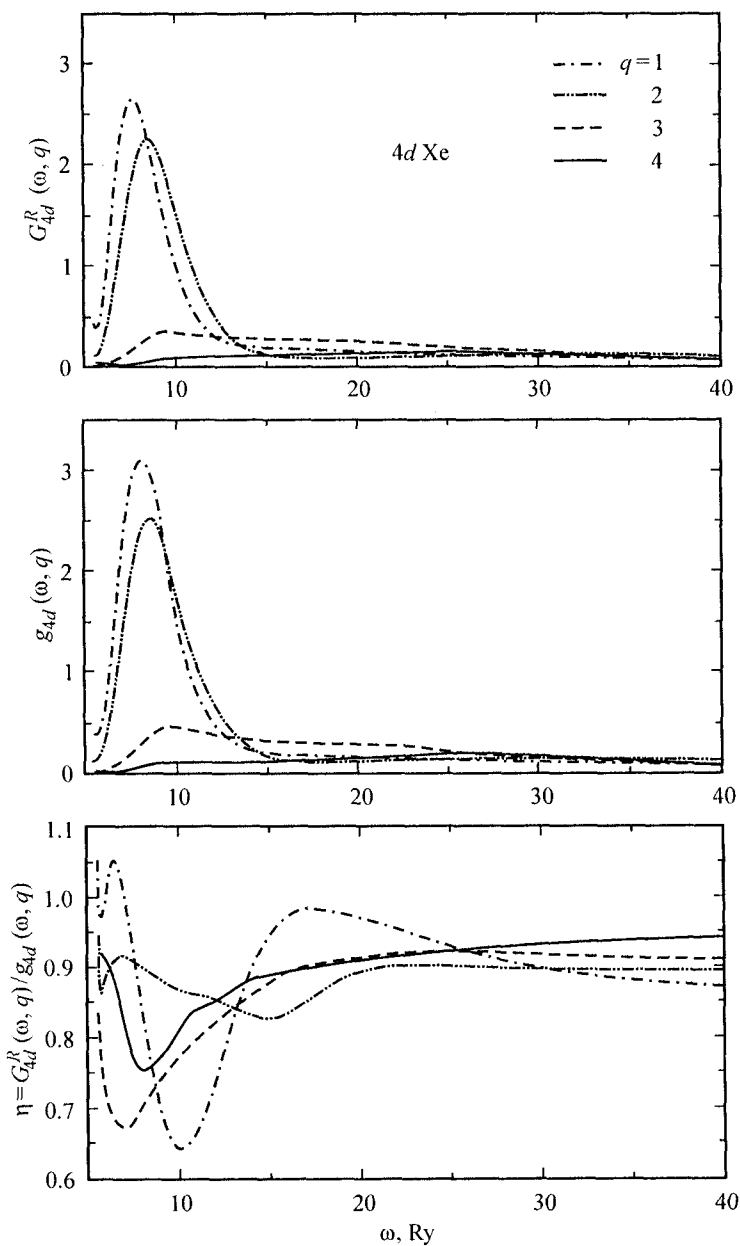


Рис. 4.2_Xe_f9. Обобщенные силы осцилляторов и их отношение для $4d$ -электронов ксенона в приближении ХФ и ПСФО.

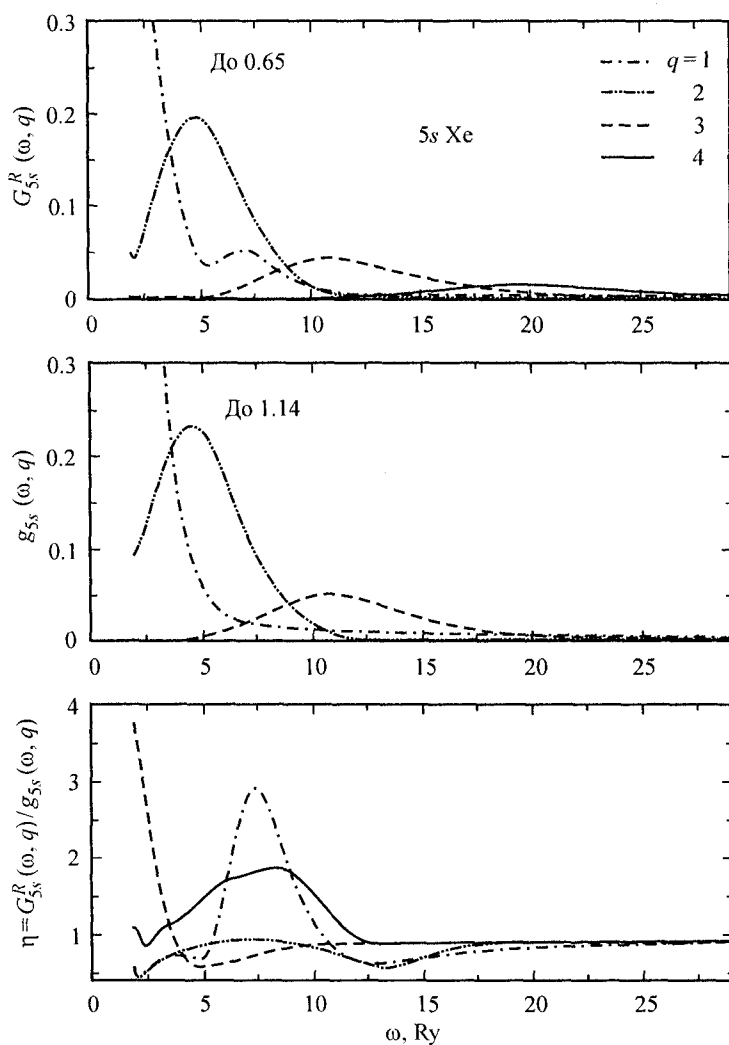


Рис. 4.2_Xe_f10. Обобщенные силы осцилляторов и их отношение для 5s-электронов ксенона в приближении ХФ и ПСФО.

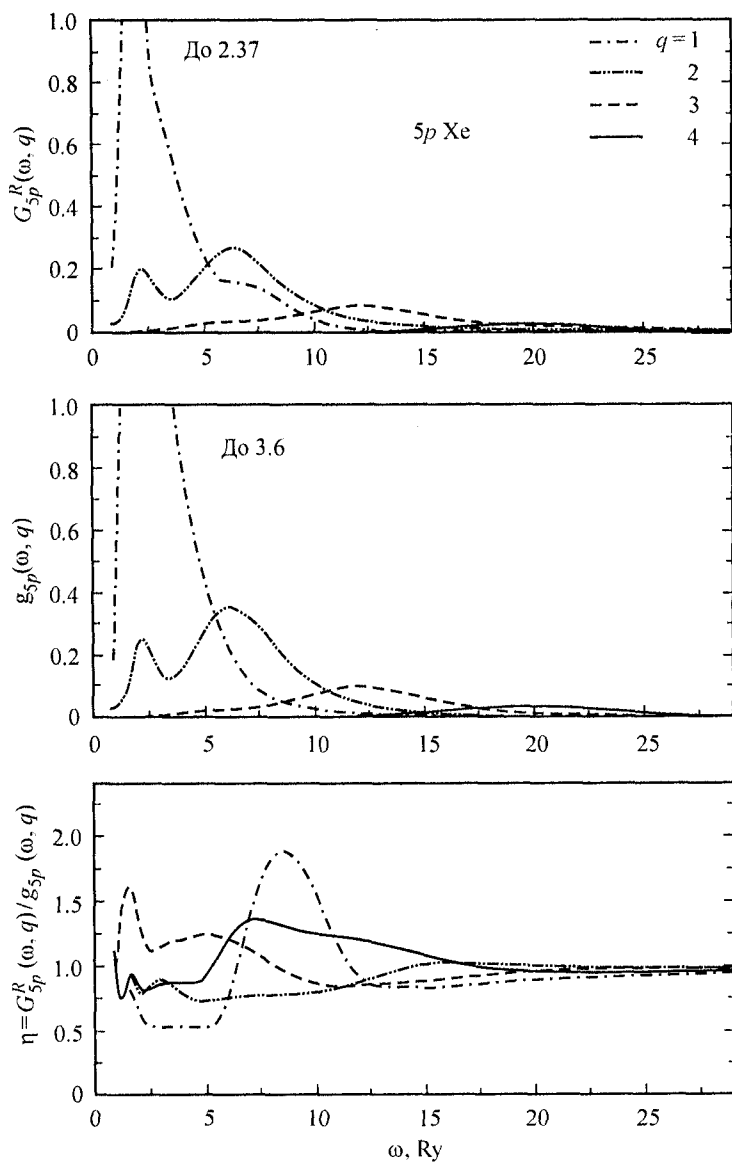


Рис. 4.2_Xe_fl1. ХФ- и ПСФО-силы осцилляторов и их отношение для 5p-электронов ксенона.

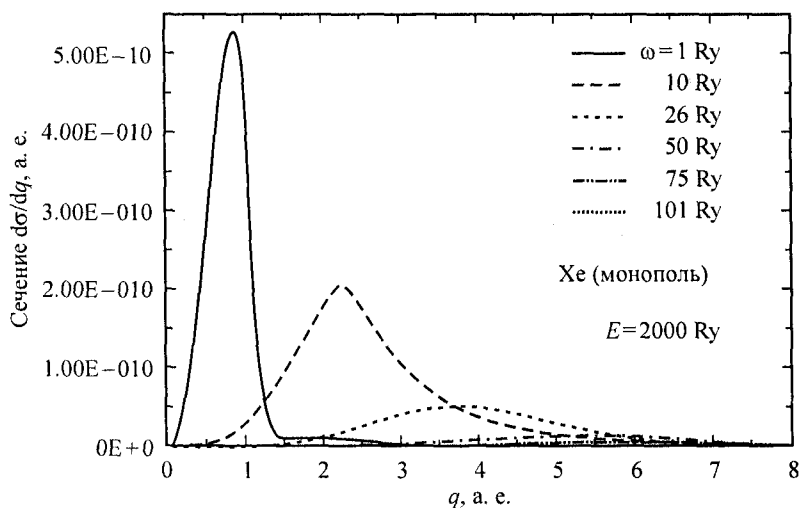


Рис. 4.2_Xe_g1. Сечение монопольного комптоновского рассеяния на атоме ксенона как функция переданного атому импульса при различных переданных энергиях в ПСФО (см. [4.15]).

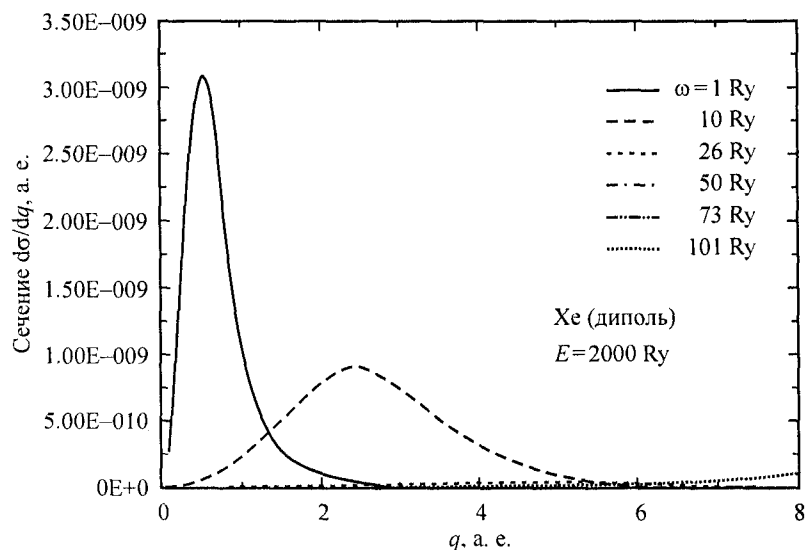


Рис. 4.2_Xe_g2. Сечение дипольного комптоновского рассеяния на атоме ксенона как функция переданного атому импульса при различных переданных энергиях в ПСФО (см. [4.15]).

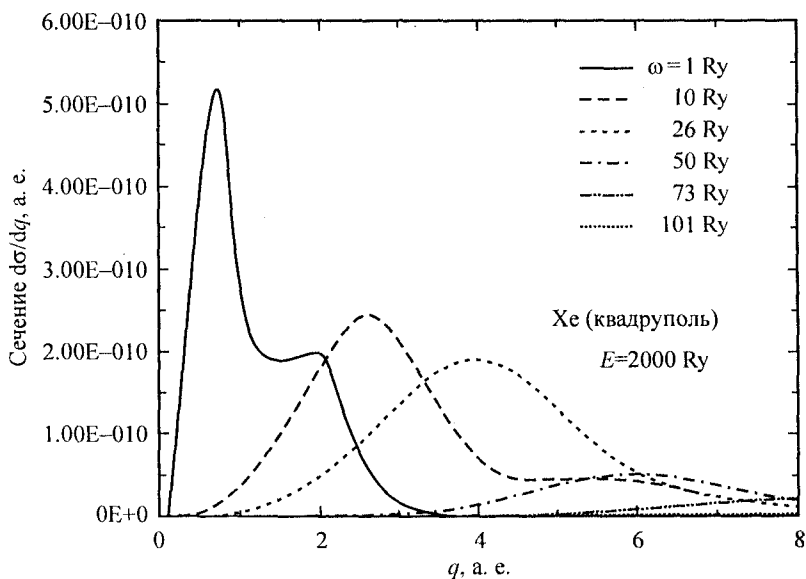


Рис. 4.2_Хе_g3. Сечение квадрупольного комптоновского рассеяния на атоме ксенона как функция переданного атому импульса при различных переданных энергиях в ПСФО (см. [4.15]).

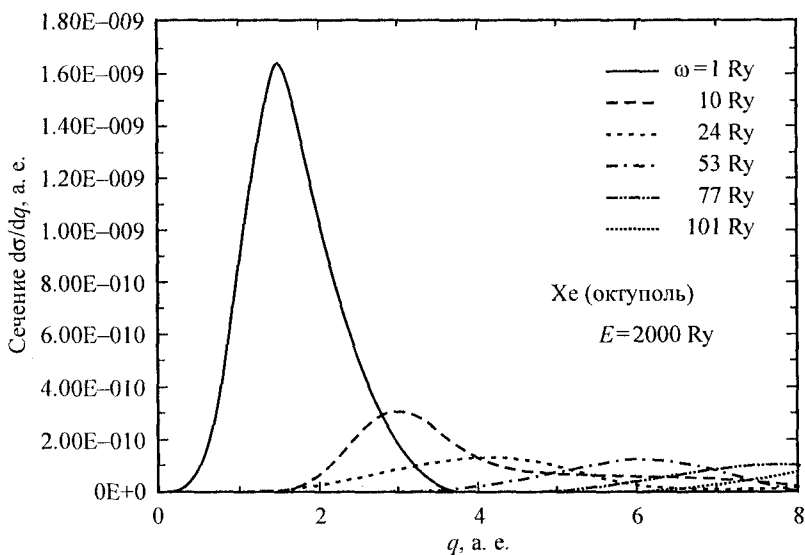


Рис. 4.2_Хе_g4. Сечение октупольного комптоновского рассеяния на атоме неона как функция переданного атому импульса при различных переданных энергиях в ПСФО (см. [4.15]).

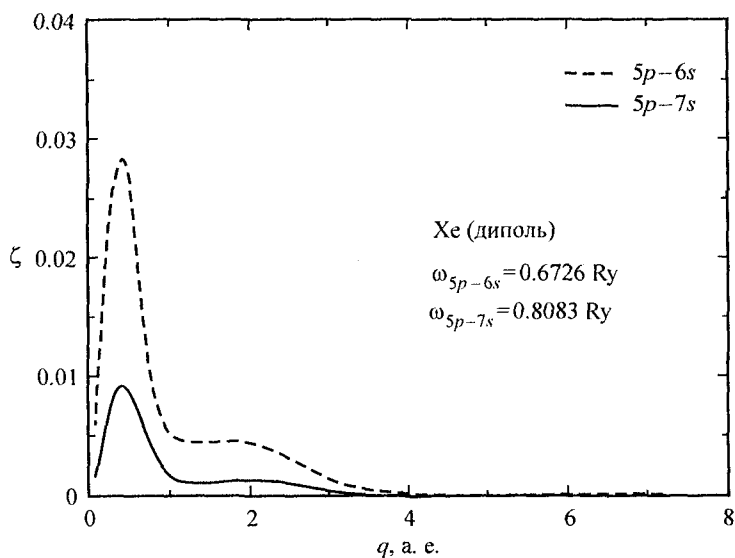


Рис. 4.2_Xe_h1. Относительное сечение комptonовского возбуждения дипольных уровней $5p - 6s$ и $5p - 7s$ атома ксенона в ПСФО (см. [4.24]).

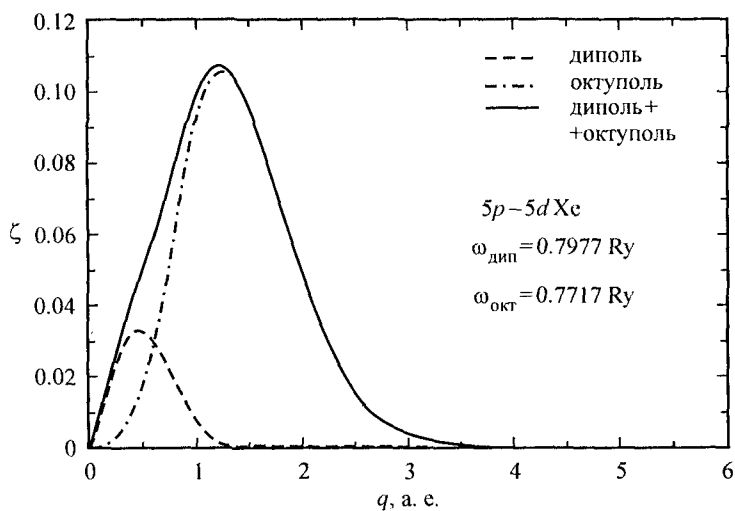


Рис. 4.2_Xe_h2. Относительное сечение комptonовского возбуждения дипольного и октупольного уровней $5p - 5d$ атома ксенона в ПСФО (см. [4.24]).

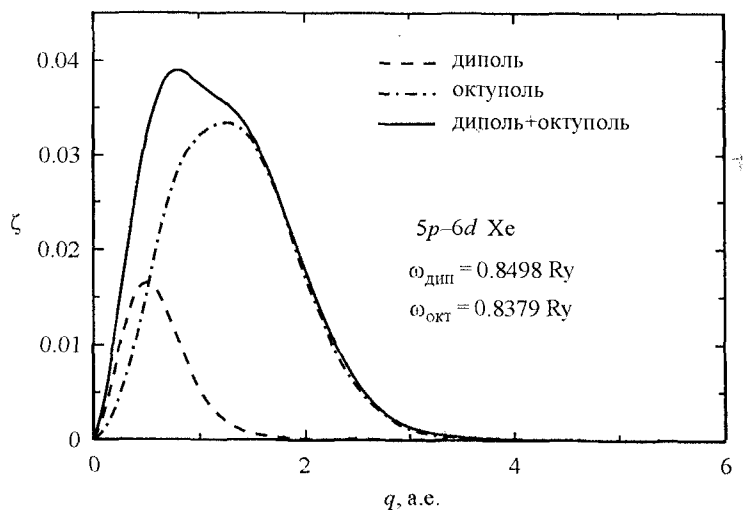


Рис. 4.2_Xe_h3. Относительное сечение комptonовского возбуждения дипольных уровней $5p - 6d$ атома ксенона в ПСФО (см. [4.24]).

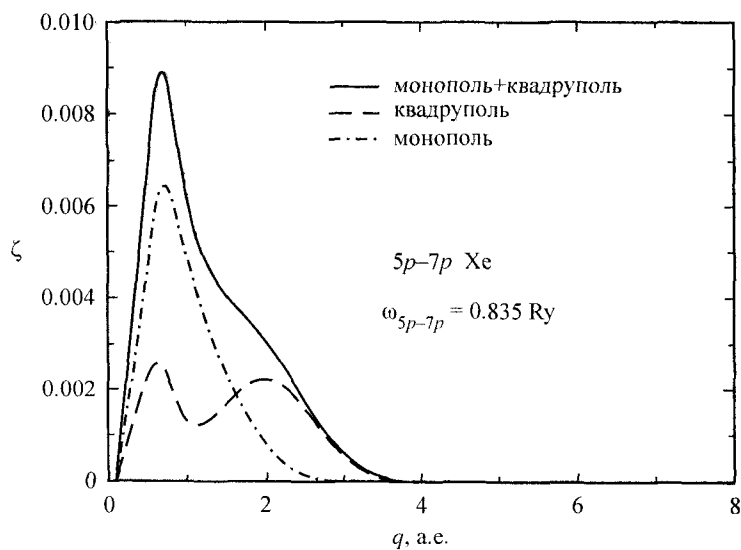


Рис. 4.2_Xe_h4. Относительное сечение комptonовского возбуждения дипольных уровней $5p - 7p$ атома ксенона в ПСФО (см. [4.24]).

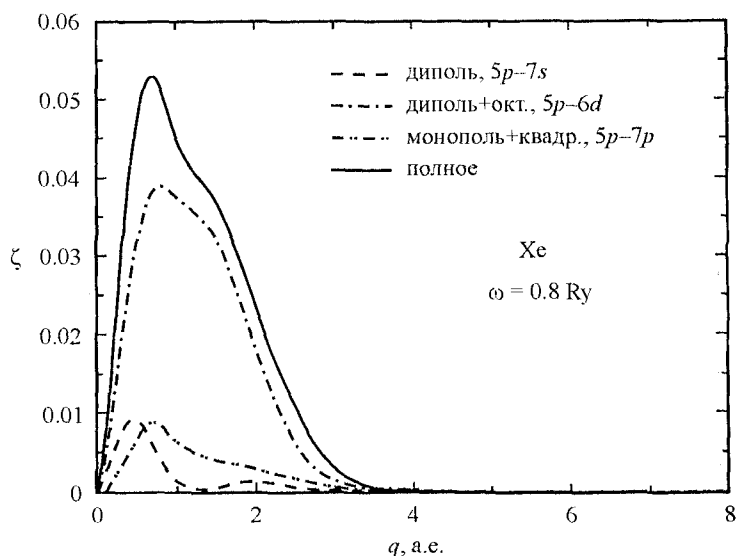


Рис. 4.2_Xe_h5. Относительное сечение комптоновского возбуждения дипольных, октупольных, монопольных и квадрупольных уровней $5p - 7s$, $5p - 6d$, $5p - 7p$ атома ксенона в ПСФО (см. [4.25]).

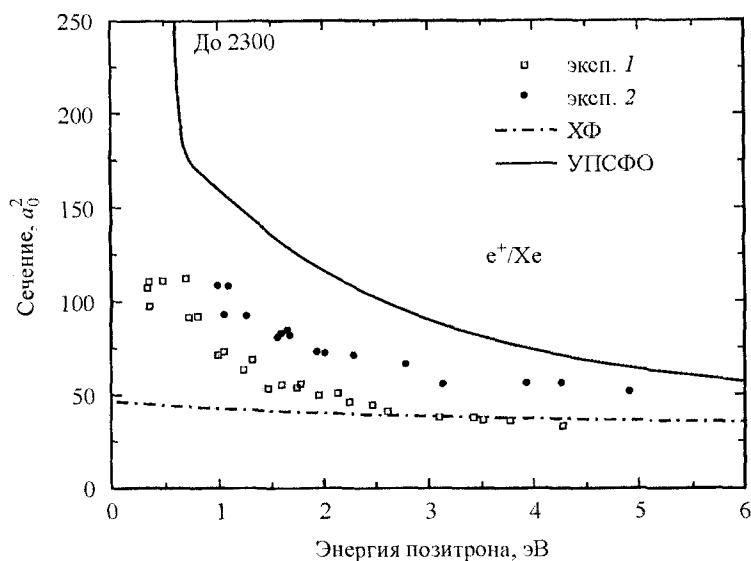


Рис. 4.2_Xe_il. Сечение упругого рассеяния позитронов на атоме ксенона в приближении ХФ и УПСФО (см. [4.10]).

