

УДК 539.182

М. Я. Амусья, В. К. Иванов,  
Н. А. Черепков, Л. В. Чернышева

ПРОЦЕССЫ  
В  
МНОГОЭЛЕКТРОННЫХ  
АТОМАХ

Санкт-Петербург,

Наука

2006

### Аннотация

Предложен метод учета многоэлектронных корреляций в атомах - Приближение Случайных Фаз с Обменом (ПСФО), являющийся развитием приближения Хартри – Фока (ХФ). На основании расчетов в ПСФО и его модификаций описаны сечения фотоионизации многих атомов и ионов, предсказаны различные коллективные эффекты: гигантские резонансы, максимумы и минимумы в парциальных сечениях фотоионизации, резкие вариации углового распределения фотоэлектронов. Предсказаны спиновая поляризация фотоэлектронов из оболочек с ненулевым орбитальным моментом и “поляризационное” тормозное излучение при рассеянии частиц на атомах. Описаны многоэлектронные эффекты в рассеянии электронов, распаде вакансий, фотопоглощении в молекулах, металлических кластерах.

### Abstract

A method to account for many-electron correlations in atoms, the Random Phase Approximation with Exchange (RPAE), was developed which is the next step beyond the Hartree-Fock (HF) approximation. With the help of RPAE and its modifications the photoionization of many atoms and ions was described and different collective effects predicted, such as giant and interference resonances in total, partial and differential in angle cross sections. The spin polarization of photoelectrons from shells with nonzero orbital angular momentum, and the “polarization” bremsstrahlung in particle scattering on atoms were predicted. Many-electron effects in electron scattering, vacancy decay, photoabsorbtion by molecules and metallic clusters have been described.

## Предисловие

Идея этой книги появилась давно, в связи с успешным применением теории многих тел в исследованиях атомных процессов, особенно атомной фотоионизации. Нас необыкновенно увлекла простота теории, ее способность прояснять механизмы различных атомных процессов и изображать их с помощью языка фейнмановских диаграмм. Стало ясно, что это - важное преимущество не только для теоретиков, изучающих атомы и атомные процессы, но также и для экспериментаторов, работающих в этой области. Также стало очевидным, что большинство исследователей в области атомной физики могло быть заинтересовано в применении такого теоретического подхода к множеству различных эффектов и процессов.

Известно несколько книг, в которых описывается теория многих тел. Некоторые из них посвящены бесконечным в пространстве системам, таким как электронный газ, жидкий гелий и т.п. Очевидно, все они очень далеки от такой неоднородной и конечной системы как атом. Другие книги рассматривают собственно теорию многих тел, не обращая достаточного внимания на проблемы ее применения к конкретным системам, что само по себе является сложной проблемой.

Во всех существующих книгах при обсуждении теории многих тел большое внимание уделяется основам теории, которая является весьма сложной. Эта сложность создает серьезный “потенциальный” барьер, который препятствует широкому применению теории многих тел к различным конкретным процессам, особенно для людей без хорошей предварительной теоретической подготовки. Между тем, основы теории, достаточно важные сами по себе, могут быть относительно легко отделены от простых приложений, или, лучше сказать, “рецептов” их применения к конкретной системе или процессу.

Важная особенность этих рецептов заключается в том, что они не только просты, но и являются также очень общими и используются почти во всех областях микроскопической физики, в исследованиях элементарных частиц, твердого тела и конденсированного вещества. Поэтому, изучая эти рецепты, можно не только учиться понимать и даже, возможно, развивать теоретические подходы к различным

физическим процессам, скажем, в атомной физике, но и изучить почти универсальный язык, который может существенно помочь работать в различных областях физики. Эти рецепты помогают графически изображать микроскопические атомные процессы, проясняя их механизмы.

Итак, основная идея этой книги состоит в том, чтобы дать детальное описание этих рецептов и их качественного понимания, а также активного применения их к максимальному числу конкретных процессов. Нам хотелось также, чтобы эта книга содержала полученный нами обширный материал по теории атомных процессов. В некотором смысле такая книга должна быть подобием поваренной книги рецептов, которая помогает готовить хорошую пищу и способствует развитию творческих навыков, не обращая внимания на обсуждение биохимических процессов в приготовлении и употреблении пищи.