Эксперимент взят из [4.31, 4.17].

Литература

1. *Amusia M. Ya., Cherepkov N. A.* // Case Studies in Atomic Physics. North-Holland Publishing Company, 1975. Vol. 5, N 2. P. 47—179.
2. *Амусья М. Я., Танчич А., Черепков Н. А., Чернышева Л. В., Шапиро С. Г.* // ЖЭТФ. 1975. Т. 68, № 6. С. 2023—2031.
3. *Andrick D.* // Adv. At. Mol. Phys. 1973. Vol. 9. P. 207.
4. *Golden D. E., Furst J., Mahgerefteh M.* // Phys. Rev. A. 1988. Vol. 30, N 3. P. 1247—1254.
5. *Ramsauer C., Kollath R.* // Ann. Phys. (Leipzig). 1932. Vol. 12. P. 521—561.
6. *Амусья М. Я., Черепков Н. А., Шефтель С. И.* // ЖЭТФ. 1970. Т. 58, № 2. С. 618—623.
7. *Amusia M. Ya., Chernysheva L. V., Felfli Z., Msezane A. Z.* // Phys. Rev. A. 2001. Vol. 64. P. 032711.
8. *Liu J. X., Zhu L. F., Yuan Z. S. et al.* // J. Elect. Spectr. Rel. Phenom. 2004. Vol. 135. P. 15.
9. *Amusia M. Ya., Cherepkov N. A., Chernysheva L. V., Shapiro S. G.* // J. Phys. B: At. Mol. Phys. 1976. Vol. 9, N 17. P. L531—L534.
10. *Amusia M. Ya., N. A. Cherepkov N. A., Chernysheva L. V.* // JETP. 2003. Vol. 124, N 1(7). P. 1—9.
11. *Jaduszliwer E., Paul D. A. L.* // Can. J. Phys. 1973. Vol. 51. P. 1565—1573.
12. *Linert I., Mielewska B., King G. C., Zubek M.* // Phys. Rev. A. 2006. Vol. 74. P. 042701.
13. *Amusia M. Ya., Chernysheva L. V., Felfli Z., Msezane A. Z.* // Phys. Rev. A. 2003. Vol. 67. P. 022703.
14. *Amusia M. Ya., Chernysheva L. V., Felfli Z., Msezane A. Z.* // Phys. Rev. A. 2007. Vol. 75. P. 062703.
15. *Amusia M. Ya., Chernysheva L. V., Felfli Z., Msezane A. Z.* // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. Submitted, 2009.
16. *Amusia M. Ya., Chernysheva L. V., Felfli Z., Msezane A. Z.* // Phys. Rev. A. 2002. Vol. 65, N 6. P. 62705.
17. *Dababneh M. S., Kauppila W. E., Downing J. B., Lapierre F., Pol V., Smart J. H., Stein T. S.* // Phys. Rev. A. 1980. Vol. 22. P. 1872.
18. *Golden D. E., Bandel H. W.* // Phys. Rev. 1965. Vol. 138. P. A14.
19. *Thomson D. G.* // Proc. Roy. Soc. 1966. Vol. A294. P. 160.
20. *Ramsauer C.* // Ann. Phys. (Leipzig). 1921. Vol. 64. P. 513.
21. *Panajotovic R., Filipovic D., Marinkovic B., Pejcev V., Kurepa M., Vuskovic L. J.* // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 1997. Vol. 30. P. 5877—5894.
22. *Fang X. W., Leung K. T.* // Phys. Rev. 2000. Vol. 62. P. 062703.
23. *Chen Z., Amusia M. Ya., Msezane A. Z.* // Phys. Rev. A. 1999. Vol. 60, N 6. P. 5115—5117.
24. *Zhu L. F., Cheng H. D., Yuan Z. C., Liu X. J., Sun J. M., Xu K. Z.* // Phys. Rev. A. 2006. Vol. 73. P. 042703.

25. *Amusia M. Ya., Chernysheva L. V., Felfli Z., Msezane A. Z.* // *Surf. Rev. Lett.* 2002. Vol. 9, N 2. P. 1155—1160.
26. *Stein T. S., Kauppila W. E.* // *Adv. At. Mol. Phys.* 1982. Vol. 18. P. 53.
27. *Charlton M.* // *Rep. Prog. Phys.* 1985. Vol. 48. P. 737.
28. *Hewitt R. N., Noble C. J., Bransden B. H.* // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 1993. Vol. 26. P. 3661.
29. *Dababneh M. S., Kauppila W. E., Downing J. B., Lapierre F., Pol V., Smart J. H., Stein T. S.* // *Phys. Rev. A*, 1980. Vol. 22. P. 1872—1884.
30. *Amusia M. Ya., Chernysheva L. V., Felfli Z., Msezane A. Z.* // *Phys. Rev. A*. 2006. Vol. 73. P. 062716.
31. *Sinapius G., Raith W., Wilson W. G.* // *J. Phys. B*. 1980. Vol. 13. P. 4079.
32. *Amusia M. Ya., Zhivanovich Zh., Radojevich V., Cherepkov N. A.* // *J. Chem. Phys.* 1979. Vol. 71, N 4 P. 1761—1766.
33. *Амусья М. Я., Соснивер В. А., Черепков Н. А., Чернышева Л. В.* // *ЖТФ*. 1985. Т. 55, № 12. С. 2304—2311.
34. *Амусья М. Я., Соснивер В. А.* // *ЖТФ*. 1989. Т. 59, № 3. С. 28—32.
35. *Ivanov V. K.* // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 1999. Vol. 32, N 12. P. R67—R101.
36. *Ivanov V. K.* // *Rad. Phys. Chem.* 2004. Vol. 70. P. 345—370.
37. *Amusia M. Ya., Ivanov V. K., Sheinerman S. A.* // *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* 1976. Vol. 9, N 9. P. 1537—1553.
38. *Amusia M. Ya., Cherepkov N. A., Chernysheva L. V., Sheftel S. I.* // *Phys. Lett. A*. 1972. Vol. 40, N 1. P. 5.

РАЗДЕЛ III

РАСПАД ВАКАНСИЙ

ГЛАВА 5

ОСНОВНЫЕ ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ПОЛОЖЕНИЯ И РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ

5.1. Наиболее важное о вакансиях и их распаде

Вакансия, образуемая в любой из электронных оболочек атома или молекулы (за исключением самой внешней), может распадаться, то есть переходить в другие состояния с одной или несколькими вакансиями. Вследствие распада такая вакансия (дырочный уровень) приобретает конечную *ширину* Γ_k , где k обозначает совокупность всех квантовых чисел (главного квантового n , углового момента l и полного момента j) данной оболочки. Связь между *временем жизни вакансии* τ_k и шириной Γ_k даётся *соотношением неопределенности* для энергии:

$$\tau_k \Gamma_k \approx 1. * \quad (5.1)$$

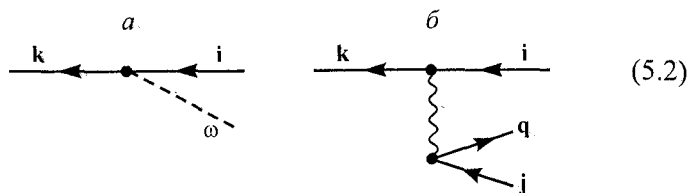
В отсутствие распада спектр вакансий атома представлял бы набор линий нулевой ширины.

Возможны два основных канала распада: излучательный и безызлучательный. При излучательном распаде дырка k переходит в оболочку i с меньшей энергией связи, чем ϵ_k , а высвобождающаяся энергия $\omega_{ki} = \epsilon_i - \epsilon_k$ передается фотону. При безызлучательном переходе (оже-процесс) высвобождающаяся энергия передается другому электрону j , который переходит в состояние q с положительной энергией и покидает атом.

Для изображения таких процессов будем использовать диаграммную технику, описанную в п. 1.3. Простейшие диаграм-

* Напомним, что в данной книге принята атомная система единиц, в которой заряд электрона e , его масса m и постоянная Планка $\hbar$ полагаются равными 1, $e = m = \hbar = 1$.

мы, изображающие излучательный и безызлучательный каналы распада вакансии, соответственно имеют вид:



Радиационная ширина уровня, амплитуда которой изображается диаграммой (5.2, а), Γ_k^γ , дается следующей формулой (см., к примеру, [БЛП], [АМ] и [АИЧЧ]):

$$\Gamma_k^\gamma = \frac{1}{c^3} \sum_{i < F} \omega_{ki}^3 |\langle i | \mathbf{e} \mathbf{r} | k \rangle|^2, \quad (5.3)$$

где $\mathbf{e}$ — вектор поляризации излучаемого фотона. Суммирование производится по всем занятым электронным состояниям с $|\epsilon_i| < |\epsilon_k|$.

Ширина уровня $\Gamma_k^{(A)}$, обусловленная оже-распадом, амплитуда которого изображается диаграммой (5.2, б), дается формулой (см., например, [АМ] и [АИЧЧ]):

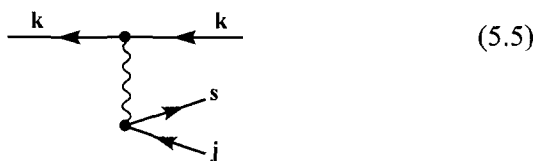
$$\Gamma_k^{(A)} = 2\pi \sum_{i, j < F} \int_{q > F} |\langle kq | U | ij \rangle|^2 \delta(\epsilon_j + \epsilon_i - \epsilon_q - \epsilon_k). \quad (5.4)$$

В качестве одноэлектронного принято, как и в предыдущих главах, приближение Хартри—Фока (ХФ). Учёт многоэлектронных корреляций в рамках приближения случайных фаз с обменом (ПСФО) осуществляется заменой в (5.3) для радиационного перехода $\langle i | \mathbf{e} \mathbf{r} | k \rangle$ на $\langle i | \mathbf{e} \mathbf{D}(\omega) | k \rangle$ — решение уравнения (1.37). Для безрадиационного перехода учёт ПСФО сводится к замене $\langle kq | U | ij \rangle$ в (5.4) на $\langle kq | \Gamma(\omega) | ij \rangle$ — решение уравнения (1.40) [1], [АМ].

Наряду с уширением линий, соответствующих ХФ-вакансиям, взаимодействие атомных электронов приводит к появлению новых. Так, одиночная вакансия k может переходить в более сложные конечные состояния, нежели представленные диаграммами (5.2). В результате спектр конечных состояний усложняется, в нём наряду с одноэлектронными линиями появляются более сложные, соответствующие созданию двух и более вакан-

сий. Возникающие при этом электроны могут либо занимать дискретные уровни в ионе-остатке, либо уходить в сплошной спектр.

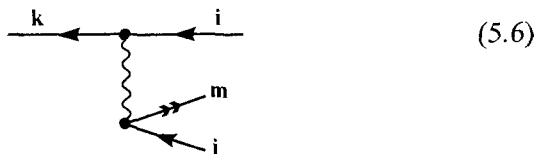
Соответствующие линии называются *сателлитами*. Они создаются в основном за счёт *встряски* — внезапного изменения поля, действующего на остальные атомные электроны (обычно из внешних подоболочек) при удалении электрона из промежуточных или внутренних оболочек. Встряска приводит к переходу одного или даже нескольких электронов на возбуждённые уровни иона-остатка или в его сплошной спектр. Первый процесс называем *встряской-возбуждением* («shake-up»), а второй *встряской-удалением* («shake-off»). Встряска изображается следующим элементом, добавляемым к любой дырочной линии в общей диаграмме, описывающей распад вакансии:



Обратим внимание, что в отличие от (5.2) состояние начальной дырки совпадает с состоянием одной из дырок конечного состояния. Электрон может быть на дискретном уровне и в сплошном спектре.

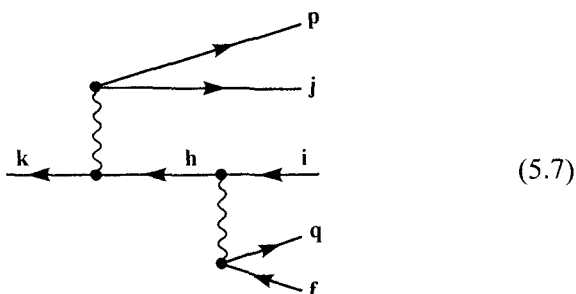
Полные энергии возбужденных атомных состояний типа «один электрон s и две дырки $k^{-1}j^{-1}$, $sk^{-1}j^{-1}$ » больше, чем энергии состояния с одной вакансией k . Поэтому в фотоэлектронных спектрах [2—6] они соответствуют меньшим кинетическим энергиям вылетающего фотоэлектрона и образуют сателлиты встряски-возбуждения. Они имеют «хвост» и в области сплошного спектра, вызванный встряской-удалением. Согласно теореме Купманса [7], первым приближением к энергии ионизации являются теоретические орбитальные одноэлектронные энергии. Их расчёт в приближении ХФ довольно груб. Учет многочастичных поправок для положений вакансий таких возбуждений по методам многочастичной теории возмущений [8] приводит к уменьшению теоретических энергий ионизации внутренних оболочек на величину 10—20 эВ и в результате дает величины, находящиеся в удовлетворительном согласии с экспериментом (с точностью до 1—2 эВ).

Оже-распад вакансии в состоянии типа «две дырки и одна частица», показанный на диаграмме (5.2), приводит к уширению основной фотоэлектронной линии. В некоторых случаях высвобождаемой энергии недостаточно для удаления электрона из атомных оболочек, но достаточно для возбуждения его в связанное состояние, которое обозначено двойной стрелкой:



Матричный элемент оже-перехода особенно велик, если главные квантовые числа взаимодействующих вакансий $i^{-1}k^{-1}$ совпадают. Такие переходы имеют специальное название — переходы Костера—Кронига. Если совпадают главные квантовые числа всех трёх вакансий: $n_i = n_k = n_j$, то имеет место переход супер-Костера—Кронига.

Возможен также двойной оже-процесс, при котором одна вакансия распадается на три дырки и два электрона [9, 10]:



Вклад в ширину вносят также диаграммы, подобные (5.7), но с перестановкой моментов рождения пар pj^{-1} и qf^{-1} , а также с частицей в промежуточном состоянии (см. правила построения диаграмм в п. 1.3).

В этой главе будет описана многочастичная теория возмущений (МТВ) (см. п. 1.4) применительно к приведенным выше процессам. Будут рассмотрены методы расчета как для заполненных, так и для не заполненных в основном состоянии оболочек.

5.2. Энергии атомных уровней

Если ограничиться одноэлектронной картиной фотоионизации, то в конечном состоянии присутствует только одна дырка k и один электрон q в континууме, энергии которых связаны законом сохранения:

$$\omega = \varepsilon_q - \varepsilon_k. \quad (5.8)$$

Согласно теореме Купманса [7], орбитальная энергия ε_k , рассчитанная в приближении Хартри—Фока, равна энергии ионизации атомной оболочки k . Из сравнения теоретических орбитальных энергий с экспериментальными энергиями ионизации, приведенными в табл. 5.1, видно, что одноэлектронное приближение (теорема Купманса) существенно завышает энергии ионизации для внутренних и промежуточных оболочек. Это различие связано с релаксацией ионного остова. Релаксация приводит к уменьшению энергий связи по сравнению с одноэлектронными значениями и к появлению сателлитов встряски — возбуждения и удаления.

Точные энергии ионизации могут быть получены как разности полных энергий нейтрального атома и иона, рассчитанных методом самосогласованного поля:

$$E_b^{\Delta\text{ССП}}(k) = E_{\text{ПОЛ}}^{\text{ХФ}}(k^{-1}) - E_{\text{ПОЛ}}^{\text{ХФ}}, \quad (5.9)$$

где k^{-1} — вакантное относительно основной конфигурации исходного атома состояние (дырка в оболочке k). Подобный метод расчёта обозначается как $\Delta\text{ССП}$ (или SCF в англ. варианте).

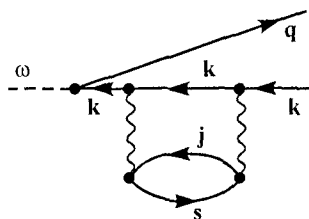
Конфигурация основного состояния (именуемая иногда *ферми-вакуумом*) не имеет дополнительных индексов, а указываются только возбужденные (относительно основной конфигурации) состояния и дырки. Как отмечено выше, сателлитные состояния типа «две дырки—одна частица» обозначаются как $i^{-1}j^{-1}s$. Метод $\Delta\text{ССП}$ — хорошее приближение для расчета энергии ионизации, если начальное и конечное состояния находятся на достаточно больших энергетических расстояниях от других состояний атома или иона, и следовательно, взаимодействие конфигураций мало [11]. Энергии некоторых внутренних уровней инертных газов, рассчитанные различными методами, сравниваются с экспериментом в табл. 5.1. Энергии связи, рассчитанные релятивистским методом $\Delta\text{ССП}$ [12] и методами МТВ,

находятся в хорошем согласии с экспериментом, в то время как энергии связи, рассчитанные по теореме Купманса (в одноэлектронном приближении), во всех случаях существенно больше.

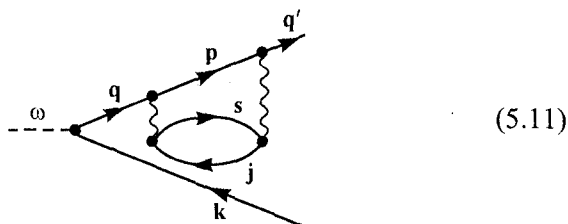
Однако может случиться, что разность энергий между состоянием с одной дыркой k^{-1} и каким-то из состояний типа «две дырки и одна частица $i^{-1}j^{-1}s$ » мала, а кулоновское взаимодействие велико. Например, энергия $4p^{-1}$ -вакансии в атомах, находящихся в Периодической системе элементов Менделеева вблизи Хе, близка к энергии состояний типа «две дырки—одна частица» $4d^{-2}4f$, а матричный элемент взаимодействия между этими состояниями велик, так как главные квантовые числа всех взаимодействующих состояний совпадают. В результате, в $4p$ -фотоэлектронных спектрах этих атомов наблюдаются очень большие сдвиги энергий, уширение и расщепление линий [13], которые не описываются в рамках приближения ХФ. Эти эффекты могут быть рассчитаны в более высоких порядках теории возмущения методами МТВ [14, 15], или взаимодействия конфигураций [16]. Релаксация ионного остова, то есть его перестройка после образования вакансии, приводит к асимметричному уширению основной линии и появлению сателлитных линий. Для расчета интенсивностей и форм сателлитных линий должна быть учтена динамика релаксации остова. Подходы к решению этой проблемы будут рассмотрены в следующих разделах настоящей главы.

5.3. Поляризационное взаимодействие вакансий

Возникновение внутренней вакансии k^{-1} может быть представлено как внезапное включение потенциала дырки W_h . Этот потенциал поляризует электронные оболочки и приводит к возбуждению частично-дырочных пар, которые экранируют поле вакансии:

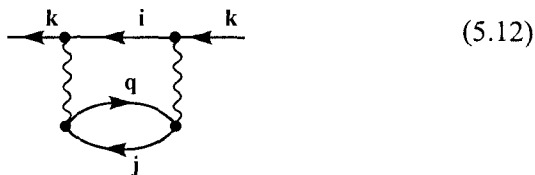

(5.10)

Согласно МТВ [17], возбуждения электрон-дырочных пар приводят к динамической эволюции электронной оболочки под действием потенциала W_h . Это поляризационное взаимодействие приводит к изменению таких параметров вакансии, как энергия, ширина и интенсивность линии, по сравнению с одноэлектронными значениями. Кроме того, возникают сателлитные состояния $k^{-1}j^{-1}s$. Такие же состояния возникают при взаимодействии вылетающего электрона с атомными оболочками, изображенными на следующей диаграмме:



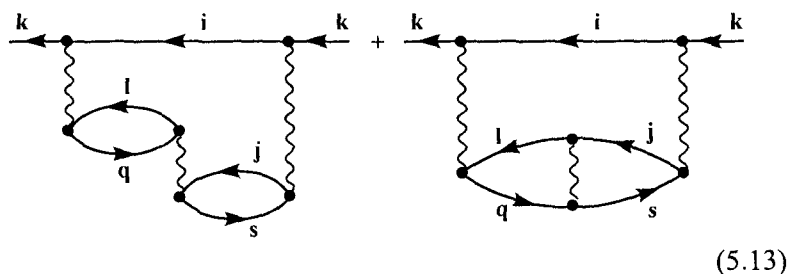
Влияние таких процессов на интенсивности и угловое распределение наиболее существенно вблизи порога ионизации.

В этой главе мы рассматриваем фотоионизацию атомных оболочек, достаточно далеко отстоящих друг от друга по энергии. В таком случае вероятность перехода дырки k^{-1} в другие состояния мала, что соответствует так называемому диагональному приближению [18]. Это название происходит от ограничения процессов с одинаковыми внешними линиями. В наименьшем приближении по межэлектронному взаимодействию в таком подходе поправку к состоянию дырки изображают следующей диаграммой, представляющей вклад взаимодействия виртуального состояния $i^{-1}j^{-1}q$ с дыркой k^{-1} :



На языке теории многих тел (см. разд. 1.4) эта диаграмма в выбранном приближении вносит основной вклад в так называемую собственно энергетическую часть одночастичной функции Грина.

Поскольку электронные корреляции, приводящие к образованию спутников, во многих случаях являются весьма сильными, то существенными оказываются также диаграммы третьего порядка, представляющие взаимодействия между такими состояниями. Примеры таких диаграмм приведены ниже:



(5.13)

Такие процессы определяют ширины уровней при учёте их взаимодействия с возбуждениями сплошного спектра. Влияние поляризационного взаимодействия и других многоэлектронных процессов на спектр вакансии рассматривается в данной главе при помощи техники спектральных функций, основанной на методе функций Грина.

5.4. Собственно энергетическая часть функции Грина и спектроскопические параметры

Функция Грина вакансии в одноэлектронном приближении записывается как [19, 11]:

$$G^{\chi\Phi}(E) = \frac{1}{\epsilon_k - E - i\eta}, \quad (5.14)$$

где ϵ_k — хартри-фоковская энергия дырки (соответствующая теореме Купманса); E — энергетический параметр; η — бесконечно малая величина. Спектральное распределение, или спектральная функция, определяется соотношением

$$A(E) = \frac{\text{Im } G(E)}{\pi}, \quad (5.15)$$

где $G(E)$ — точная одночастичная функция Грина (см., к примеру, [20]).

В одноэлектронном приближении ХФ спектральная функция имеет вид дельта-функции:

$$A^{\text{ХФ}}(E) = \delta(E - \varepsilon_k). \quad (5.16)$$

Функция Грина дырки, возникшей в системе взаимодействующих электронов, описывает эволюцию системы после удаления электрона. В упомянутом выше диагональном приближении эта функция Грина записывается как

$$G_k(E) = \frac{1}{-E + \varepsilon_k + \Sigma_k(E)}, \quad (5.17)$$

где $\Sigma_k(E)$ — собственно энергетическая часть функции Грина, которая определяется действительной $\text{Re} \Sigma_k(E)$ и мнимой $\text{Im} \Sigma_k(E)$ частями.

Тогда спектральная функция вакансии с учетом корреляций запишется как [14, 18—22]

$$\begin{aligned} A_k(E) &= \frac{\text{Im} G_k(E)}{\pi} = \\ &= \frac{1}{\pi} \frac{-\text{Im} \Sigma_k(E)}{(-E + \varepsilon_k + \Sigma_k(E))^2 + (\text{Im} \Sigma_k(E))^2}. \end{aligned} \quad (5.18)$$

В наинизшем (втором) порядке действительная и мнимая части собственно энергетической части функции Грина даются двумя следующими формулами [14, 18]:

$$\text{Re} \Sigma_k(E) = \sum_{ijs} \left(\sum_{n_s} + \int_{\varepsilon_s} d\varepsilon_s \right) \frac{(-1)^{l+h} |\langle kj|U|is \rangle|^2}{-E + \varepsilon_i + \varepsilon_j - \varepsilon_s}; \quad (5.19)$$

$$\begin{aligned} \text{Im} \Sigma_k(E) &= \\ &= \pi \sum_{ijs} (-1)^{l+h} |\langle kj|U|is \rangle|^2 \delta(-E + \varepsilon_i + \varepsilon_j - \varepsilon_s). \end{aligned} \quad (5.20)$$

Здесь l — число фермионных петель; h — число дырочных линий на фейнмановской диаграмме; интеграл в (5.19) понимается в смысле главного значения; $\langle kj|U|is \rangle$ — кулоновские матрич-

ные элементы с учетом обмена, которые удобно здесь представить в виде, аналогичном, но несколько отличном от использованного в (1.37):

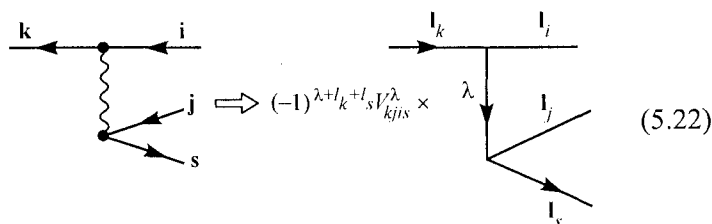
$$\langle kj|U|is\rangle = \sum_{\lambda} f_{\lambda} \langle kj|V^{\lambda}|is\rangle - \sum_{\mu} g_{\mu} \langle ki|V^{\mu}|js\rangle, \quad (5.21)$$

где радиальные части кулоновских интегралов V_{kjis}^{λ} определены ф-лами (1.61), (1.62). В одноэлектронных функциях (1.57) разделены радиальные, угловые и спиновые переменные.

Интегрирование по угловым переменным и суммирование по спиновым для расчета вклада диаграмм можно провести аналитически. Для этого была разработана специальная графическая техника [23]. Весовые множители f_{λ} и g_{μ} рассчитываются для каждой вершины, обозначающей взаимодействия согласно *моментной диаграмме* [23], топологически эквивалентной [24] фейнмановской диаграмме. Иллюстрации использования этой техники для расчётов многоэлектронных атомов можно найти в [25]. Приводимые в данной главе результаты интегрирования по угловым переменным и суммирования по спиновым получены с помощью техники [23—25].

Сформулируем правила применения техники *моментных диаграмм* к фейнмановским диаграммам, соответствующим частично дырочным состояниям, связанным в полный момент.

1. Фрагмент фейнмановской диаграммы с линией взаимодействия заменяется топологически эквивалентным фрагментом моментной диаграммы, со стрелками на начальной дырке, конечной частице и на линии взаимодействия и с весовым множителем $(-1)^{\lambda+l_k+l_s} \langle kj|V^{\lambda}|is\rangle$ следующим образом:



$$\Rightarrow (-1)^{\lambda+l_k+l_s} V_{kjis}^{\lambda} \times \quad (5.22)$$

При этом стрелки на исходной фейнмановской диаграмме не учитываются, а направления стрелок на моментных диаграммах для целого l несутсвенны [25]. Отметим также, что поскольку кулоновское взаимодействие отлично от нуля только между кон-

фигурациями одинаковой четности, фазовый множитель можно записать как $(-1)^{\lambda+l_i+l_j}$, а стрелки поставить на две дырки в конечном состоянии.

2. Все линии на моментной диаграмме с каждой стороны вершины должны быть связаны в промежуточные угловые моменты и полный момент. При связывании в полный угловой момент надо учитывать весовой множитель $(2L+1)^{1/2}$, что графически [25] изображается толстой линией.

3. При связывании момента дырки с моментами дырки или частицы следует использовать правило Джадда [24], согласно которому при связывании дырки в полный момент с другим дырочным или электронным состоянием магнитные квантовые числа (проекция углового момента) меняют знак и возникает дополнительный фазовый множитель $(-1)^{l+1/2+m_i+m_j}$. На моментной диаграмме это выражается в добавлении стрелок, направленных к вершине на орбитальной и спиновой диаграммах.

4. Поскольку мы рассматриваем только кулоновское взаимодействие, не зависящее от спина, спиновая диаграмма получается из орбитальной удалением линии взаимодействия и соответствующих стрелок.

Рассмотрим расчет весового множителя для диаграммы второго порядка (5.12), изображающей возбуждения сателлитов встряски при фотоионизации. При ионизации атома с заполненными оболочками возникает только одно состояние иона с полным угловым моментом $L = l_k$ и спином $S = 1/2$. В приближении LS -связи угловые моменты двух дырок i^{-1} и j^{-1} связываются в промежуточный момент L_{ij} и спин S_{ij} . Поскольку состояния со всеми промежуточными моментами принимают участие в экранировании вакансии, подразумевается, что суммирование фейнмановских диаграмм по всем i и j в формулах для собственно энергетической части функции Грина (5.19) и (5.20) включает также все возможные значения L_{ij} и S_{ij} . Весовые множители прямого и обменного членов кулоновского взаимодействия, зависящие от L_{ij} и S_{ij} , даются двумя следующими формулами [26]:

$$f_{\lambda} = (-1)^{S_{ij}+1} \frac{[S_{ij}L_{ij}]^{1/2}}{2^{1/2}[l_k]^{1/2}} \left\{ \begin{matrix} L_{ij} & l_k & l_s \\ \lambda & l_j & l_i \end{matrix} \right\}; \quad (5.23)$$

$$g_{\lambda} = (-1)^{L_{ij}+l_k+l_s} \frac{[S_{ij}L_{ij}]^{1/2}}{2^{1/2}[l_k]^{1/2}} \left\{ \begin{matrix} L_{ij} & l_k & l_s \\ \mu & l_i & l_j \end{matrix} \right\}, \quad (5.24)$$

где введено обозначение $[q] = 2q + 1$, а выражения в фигурных скобках — $6j$ -символы [ИС].

Эти формулы отличаются от формул работы [27] только общим фазовым множителем. Таким образом, мы полностью определили метод расчета всех величин, необходимых для получения функции Грина дырки, и теперь рассмотрим применение метода спектральных функций для определения параметров спектральных линий.

Описание состояний в терминах квазичастиц возможно, если выполнено следующее соотношение [19]:

$$\operatorname{Re} \Sigma_k(E) \gg \operatorname{Im} \Sigma_k(E). \quad (5.25)$$

Спектр энергий связи электрона определяется из решений уравнения Дайсона [20]:

$$\bar{E} = \varepsilon_k + \operatorname{Re} \Sigma_k(\bar{E}). \quad (5.26)$$

Решения ур-я (5.26) соответствуют основной и спутным линиям в фотоэлектронном спектре. Таким образом, влияние релаксации на энергию основной линии может быть учтено двумя методами: решением уравнения Дайсона (5.26) и рассмотренным выше методом ДССП. В табл. 5.1 теоретические энергии ионизации атомных оболочек, рассчитанные по ур-ю (5.26) и методом ДССП, сравниваются с экспериментом. Из этой таблицы видно, что энергии связи, рассчитанные по теореме Купманса, как упоминалось выше, отличаются от экспериментальных значений на 10 эВ и более, в то время как энергии связи, рассчитанные с учетом релаксации двумя указанными методами, согласуются с экспериментом с точностью около 1 эВ.

Разложив вблизи полюса действительную часть собственно энергетической части функции Грина и пренебрегая изменениями мнимой части, получим, что спектральная функция может быть представлена в виде:

$$A(E) = f \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma/2}{(E - \bar{E})^2 + (\Gamma/2)^2}, \quad (5.27)$$

где ширина спектральной линии Γ (полная ширина на половине высоты) дается формулой

$$\Gamma = -2\pi f \operatorname{Im} \Sigma_k(E), \quad (5.28)$$

а спектроскопический фактор f определен формулой

$$f = \frac{1}{1 - \alpha}, \quad (5.29)$$

где

$$\alpha = \left. \frac{\partial \operatorname{Re} \Sigma_k(E)}{\partial E} \right|_{E=\bar{E}}. \quad (5.30)$$

Спектроскопический фактор равен доле всего спектрального распределения вакансии, соответствующей основной линии. Можно также показать, что выполняются следующие правила сумм [18, 21]:

$$\Sigma f_n + \int_{-\infty}^{\varepsilon_i + \varepsilon_j - \varepsilon_s} \frac{1}{\pi} \frac{\operatorname{Im} \Sigma_k(E) dE}{[\varepsilon_k - E + \Sigma_k(E)]^2 + [\operatorname{Im} \Sigma_k(E)]^2} = 1; \quad (5.31)$$

$$\sum_n f_n E_n + \int_{-\infty}^{\varepsilon_i + \varepsilon_j - \varepsilon_s} \frac{1}{\pi} \frac{E \operatorname{Im} \Sigma_k(E) dE}{[\varepsilon_k - E + \Sigma_k(E)]^2 + [\operatorname{Im} \Sigma_k(E)]^2} = \varepsilon_k. \quad (5.32)$$

Первое из этих соотношений означает, что релаксационные эффекты не меняют полной интенсивности линии, а приводят к появлению набора дискретных сателлитов возбуждения и сплошного спектра двойной ионизации вместо одной узкой линии. Второе соотношение означает, что центр тяжести всего спектрального распределения с учетом релаксации совпадает с одноэлектронной энергией исходной вакансии. Такое же правило сумм получено в модели, в которой интенсивность сателлита пропорциональна перекрыванию между исходным и релаксированным состояниями [28].

В приближении ХФ учтены диаграммы первого порядка по межэлектронному взаимодействию, соответствующие возбуждению частично-дырочных пар (теорема Бриллюэна [7]). Следующий порядок теории возмущений соответствует примешиванию к основному (вакуумному) состоянию частично-дырочных пар типа $l^{-1}j^{-1}rs$. В МТВ вклад таких корреляций соответствует учету диаграмм «назад по времени» (см. обсуждение (1.36)). Взаимодействие такого возбуждения с вакансией k^{-1} показано на следующей диаграмме:

$$(5.33)$$

Вклад этой диаграммы в собственную энергию дается формулой

$$\text{Re } \Sigma_k(E) = \sum_{ijsp} \left(\sum_{n_s, n_p} + \iint_{\epsilon_s, \epsilon_p} d\epsilon_s d\epsilon_p \right) \frac{(-1)^{l+h} \left| \langle kj | U | ps \rangle \right|^2}{-E + \epsilon_j - \epsilon_s - \epsilon_p}. \quad (5.34)$$

Кроме того, спонтанно возникшее в основном состоянии возбуждение типа «две дырки и одна частица $l^{-1}j^{-1}qs$ », взаимодействуя с вакансией, может аннигилировать, причем оператор такого взаимодействия совпадает с оператором W_h , приводящим к образованию спутников:

$$(5.35)$$

Вклад этой диаграммы в действительную часть собственной энергии дается формулой

$$\begin{aligned} \text{Re } \Sigma_k(E) = & \sum_{jls p} \left(\sum_{n_i, n_p} + \iint_{\epsilon_s, \epsilon_p} d\epsilon_s d\epsilon_p \right) \times \\ & \times \frac{(-1)^{l+h} \langle lj | U | ps \rangle \langle kl | U | ip \rangle \langle ij | U | ks \rangle}{(\epsilon_j + \epsilon_l - \epsilon_s - \epsilon_p)(-E + \epsilon_i + \epsilon_j - \epsilon_s)}. \end{aligned} \quad (5.36)$$

Здесь интегрирование проводится в смысле главного значения.

Релаксация внезапно возникшей внутренней вакансии — это переход от волновых функций основного состояния атома в релаксированное состояние иона. Нет однозначного выбора базиса волновых функций для расчета параметров этого процесса.

Возможны несколько подходов, основанных на ХФ-атомных волновых функциях. В приближении «замороженного» остова волновые функции возбужденных состояний рассчитываются в потенциале, полученном с использованием радиальных частей волновых функций основного состояния. При этом отсутствие двух электронов учитывается в числах заполнения двух оболочек. В релаксированном приближении самосогласованно рассчитывается конфигурация атома с двумя дырками и в этом поле находятся возбужденные состояния.

Возможно также промежуточное, так сказать, *релаксированно-замороженное* приближение, в котором самосогласованно рассчитывается состояние с одной внутренней дыркой, а вторая дырка учитывается лишь в числах заполнения. Наиболее простое, называемое *замороженным*, приближение соответствует общему подходу МТВ к описанию эволюции системы под действием оператора W_h .

Релаксированно-замороженное приближение обычно используется для расчета скоростей оже-распада и ширины линий. Результаты для этих величин находятся в хорошем согласии с экспериментом [29]. Полностью релаксированное приближение дает наилучшие результаты при расчете ширин и форм спутных линий [30, 31]. Спектроскопические факторы и энергии связи для линии $1s$ Ne, рассчитанные в различных приближениях сравниваются с экспериментом в табл. 5.2. Спектроскопический фактор, рассчитанный в «замороженном» приближении во втором порядке МТВ, немного меньше экспериментального значения, а абсолютная величина энергии релаксации несколько завышена. Учет корреляций в основном состоянии уменьшает энергию релаксации и улучшает согласие с экспериментом. Энергия релаксации, рассчитанная в релаксированно-замороженном приближении, находится в хорошем согласии с экспериментом даже в наини́зшем порядке теории возмущений. Из приведенных данных следует также, что спектроскопический фактор основной линии менее чувствителен к методу расчета, чем суммарные спектроскопические факторы спутных линий.

Рассмотрим релаксацию вакансии в атомах с одной незаполненной внешней оболочкой. При ионизации внутренней оболочки атома с незаполненной внешней оболочкой $l_j^N L_j S_j$ орбитальный момент и спин вакансии складываются с полными орбитальным моментом и спином незаполненной оболочки в состоянии LS ионного остова. В схеме LS -связи такие состояния

с различными L и S не взаимодействуют друг с другом. Поэтому рассмотренный подход МТВ может быть применен к каждому из таких каналов в отдельности. Однако в этом случае важно исследовать зависимость величины энергии релаксации от терма, что и будет сделано ниже с помощью графических методов теории углового момента [23, 25].

Рассмотрим вклад в релаксацию возбуждений спутников из незаполненной оболочки. В каждом из LS -каналов спутниковое состояние $l_i^{-1}l_j^{-1}l_s$ характеризуется термом $L_j S_j$ оболочки l_j^{N-1} и промежуточным моментом и спином $L_{ij} S_{ij}$ их связывания с вакансией l_i . Используя графические методы, получим вместо (5.23) и (5.24) следующие две формулы для весовых множителей:

$$f_{\lambda(L_j S_j L_{ij} S_{ij})} = N_j^{1/2} G_{\underline{L}_j \underline{S}_j}^{L_j S_j} \sum_q (-1)^{L+L_j+\underline{L}_j+L_{ij}+l_i+l_k+S+3\underline{S}_j+2S_{ij}} \times \\ \times [q][L_j S_j L_{ij} S_{ij}]^{1/2} \left\{ \begin{matrix} \underline{L}_j & L & q \\ l_s & l_i & L_{ij} \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} l_k & l_j & q \\ l_s & l_i & \lambda \end{matrix} \right\} \times \\ \times \left\{ \begin{matrix} \underline{L}_j & L & q \\ l_k & l_j & L_j \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} 1/2 & \underline{S}_j & S_{ij} \\ 1/2 & S & S_j \end{matrix} \right\}; \quad (5.37)$$

$$g_{\mu(L_j S_j L_{ij} S_{ij})} = N_j^{1/2} [L_j L_{ij} S_j S_{ij}]^{1/2} [S]^{-1} (-1)^{L+L_j+\underline{L}_j+L_{ij}+l_k+l_s+\mu} \times \\ \times G_{\underline{L}_j \underline{S}_j}^{L_j S_j} \left\{ \begin{matrix} L & \underline{L}_j & \mu \\ l_i & l_s & L_{ij} \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} L & \underline{L}_j & \mu \\ l_j & l_k & L_j \end{matrix} \right\} \delta(S, S_j), \quad (5.38)$$

где $G_{\underline{L}_j \underline{S}_j}^{L_j S_j}$ — генеалогические коэффициенты [ИС], а состояния конфигурации l_j^{N-1} — угловой момент $\underline{L}_j$ и спин $\underline{S}_j$ подчеркнуты.

Чтобы получить полный вклад возбуждения спутников из незаполненной оболочки в релаксацию вакансии надо просуммировать для каждого LS -канала по всем термам $\underline{L}_j \underline{S}_j$ конфигурации l_j^{N-1} и по всем возможным значениям $L_{ij} S_{ij}$. Кроме того, надо учесть также возбуждения из заполненных внешних $l_p^{4l_p+2}$ -оболочек в незаполненную l_j^N . В этом случае l_s совпадает с l_j . Применив метод моментных диаграмм, получим:

$$f_{\lambda} = (N+1)^{1/2} [\bar{L}_j L_{ip} \bar{S}_j S_{ip}]^{1/2} G_{\bar{L}_j \bar{S}_j}^{\bar{L}_j \bar{S}_j} (1)^{L+S+2S_j+3\bar{S}_j} \times \\ \times \left\{ \begin{matrix} L_{ip} & l_k & \bar{l}_j \\ \lambda & l_p & l_i \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} L & l_k & L_j \\ l_j & \bar{L}_j & L_{ip} \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} S & 1/2 & S_j \\ 1/2 & \bar{S}_j & S_{ip} \end{matrix} \right\}; \quad (5.39)$$

$$g_{\mu} = (N+1)^{1/2} [\bar{L}_j L_{ip} \bar{S}_j S_{ip}]^{1/2} G_{L_j S_j}^{\bar{L}_j \bar{S}_j} (1)^{L+S+2S_j+3\bar{S}_j} \times \\ \times \left\{ \begin{matrix} L_{ip} & l_k & l_j \\ \lambda & l_p & l_i \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} L & l_k & L_j \\ l_j & \bar{L}_j & L_{ip} \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} S & 1/2 & S_j \\ 1/2 & \bar{S}_j & S_{ip} \end{matrix} \right\}. \quad (5.40)$$

Состояния термов конфигурации l_j^{N+1} обозначены чертой сверху.

Как видно из полученных выше формул, а также из ф-л (5.23) и (5.24) для заполненных оболочек, в релаксацию вакансии дают вклад несколько промежуточных моментов L_{ij} и S_{ij} . Для того чтобы получить полное спектральное распределение вакансии (спектральную функцию), надо просуммировать в ф-ле (5.39) по всем различным значениям L_{ij} и S_{ij} , используя при этом различные энергетические знаменатели.

Уравнение Дайсона имеет одно решение, соответствующее основной линии и группу решений, соответствующих сателлитам. Рассмотрим решение, соответствующее основной линии. В этом случае энергетический знаменатель равен энергии возбуждения частично-дырочной пары наружных оболочек, что составляет обычно 10—30 эВ. Если дырки i и j принадлежат различным атомным оболочкам, энергетическое расщепление между различными термами $L_{ij} S_{ij}$ определяется кулоновскими и обменными матричными элементами взаимодействия электронов различных оболочек. Расчеты показывают, что в этом случае энергетическое расщепление составляет единицы электронвольт и менее. Пренебрегая расщеплением между термами и проведя суммирование для монопольного члена ($i = k$) по всем возможным L_{ij} и S_{ij} в (5.23) и (5.24), получим для случая заполненных оболочек следующее выражение для кулоновского матричного элемента:

$$\left| \langle kj | U | ks \rangle \right|^2 = \frac{2}{[\lambda l_k]} \left| \langle kj | V^{\lambda} | ks \rangle \right|^2 - \frac{4(-1)^{l_i+l_j}}{[l_k]} \left\{ \begin{matrix} l_k & l_k & \lambda \\ l_s & l_j & \mu \end{matrix} \right\} \times \\ \times \langle kj | V^{\lambda} | ks \rangle \langle kk | V^{\mu} | js \rangle + \frac{2}{[\mu l_k]} \left| \langle kk | V^{\mu} | js \rangle \right|^2. \quad (5.41)$$

В случае незаполненной оболочки, кроме этого, надо провести суммирование по всем термам конфигурации l_j^{N-1} , поскольку все такие термы, совместимые с сохранением полного углового

момента, дают вклад в энергию релаксации вакансии. Просуммировав по q ф-лу (5.37) для случая монопольного спутника ($\lambda = 0$, $l_i = l_k$ и $l_j = l_s$), возведя в квадрат, просуммировав по всем промежуточным моментам L_{ij} и S_{ij} , получим:

$$f_{0(L_j S_j)}^2 = \frac{N \left(G_{L_j S_j}^{L_j S_j} \right)^2}{[l_k l_j]}. \quad (5.42)$$

Просуммировав далее по всем термам конфигурации l_j^N и воспользовавшись соотношением ортогональности для генеалогических коэффициентов [ИС], получим окончательно:

$$f_0^2 = \frac{N_j}{[l_k l_j]}. \quad (5.43)$$

Таким образом, мы получили важное соотношение: вклад в монопольную релаксацию вакансии вследствие возбуждения спутников из незаполненной оболочки пропорционален числу электронов в этой оболочке и не зависит ни от терма этой оболочки $L_j S_j$, ни от терма ионного остова LS . Подобное суммирование для обменного члена не может быть сделано в явном виде. Однако очевидно, что в случае монопольной релаксации глубоких оболочек обменный член существенно меньше прямого.

Аналогичное суммирование можно провести и для возбуждений из заполненной оболочки в незаполненную оболочку. В этом случае формула для прямого монопольного члена выглядит аналогично:

$$f_0^2 = \frac{4l_j + 2 - N_j}{[l_k l_j]}. \quad (5.44)$$

В этом случае величина релаксации пропорциональна числу свободных мест в незаполненной оболочке и также не зависит от терма.

Полученные формулы для весового фактора позволяют сделать оценку монопольной релаксации, сопровождающей фотоионизацию атомов с незаполненной оболочкой. Теоретические спектроскопические факторы [26] линий, обычно использующихся в фотоэлектронной спектроскопии для большинства ато-

мов, приведены в табл. 5.3 (CD, 000). При расчете учитывались только монопольные возбуждения, а вклад процессов, изменяющих исходную вакансию, пренебрегался. При расчете волновых функций и энергий использовалось релаксированно-замороженное приближение. Учитывались возбуждения из оболочек с энергией связи до 150 эВ в частично заполненные и незаполненные оболочки, равно как и в сплошной спектр.

Из анализа этой таблицы можно сделать следующие выводы. Спектроскопические факторы различных внутренних оболочек одного и того же атома почти совпадают. Например, спектроскопические факторы линий $2p$ Kr и $3d$ Kr равны соответственно 0.84 и 0.86. Это совпадение связано с тем, что релаксация определяется экранированием внутренней вакансии возбуждениями из валентных оболочек. Поэтому спектроскопический фактор определяется в основном числом электронов в валентных оболочках и их энергиями связи и кулоновским взаимодействием с возбужденными оболочками. Если самая внешняя оболочка s -типа, то экранировка меньше и спектроскопический фактор основной линии больше. При заполнении с ростом атомного номера внешней оболочки спектроскопический фактор уменьшается. Например, спектроскопические факторы уменьшаются в ряду от В до Ne, в то время как в Na частичное заполнение $3s$ -оболочки приводит к увеличению энергии связи $2p$ -электронов и спектроскопический фактор немного увеличивается. Экранирование вакансии больше, если волновая функция внешней оболочки не имеет радиальных нулей. Поэтому спектроскопический фактор линии $1s$ Ne меньше, чем факторы линий $2p$ Kr и $3d$ Kr, также $2p$ -спектроскопические факторы $3d$ -атомов меньше, чем $3d$ - спектроскопические факторы $4d$ -атомов.

Спектроскопические факторы внутренних оболочек меняются незначительно: от 0.91 линии $1s$ Li до 0.77 линии $2p$ Zn. Поскольку все спектроскопические факторы находятся в узком интервале вблизи 0.8, учет спектроскопических факторов при расчете относительных интенсивностей линий в рентгеноэлектронных спектрах несуществен. Учет спектроскопического фактора необходим при расчете сечений фотоионизации, соответствующих основным линиям. Значение спектроскопического фактора 0.8 для $1s$ Ne хорошо согласуется с экспериментом [32], где было получено, что интенсивность всех сателлитов ионизации $1s$ Ne составляет 25 % интенсивности основной линии (20 % всего спектра $1s$ Ne).

При исследовании твердых образцов оценки интенсивности спутников сильно зависят от метода удаления фона. Анализ для пяти элементов Al, Cu, Mo, Sn и Ta с удалением фона по Ширли [33] дал значения 0.27, 0.24, 0.12, 0.20 и 0.28 соответственно [34] (среднее значение 0.22), что качественно в основном согласуется с нашими результатами 0.11, 0.22, 0.18, 0.17 и 0.16 (среднее значение 0.17).

Спутники фотоионизации внутренних и валентных оболочек инертных газов возникают из-за многоэлектронных корреляций, сопровождающих фотоионизацию. В МТВ положения спутников даются решениями уравнения Дайсона. Энергии монопольных спутников сдвинуты в сторону больших энергий связи относительно одноэлектронных энергий состояния типа «две дырки—одна частица». Интенсивности спутников равны соответствующим спектроскопическим факторам. Такое приближение справедливо в области далекой от порога ионизации, где вероятность возбуждения таких же состояний вылетающим электроном пренебрежимо мала.

Рассмотрим в качестве примера спутники фотоионизации $2s$ -оболочки атома Ne. Существуют два канала монопольных спутников, отличающиеся полным спином двух дырок $2s^{-1}2p^{-1}(^1,^3P) np(^2S)$ и два дипольных канала распада в состояния $2p^{-2}(^1S) ns(^2S)$ и $2p^{-2}(^1D) nd(^2S)$. Результаты расчета интенсивностей спутников в приближении «замороженного остова» [22] приведены в табл. 5.4 (CD, 000). Как видно из этой таблицы, наименьший порядок МТВ хорошо воспроизводит интенсивности большинства спутников с $n = 3$ с точностью 20 % при условии, что спутники достаточно далеко отстоят друг от друга по энергии.

При выводе выражений для формы линии (5.27), её ширины (5.28) и спектроскопического фактора (5.29) предполагалось, что неравенство (5.25) выполнено и изменением мнимой части собственно энергетической части функции Грина можно пренебречь. В случае широких линий, включив также разложение мнимой собственной энергии в ряд по $(E - \tilde{E})$ [21], получим следующие формулы для указанных величин:

$$A(E) = \frac{1}{\pi} \frac{1 - \alpha}{(1 - \alpha)^2 + \beta^2} \frac{\tilde{\Gamma}/2 + \beta(1 - \alpha)(E - \tilde{E})}{(E - \tilde{E})^2 + (\tilde{\Gamma}/2)^2}; \quad (5.45)$$

$$\tilde{\Gamma} = \frac{2(1-\alpha) \operatorname{Im} \Sigma_k(\tilde{E})}{(1-\alpha)^2 + \beta^2}, \quad (5.46)$$

$$\tilde{f} = \frac{1-\alpha}{(1-\alpha)^2 + \beta^2}, \quad (5.47)$$

где

$$\alpha = \frac{\partial \operatorname{Re} \Sigma_k(z)}{\partial x} = \frac{\partial \operatorname{Im} \Sigma_k(z)}{\partial y}, \quad (5.48)$$

$$\beta = \frac{\partial \operatorname{Im} \Sigma_k(z)}{\partial x} = -\frac{\partial \operatorname{Re} \Sigma_k(z)}{\partial y}, \quad (5.49)$$

$$\tilde{E} \equiv z \equiv x + iy.$$

Из ф-лы (5.45) следует, что уширение основных линий вследствие распада вакансий всегда асимметричное. Такое уширение линий в фотоэлектронных спектрах может быть вызвано и другими причинами. Линии в фотоэлектронных спектрах твердых тел всегда уширены из-за неупругого рассеяния фотоэлектронов. Неупругорассеянные электроны имеют меньшую кинетическую энергию, что приводит к подъему высокоэнергетической (по энергиям связи) стороны линии [33]. Поэтому экспериментально наблюдаемая асимметрия широких линий в твердых телах является результатом двух указанных выше эффектов.

Заметим, что в проводящих твердых телах появляется еще один канал релаксации внутренней вакансии. Это явление, названное *релаксацией ферми-поверхности*, приводит к тому же направлению асимметрии, что и неупругое рассеяние [35, 36]. Будем называть это направление *положительным*. Выясним знак асимметрии, обусловленной распадом вакансии. Увеличение энергии связи исходной вакансии k^{-1} приводит к увеличению кинетической энергии ϵ_s в конечном состоянии $i^{-1}j^{-1}s$. Абсолютные величины кулоновских матричных элементов $\langle kj|U|is \rangle$, определяющих ширину линии, обычно уменьшаются с ростом кинетической энергии. Поэтому эффективная ширина линии уменьшается с ростом энергии связи, приводя к отрицательной асимметрии (противоположной направлению асимметрии, вызванной неупругим рассеянием и релаксацией ферми-поверхности). Следует отметить, что асимметрия, вызванная релаксацией ферми-поверхности, обычно намного больше релаксации, вызванной распадом вакансии.

Преобразовав ф-лу (5.45), запишем асимметричную лоренцеву форму линии в виде [37, 38]:

$$L_a(x) = \frac{1 + \beta'(x - x_0) / \Gamma/2}{1 + (x - x_0)^2 / (\Gamma/2)^2}. \quad (5.50)$$

В случае асимметричного уширения, вызванного процессами Оже и Костера—Кронига, параметр асимметрии формы линии связан с производными действительной и мнимой частей собственной энергии α и β следующей формулой:

$$\beta' = \frac{\beta}{1 - \alpha}. \quad (5.51)$$

Полная ширина линии Γ равна сумме левой $\Gamma_l/2$ и правой $\Gamma_r/2$ полуширин. Можно показать, что с точностью до бесконечно малых величин высших порядков $\Gamma_l/2 = (\Gamma/2) / (1 - \beta')$ и $\Gamma_r/2 = (\Gamma/2) / (1 + \beta')$, а полная ширина на половине высоты не меняются. Это свойство делает асимметричный профиль (5.50) очень удобным при подгонке спектров методом наименьших квадратов, поскольку ширина линии и её асимметрия являются независимыми параметрами. Используемый в некоторых работах индекс асимметрии $\delta = \Gamma_r/\Gamma_l$ связан с введенным нами параметром асимметрии β' следующей формулой:

$$\beta' = \frac{2(\delta - 1)}{(\delta + 1)}. \quad (5.52)$$

Для разложения перекрывающихся линий используется метод подгонки спектра параметрическими функциями [39]. Обычно для подгонки спектра достаточно трех параметров формы линии: лоренцевой ширины, гауссова уширения и параметра асимметрии формы. Гауссово инструментальное уширение может быть учтено сверткой функции Гаусса с асимметричной лоренцевой функцией (5.50) или использованием смешанных гаусс-лоренцевых функций [39]. Подгонка экспериментального спектра асимметричной лоренцевой функцией, уширенной гауссианом, позволяет получить параметры Γ и β' из эксперимента. Такая параметризация возможна, если асимметрия линии не очень сильная. Подобные линии будем называть *квазилоренцевыми*. В случае большой асимметрии для подгонки используется формула Фано (1.50).

В качестве примера применения изложенной теории рассмотрим форму $2s$ -линий атомов от Si до Sc [38]. Для получения спектроскопических факторов и параметров асимметрии формы линий при расчете собственной энергии учитывались несколько каналов распада и релаксации $2s$ -вакансии. Ширина линии определяется оже-переходами $2s^{-1} \rightarrow 2p^{-1}3p^{-1}\epsilon d(\epsilon s)$ и $2s^{-1} \rightarrow 2p^{-1}3s^{-1}\epsilon p$, при которых электроны в сплошном спектре имеют довольно малую кинетическую энергию. Учитывались и оже-переходы, вклад которых в мнимую часть собственной энергии гораздо меньше. Применялось релаксированно-замороженное приближение. Теоретические ширины линий и параметры асимметрии $2s$ -рентгеноэлектронных линий приведены в табл. 5.5 (CD, 000).

Теоретическая ширина линии $2s$ Ag $\Gamma_i = 2.21$ эВ находится в хорошем согласии с экспериментом $\Gamma_{\text{эксп}} = 2.25$ эВ [40] и теорией других авторов [41] ($\Gamma = 2.27$ эВ). Эксперимент [40] также дал отрицательную асимметрию линии $2s$ Ag. Авторы статьи [41] качественно объяснили такое направление асимметрии сателлитами возбуждения в непрерывный спектр, возникающими при фотоионизации $2p$ -оболочки.

5.5. Форма сателлитных линий в фотоэлектронных спектрах

Рассмотрим соотношения между такими параметрами сателлитных линий, как энергия, релаксационный сдвиг, интенсивность и ширина. При возбуждении сателлитов вакансия не меняется и удобно ввести малый параметр Δ — сдвиг энергии сателлита относительно одноэлектронного значения:

$$\Delta = -E + \epsilon_k + \epsilon_j - \epsilon_s. \quad (5.53)$$

Тогда основной вклад в собственную энергию вблизи сателлита $k^{-1}j^{-1}s$ запишется в виде, следующем из формулы для вклада второго порядка теории возмущений по межэлектронному взаимодействию в собственно энергетическую часть (5.12):

$$\text{Re} \Sigma_{k(js)}^{(2)}(\Delta) = - \frac{|\langle kj | U | ks \rangle|^2}{\Delta}. \quad (5.54)$$

В этих обозначениях уравнение Дайсона запишется как

$$\varepsilon_k + \varepsilon_j - \varepsilon_s - \Delta = \varepsilon_k - \frac{\left| \langle kj | U | ks \rangle \right|^2}{\Delta}. \quad (5.55)$$

С учетом малости Δ получим решение уравнения Дайсона:

$$\tilde{\Delta}_{k(js)} = \frac{\left| \langle kj | U | ks \rangle \right|^2}{\varepsilon_s - \varepsilon_j}. \quad (5.56)$$

Тогда спектроскопический фактор изолированного спутника малой интенсивности можно представить формулой, совпадающей с результатом, получаемым с помощью ф-лы (1.132) в рамках теории возмущений [ЛЛ]:

$$\begin{aligned} f_{k(js)} &= \frac{1}{1 + \left| \langle kj | U | ks \rangle \right|^2 / \tilde{\Delta}_{k(js)}^2} \approx \\ &\approx \frac{\tilde{\Delta}^2}{\left| \langle kj | U | ks \rangle \right|^2} = \frac{\left| \langle kj | U | ks \rangle \right|^2}{(\varepsilon_s - \varepsilon_j)^2}. \end{aligned} \quad (5.57)$$

Некоторые монопольные спутники в фотоэлектронных спектрах имеют профиль с поднятым высокоэнергетическим краем [6]. Покажем, что это направление асимметрии следует из формулы для спектральной функции во втором порядке теории возмущений и не зависит от знака матричного элемента. Предположим, что мнимая часть собственной энергии (5.20) постоянна. Тогда асимметрия формы спектральной функции (5.18) определяется резким изменением $\text{Re } \Sigma_{k(js)}^{(2)}(E)$, следующим из ф-лы (5.54). При $\Delta \rightarrow 0$ $\text{Re } \Sigma_k^{(2)}(E)$ расходится и спектральная функция обращается в ноль. Поэтому линия будет иметь лоренцеву форму, если сдвиг линии относительно этой точки больше полуширины линии:

$$\tilde{\Delta} \gg \Gamma / 2. \quad (5.58)$$

Используя (5.56) и (5.57), это неравенство можно преобразовать к виду:

$$\text{Re } \Sigma_k(\tilde{\Delta}) \gg \text{Im } \Sigma_k(\tilde{\Delta}). \quad (5.59)$$

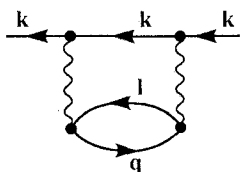
Таким образом, мы получили, что при выполнении стандартного условия квазичастичной картины спутничная линия является лоренцевой (или квазилоренцевой), и ее профиль может

быть выражен через параметры, рассчитанные в одной точке. В противном случае, то есть если мнимая и действительная части собственной энергии — величины одного порядка, форма спектральной линии является нелоренцевой и не выражается через параметры, рассчитанные в одной точке. При этом, как следует из формулы для спектральной функции, интенсивность линии, соответствующая меньшим кинетическим энергиям, уменьшается, что приводит к предпочтительному положительному направлению асимметрии с поднятой высокоэнергетической стороной.

Случаи нарушения квазичастичной картины могут быть найдены в экспериментальных фотоэлектронных спектрах, если оценить $\text{Re } \Sigma_k$ как сдвиг энергии сателлита относительно центра тяжести спектра, а ширину линии представить как $f_k \text{Im } \Sigma_k$. При этом спектроскопический фактор равен экспериментальному отношению интенсивности сателлита к основной линии. Экспериментальные значения интенсивностей и ширин некоторых сателлитов в фотоэлектронных спектрах Ne и полученные на их основе $\text{Re } \Sigma_k$ и $\text{Im } \Sigma_k$ приведены в табл. 5.6 (CD, 496).

Пренебрежение двойной ионизацией при такой обработке экспериментальных данных приводит к ошибке около 10 %. Несмотря на это, можно сделать два вывода. Во-первых, во всех рассмотренных случаях действительная и мнимая части собственной энергии — величины одного порядка и стандартное условие применимости квазичастичной картины (5.25) нарушается. Во-вторых, расчеты $\text{Im } \Sigma$ во втором порядке теории возмущений по ф-ле (5.20) всегда дает величины порядка единиц электронвольт, то есть на порядок меньше экспериментальных значений. Это означает, что в данном случае для правильного расчета ширины сателлита должны быть учтены высшие порядки в разложении W_h .

Рассмотрим общий случай возбуждения дискретного сателлита $k^{-1} \rightarrow k^{-1}j^{-1}s$ при наложении континуума $k^{-1} \rightarrow k^{-1}l^{-1}q$. Конечные состояния иона $k^{-1}j^{-1}$ и $k^{-1}l^{-1}$ могут отличаться на одну дырку или совпадать, отличаясь только схемой связи моментов и спинов. Вклад второго порядка в ширину линии обусловлен возбуждениями в континуум ql^{-1} :



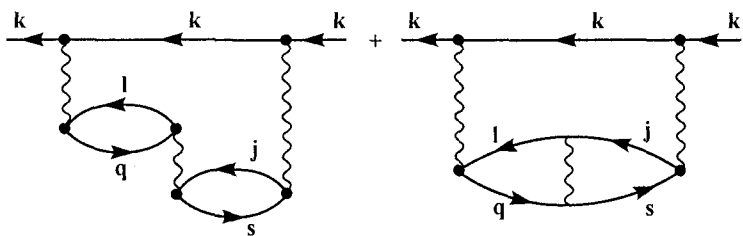
$$(5.60)$$

Вклад этой диаграммы в мнимую часть собственной энергии и ширину линии дается двумя следующими формулами:

$$\Gamma_0 = 2\pi f \sum_{lq} \left| \langle kl|U|kq \rangle \right|^2 \delta(-E + \varepsilon_k + \varepsilon_l - \varepsilon_q); \quad (5.61)$$

$$\begin{aligned} \text{Im} \Sigma_k^{(2)}(E) = \\ = \pi \sum_{lq} (-1)^{l+h} \left| \langle kl|U|kq \rangle \right|^2 \delta(-E + \varepsilon_k + \varepsilon_l - \varepsilon_q). \end{aligned} \quad (5.62)$$

Возможны также более сложные резонансные процессы, в частности возбуждение дискретного сателлита и его последующий распад в континуум [42—44]. Эти процессы изображаются двумя фейнмановскими диаграммами (прямой и обменной):



(5.63)

Соответствующий вклад третьего порядка в мнимую часть собственной энергии имеет вид [42—44]:

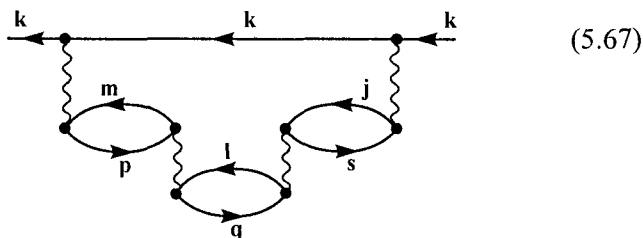
$$\begin{aligned} \text{Im} \Sigma_k^{(3)}(E) = 2\pi \frac{\langle kj|U|ks \rangle}{\Delta} \sum_{l,q} (-1)^{l+h} \times \\ \times \langle kj|U|ks \rangle \langle jq|U|ls \rangle \delta(-E + \varepsilon_k + \varepsilon_l - \varepsilon_q). \end{aligned} \quad (5.64)$$

Весовые множители для внешних вершин такие же, как и для диаграмм второго порядка. Приведение моментных диаграмм, соответствующих внутренним вершинам, дает следующие формулы для прямого и обменного членов:

$$\begin{aligned} f_{jlsq}^\lambda = \frac{[L_{il}L_{ij}S_{il}S_{ij}]^{1/2}}{2} \times \\ \times \left\{ \begin{matrix} L & l_i & \lambda \\ l_l & l_q & L_{il} \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} L & l_i & \lambda \\ l_j & l_s & L_{ij} \end{matrix} \right\} \delta(S, 1/2); \end{aligned} \quad (5.65)$$

$$g_{jlsq}^{\mu} = [L_{il}L_{ij}S_{il}S_{ij}]^{1/2} \left\{ \begin{matrix} L_{ij} & L_{il} & \mu \\ l_i & l_j & l_i \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} L_{ij} & L_{il} & \mu \\ l_s & l_q & L \end{matrix} \right\} \times \\ \times (-1)^{L+L_{ij}+L_{il}+l_i+l_j+l_q+\mu} \delta(S_{ij}, S_{il}). \quad (5.66)$$

Вклады третьего порядка резонансно возрастают в окрестности дискретного спутника из-за присутствия малой величины Δ в знаменателе ф-лы (5.64). Это означает, что следует учесть также вклады четвертого порядка, изображаемые следующей диаграммой:



Вклад этой диаграммы в мнимую часть собственной энергии дается следующей формулой:

$$\text{Im} \Sigma_{k(js)}^{(4)}(E) = \pi \frac{|\langle kj|U|ks \rangle|^2}{\Delta^2} \times \\ \times \sum_{l,q} (-1)^{l+h} |\langle jq|U|ls \rangle|^2 \delta(-E + \epsilon_k + \epsilon_l + \epsilon_q). \quad (5.68)$$

Подставив это выражение в формулу для ширины линии (5.28) и используя приближенное выражение для спектроскопического фактора (5.57), получим уширение линии k за счет взаимодействия резонансного состояния $j^{-1}s$ с континуумом $l^{-1}q$:

$$\Gamma_r = 2\pi \int |\langle jq|U|ls \rangle|^2 \delta(-E + \epsilon_k + \epsilon_l - \epsilon_q) d\epsilon_q. \quad (5.69)$$

Эта формула соответствует «золотому правилу», названному именем Ферми, согласно которому, вне зависимости от природы возникновения спутничного состояния, его уширение равно квадрату матричного элемента взаимодействия с континуумом. Очевидно, что этот член является основным в уширении спутника, поскольку в нем отсутствует спектроскопический фактор

линии. Диаграмма третьего порядка и соответствующая ф-ла (5.64) представляют интерференционный член двух каналов уширения.

Из-за малости Δ в знаменателе (5.68) требование плавного изменения собственной энергии не выполняется и профиль линии не может быть описан параметрами, рассчитанными в одной точке. Для этого требуется вычисление спектральной функции во всем энергетическом интервале сателлитной линии. Все три вклада в мнимую часть собственной энергии могут быть объединены одной формулой:

$$\text{Im } \Sigma_k^{(2,3,4)} = \pi \sum_l \int (-1)^{l+h} \times \\ \times \left(U_{klkq} + \frac{U_{kjs} U_{jqls}}{\Delta} \right)^2 \delta(-E + \varepsilon_k + \varepsilon_l - \varepsilon_q) d\varepsilon_q, \quad (5.70)$$

где фазовый множитель $(-1)^{l+h}$ соответствует диаграмме второго порядка (5.60).

Из этой формулы следует, что знак суммы вкладов второго, третьего и четвертого порядков в мнимую часть собственной энергии совпадает со знаком вклада второго порядка (5.62). Рассмотренный подход содержит основные диаграммы, определяющие ширину линии вплоть до четвертого порядка. Будем называть его упрощенным четвертым порядком теории возмущений.

Рассмотрим результаты расчетов формы сателлитных линий в этом приближении. Сателлит $1s^{-1} 2s^{-1}(^3S) 3s(^2S)$ в $1s$ -спектре фотоионизации Ne имеет профиль типа Фано [2, 3]. Этот сателлит асимметрично уширен взаимодействием с двумя каналами сплошного спектра $1s^{-1} 2p^{-1}(^1,^3P) \varepsilon p$. Спектральная функция сателлита $1s^{-1} 2s^{-1}(^3S) 3s(^2S)$, рассчитанная в упрощенном четвертом порядке в релаксированном приближении [45], приведена на рис. 5.1 (CD, 000) вместе с экспериментальными данными [3]. Подгонка теоретического спектра функцией Фано (1.50) дала параметры $\Gamma = 0.54$ эВ и $q = -2.3$, которые находятся в хорошем согласии с экспериментальными величинами $\Gamma = 0.57$ эВ и $q = -2.2$ [2, 3]. Для оценки теоретической интенсивности линии рассчитывались две площади: под кривой в интервале 3 эВ и под кривой за вычетом линейного фона, которые делились на спектроскопический фактор основной линии. Полученные два значения 0.92 % и 0.59 % находятся в удовлетворительном согласии с

экспериментальной интенсивностью сателлита относительно основной линии, равной 0.7 % [3].

Сателлиты $2s^{-1}2p^{-1}(^2S+^1P)ns(^2P)$ фотоионизации Ne уширены тремя каналами распада в сплошной спектр $2p^{-2}(^1S, ^1D, ^3P)\epsilon p(^2P)$ и имеют как сильно асимметричную форму, так и почти симметричную. На рис. 5.2 (CD, 485) показана теоретическая спектральная функция сателлита $2s^{-1}2p^{-1}(^3P)3s(^2P)$ (линия 60), уширенная гауссианом с полушириной 0.17 эВ, что соответствует экспериментальному уширению [6]. На рисунке приведен также результат подгонки экспериментального спектра функцией Фано (1.50). Полученные подгонкой теоретические параметры $q = -1.8$ и $\Gamma = 0.37$ эВ находятся в хорошем согласии с экспериментальными величинами $q = 2.7$ [6] и $\Gamma = 0.42$ эВ [5].

Теоретическая спектральная функция сателлита $2s^{-1}2p^{-1}(^1P)3s(^2P)$ (линия 67 [6]), приведенная на рис. 5.3 (CD, 486) имеет сложную форму, состоящую из двух пиков. Экспериментально наблюдается один почти симметричный пик. На рис. 5.4 (CD, 486) приведена полная спектральная функция всего сателлитного спектра $2^{-1}s2p^{-1}(^2S+^1P)ns(^2P)$ фотоионизации Ne, уширенная гауссианом полушириной 0.17 эВ. Как видно из этого рисунка теоретическая спектральная функции воспроизводит как асимметричную форму линии 60, так и почти симметричную линию 67 [6].

Еще одним каналом распада сателлитов являются так называемые *валентные мультиплетные оже-переходы* [30]. В этом случае дырочные состояния в начальном и конечном состояниях совпадают, но меняется схема связи их орбитальных и спиновых моментов. Матричные элементы таких переходов рассчитаны в работах [30, 31, 46].

Две серии сателлитов ионизации $2s$ -оболочки: $2s^{-1}2p^{-1}(^1P)np(^2S)$ (синглетная серия) и $2s^{-1}2p^{-1}(^3P)np(^2S)$ (триплетная серия), интенсивности которых были рассчитаны в п. 5.3, асимметрично уширены несколькими каналами распадов. Обе серии сателлитов распадаются в сплошной спектр конфигураций $2p^{-2}(^1S)\epsilon s(^2S)$ и $2p^{-2}(^1D)\epsilon d(^2S)$. Кроме того, все синглетные сателлиты распадаются в континуум триплетного канала. Теоретическая спектральная функция, уширенная гауссианом полушириной 0.17 эВ, что соответствует экспериментальному приборному уширению [6], приведена на рис. 5.5 (CD, 487). Расчеты воспроизводят ширину и форму наиболее интенсивных сателлитов $2s^{-1}2p^{-1}(^1P)3p(^2S)$ (линия 68 [5]) и $2s^{-1}2p^{-1}(^3P)3p(^2S)$ (линия

62 [6]) и их относительные высоты. Ширины триплетного и синглетного сателлитов 0.4 и 0.17 эВ, оцененные по теоретическому графику, находятся в согласии с экспериментальными [47] величинами 0.53 и 0.12 эВ соответственно.

Аналогичные сателлиты возникают при фотоионизации валентной оболочки Ag [6], форма линий которых была рассчитана методом спектральных функции в упрощенном четвертом порядке теории возмущений. На рис. 5.6 (CD, 487) приведена теоретическая спектральная функция сателлита $3s^{-1}3p^{-1}(^3P) 4s (^2P)$ (линия 68). Этот сателлит уширен и имеет асимметричный подъем в сторону больших энергий связи из-за распада в состоянии $3p^{-2}(^1S, ^1D \text{ и } ^3P) \epsilon p$ [6]. Его форма хорошо передается теоретическим расчетом. Он имеет сложную форму, так как находится на пороге континуума $3p^{-2}(^1S) \epsilon p$. Результаты расчета формы синглетного сателлита $3s^{-1}3p^{-1}(^1P) 4s (^2P)$ [44] напоминают результаты для его аналога в Ne. Он состоит из двух пиков с провалом посередине (см. рис. 5.7) (CD, 488). Большой пик со стороны больших энергий связи соответствует экспериментальной линии 71 с энергией 50.4 эВ, а меньшему пику со стороны меньших энергий связи соответствует линия 70 с энергией 50.0 эВ.

Таким образом, асимметричное уширение фотоэлектронных сателлитов возбуждения в результате встряски является следствием многоэлектронной природы этих состояний и наблюдается для большинства сателлитов.

5.6. Эффекты межсателлитного взаимодействия

В $4p$ -фотоэлектронных спектрах лантанидов и некоторых атомов с меньшим атомным номером вместо спин-дублета $4p_{1/2}$ и $4p_{3/2}$ вследствие переходов Костера—Кронига в состояния $4d^{-2}4f (\epsilon f)$ появляется сложная структура, сильно меняющаяся при изменении атомного номера [13—16, 48—50]. Аналогичные эффекты наблюдаются и в $5p$ -спектрах соединений актинидов [51]. Это явление, называемое иногда динамической дипольной релаксацией, исследовалось теоретически методами МТВ [14, 15, 49, 50] и взаимодействия конфигураций [16, 50, 51].

МТВ применима, когда взаимодействие между уровнями относительно мало, а расстояние между ними велико. В этом случае сдвиги уровней много меньше расстояния между ними. В рассматриваемом ряду элементов это условие выполняется,

при этом далеко не полностью, только для Хе, где наиболее сильным является взаимодействие $4p_{1/2}$ -вакансии с состояниями континуума $4d^{-2}\varepsilon f$, приводящее к почти полному исчезновению $4p_{1/2}$ -линии в спектре, в то время как форма линии $4p_{3/2}$ почти не меняется [13, 14]. Поэтому для Хе расчет проводился методом спектральных функций во втором порядке теории возмущений. На рис. 5.8 (CD, 488), где приведены теоретический и экспериментальный [48] $4p$ -фотоэлектронные спектры Хе, показаны также теоретические энергии связи $4p_{1/2}$, $4p_{3/2}$ и $4d^2$, рассчитанные методом самосогласованного поля как разности полных энергий. Из этого рисунка видно, что дипольная релаксация приводит к существенному (на 13 и 11 эВ соответственно) уменьшению энергий связи $4p_{1/2}$ и $4p_{3/2}$. В следующих за Хе атомах Cs, Ва и La взаимодействия между $4p$ -вакансией и состояниями $4d^{-2}(^3F, ^1D, ^1G) 4f(^1P)$ очень велики (около половины атомной единицы), а взаимодействие с континуумом становится малым.

Расчет спектров этих атомов проводился методом взаимодействующих конфигураций. Для каждого из начальных состояний $4p_{1/2}$ и $4p_{3/2}$ решалось секулярное уравнение в базисе из четырех состояний $4p^{-1}$ и $4d^{-2}(^3F, ^1D, ^1G) 4f(^1P)$. Интенсивность линии принималась равной квадрату коэффициента при состоянии $4p^{-1}$ в собственном векторе. Лоренцево уширение рассчитывалось по «золотому правилу» Ферми, то есть как квадрат матричного элемента взаимодействия с континуумом. Для учета спин-орбитального расщепления использовались теоретические релятивистские энергии связи. Спектры $4p_{1/2}$ и $4p_{3/2}$ рассчитывались отдельно, уширялись гауссианами и складывались со статистическими весами.

Теоретические спектры Cs, Ва и La были сдвинуты до совпадения наиболее интенсивных линий в теоретическом и экспериментальном спектрах. Эти сдвиги, величины которых около 1 эВ, показаны на рис. 5.9—5.11 (CD, 489—490), где приведены теоретические и экспериментальные спектры соединений исследуемых атомов. В атомах Ва, Cs и La взаимодействие между $4p_{1/2}$ и $4d^{-2}(^3F, ^1D, ^1G) 4f(^2P)$ -состояниями возрастает по сравнению с Хе и $4p_{1/2}$ -уровень расщепляется на несколько линий. Уровень $4p_{1/2}$ состоит из трех линий, сдвинутых относительно линии $4p_{3/2}$ приблизительно на величину спин-орбитального расщепления и четвертой линии, сильно сдвинутой в сторону больших энергий связи. Эта сложная структура $4p_{1/2}$ -линии перекрывается со структурой $4p_{3/2}$ -линии.

Отметим, что наши предварительные расчеты методом МТВ для Ba, Cs и La без учета взаимодействия между сателлитами давали только два состояния для каждой из спин-орбитальных компонент: основную линию $4p^{-1}$ и все три сателлита, слившиеся в один с существенно завышенным сдвигом в сторону больших энергий связи. Таким образом, при наличии интенсивных, взаимодействующих между собой сателлитов лучшие результаты дает метод взаимодействующих конфигураций.

5.7. Радиационный распад

Когда электрон удаляется из атомной оболочки, исключая самую внешнюю, возможны два типа распада вакансии: радиационный распад и оже-распад. В случае радиационного распада заполнение вакансии электроном внешней оболочки сопровождается излучением фотона с энергией ω . Вероятность радиационного перехода из заполненной оболочки l_f^N в состояние вакансии k^{-1} дается следующим выражением [AM]:

$$W_{k \rightarrow f} = \frac{4\omega}{3c^3[l_k]} \left\langle l_k \left\| d^{V,R}(\omega) \right\| l_f \right\rangle^2, \quad (5.71)$$

где дипольные матричные элементы $d^{V,R}(\omega)$ определены ф-лами (1.59а), (1.59б).

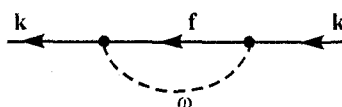
В атомных единицах вероятность радиационного перехода совпадает с полушириной линии (см., к примеру, [11]). В наименьшем порядке теории возмущений, то есть если пренебречь релаксацией вакансии, полная ширина линии представляется как сумма двух величин: радиационной ширины и оже-ширины:

$$\Gamma_k = \sum_{if} \Gamma_{k \rightarrow if}^{\text{Оже}} + \sum_f \Gamma_{k \rightarrow f}^{\text{рад}}. \quad (5.72)$$

В первом слагаемом суммирование происходит по всем энергетически возможным двухдырочным состояниям $i^{-1}j^{-1}$, а во втором — по всем внешним оболочкам. Если пренебречь вкладами недипольных переходов в ширину линии, то вторая сумма ограничивается внешними оболочками с $l_j = l_k \pm 1$.

Скорости радиационного распада некоторых атомов приведены в табл. 5.7 (CD, 497).

При расчете параметров линии методом спектральных функций радиационный распад может быть учтен подобно оже-распаду в собственно энергетической части функции Грина [49]. Вклад в собственно энергетическую часть функции Грина от радиационного заполнения вакансии k^{-1} электроном из оболочки l_f^N дается следующей диаграммой:


(5.73)

Если оболочка l_f^N первоначально заполнена, то форма моментной диаграммы совпадает с формой диаграммы Фейнмана (5.73), где вместо квантовых чисел дырок находятся их моменты, а вместо ω находится единица. Весовой множитель этой диаграммы равен $1/[l_k]$. Сравнивая этот результат с ф-лой (5.72), получаем, что при расчете ширин линий более сложных конфигураций графическими методами надо в каждой вершине, включающей дипольный оператор, добавить весовой множитель

$$W_{\text{рад}} = 2 \sqrt{\frac{\omega}{3c^3}} \langle l_k \| d^{V,R}(\omega) \| l_f \rangle. \quad (5.74)$$

Рассмотрим переход из состояния $l_k^{-1} l_f^N (LS)(L'S')$ с вакансией в заполненной внутренней оболочке в конечное состояние $l_f^{N-1} (L_1 S_1)$. Применение графических методов дает следующую формулу для вклада радиационного перехода в ширину уровня k^{-1} :

$$\Gamma_{k \rightarrow f}^{\text{рад}} = w_{\text{рад}}^2 [LS] N \left\{ \begin{matrix} L' & L_1 & 1 \\ l_f & l_k & L \end{matrix} \right\}^2 (G_{L_1 S_1}^{LS})^2. \quad (5.75)$$

Очевидно, что рассмотренная ранее монополярная релаксация вакансии одинаковым образом влияет на уширение за счет оже-переходов и за счет радиационных переходов (см., к примеру, [57] [МА]). Таким образом, справедлива следующая формула для радиационной ширины линии, отличающаяся фактором f от приведенной, к примеру, в [АИЧЧ]:

$$\Gamma_{kf} = f \frac{4\omega}{3c^3 [l_k]} \left| \langle l_k \| d^{V,R}(\omega) \| l_f \rangle \right|^2. \quad (5.76)$$

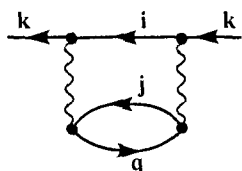
Вклады радиационных переходов в ширину линии существенны для внутренних оболочек тяжелых атомов. Как следует из табл. 5.3 (CD, 494), спектроскопические факторы внутренних оболочек для всех элементов примерно равны 0.8.

Электронные корреляции типа ПСФО учитываются заменой в (5.76) оператора $d^{V,R}(\omega)$ из (1.59а, 1.59б) на $D^{V,R}(\omega)$ из (1.55). Воздействие корреляций может быть весьма сильным, вплоть до обращения Γ_{kf} в ноль за счёт деструктивной интерференции прямого и идущего через виртуальное возбуждение других электронов каналов распада (см. табл. 5.8 (CD, 499) и [1, 11, АИЧЧ]).

5.8. Безызлучательный или оже-распад

Вследствие межэлектронного взаимодействия внутренняя вакансия может заполняться электроном из внешних оболочек с одновременным выбросом одного или нескольких электронов в сплошной спектр — континуум. В оже-процессе начальным является состояние с одной вакансией, а конечным — это дву- или трёх (и даже, возможно, более)-кратный ион с одним или несколькими электронами в континууме. Возможны также более сложные процессы, в которых начальным состоянием является сателлит фотоионизации или возбужденное состояние атома.

Рассмотрим процесс заполнения атомной вакансии k^{-1} электроном внешней оболочки i с одновременным выбросом электрона оболочки j в состояние континуума q . Такие переходы соответствуют диаграммным линиям и обозначаются буквой A [52]. Вклад такого процесса в собственную энергию выражается следующей диаграммой:


(5.77)

В отличие от (5.60) промежуточное состояние здесь содержит дырку $i^{-1} \neq k^{-1}$. Считается, что вершины, в которых дырки i и j обмениваются местами в одной или двух вершинах, также включены в эту диаграмму. Амплитуда соответствующего оже-процесса описывается диаграммой (5.2, б) — с одной вершиной.

При расчёте удобнее исходить из (5.77), поскольку проще использовать технику спектральных функций, развитую в предыдущих разделах. В одноэлектронном приближении полная оже-ширина атомной вакансии k дается ф-лой (5.4). В этой формуле U обозначает межэлектронное кулоновское взаимодействие с учетом обмена дырок в конечном состоянии (см. (1.37)). В релятивистском случае межэлектронное взаимодействие записывается в более сложном виде [БЛП]:

$$U_{\omega} = \frac{1}{r_{12}} - (\alpha_1 \cdot \alpha_2) \frac{\exp(i\omega r_{12})}{r_{12}} + \\ + (\alpha_1 \cdot \nabla_1)(\alpha_2 \cdot \nabla_2) \frac{\exp(i\omega r_{12}) - 1}{\omega^2 r_{12}}, \quad (5.78)$$

где r_{12} — межэлектронное расстояние; $\omega = |\epsilon_k - \epsilon_i| \approx \omega' = |\epsilon_j - \epsilon_q|$; α_1, α_2 — матрицы Дирака.

Это общее выражение может быть преобразовано к виду [53], в котором взаимодействие разложено по степеням постоянной тонкой структуры α :

$$V_{\omega} = \frac{1}{r_{12}} - \frac{1}{r_{12}} [(\alpha_1 \cdot \alpha_2) + (\alpha_1 \cdot r_1)(\alpha_2 \cdot r_2) / r_{12}^2] - \\ - i \frac{2}{3} \omega (\alpha_1 \cdot \alpha_2) + O(\alpha_1)(\alpha_2)(\omega r_{12})^2. \quad (5.79)$$

Здесь второй член представляет *брейтовское взаимодействие*, имеющее порядок $(Z^*\alpha)^2$ по сравнению с чисто кулоновским взаимодействием. Третий член — это основная мнимая часть порядка $(Z^*\alpha)^3$, и последний член имеет порядок $(Z^*\alpha)^4$; Z^* обозначает эффективный заряд рассматриваемой электронной оболочки. Поэтому для атомов с $Z < 40$ достаточно нерелятивистского приближения. Для атомов $40 < Z < 70$ и для внешних оболочек более тяжелых атомов требуется учет брейтовского взаимодействия. Для $70 < Z < 90$ необходим учет также основной мнимой части, а для $Z > 90$ должны учитываться все взаимодействия, входящие в ф-лу (5.79).

Мы рассматриваем оже-процессы в легких атомах и при расчете матричных элементов перехода учитываем только кулоновское взаимодействие. В схеме LS -связи две вакансии в конечном состоянии связываются в полные орбитальный L_{ij} - и спиновый

S_{ij} -моменты, а затем с оже-электроном q — в моменты L и S . Поскольку схема связи в оже-процессе такая же, как и при возбуждении сателлитов, для расчета весовых множителей можно использовать ф-лы (5.23) и (5.24).

Перейдем к расчету весовых множителей для оже-процесса в атомах с незаполненными оболочками. Рассмотрим случай ионизации заполненной оболочки $l_k^{4l_k+2}$ в присутствии незаполненной $l_j^{N_j}(L_j S_j)$. Для каждого из термов $L_j S_j$ незаполненной оболочки при ионизации возникает набор термов LS -начальных состояний для оже-процесса. Их обозначим как $l_i^{N_i}(\underline{L}_i \underline{S}_i) l_j^{N_j}(\underline{L}_j \underline{S}_j) (L_{ij} S_{ij}) l_q (LS)$. Термы конфигурации $N_j - 1$ -электрон будем подчеркивать одной чертой, а термы конфигурации $N_j - 2$ -электрона — двумя чертами. В зависимости от того, как конечные дырки распределены между первоначально заполненными оболочками и незаполненной оболочкой, возможны три случая. Моментная диаграмма для случая, когда две дырки конечного состояния дает следующий весовой множитель:

$$f_{kiiq}^{\lambda} = 2^{1/2} [L_{ij} S_{ij} \underline{\underline{L}}_i \underline{\underline{S}}_i]^{1/2} (-1)^{L_j + L_{ij} + \underline{S}_i + S_j + S_{ii}} \times \\ \times \begin{Bmatrix} S & S_j & 1/2 \\ \underline{\underline{S}}_i & 1/2 & S_{ij} \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} \underline{L}_i & l_k & l_q \\ \underline{\underline{\lambda}} & l_i & l_j \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} L & l_k & L_j \\ \underline{L}_i & L_{ij} & l_q \end{Bmatrix}. \quad (5.80)$$

Если одна дырка конечного состояния находится в заполненной оболочке, а другая — в незаполненной, то полное взаимодействие состоит из двух частей, прямой и обменной, весовые множители для которых даются следующими двумя формулами:

$$f_{kjiq}^{\lambda} = N_j^{1/2} G_{\underline{L}_j \underline{S}_j}^{L_j S_j} [L_{ij} S_{ij} L_j S_j]^{1/2} (-1)^{S + \underline{S}_j + 1} \begin{Bmatrix} S & S_j & 1/2 \\ \underline{S}_j & S_{ij} & 1/2 \end{Bmatrix} \times \\ \times \sum_r [r] \begin{Bmatrix} \underline{\lambda} & L_{ij} & r \\ \underline{L}_j & l_k & l_i \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} L & l_j & r \\ \underline{L}_j & l_k & L_j \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} L & l_j & r \\ \underline{\lambda} & L_{ij} & l_q \end{Bmatrix}; \quad (5.81)$$

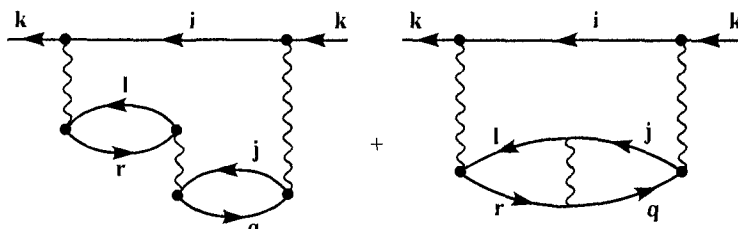
$$g_{kjiq}^{\mu} = N_j^{1/2} G_{\underline{L}_j \underline{S}_j}^{L_j S_j} [L_{ij} S_{ij} L_j S_j]^{1/2} [S]^{-1} (-1)^{L + L_j + \underline{L}_j + l_k + l_q + \mu} \times \\ \times \begin{Bmatrix} L & \underline{L}_j & \mu \\ l_i & l_q & L_{ij} \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} L & \underline{L}_j & \mu \\ l_j & l_k & L_j \end{Bmatrix} \delta(S, \underline{S}_j). \quad (5.82)$$

Если две дырки конечного состояния находятся в первоначально незаполненной оболочке, то остается только прямой член, формула для которого имеет вид:

$$f_{kjjq}^{\lambda} = (N_j (N_j - 1))^{1/2} \sum_{\underline{L}_j \underline{S}_j} G_{\underline{L}_j \underline{S}_j}^{L_j S_j} G_{\underline{L}_j \underline{S}_j}^{L_j S_j} [L_j \underline{L}_j S_j \underline{S}_j^{-1}]^{1/2} \times \\ \times (-1)^{L+L_j+\underline{L}_j+\underline{L}_j+l_j+l_q} \left\{ \begin{matrix} L & \underline{L}_j & \lambda \\ l_j & l_k & L_j \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} L & \underline{L}_j & \lambda \\ l_j & l_q & \underline{L}_j \end{matrix} \right\} \delta(S, S_j). \quad (5.83)$$

На примере переходов KLL в Ne рассмотрим основные электронные корреляции, влияющие на интенсивности оже-спектров. В [54] было показано, что взаимодействие конфигураций $2s^{-2}(1S)$ и $2p^{-2}(1S)$ приводит к существенному перераспределению интенсивностей переходов, уменьшая интенсивность первого. Расчеты методом МТВ [55], по теории рассеяния [56] и многоконфигурационным методом Дирака—Фока [29] показали, что взаимодействия, включающие электроны в континууме также существенно влияют на относительные интенсивности линий в оже-спектрах. Полные таблицы оже-переходов в одноэлектронном приближении для атомов $6 < Z < 92$ рассчитаны в [57].

Взаимодействие между каналами оже-распада изображается двумя следующими диаграммами (прямой и обменной):



$$(5.84)$$

Вклад этих процессов в собственную энергию записывается как

$$\text{Im } \Sigma_k(E) = 2\pi \sum_{i,j,l < F} (-1)^{l+h} \langle kj | U | iq \rangle \times \\ \times \delta(-E + \varepsilon_i + \varepsilon_j - \varepsilon_q) d\varepsilon_q \int \frac{\langle kl | U | iq \rangle \langle lr | U | jq \rangle d\varepsilon_r}{-E + \varepsilon_i + \varepsilon_l - \varepsilon_r}, \quad (5.85)$$

где второй интеграл берётся в смысле главного значения.

Если конфигурации конечного состояния отличаются двумя дырками, то надо также учесть взаимодействие конфигураций ионных остовов, изображаемое следующей диаграммой:

$$(5.86)$$

Это взаимодействие отлично от нуля, если $L_{lm} = L_{ij}$ и $S_{lm} = S_{ij}$. Формула для вклада этой диаграммы в мнимую часть собственной энергии записывается как

$$\text{Im} \Sigma_k(E) = 2\pi \sum_{i, j, l, m < F} (-1)^{l+h} \int \langle kj|U|i q \rangle \times \\ \times \delta(-E + \epsilon_i + \epsilon_j - \epsilon_q) d\epsilon_q \frac{\langle km|U|l q \rangle \langle lm|U|ij \rangle}{-E + \epsilon_i + \epsilon_m - \epsilon_q}. \quad (5.87)$$

В матричный элемент оже-процесса входит волновая функция электрона q в сплошном спектре. Её можно рассчитать либо в поле двух «замороженных» дырок i и j в конечном состоянии, либо сначала решить уравнения ХФ для атома с двумя дырками i и j и уже в этом поле рассчитать волновую функцию q . Возможен также и промежуточный вариант, в котором самосогласованно рассчитывается атом с исходной вакансией k , а волновая функция q рассчитывается с использованием этих радиальных частей, но с реальными числами заполнения, т. е. дырками i и j .

Приближение начальной релаксированной вакансии предполагает, что этот процесс идёт быстрее оже-распада и вылетающий электрон чувствует изменённое релаксацией поле. Эту вакансию также можно описать в рамках приближения замороженного остова, если учесть диаграммы взаимодействия между процессом возбуждения сателлитов и оже-процессом, к примеру, следующую:

$$(5.88)$$

ная линия. При этом энергия, необходимая для того чтобы конечное состояние было возбужденным, берется от фотоэлектрона и частично от оже-электрона.

Возможен также и нерезонансный путь, соответствующий энергии связи основной линии в фотоэлектронном спектре [58]. Этот путь проходит через виртуальные сателлитные состояния, и закон сохранения энергии выполняется только в конечном состоянии. При этом дополнительная энергия, необходимая для того чтобы получить возбужденное конечное состояние $i^{-1}j^{-1}l^{-1}s$, целиком берется у оже-электрона. Такие сателлиты оже-процесса будем называть *сателлитами основной* (фотоэлектронной) *линии*. Его кинетическая энергия равна разности между кинетической энергией соответствующего сателлита C_α и энергией возбуждения фотоэлектронного сателлита встряски. Поскольку оже-сателлиты основной линии соответствуют энергии связи основной линии, они дают вклад в её уширение.

Корреляции в основном состоянии также могут быть учтены методом МТВ при расчете оже-процесса. Поскольку возбуждения одной частично-дырочной пары уже учтены в методе Хартри—Фока, нам надо учесть только одновременные возбуждения двух частично-дырочных пар $i^{-1}j^{-1}pr$. Следующая диаграмма даёт пример влияния такого возбуждения на оже-распад:

$$(5.92)$$

Вклад этой диаграммы в собственную энергию состояния k^{-1} дается формулой

$$\begin{aligned} \text{Im } \Sigma(E) = & 2(-1)^{l+h} \int \langle kj | U | iq \rangle \delta(-E + \epsilon_i + \epsilon_j - \epsilon_q) \times \\ & \times \left(\sum_{p,r} + \iint_{\epsilon_p, \epsilon_r} d\epsilon_p d\epsilon_r \right) \frac{\langle ij | U | pr \rangle \langle kr | U | pq \rangle}{-\epsilon_p - \epsilon_r + \epsilon_i + \epsilon_j}. \end{aligned} \quad (5.93)$$

Теоретические скорости оже-распада Ne KLL , полученные в различных приближениях, сравниваются с экспериментом

и другими теоретическими данными в табл. 5.9 (CD, 499). Скорости оже-распада рассчитаны в приближениях релаксированной исходной дырки и замороженного остова. В обоих случаях скорости оже-распада рассчитывались как вклады в мнимую часть собственной энергии исходной вакансии с учетом взаимодействия остовных конфигураций и взаимодействия между каналами, включающими волновые функции непрерывного спектра. В приближении замороженного остова учитывались также взаимодействия между оже-распадом и возбуждениями сателлитов встряски. В этом случае скорость оже-распада рассчитывалась как вклад в мнимую часть собственной энергии, умноженный на спектроскопический фактор вакансии $1s$. Следует отметить, что в приближении замороженного остова с учетом только взаимодействия между каналами ширина линии $1s$ Ne составляет всего $4.84 \cdot 10^{-3}$ а. е.

Учет взаимодействия между возбуждениями сателлитов и оже-распадом приводит к фактическому удвоению теоретической ширины линии $1s$ Ne. Для корректного сопоставления с другими данными в приближении замороженного остова за единицу принималась интенсивность пяти диаграммных линий. Поэтому в этом приближении ширина линии $1s$ Ne с учетом сателлитов основной линии оказывается больше единицы. Полная ширина $1s$ -уровня Ne, рассчитанная в потенциале релаксированного конечного состояния хорошо согласуется с экспериментом. Учет взаимодействия между каналами приводит к перераспределению интенсивностей, не изменяя существенно полной ширины $1s$ -уровня Ne.

Теоретические интенсивности сателлитов основной линии для Ne, рассчитанные в приближении начального релаксированного состояния приведены в табл. 5.10 (CD, 500). В этом же приближении рассчитывались скорости KLL оже-распада атомов C, N, O и F, приведенные в табл. 5.11—5.14 (CD, 500—502). Расчеты для атомов с открытыми оболочками показали тенденции, аналогичные тем, что были установлены для Ne: взаимодействие между остовными конфигурациями $2s^{-2}$ и $2p^{-2}$ приводит к передаче интенсивности от перехода $2s^{-2}\epsilon s$ к переходу $2p^{-2}\epsilon s$. Взаимодействие между каналами с участием состояний непрерывного спектра также существенно перераспределяет интенсивности.

Из данных, приведенных в табл. 5.15 (CD, 502), где теоретические скорости оже-распада [58—60] для атома кислорода сравниваются с экспериментом [61], следует, в частности, что

корреляции в основном состоянии уменьшают полную ширину линии, но мало влияют на относительные интенсивности.

Скорости оже-распада LMM Ag, рассчитанные в приближении релаксированного начального состояния, сравниваются с экспериментом и результатами других авторов в табл. 5.16 (CD, 503).

В табл. 5.17 (CD, 503) приведены скорости оже-распада LMM S. В этом случае начальное состояние оже-процесса характеризуется термом конфигурации $3p^4$ и полными орбитальным и спиновым моментами иона.

5.9. Форма низкоэнергетического оже-спектра

Метод спектральных функций позволяет рассчитать также форму линий оже-спектров. Представим мнимую часть собственной энергии в виде суммы вкладов отдельных каналов:

$$\text{Im} \Sigma_k(E) = \sum_{ilq} \Omega_{kilq}(E) \delta(E - \varepsilon_i - \varepsilon_l + \varepsilon_q), \quad (5.94)$$

где $\Omega_{kijq}(E)$ — вклад перехода $k^{-1} \rightarrow i^{-1}l^{-1}q$.

Тогда спектральная функция может быть записана в виде функции переменных E и ε_q :

$$A_k(E, \varepsilon_q) = \frac{\sum_{ilq} \Omega_{kijq}(E) \delta(E - \varepsilon_i - \varepsilon_l + \varepsilon_q)}{[E - \varepsilon_k - \text{Re} \Sigma_k(E)]^2 + [\text{Im} \Sigma_k(E)]^2}. \quad (5.95)$$

Интеграл по энергиям состояний непрерывного спектра ε_q дает спектральную функцию исходной вакансии в шкале энергий связи фотоэлектронного спектра E . В шкале кинетических энергий оже-электронов эта же формула определяет спектральную плотность фотоэлектронной линии, передаваемую оже-электроному. Если выполняется условие медленного изменения собственной энергии, то все линии имеют лоренцеву или квазилоренцеву форму и их интенсивности пропорциональны парциальным ширинам $\Omega_{kijq}(E)$.

В случае распада фотоэлектронных сателлитов встряски $i^{-1}j^{-1}s$ в состояния непрерывного спектра $i^{-1}l^{-1}q$ условие медленного изменения собственной энергии не выполняется и распределение спектральной плотности фотоэлектронной линии

между оже-линиями малой энергии [62] становится более сложным [43, 44, 63]. В этом случае распределение интенсивности фотоэлектронной линии между каналами распада не постоянно, а зависит от энергии E :

$$\Omega_{klkq}(E) = \pi \left| \langle kl|U|kq \rangle + \frac{\langle kj|U|ks \rangle \langle jq|U|lr \rangle}{E - \varepsilon_k - \varepsilon_j + \varepsilon_s} \right|^2. \quad (5.96)$$

Вблизи энергии резонанса $\Omega_{kijq}(E)$ — очень резкая функция E . Вид этой функции зависит от знака интерференции между двумя путями — резонансным и нерезонансным. В случае конструктивной интерференции формы оже-линий примерно такие же, как и форма исходной сателлитной линии. В случае деструктивной интерференции спектральная плотность может иметь более сложную форму.

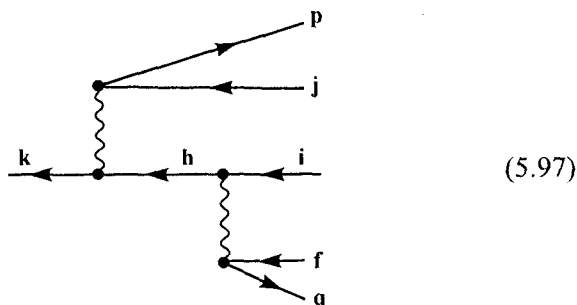
На рис. 5.12 и 5.13 (CD, 490, 491) приведены результаты расчетов для сателлитов $2s^{-1}2p^{-1}(^3,^1P)3s(^2P)$ фотоионизации $2p$ -электронов Ne. Фотоэлектронные линии асимметрично уширены из-за распада в континуум $2p^{-2}(^1S, ^3P, ^1D)\varepsilon p(^2P)$. На рисунках в шкале энергий связи фотоэлектронного спектра изображены также линии оже-спектра. Используя пороги однократной и двукратной ионизации, нетрудно перевести эту шкалу в шкалу кинетических энергий оже-спектров. Из рис. 5.12 видно, что сателлит $2s^{-1}2p^{-1}(^3P)3s(^2P)$ распадается преимущественно в континуум $2p^{-2}(^1D)\varepsilon p$, а интенсивности распада в состояние $2p^{-2}(^1S)\varepsilon p$ существенно меньше, причем формы линий оже-спектров повторяют форму фотоэлектронной линии. Интенсивность оже-линии $2p^{-2}(^3P)\varepsilon p$ очень мала. Из рис. 5.13 видно, что синглетный сателлит $2s^{-1}2p^{-1}(^1P)3s(^2P)$ распадается в основном в состояния $2p^{-2}(^1D)\varepsilon p$ и $2p^{-2}(^3P)\varepsilon p$, причем формы этих линий в оже-спектре различны, а интенсивность последней больше. Эти теоретические предсказания [43, 44] были подтверждены экспериментально [64].

Теоретический оже-спектр малой энергии [63], соответствующий распаду сателлита $1s^{-1}2s^{-1}(^3S)3s(^2S)$ фотоионизации $1s$ Ne в два состояния непрерывного спектра $1s^{-1}2p^{-1}(^1,^3P)\varepsilon p$ показан на рис. 5.14 (CD, 491). Форма обеих линий соответствует форме фотоэлектронного сателлита, приведенной на рис. 5.1 (CD, 484). Основная часть интенсивности передается синглетному каналу Оже (с кинетической энергией 8.3 эВ), а интенсивность линии в триплетном канале (с кинетической энергией 12.6 эВ) существенно меньше.

Это предсказание подтверждено в работе [65], где было экспериментально установлено, что интенсивность оже-линии при кинетической энергии 8 эВ существенно больше интенсивности линии с кинетической энергией 12.6 эВ.

5.10. Двухэлектронный оже-распад

Переход из состояния с одной дыркой в состояние с тремя дырками и двумя частицами изображается набором диаграмм, простейший пример которых выглядит следующим образом:



Для краткости, диаграммы, соответствующие обмену дырок, опущены. Подразумевается сумма по промежуточным состояниям h . С экспериментальной точки зрения представляют интерес две величины: вклад этого процесса в ширину исходной k -вакансии и вероятность образования конечного состояния. Последняя величина зависит от распределения энергий между электронами p и q .

Возможен также каскадный процесс, в котором вся энергия, выделяющаяся при переходе остова из состояния k^{-1} в состояние $j^{-1}h^{-1}$, передается электрону p . Вклад такого процесса в ширину исходной вакансии дается следующей формулой:

$$\Gamma_k = 2\pi \int \left| \langle kj | U | hp \rangle \right|^2 \delta(\epsilon_k - \epsilon_h - \epsilon_j + \epsilon_p) d\epsilon_k. \quad (5.98)$$

Вероятность возникновения конечного состояния при таком процессе записывается как

$$\Gamma_{k,ijfpq} = 4\pi^2 \int \left| \langle kj | U | hp \rangle \right|^2 \delta(\epsilon_k - \epsilon_h - \epsilon_j + \epsilon_p) d\epsilon_p \times \\ \times \int \frac{1}{\Gamma_h} \left| \langle hf | U | iq \rangle \right|^2 \delta(\epsilon_h - \epsilon_i - \epsilon_f + \epsilon_q) d\epsilon_q, \quad (5.99)$$

где Γ_h — ширина промежуточной вакансии h^{-1} . В результате каскадного процесса возникают две оже-линии, энергии которых соответствуют закону сохранения энергии на обоих шагах распада. Вновь образованные дырки могут в свою очередь распадаться далее, если их энергия достаточна, образуя так называемое дерево распада. Такой процесс, если начинается с вакансии во внутренней оболочке, приводит к высокозарядному иону. Этот сложный процесс рассматривался со значительными упрощениями в [66].

Возможен также и процесс одновременного распада состояния с одной дыркой в состояние с тремя дырками и двумя частицами, при котором закон сохранения энергии выполняется только для начального и конечного состояния. В результате такого процесса высвобождающаяся энергия распределяется между двумя вылетающими электронами непрерывно [67]. Вклад этого процесса в ширину исходной вакансии равен вероятности возникновения конечного состояния вне зависимости от распределения энергии между частицами p и q :

$$\Delta\Gamma_{k,ijfpq} = 2\pi \left(\sum_p + \int_{\epsilon_p} d\epsilon_p \right) \times \\ \times \frac{\left| \langle kj | U | hp \rangle \right|^2 \left| \langle hf | U | iq \rangle \right|^2 \delta(\epsilon_k - \epsilon_i - \epsilon_j - \epsilon_f + \epsilon_p + \epsilon_q)}{(\epsilon_k - \epsilon_h - \epsilon_j + \epsilon_p)^2}. \quad (5.100)$$

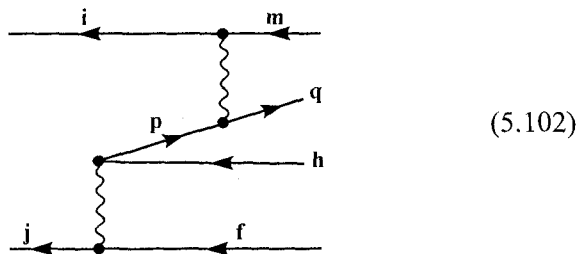
Подынтегральное выражение в этой формуле (без δ -функции) равно вероятности распада в единичный интервал кинетической энергии электрона p .

Возможен также переход из исходного двухдырочного состояния $i^{-1}j^{-1}$ в другое состояние $m^{-1}f^{-1}$ с одновременным удалением электрона из оболочки h в состояние континуума q [67, 68]. В этом случае энергия, высвобождающаяся при одновременном заполнении дырок i^{-1} и j^{-1} электронами m и f передается атомному электрону h , переходящему в континуум q . Вероятность такого перехода в единицу времени дается следующей формулой:

$$\Gamma_{ijq,mfh} = 2\pi \left| M_{ijq,mfh} \right|^2. \quad (5.101)$$

Здесь $M_{ijq, m/h}$ — матричный элемент взаимодействия между трехэлектронными состояниями. Многочастичная теория возмущений обычно применима к таким процессам, поскольку атомные электронные оболочки достаточно хорошо разделены по энергии и кулоновское взаимодействие относительно слабое. Следует отметить, что наинизшие диаграммы для амплитуды двойного оже-распада двухдырочного состояния появляются только во втором порядке теории возмущений, в то время как диаграммы распада каждой из дырок по схеме простого оже-распада — это диаграммы первого порядка. Поэтому в общем случае вклад двойного оже-распада в полную вероятность распада двухдырочного состояния невелик. Однако двойной оже-распад становится единственным каналом распада двухдырочного состояния, если энергии, высвобождаемой при переходе $i^{-1} \rightarrow m^{-1}$, недостаточно для удаления электрона из оболочки h , в то время как энергии, высвобождаемой при двухэлектронном переходе $i^{-1}j^{-1} \rightarrow m^{-1}f^{-1}$, для этого достаточно.

Одноэлектронный оже-распад двухдырочного состояния [70, 71], изображенный на следующей диаграмме, состоит из перехода дырки j^{-1} в состояние «две дырки—одна частица» $h^{-1}f^{-1}p$, то есть из виртуального оже-процесса и последующего перехода состояния $i^{-1}p$ в $m^{-1}q$:



Амплитуда этого процесса имеет вид:

$$M_{ij, m/hq}^{(1)}(E) = \left(\sum_p + \int_{\epsilon_p} d\epsilon_p \right) \frac{\langle jp | U | fh \rangle \langle ip | U | mq \rangle}{E + \epsilon_f - \epsilon_h + \epsilon_p} \times \delta(E - \epsilon_f - \epsilon_h - \epsilon_m + \epsilon_q), \quad (5.103)$$

где суммирование и интегрирование идет по дискретным и непрерывным состояниям p .

Процесс, изображенный на следующей диаграмме, аналогичен предыдущему, но второе взаимодействие происходит между двухдырочными состояниями без участия континуума:

$$(5.104)$$

Формула для амплитуды этого процесса имеет вид:

$$M_{ij, mfhq}^{(2)}(E) = \sum_r \frac{\langle jh|U|rq\rangle\langle ip|U|mq\rangle}{E - \epsilon_i - \epsilon_r - \epsilon_h + \epsilon_q} \times \delta(E - \epsilon_f - \epsilon_h - \epsilon_m + \epsilon_q). \quad (5.105)$$

Суммирование должно проводиться по всем возможным дырочным состояниям, но поскольку атомные оболочки хорошо разделены по энергиям, в сумму вносит вклад небольшое число слагаемых. В частности, если $r = j$, эта диаграмма представляет возбуждение электрона из оболочки h , аналогичное возбуждению спутника встряски.

Следующая диаграмма, отличающаяся от предыдущей перестановкой вершин, изображает виртуальный переход двух глубоких дырок $i^{-1}j^{-1}$ в две дырки с меньшей энергией связи $r^{-1}m^{-1}$, с последующим оже-распадом одной из них:

$$(5.106)$$

Вклад этой диаграммы в амплитуду оже-процесса двухдырочного состояния записывается в виде:

$$M_{ijq, mfh}^{(3)}(E) = \sum_r \frac{\langle ij|U|mr\rangle\langle rh|U|fq\rangle}{E - \epsilon_m - \epsilon_r} \times$$

$$\times \delta(E - \varepsilon_f - \varepsilon_h - \varepsilon_m + \varepsilon_q). \quad (5.107)$$

Кроме рассмотренных выше, следует учесть и диаграммы, отличающиеся перестановкой дырок в начальном и конечном состояниях. Полный набор таких диаграмм и формулы для расчета угловых частей приведены в [69, 70, 71].

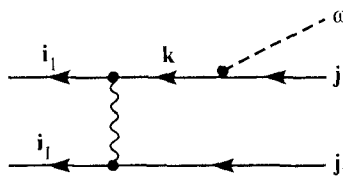
Одноэлектронный оже-распад внутренних двухдырочных состояний приводит к линиям в спектре с энергиями, большими чем у одиночной K -вакансии. Наряду с этим он открывает и другие возможности. Так, если обе начальные вакансии находятся в промежуточных подоболочках, то в результате распада более глубокая вакансия может несколько «углубиться», а наружная — «всплыть» [72]. Возможна и ситуация «встречного движения», когда изначально более мелкая вакансия углубится, а мелкая — всплывёт [73]. Двухвакантные состояния могут иметь и сателлиты [74]. Примером может служить диаграмма (5.106), в которой $i^{-1}j^{-1} = m^{-1}f^{-1}$.

Распады вакансий вследствие наличия между ними взаимодействия не обязательно должны быть либо Оже, либо радиационными. Они могут проходить с испусканием электронов и фотонов одновременно и называются радиационными полуоже-распадами (см., к примеру, [10]).

5.11. Однофотонный распад двухдырочных состояний

Взаимодействие между атомными электронами приводит также к одновременному распаду двух вакансий с испусканием одного фотона.

При распаде вакансий во внутренних оболочках энергия испускаемого фотона примерно равна сумме энергий обеих вакансий и, следовательно, велика. Поэтому можно, как и в п. 5.10, пользоваться теорией возмущений по межэлектронному взаимодействию. Амплитуда процесса $M_{j_1 j_2 i_1 i_2}$ представляется диаграммой



$$(5.108)$$

и еще тремя другими, где фотонная линия исходит из других дырочных линий диаграммы. Здесь энергия испускаемого фотона равна $\omega_{j_1 j_2 i_1 i_2} = E_{j_1 j_2} - E_{i_1 i_2}$. По промежуточным состояниям k , которые могут быть как дырочными, так и электронными, в выражении для амплитуды производится суммирование (и интегрирование). Вероятность (парциальная ширина) распада находится с помощью формулы, подобной (5.71):

$$\Gamma_{j_1 j_2 i_1 i_2}^{\gamma} = \frac{4}{3} \omega_{j_1 j_2 i_1 i_2} \alpha^3 \left| M_{j_1 j_2 i_1 i_2}^{\gamma} \right|^2. \quad (5.109)$$

Полная ширина однофотонного распада двухдырочного состояния $\gamma_{i_1 i_2}$ получается из парциальных $\Gamma_{j_1 j_2 i_1 i_2}^{\gamma}$ суммированием по j_1, j_2 с учётом закона сохранения энергии $\omega_{j_1 j_2 i_1 i_2} = E_{j_1 j_2} - E_{i_1 i_2}$.

Идеи о возможности существования такого распада высказывались еще в 30-х годах А. Зоммерфельдом, однако первые реальные вычисления были проведены лишь в 1977 г. (см. в [74]). Оказалось, что следует учесть все четыре диаграммы типа (5.108) и просуммировать по весьма широкому набору состояний k . Заметная роль большого числа состояний в сумме по k подчеркивает многоэлектронный характер процесса однофотонного распада двухвакантных состояний.

Оценки и вычисления показывают, что ширина $\Gamma_{j_1 j_2 i_1 i_2}^{\gamma}$, как правило, на шесть порядков меньше оже-ширины каждого из уровней i_1 и i_2 . Отношение $\Gamma_{j_1 j_2 i_1 i_2}^{\gamma}$ к удвоенной ширине радиационного распада колебалось от 0.002 до 0.47. В качестве примера приведем результаты для следующих распадов:

Ne^{2+} : распад $1s^{-2} \rightarrow 2s^{-1}2p^{-1}$, его ширина $\Gamma^{\gamma} = 1.3 \cdot 10^{-5}$ эВ,

Ar^{2+} : распад $2s^{-2} \rightarrow 3s^{-1}2p^{-1}$, его ширина $\Gamma^{\gamma} = 4.06 \cdot 10^{-5}$ эВ,

Xe^{2+} : распад $4d^{-2} \rightarrow 5s^{-1}5p^{-1}$, его ширина $\Gamma^{\gamma} = 0.43 \cdot 10^{-5}$ эВ.

Данные опыта по распаду в Ne показывают значение $1.4 \cdot 10^{-5}$ эВ, весьма близкое к приведенному выше расчетному.

Вероятность однофотонного распада значительно возрастает, если энергия фотона относительно мала. Уменьшение $\omega_{j_1 j_2 i_1 i_2}$ в (5.109) легко компенсируется увеличением амплитуды, в которую входят состояния с большим перекрытием волновых функций. Это может иметь место при распаде двухдырочных состояний в промежуточных оболочках. Причем одна из конечных ва-

кансий может быть и глубже, чем начальная [70,71], то есть имеет место либо «углубление», либо «встречное» движение вакансий. Распад двухвакантных состояний в промежуточных оболочках приводит к большому разнообразию в энергиях фотонов. В рассмотренном случае благородных газов — Ne, Ar, Kr — диапазон энергий $\omega_{j_1 j_2 l_1 l_2}$ изменяется от 1 до 60 Ry, а радиационных ширин — от $0.06 \cdot 10^{-7}$ до $227 \cdot 10^{-7}$ эВ. Результаты для Kr приведены в табл. 5.16 (CD, 503).

Таким образом, однофотонные распады в ионах с двумя и большим числом вакансий являются чисто корреляционными процессами, вероятность которых определяется межэлектронным взаимодействием и которые приводят к появлению значительного числа новых спектральных линий заметной интенсивности [10].

5.12. Угловая зависимость и спиновая поляризация оже-электронов

Возникновение анизотропии и спин-поляризации оже-электронов и фотоэлектронов определяется различием в симметрии операторов взаимодействия. Кулоновский оператор перехода в оже-процессе является скалярным в отличие от дипольного оператора взаимодействия электромагнитного излучения с веществом. Поэтому угловое распределение фотоэлектронов всегда асимметрично, в то время как угловая анизотропия оже-электронов возникает только, если исходная вакансия анизотропна [75]. Если вероятность нахождения вакансии j_k в каждом из состояний с магнитным квантовым числом m_k одинакова, то вакансию будем называть *сферически-симметричной*.

Если поток фотонов или заряженных частиц производит в мишени сферически-симметричные вакансии, то сферически-симметричным будет также и угловое распределение оже-электронов. Если же распределение вакансий асимметрично, то асимметричным будет и угловое распределение оже-электронов.

Различают два типа асимметричного распределения: *ориентацию* («*orientation*») и *установку* («*alignment*»). *Ориентацией* называют распределение, при котором заселенности состояний с противоположными по знаку магнитными квантовыми числами различны, а *установкой* — распределение, симметричное отно-

сительно знака магнитного квантового числа. Различие в заселенностях определяется модулем магнитного квантового числа вакансии. Из этого определения следует, что ориентация отлична от нуля, если полный момент дырки $j_i > 0$, а установка отлична от нуля, если $j_i > 1/2$.

Рассмотрим случай ионизации атома неполяризованным потоком фотонов. В этом случае осью квантования является направление потока фотонов, а распределение вакансий симметрично относительно плоскости, перпендикулярной к этому направлению. Поэтому ориентация отсутствует. Однако установка может быть отлична от нуля. Это отличие связано с тем, что вероятность фотоионизации зависит от абсолютной величины магнитного квантового числа. При ионизации K -оболочки возможно только одно значение модуля магнитного квантового числа $|m| = 1/2$ и установка отсутствует. Поэтому угловое распределение в оже-спектрах K -оболочки, возбуждаемых неполяризованным излучением, сферически-симметрично. Если начальным состоянием в оже-спектре является вакансия в p -оболочке, то установка отлична от нуля в $j = 3/2$ -компоненте. В этом случае угловая анизотропия возникает, если спин-орбитальное расщепление больше, чем ширина линии. Если начальным состоянием в оже-процессе будет вакансия в d -оболочке, то обе компоненты спин-дублета могут иметь отличную от нуля установку. Теоретическое описание угловой зависимости и спин-поляризации оже-спектров дано в работах [76—82].

Для количественного описания анизотропных распределений вакансии обычно используют аппарат статистических тензоров, определяемых ф-лой [78]:

$$\rho_{kk} = \sum_{mm'} (-1)^{2j'-2m'} [k] \times \\ \times \left\{ \begin{matrix} j & k & j' \\ -m & k & m' \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} j & j' & k \\ m & -m' & -k \end{matrix} \right\} (j \| \rho_k \| j'). \quad (5.110)$$

В рассматриваемом случае j совпадает с j' и равняется полному моменту вакансии после фотоионизации. Матрица плотности ρ нормируется на сечение фотоионизации (или ионизации электронным ударом):

$$\text{Tr}(\rho) = \sigma. \quad (5.111)$$

Тогда для статистического тензора нулевого порядка получаем:

$$\rho_{00}(jj) = \frac{\sigma}{[j]^{1/2}}. \quad (5.112)$$

Из аксиальной симметрии рассматриваемой задачи следует, что отличны от нуля только тензоры четного ранга, причем

$$\rho_{kk}(j, j) = \rho_{k0}(j, j) \delta_{k0}. \quad (5.113)$$

Это эквивалентно тому, что при ионизации неполяризованным излучением может быть получена установка, но не ориентация вакансий. Степень установки определяется параметрами:

$$A_k = \rho_{k0} / \rho_{00}, \quad (5.114)$$

$$k = 2, 4 \dots$$

В случае ионизации p -оболочки для компоненты $j_k = 1/2$ установка отсутствует, в то время как для $j_k = 3/2$ установка определяется ф-лой [78, 79]:

$$A_2 = \frac{\sigma(3/2, |1/2|) - \sigma(3/2, |3/2|)}{\sigma(3/2, |1/2|) + \sigma(3/2, |3/2|)}, \quad (5.115)$$

где $\sigma(j, m)$ — сумма сечений фотоионизации для состояния иона с дыркой, имеющей полный момент j и его проекции $+m$ и $-m$.

При ионизации d -оболочки обе спин-орбитальные компоненты могут иметь установку, отличную от нуля, и угловое распределение L -спектров Оже не будет сферически симметричным. Для случая $l_k = 2, j_k = 3/2$ установка также дается ф-лой (5.115).

В случае $l_k = 2, j_k = 5/2$, кроме A_2 , имеющего вид [77]:

$$A_2 = \frac{2}{7} \frac{4\sigma(5/2, |1/2|) + \sigma(5/2, |3/2|) - 5\sigma(5/2, |5/2|)}{\sigma(5/2, |1/2|) + \sigma(5/2, |3/2|) + \sigma(5/2, |5/2|)}, \quad (5.116)$$

возникает также компонента установки четвертого порядка

$$A_4 = \frac{3}{7} \frac{2\sigma(5/2, |1/2|) - 3\sigma(5/2, |3/2|) + \sigma(5/2, |5/2|)}{\sigma(5/2, |1/2|) + \sigma(5/2, |3/2|) + \sigma(5/2, |5/2|)}. \quad (5.117)$$

Если энергия фотоэлектрона существенно превосходит энергию оже-электронов, то можно считать, что оже-процесс происходит после фотоионизации. Обозначим через J_i , J_f и j полные моменты однократно ионизованного атома, двукратно ионизованного атома и оже-электрона соответственно. Из сохранения момента количества движения и четности при оже-процессе следует, что полное число возможных парциальных волн оже-электронов ограничено величиной $2J_i + 1$, если $J_i \leq J_f$, и ограничено $2J_f + 1$, если $J_i > J_f$.

Для того чтобы сделать более понятным описание оже-процесса в приближении сильного спин-орбитального взаимодействия, рассмотрим конкретный переход $N_4 \rightarrow O_{2,3}O_{2,3}$ в ионе Xe:

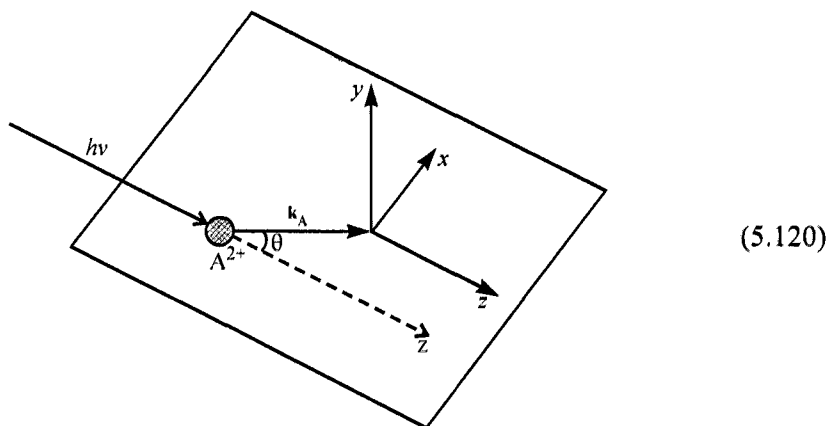
$$Xe[4d]D_{3/2} \rightarrow Xe[5p^2]^3 P_1 + \begin{cases} \varepsilon s_{1/2}(V_1, \delta_1) \\ \varepsilon d_{3/2}(V_2, \delta_2), \\ \varepsilon d_{5/2}(V_3, \delta_3) \end{cases} \quad (5.118)$$

где введены обозначения V_i и δ_i — кулоновских матричных элементов и фаз электронов в сплошном спектре для каждого из каналов. Отметим, что V_i и δ_i — величины, определяющие скорости оже-распада и угловое распределение оже-электронов. Если измеряются только относительные интенсивности и угловые распределения, то число независимых переменных каждого типа уменьшается на единицу и можно ввести обозначения:

$$v_{1,3} = \frac{V_1}{V_3}, \quad \delta_{1,3} = \delta_1 - \delta_3, \quad v_{2,3} = \frac{V_2}{V_3}, \quad \delta_{2,3} = \delta_2 - \delta_3. \quad (5.119)$$

В приближении LS -связи остается только d -волна, $\delta_{2,3} = 0$ и величина $v_{2,3}$ определяются только угловыми частями волновых функций.

Для рассмотрения кинематики процесса в случае неполяризованного излучения или круговой поляризации введем следующую систему координат [81]:



(5.120)

Плоскость проходит через направления фотона и оже-электрона. Система координат для описания спиновой поляризации выбрана так, что направление оси z совпадает с направлением фотона, а ось y перпендикулярна плоскости.

В общем случае угловая зависимость оже-спектров дается формулой [79]

$$W_e(\theta) = \frac{W_e}{4\pi} \left(1 + \sum_{k=2,4,\dots} \alpha_k A_{k0} P_k(\cos \theta) \right), \quad (5.121)$$

где $P_k(\cos \theta)$ — полиномы Лежандра, а коэффициенты α_k даются формулой [80]

$$\alpha_k = \frac{1}{W} (-1)^{J+J_f-1/2} [J]^{1/2} \sum_{l,l',j,j'} [ll'jj'k]^{1/2} (-1)^{l'-l} \times \\ \times \begin{Bmatrix} l & l' & k \\ 0 & 0 & 0 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} J & J & k \\ j & j' & J_f \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} j & j' & k \\ l' & l & 1/2 \end{Bmatrix} V_{lj} V_{l'j'}^*. \quad (5.122)$$

Спиновая поляризация оже-электрона в системе координат, связанной с его направлением движения определяется тремя следующими ф-лами [79]:

$$P_z(\theta) = \frac{A_{10}(\beta_1 + \gamma_1 P_2(\cos \theta))}{1 + \sum_{k=2,4} A_{k0} \alpha_k P_k(\cos \theta)}; \quad (5.123)$$

$$P_y(\theta) = \frac{\sum_{k=2,4} A_{k0} \xi_k \sin 2\theta}{1 + \sum_{k=2,4} A_{k0} \alpha_k P_k(\cos \theta)}; \quad (5.124)$$

$$P_x(\theta) = \frac{\frac{3}{4} A_{10} \gamma_1 \sin 2\theta}{1 + \sum_{k=2,4} A_{k0} \alpha_k P_k(\cos \theta)}. \quad (5.125)$$

Ориентация A_{10} и установка A_{20} являются параметрами, характеризующими ион. Ориентация иона отлична от нуля только при использовании поляризованного излучения, в то время как отличная от нуля установка возможна и при использовании для фотоионизации неполяризованного излучения.

Параметры α_k , β_1 , γ_1 и ξ_k называются *внутренними*. Параметры α_k определяют угловое распределение оже-электронов; ξ_k характеризуют динамическую спин-поляризацию, т. е. поляризацию, которая возникает вследствие интерференции между двумя парциальными волнами. Параметры β_1 и γ_1 характеризуют так называемую *переданную спиновую поляризацию*, т. е. переданную вследствие ориентации иона поляризованным излучением. Эти параметры даются следующими тремя ф-лами [80, 81]:

$$\xi_k = \frac{1}{W} (-1)^{J+J_f-1/2} 4\sqrt{3}[J]^{1/2} \sum_{l, l', j, j'} [ll'jj'k]^{1/2} (-1)^{1.2+l'-j'} \times \\ \times \left\{ \begin{matrix} l & l' & k \\ 0 & 0 & 0 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} J & J & k \\ j & j' & J_f \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} l & l' & k \\ 1/2 & 1/2 & 1 \\ j & j' & k \end{matrix} \right\} \text{Im}(V_{lj} V_{lj'}^*); \quad (5.126)$$

$$\beta_1 = \frac{1}{W} (-1)^{J+J_f+1/2} \sqrt{2}[J]^{1/2} \sum_{l, jj'} [jj']^{1/2} \times \\ \times \left\{ \begin{matrix} J & J & 1 \\ j & j' & J_f \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} j & j' & 1 \\ 1/2 & 1/2 & l \end{matrix} \right\} V_{lj} V_{lj'}^*; \quad (5.127)$$

$$\gamma_1 = \frac{1}{W} (-1)^{J+J_f-1/2} [J]^{1/2} \sum_{ll', jj'} [jj']^{1/2} \frac{(l-j)[j] + (l'-j')[j'] + 2}{\sqrt{3}} \times \\ \times \left\{ \begin{matrix} J & J & 1 \\ j & j' & J_f \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} j & j' & 1 \\ 1/2 & 1/2 & 0 \end{matrix} \right\} V_{lj} V_{lj'}^*, \quad (5.128)$$

где J и J_f — полные угловые моменты промежуточного и конечного ионных состояний; l и j — орбитальный и полный моменты оже-электрона; V_{lj} — приведенные кулоновские матричные элементы с учетом комплексной фазы. Кроме того, введено обозначение

$$W = \sum_{lj} V_{lj}^2. \quad (5.129)$$

5.13. Распад вакансий эндоэдральных атомов

Как уже отмечалось в п. 1.13, в последние годы внимание исследователей привлекают так называемые эндоэдральные атомы, т. е. атомы A , помещенные внутри оболочки F , состоящей из атомов углерода, размеры которой больше атомного радиуса. В качестве F обычно рассматривается наиболее симметричная система C_{60} и один атом A внутри, в центре.

В п. 1.13, 1.14 мы показали, как можно учесть влияние фуллереновой оболочки на фотоионизацию атома A . Здесь мы рассмотрим влияние F на распад вакансии A [83]. Каналы распада эндоэдральных вакансий будем различать по степени участия в них электронов фуллера. А именно, вакансия в эндоэдральном атоме может заполняться электронами того же атома или электронами валентной оболочки фуллера, что можно назвать *атомным* или *фуллереновым распадом* соответственно. Если исходная атомная вакансия достаточно глубокая, она может заполниться внутренними электронами атома углерода-фуллера, что назовем *молекулярным распадом*.

Если атомная вакансия распадается с испусканием фотона, фуллереновая оболочка может поглотить этот фотон, испустив фотон такой же энергии. Таким образом, распад вакансии происходит по двум каналам. Первый — это рекомбинация с излучением фотона изолированным атомом. Второй — это двухступенчатый процесс, происходящий через электронное возбуждение

фуллереновой оболочки. Амплитуды этих каналов интерферируют аналогично тому, что имеет место для изолированных атомов (см. разд. 1.14 и 1.5), где вероятность распада может меняться от сильного увеличения до почти полного подавления. То же самое может получиться и при оже-распаде: взаимодействие между электронами, внутренними и внешними, может измениться из-за виртуальных возбуждений электронов C_{60} , что приводит к замене чистого кулоновского взаимодействия V на эффективное взаимодействие $\Gamma(\omega)$ (см. (1.40)), зависящее от переданной энергии ω . Различие между V и $\Gamma(\omega)$ определяется внутри- и межоболочечными эффектами.

Амплитуда радиационного распада может быть представлена диаграммами, аналогичными диаграммам для радиационного распада изолированного атома:

The diagrammatic equation (5.131) shows the decomposition of a radiationless transition in a C_{60} molecule. On the left, a transition from state i to state f is represented by a solid line with a shaded circular interaction region, labeled $D_{if@C_{60}}(\omega_{if})$. This is equal to the sum of two terms on the right. The first term is a direct transition d_{if} , represented by a solid line with a small black dot. The second term is an indirect transition $D_{C_{60}}(\omega_{if})$, represented by a solid line with a loop. The loop consists of a wavy line (photon) and a shaded circular region (electron-electron interaction). The loop is labeled with $\mathbf{k}$ and j , and the interaction is labeled $\gamma_{if@C_{60}}(\omega_{if})$.

$$D_{if@C_{60}}(\omega_{if}) = d_{if} + D_{C_{60}}(\omega_{if}) \quad (5.131)$$

Возможно существенное упрощение этого выражения, такое же как и в случае фотоионизации, основанное на приближении (5.131). Мы полагаем, что радиус фуллерена много больше толщины его оболочки и размера атома. Это приводит к соотношению, аналогичному (1.114) для амплитуды радиационного распада. В результате вероятность этого распада $\Gamma_{\gamma,if}^{C_{60}}$ для атомного перехода $i \rightarrow f$ выражается через такие же параметры, как и в случае фотопоглощения эндоэдрального атома (1.115) — амплитуду $\Gamma_{\gamma,if}^A$ и фактор $G(\omega)$:

$$\Gamma_{\gamma,if}^C = \Gamma_{\gamma,if}^A \left| 1 - \frac{\alpha_F(\omega_{if})}{R^3} \right|^2 \equiv |G_F(\omega)|^2 \Gamma_{\gamma,if}^A. \quad (5.132)$$

Обозначения те же, что в (1.115).

Для C_{60} фактор $G(\omega)$ представлен на Рис. 2.10_С₆₀_g1 (CD, 233) и Рис. 2.10_С₆₀_g2 (CD, 234). Особый интерес представляет распад вакансии субвалентной s -оболочки атома благородного газа. Такие вакансии распадаются в атомах только радиационно, поскольку их оже-распад энергетически запрещен. Однако энер-

гии, выделяющейся при внутриатомном радиационном распаде, достаточно для удаления электрона из оболочки C_{60} . В результате вероятность распада сильно увеличивается, как мы увидим, на 4—6 порядков.

Оже-распад можно представить, по аналогии с (5.131), как испускание «фотона» при переходе $i \rightarrow f$ с последующим его поглощением и ионизацией электронной оболочки C_{60} :

$$(5.133)$$

Сначала пренебрежем вторым членом в правой части (5.133). Тогда вероятность оже-распада $\Gamma_{\text{Оже}, if}^C$, обусловленная переходом $i \rightarrow f$, может быть выражена через атомную радиационную ширину $\Gamma_{\gamma, if}^A$ и атомное сечение фотоионизации $\sigma_c(\omega_{if})$ электронной оболочки C_{60} фотоном энергии ω_{if} [83]:

$$\Gamma_{\text{Оже}, if}^C = \Gamma_{\gamma, if}^A \frac{3}{8\pi} \left(\frac{c}{\omega_{if}} \right)^4 \frac{\sigma_c(\omega_{if})}{R^6} \equiv \Gamma_{\gamma, if}^A / \eta_{AR}(\omega). \quad (5.134)$$

Оценка дает, что все величины, входящие в (5.134) за исключением $\Gamma_{\gamma, if}^A$, образуют очень большой множитель — порядка $10^4 \div 10^6$. Используя (5.131) и (5.133), можно рассчитать так называемый выход флюоресценции $J_R(\omega_{if})$, т. е. отношение вероятности излучения к полной ширине:

$$J_R(\omega_{if}) = \frac{8\pi}{3} \left(\frac{\omega_{if}}{c} \right)^4 \frac{R^6}{\sigma_c(\omega_{if})} \left| 1 - \frac{\alpha_c(\omega_{if})}{R^3} \right|^2. \quad (5.135)$$

Также представляет интерес оценить, насколько виртуальные возбуждения электронов C_{60} могут изменить взаимодействия между атомными электронами, участвующими в переходе с уровня f на уровень i с участием электронов C_{60} . Как было пока-

зано [83], соответствующие поправки определяются вторым слагаемым следующего выражения:

$$\Gamma_{\text{Au}, i \rightarrow f k j}^{\text{C}} = \Gamma_{\text{Au}, i \rightarrow f k j}^{\text{A}} \times \left| 1 - \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{3}{2}} \frac{c^2}{\omega_{if}} \frac{\alpha_c(\omega_{if})}{R^6} \left(\frac{\Gamma_{\gamma, if}^{\text{A}}}{\Gamma_{\text{Au}, i \rightarrow f k j}^{\text{A}}} \right)^{1/2} [\sigma_j^{\text{A}}(\varepsilon_k)]^{1/2} \right|^2. \quad (5.136)$$

Оценив эти поправки, легко показать, что они меньше единицы и ими можно пренебречь.

Кривая $\eta_{PR}(\omega)$ была получена в [83]. Беря энергии рассмотренных в качестве примера переходов $2s - 2p$ в Ne, $3s - 3p$ в Ag, $4s - 4p$ в Kr и $5s - 5p$ в Xe, можно получить соответствующие величины η_{PR} , которые достаточно велики и меняются от 3.5 до 6.2. Она изображена на рис. 5.15 (CD, 492).

Отношение оже-ширины к ширине радиационного распада, согласно ф-ле (5.131), дается η_{PR} , представленной на рис. 5.16 (CD, 492) [83]. Благодаря этому фактору вероятности распада увеличиваются в $2 \cdot 10^4 \div 4 \cdot 10^5$ раз, принимая значения, соответствующие нормальным оже-распадам, как если бы они не были запрещены законом сохранения энергии.

Отметим, что если при безрадиационном распаде в эндоэдральном атоме испускается электрон с энергией $\varepsilon \leq 70$ эв, вероятность такого процесса может существенно измениться из-за отражения этого электрона потенциалом оболочки фуллерена. В результате, вероятность распада с испусканием электрона с угловым моментом l приобретёт множитель $F_l^2(k)$, даваемый (1.106), где k — импульс вылетающего электрона.

Мы установили сильные изменения вероятностей распада и исследовали влияния открытия новых каналов. Как и в случае фотоионизации, результаты выражены через экспериментально наблюдаемые характеристики фуллерена — его сродство к электрону и сечение фотоионизации в приближении, что радиус фуллерена существенно больше радиуса атома и толщины фуллереновой оболочки.

Литература

1. *Amusia M. Ya., Kazachkov M. P., Cherepkov N. A., Chernysheva L. V.* // Phys. Lett. A, 1972. Vol. 39, N 2. P. 93—94.
2. *Svensson S., Eriksson B., Martensson N., Wendin G., Gelius U.* // J. Electron Spectr. Relat. Phenom. 1988. Vol. 47. P. 327—384.
3. *Svensson S., Martensson N., Gelius U.* // Phys. Rev. Lett. 1987. Vol. 58. P. 2639—2641.
4. *Krause M. O., Whitfield S. B., Caldwell C. D., Wu J.-Z., Van der Meulen P., de Lange C. A., Hansen R. W. C.* // J. Electron Spectr. Relat. Phenom. 1992. Vol. 58. P. 79—104.
5. *Pahler M., Caldwell C. D., Schaphorst S. J., Krause M. O.* // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 1993. Vol. 26. P. 1617—1625.
6. *Kikas A., Osborne S. J., Ausmees A., Svensson S., Sairanen O.-P., Aske-la S.* // J. Electron Spectr. Relat. Phenom. 1996. Vol. 77. P. 241—266.
7. *Майер И.* Избранные главы квантовой химии. Доказательства теорем и вывод формул. М.: Бином, 2006. 384 с.
8. *Amusia M. Ya., Cherepkov N. A., Chernysheva L. V., Shapiro S. G.* // Phys. Lett. A. Vol. 1974. Vol. 46, N 6. P. 387—388.
9. *Amusia M. Ya., Амусья М. Я., Кулин В. А., Лу И. С.* // Оптика и спектроскопия. 1985. Т. 59, № 2. С. 261—264.
10. *Amusia M. Ya., Lee I. S.* Atomic Physics 13 Ed. H. Walters, T. W. Hansch, B. Neizerk. AIP Conf. Proceed. New York, 1993. Vol. 275. P. 375—387.
11. *Amusia M. Ya., Cherepkov N. A.* // Case Stud. Atom. Phys. North-Holland, Publishing Company. 1975. Vol. 5, N 2. P. 47—179.
12. *Chernysheva L. V., Yakhontov V. L.* // Computer Phys. Comm.. 1999. Vol. 119. P. 232—255.
13. *Kovalcyk S. P., Ley L., Martin R. L., Mcfeely F. R., Shirley D. A.* // Faraday Discuss. Chem. Soc. 1975. Vol. 60. P. 7—17.
14. *Wendin G.* // Struct. Bond. 1981. Vol. 45. P. 1—123.
15. *Yarzhemsky V. G., Teterin Yu. A., Sosulnikov M. I.* // J. Electron. Spectr. Relat. Phenom. 1992. Vol. 59. P. 211—222.
16. *Tagliaferri A., Braicovich L., van der Laan G. et al.* // Phys. Rev. B. 1999. Vol. 60. P. 5728—5736.
17. *March N. H., Young W. H., Sampanthar S.* // Many-body problem in quantum mechanics. Cambridge University Press. 1967.
18. *Амусья М. Я., Хейфец А. С.* // ЖЭТФ. 1984. Т. 86, № 4. С. 1217—1226.
19. *Галицкий В. М., Мигдал А. Б.* // ЖЭТФ. 1958. Vol. 34. С. 139—150.
20. *Абрикосов А. А., Горьков Л. П., Дзялошинский И. Е.* Методы квантовой теории поля в статистической физике. М.: Изд-во МГУ, 2006.
21. *Kheifets A. S., Amusia M. Ya., Yarzhemsky V. G.* // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 1985. Vol. 18. L343—L350.
22. *Yarzhemsky V. G., Armen G. B., Larkins F. P.* // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 1993. Vol. 26. P. 2785—2794.

23. Юцис А. П., Левинсон И. Б., Ванагас В. В. Математический аппарат теории момента количества движения. Вильнюс: Госполитнаучиздат, 1960. 243 с.
24. Judd B. R. Second quantization and atomic spectroscopy. Baltimore: John Hopkins, 1967. 62 p.
25. Lindgren I., Morrison J. Atomic many-body theory. Berlin: Springer, 1982. 254 p.
26. Yarzhevsky V. G., Nefedov V. I., Trzhaskovskaya M. B., Band I. M., Szargan R. // J. Electron Spectr. Relat. Phenom. 2002. Vol. 123. P. 1—10.
27. Walters D. L., Bhalla C. P. // Phys. Rev. A. 1971. Vol. 3. P. 1919—1927.
28. Manne R., Eberg T. // Chem. Phys. Lett. 1970. Vol. 7. P. 282—284.
29. Tulkki J., Eberg T., Mantykentta A., Aksela H. // Phys. Rev. A. 1992. Vol. 43. P. 1357—1366.
30. Armen G. B., Larkins F. P. // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 1991. Vol. 24. P. 741—759.
31. Armen G. B., Larkins F. P. // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 1992. Vol. 25. P. 931—947.
32. Albiez A., Toma M., Weber W., Mehlhorn W. Z. // Phys. D. 1990. Vol. 16. P. 97—106.
33. Shirley D. A. // Phys. Rev. B. 1987. Vol. 5. P. 4709—4714.
34. Seah M. P., Gilmore I. S. // Phys. Rev. B. 2006. Vol. 73. At. 174113. P. 1—10.
35. Doniah S., Sunjic M. // J. Phys. C. 1970. Vol. 3. P. 285—291.
36. Hufner S., Wertheim G. K. // Phys. Rev. B. 1975. Vol. 11. P. 678—683.
37. Яржемский В. Г., Колотыркин И. Я., Каплан Г. И., Ждан П. А. // Поверхность. 1990. № 2. С. 141—146.
38. Yarzhevsky V. G., Reich T., Chernysheva L. V. et al. // J. Electron Spectr. Relat. Phenom. 1996. Vol. 77. P. 15—24.
39. Шервуд П. М. А. // Анализ поверхности методами оже- и рентгеноэлектронной спектроскопии / Под. ред. Д. Бриггса и М. П. Сиха. М.: Мир. 1987. С. 497—529.
40. Glans P., LaVilla R. E., Ohno M. et al. // J. Phys. Rev. A. 1994. Vol. 47. P. 1539—1542.
41. Karim K. R., Chen M. H., Craseman B. // Phys. Rev. A. 1984. Vol. 29. P. 2605—2610.
42. Yarzhevsky V. G., Kheifets A. S., Armen G. B., Larkins F. P. // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 1995. Vol. 28. P. 2105—2112.
43. Yarzhevsky V. G., Larkins F. P. // J. Electron Spectr. Relat. Phenom. 1998. Vol. 96. P. 149—156.
44. Yarzhevsky V. G., Larkins F. P. // Eur. Phys. J. D. 1999. Vol. 5. P. 179—184.
45. Yarzhevsky V. G., Nefedov V. I., Amusia M. Ya., Chernysheva L. V. // Surf. Rev. Lett. 2002. Vol. 9. P. 1209—1212.
46. Amusia M. Ya., Lee I. S., Wehlitz R., Becker U. // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 1993. Vol. 26. P. 41—46.

47. Ueda K., Kitajima M., De Fanis A. et al. // Phys. Rev. Lett. 2003. Vol. 90. At. 153005. P. 1—4.
48. Svennson S., Martensson N., Basilier E., Malmquist P. A., Gelius U., Siegbahn K. // Phys. Scripta. 1976. Vol. 14. P. 141—147.
49. Ohno M., Wendin G. Z. // Phys. D. 1987. Vol. 5. P. 233—240.
50. Boring M., Cowan R. D., Martin R. L. // Phys. Rev. B. 1981. Vol. 23. P. 445—448.
51. Яржемский В. Г., Тетерин Ю. А., Тетерин А. Ю., Амусья М. Я., Нефедов В. И. // Поверхность Рентгеновские нейтронные и синхротронные исследования. 2005. № 6. С. 3—8.
52. Krause M. O., Carlson T. A., Moddeman W. E. // J. Phys. (Paris). 1971 Vol. 32. P. C4-139—C4-144.
53. Huang K. N. // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 1978. Vol. 11. P. 787—795.
54. Bhalla C. P. // Phys. Lett. A. 1973. Vol. 44. P. 103—104.
55. Kelly H. P. // Phys. Rev A. 1975. Vol. 11. P. 556—565.
56. Howat G., Eberg T., Goscinski O. // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 1978. Vol. 11. P. 1575—1588.
57. Chen M. H., Larkins F. P., Crasemann B. // Atomic. Data. Nucl. Data Tables. 1990. Vol. 45. P. 1—205.
58. Yarzhemsky V. G., Sgamellotti A. // J. Electron Spectr. Relat. Phenom. 2002. Vol. 125. P. 13—24.
59. Lohman B., Fritzsche S. // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 1996. Vol. 29. P. 5711—5723.
60. Saha H. P. // Phys. Rev. A. 1994. Vol. 49. P. 894—898.
61. Caldwell C. D., Krause M. O. // Phys. Rev. A. 1993. Vol. 47. P. R759—R762.
62. Becker U., Wehlitz R. // J. Electron Spectr. Relat. Phenom. 1994. Vol. 67. P. 341—361.
63. Yarzhemsky V. G., Amusia M. Ya., Chernysheva L. V. // J. Electron Spectr. Relat. Phenom. 2002. Vol. 127. P. 153—159.
64. Kaneyasu T., Hikosaka Y., Shigemasa E. et al. // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 2007. Vol. 40. P. 4047—4060.
65. Hikosaka Y., Aoto T., Lablanquie P. et al. // Phys. Rev. Lett. 2006. Vol. 97. At. 053003. P. 1—4.
66. Kochur A. G., Sukhorukov V. L. // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 1996. Vol. 29. P. 3587—3598.
67. Amusia M. Ya., Lee I. S., Kilin V. A. // Phys. Rev. A. 1992. Vol. 45. P. 4576—4587.
68. Амусья М. Я., Килин В. А., Ли И. С. // ЖТФ. 1984. Т. 54. № 5. С. 990—992.
69. Amusia M. Ya., Lee I. S. // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 1991. Vol. 24. P. 2617—2632.
70. Амусья М. Я., Килин В. А., Колесникова А. Н., Ли И. С. // Письма в ЖТФ. 1984. Т. 10, № 17. С. 1029—1033.
71. Амусья М. Я., Килин В. А., Колесникова А. Н., Ли И. С. // Письма в ЖТФ. 1985. Т. 11, № 6. С. 343—346.

72. Амусья М. Я., Кулин В. А., Колесникова А. Н., Лу И. С. // Письма в ЖТФ. 1987. Т. 57, № 7. С. 1246—1254.
73. Amusia M. Ya., Lee I. S. // Physica Scripta. 1992. Vol. 41. P 3—27.
74. Амусья М. Я., Лу И. С. // ЖЭТФ. 1977. Т. 73, № 2(8). С. 430—437.
75. Flugge S., Mehlhorn W., Schmidt V. // Phys. Rev. Lett. 1972. Vol. 29. P. 7—9.
76. McFarlane S. C. // J. Phys. B: Atom. Molec. Opt. Phys. 1972. Vol. 5. P. 1906—1915.
77. Cleff B., Mehlhorn W. // J. Phys. B: Atom. Molec. Opt. Phys. 1974. Vol. 7. P. 593—604.
78. Berezhko E. G., Kabachnik N. M. // J. Phys. B: Atom. Mol. Opt. Phys. 1977. Vol. 10. P. 2467—2477.
79. Kabachnik N. M., Sazhina I. P. // J. Phys. B: Atom. Mol. Opt. Phys. 2002. Vol. 35. P. 3591—3598.
80. Lohman B., Hergenhahn U., Kabachnik N. M. // J. Phys. B: Atom. Mol. Opt. Phys. 1993. Vol. 26. P. 3327—3338.
81. Kabachnik N. M., Sazhina I. P. // J. Phys. B: Atom. Mol. Opt. Phys. 1984. Vol. 17. P. 1335—1342.
82. Balashov V. V., Grum-Grzhimailo A. N., Kabachnik N. M. // Polarisation and correlation phenomena in atomic collisions. A practical theory course. Springer. 2000.
83. Amusia M. Ya., Baltenkov A. S. // Phys. Rev. A. 2006. Vol. 73. At. 063206. P. 1—7.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей книге собраны результаты вычислений сечений и вероятностей широкого круга атомных процессов с участием фотонов и электронов. Приведены:

- а) полные и парциальные сечения фотопоглощения,
- б) дипольные и недипольные параметры анизотропии фотоэлектронов,
- в) сечения упругого рассеяния медленных электронов и позитронов,
- г) обобщённые силы осцилляторов возбуждений дискретных и сплошного спектров,
- д) сечения комптоновского рассеяния с ионизацией или возбуждением,
- е) данные оже- и радиационных распадов по образующимся в этих процессах вакансиям.

В качестве мишеней фигурируют атомы, относящиеся ко всем группам Периодической системы элементов Менделеева. В ряде случаев рассматриваются также и некоторые ионы — положительные и отрицательные — целого ряда атомов. В качестве примеров приводятся данные для эндодральных атомов, т. е. атомов, помещённых в оболочку фуллерена C_{60} .

Для наибольшего числа атомов проведены расчёты сечений фотоионизации, для наименьшего — приведены данные по сложным оже-распадам вакансий. Количество рассмотренных примеров определяют как трудоёмкость расчёта процесса, достигнутая и оцениваемая нами степень его автоматизации и необходимость в соответствующих массовых данных. С разной степенью подробности освещаются и теоретические подходы, использованные в расчётах, в основном в зависимости от того, в какой мере и степени тот или иной процесс или характеристика обсуждаются в литературе.

В расчётах в качестве простейшего было принято одноэлектронное приближение Хартри—Фока (ХФ), а для неучтённого в его рамках межэлектронного взаимодействия использовалось в основном приближение случайных фаз с обменом (ПСФО) и его различные модификации. Ряд результатов получен с помощью многочастичной теории возмущений (МТВ). Используемые вычислительные программы описаны и частично приведены в [АЧ]. Однако с момента публикации этой книги прошло заметное время и содержащиеся в ней программы существенно модифицированы и дополнены. Эти изменения учитывают, в том числе, и совершенствование вычислительных машин, в первую очередь персональных, вследствие увеличения скорости операций и объёма памяти — оперативной и дисковой. В результате, появилась возможность учитывать значительно большее число взаимодействующих электронов.

При проведении массовых расчётов важным является контроль точности получаемых результатов. Мы имеем в виду величину чисто математической погрешности, неизбежной при проведении конкретных вычислений в рамках выбранной физической модели либо подхода. Надёжность численного результата контролируется не только проверкой задания исходных данных, но и ростом числа точек, в которых находятся волновые функции при решении исходных уравнений ХФ, и числа точек по энергии в конечных суммах, которыми заменяются интегралы по возбуждениям в сплошном спектре с бесконечным верхним пределом.

Удобной проверкой численной точности расчёта сечений фотоионизации — полных и парциальных, дифференциальных по углу испускания фотоэлектрона служит согласие результатов расчётов в формах «длины» и «скорости» (1.60). Результаты должны совпадать как с точными волновыми функциями в начальном и конечном состояниях, так и в рамках ПСФО [АМ]. В рамках МТВ, ХФ приближения и различных обобщений ПСФО результаты в формах «длины» и «скорости» могут различаться. Заметим, что совпадение результатов в формах «длины» и «скорости» не означает высокую точность выбранного приближения в смысле близости с данными надёжных, проверенных экспериментов, равно как различие не означает, что принятое приближение плохо. К примеру, обладающий весьма низкой точностью в описании эксперимента локальный одноэлектронный потенциал, одинаковый для атомных и вылетающих элект-

ронов, приводит к совпадению результатов расчета в формах «длины» и «скорости», но сильному отличию от эксперимента.

Сказанное в предыдущем абзаце справедливо и для обобщённых сил осциллятора (ОСО), для которых операторы в формах «длины» и «скорости» записываются в виде (3.56) и (3.57) соответственно. Мы считали разницу в результатах в пределах 2—3 % удовлетворительной, и в этом случае приводили лишь одно, усреднённое, значение. Большее различие свидетельствует обычно о том, что вклады не всех электронных подболочек и переходов из них учтены. Это, как правило, вызвано в свою очередь ограничениями наших вычислительных возможностей.

Существенной проверкой для полных сечений фотопоглощения и ОСО, полученных с точными волновыми функциями, является дипольное «правило сумм» (см. к примеру, [АМ]). Для сечения фотоионизации оно имеет вид (1.7). Заметим, что оно справедливо не только для точных волновых функций, но и в ПСФО. В рамках МТВ, ХФ-приближение и в различных обобщениях ПСФО левая часть в (1.7) не совпадает, вообще говоря, с полным числом электронов в атоме. Чтобы применять правило сумм для проверки вычислительной точности, надо вычислять сечение вплоть до очень высоких значений энергии. Для приближённой оценки этого не требуется: правило сумм приближённо выполняется для большинства атомных подболочек, даже если ограничиться областью энергий, не намного превосходящих положение максимума в сечении фотопоглощения данной подболочки.

Правило сумм, аналогичное (1.7), справедливо и для ОСО (3.65) при любых q :

$$\sum_{f,i} G_{fi}(\omega, q) \equiv Q(q) = N,$$

где суммирование по f включает дискретные возбуждения и интегрирование по сплошному спектру, а суммирование по i содержит лишь данные по электронным занятым состояниям.

Отметим, что, поскольку, согласно определению ОСО, $Q(0) = N$, в ноль должны обращаться суммы ОСО любой n -й производной по q в нуле: $Q^{(n)}(q) (q = 0) = 0$. Пока такая проверка не проводится, хотя первая производная ОСО по q изучалась давно (см., к примеру, [1] где изучен случай He).

Проверками точности вычислений служит также достигаемая близость к надёжно установленным экспериментальным результатам. Здесь, однако, следует иметь в виду, что приведённые в книге результаты получены с использованием наилучших теоретических подходов, совместимых с идеей проведения массовых расчётов. Сами по себе эти подходы вовсе не гарантируют согласия с экспериментом. Наоборот, надёжно установленное отклонение между приведенными в настоящей книге расчётными и опытными данными должно привлечь внимание обеих заинтересованных сторон — теоретиков и экспериментаторов. Это отношение может служить доказательством ограниченности и недостаточности использованного теоретического подхода или наличия ошибки, в первую очередь — систематической. Как заинтересованная в правильности расчётов сторона, отмечаем, что обнаружение различия теории — эксперимента совсем не столь редко обнаруживает погрешность в эксперименте. Так, сравнительно недавно рассчитанное в рамках используемых в данной книге приближений сечение фотоионизации $4d$ -подоболочки иода [2] в три раза больше, чем принятое в литературе значение. Последовавшие проверочные измерения [3] подтвердили правильность расчёта, сохранив тем не менее некоторые различия между результатами расчёта и опыта, что будет способствовать, надеемся, совершенствованию методов расчёта. Это — отнюдь не единственный случай.

В перспективе, в проблеме сбора и хранения данных мы видим, наряду с созданием базы результатов вычислений, представленных в данной книге, ещё и такое развитие техники расчётов, которое сделает возможным, при задании названия атома и при указании представляющей интерес характеристики или сечения процесса, вычислить все необходимые данные в рамках предварительно разработанного и выбранного приближения, к примеру ПСФО, представив их в виде таблиц или рисунков, притом — за секунды. Пока такая программа далека от реальности, но темп совершенствования вычислительных машин необычайно быстр, так что указанный подход заслуживает внимания. Отметим, что увеличение быстродействия и объёма памяти персональных компьютеров сделает возможным получение данных, сходных с приведенными в настоящей книге, не только для атомов, но и для простых молекул.

Как отмечалось в Предисловии, мы надеемся, что собранные нами данные и методы, используемые при их получении,

могут быть полезны при теоретическом описании уже выполненных экспериментов и в предложении новых, для которых теоретические оценки или даже вычисления могут быть выполнены заранее. Все это, как было сказано в Предисловии, сможет помочь экспериментаторам планировать их деятельность более эффективно, позволяя проводить перед реальным экспериментом гораздо более простой и менее трудоёмкий вычислительный эксперимент.

Л и т е р а т у р а

1. *Amusia M. Ya., Zhivanovich Zh., Radojevich V., Cherepkov N. A.* // *Phys. Rev. A.* 1976. Vol. 13. P. 1466—1474.
2. *Amusia M. Ya., Cherepkov N. A., Chernysheva L. V., Manson S. T.* // *Phys. Rev. A.* 2000. Vol. 61. P. 020701.
3. *Kiildsen H., Andersen P., Folkmann F., Knudsen H., Kristensen B., West J. B., Andersen T.* // *Phys. Rev. A.* 2000. Vol. 62. P. 020702.

Научное издание

Мирон Янкелевич Амусья,
Лариса Владимировна Чернышева,
Виктор Георгиевич Яржемский

ПОГЛОЩЕНИЕ ФОТОНОВ,
РАССЕЯНИЕ ЭЛЕКТРОНОВ,
РАСПАД ВАКАНСИЙ

Атомные данные

Редактор издательства *Л. С. Тихомирова*

Художник *Е. В. Кудина*

Технический редактор *О. В. Новикова*

Компьютерная верстка *Л. Н. Напольской*

Лицензия ИД № 02980 от 06 октября 2000 г.

Сдано в набор 12.05.09. Подписано к печати 18.02.10.

Формат 60×90 1/16. Бумага офсетная. Гарнитура Таймс.

Печать офсетная. Усл. печ. л. 51.5. Уч.-изд. л. 46.6. Тираж 400 экз.

Тип. зак. № 3027. С 25

Санкт-Петербургская издательская фирма «Наука» РАН

199034, Санкт-Петербург, Менделеевская линия, 1

E-mail: main@nauka.nw.ru

Internet: www.naukaspb.spb.ru

Первая Академическая типография «Наука» РАН

199034, Санкт-Петербург, 9 линия, 12

ISBN 978-5-02-025328-5



9 785020 253285

САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКАЯ ИЗДАТЕЛЬСКАЯ ФИРМА
«НАУКА» РАН
ГОТОВИТ К ВЫПУСКУ

**АКАДЕМИЯ НАУК
В ИСТОРИИ КУЛЬТУРЫ РОССИИ
В XVIII—XX вв.**

В книге представлен опыт осмысления роли Академии наук в становлении отечественной науки и развитии культуры, показана деятельность Академии наук как одного из очагов русской культуры, как центра по распространению образования и научно-популярных знаний.

Для научных работников и широкого круга читателей.

САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКАЯ ИЗДАТЕЛЬСКАЯ ФИРМА

«НАУКА» РАН

ГОТОВИТ К ВЫПУСКУ

А. В. Кирюхин, В. А. Кирюхин, Ю. Ф. Манухин

ГИДРОГЕОЛОГИЯ ВУЛКАНОГЕНОВ

Рассматриваются общие и региональные закономерности распространения и формирования подземных вод в вулканогенных структурах. Особое внимание уделяется рассмотрению гидрогеологии неоген-четвертичных вулканогенных бассейнов Камчатки, в которых формируются современные магматические и гидротермальные системы — родоначальники геотермальных месторождений. Обобщается опыт разведки и эксплуатации 52 высокотемпературных геотермальных месторождений мира, суммарная продукция которых достигла 8900 МВт. Представлены результаты исследований тепломассопереноса на высокотемпературных геотермальных месторождениях Камчатки (Мутновское и Паужетское), рассмотрены их концептуальные гидрогеологические модели, показаны приложения TOUGH-моделирования для описания: 1) термогидродинамических процессов в крутопадающей проницаемой зоне в естественных и нарушенных эксплуатацией условиях; 2) вторичного минералообразования при восходящей фильтрации теплоносителя; 3) решения обратных многопараметрических задач геотермальной гидрогеологии с большим объемом исходных данных; 4) прогнозирования работы добычных скважин. Приводятся данные по взаимосвязи аномальных изменений давления в Мутновском высокотемпературном резервуаре с сейсмическими событиями. Изложены представления об особенностях тепломассопереноса на границе гидротермальных и магматических систем.

Монография предназначена для специалистов гидрогеологов, вулканологов, геофизиков, геохимиков, а также студентов и аспирантов соответствующих специальностей.

САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКАЯ ИЗДАТЕЛЬСКАЯ ФИРМА
«НАУКА» РАН
ГОТОВИТ К ВЫПУСКУ

В. И. Клячкин, И. А. Селезнев

**ВЕРОЯТНОСТНЫЕ МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ
ГРАНИЧНО-КОНТАКТНЫХ ЗАДАЧ
СТАТИСТИЧЕСКОЙ ГИДРОАКУСТИКИ
И ГИДРОФИЗИКИ. Ч. II**

Вероятностные методы в задачах информационного анализа случайных и случайно-параметрических полей различного физического происхождения; синтез и анализ показателей качества алгоритмических структур, их пространственно-временной обработки в интересах физической и информационной адресации сформированных научно-прикладных направлений, анализ полученных результатов исследований.

АДРЕСА КНИГОТОРГОВЫХ ПРЕДПРИЯТИЙ ТОРГОВОЙ ФИРМЫ «АКАДЕМКНИГА»

Магазины «Книга — почтой»

121009 Москва, Шубинский пер., 6; 241-02-52

197137 Санкт-Петербург, Петрозаводская ул., 7Б; (код 812) 235-40-64

Магазины «Академкнига» с указанием отделов «Книга — почтой»

690088 Владивосток-88, Океанский пр-т, 140 («Книга — почтой»);
(код 4232) 5-27-91

620151 Екатеринбург, ул. Мамина-Сибиряка, 137 («Книга — почтой»);
(код 3432) 55-10-03

664033 Иркутск, ул. Лермонтова, 298 («Книга — почтой»);
(код 3952) 46-56-20

660049 Красноярск, ул. Сурикова, 45; (код 3912) 27-03-90

220012 Минск, пр-т Независимости, 72; (код 10-375-17) 292-00-52,
292-46-52, 292-50-43

117312 Москва, ул. Вавилова, 55/7; 124-55-00

117192 Москва, Мичуринский пр-т, 12; 932-74-79

103054 Москва, Цветной бульвар, 21, строение 2; 921-55-96

103624 Москва, Б. Черкасский пер., 4; 298-33-73

630091 Новосибирск, Красный пр-т, 51; (код 3832) 21-15-60

630090 Новосибирск, Морской пр-т, 22 («Книга — почтой»);
(код 3832) 30-09-22

142292 Пушкино Московской обл., МКР «В», 1 («Книга — почтой»);
(13) 3-38-60

443022 Самара, пр-т Ленина, 2 («Книга — почтой»);
(код 8462) 37-10-60

- 191104 Санкт-Петербург, Литейный пр-т, 57; (код 812) 272-36-65
бук. 273-13-98
- 197110 Санкт-Петербург, Петрозаводская ул., 7Б; (код 812) 235-40-64
- 199034 Санкт-Петербург, Менделеевская линия, 1; (код 812) 328-38-12
- 199034 Санкт-Петербург, Васильевский остров, 9 линия, 16; (код 812)
323-34-62
- 634050 Томск, Набережная р. Ушайки, 18; (код 3822) 22-60-36
- 450059 Уфа-59, ул. Р. Зорге, 10 («Книга — почтой»); (код 3472) 24-47-74
- 450025 Уфа, ул. Коммунистическая, 49; (код 3472) 22-91-85

интернет-магазин
OZON.ru



71838928