Исследования в микрофизике, теоретической или экспериментальной, начинаются с определения физического процесса. Оно требует спецификации частиц, т.е. определения их типа и их характеристик: энергии и момента, момента импульса, спина и т.п., а если частицы структурированы, то и их начального и конечного состояний, т.е. состояний до и после их взаимодействия друг с другом. Экспериментаторы пытаются измерить вероятность или сечение этого взаимодействия. В то же время теоретики пытаются вычислить эти характеристики. И тем, и другим нужно понять механизм этого процесса. Особенно это важно для теории, поскольку, не имея разумной идеи о механизме атомного процесса, невозможно предложить подход или модель для вычисления его вероятности.

В этой книге мы предлагаем идти следующим путем: от формулирования самого интересующего процесса через определение его простейшего возможного механизма к его теоретическому описанию путем вывода необходимых аналитических выражений и выполнения соответствующих численных расчетов. На следующем шаге выясняются более сложные «пути», через которые может протекать рассматриваемый процесс, и то, как вычислить или оценить вклады в вероятность или сечение рассматриваемого процесса, которые проистекают из этих более сложных путей. Преимущественно обсуждаются обе рассматриваемые возможности, т.е. простейшие одночастичные приближения, и поправки к ним, учитывающие так называемые многоэлектронные корреляции, т.е. все, что лежит за рамками одночастичного приближения. Поэтому особое внимание в книге уделяется обсуждению методов учета электронных

корреляций – многочастичной теории возмущений (МТВ) и приближению случайных фаз с обменом (ПСФО), а также их комбинациям. Эти методы и подходы являются достаточно общими и применимы не только в теории атомных процессов, однако в книге мы ограничиваемся только последней.

Методы, обсуждаемые в этой книге, могут быть использованы не только при теоретическом описании эксперимента, который уже выполнен, но и оказаться очень эффективными при оценке возможностей готовящихся к постановке новых экспериментов.

В этой книге мы рассматриваем широкий круг различных физических процессов. Почти все они связаны с поглощением фотонов атомами и ионами, т.е. с фотоионизацией, с комптоновским рассеянием фотонов, с упругим и неупругим рассеянием электронов и позитронов на атомах. При этом обращается внимание на структуру атомов и ионов, как положительных, так и отрицательных, и на положение и ширины атомных уровней. В качестве мишени будут в основном рассматриваться обычные атомы и ионы в их основных и возбужденных состояниях, однако некоторое внимание будет уделено многоатомным образованиям – молекулам, металлическим кластерам и фуллеренам.

Для каждого из этих процессов мы представляем его простейшее диаграммное изображение и соответствующую простейшую аналитическую формулу. Затем для большинства рассматриваемых процессов приводятся более сложные диаграммные и соответствующие аналитические выражения, а также даются некоторые объяснения, как выполнить численные расчеты.

Везде в книге мы используем *атомную систему единиц*, полагая постоянную Планка  $\hbar$ , заряд электрона  $e$  и его массу  $m$  равными 1, так как в противном случае формулы, расчеты и выражения будут перегружены 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 =  $5.29 \cdot 10^{-1}$  нм; энергия  $\varepsilon_0 = 2$  Рид =  $me^4 / \hbar^2 \approx 27.21$  эВ =  $43.59 \cdot 10^{-10}$  нДж; сечение  $a_0^2 \approx 27.98 \cdot 10^{-18}$  см<sup>2</sup> =  $27.98 \cdot 10^{-4}$  нм<sup>2</sup> =  $27.98$  Мб (1 Мб равен  $10^{-18}$  см<sup>2</sup>); скорость  $v_0 = (\varepsilon_0/m)^{1/2} = e^2 / \hbar \approx 2.188 \cdot 10^6$  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  $c = 137.04$ .

Книга адресована широкой аудитории, включая не только исследователей, теоретиков и экспериментаторов, но также студентов, аспирантов, которые намерены специализироваться в атомной физике и смежных областях. Мы пытаемся представить материал настолько просто, насколько это возможно, позволяя таким образом использовать эту книгу не только физикам, работающим в области исследования атомов, но также исследователям и студентам, интересующимся другими конечными многочастичными системами, такими как молекулы, атомные кластеры, фуллерены и атомное ядро. Мы глубоко убеждены, что те же методы, которые описаны в этой книге, без сомнения могут быть успешно применены и уже применяются к новым искусственным многочастичным объектам, т.е. атомам или электронам и ионам, заключенным внутри ограниченного пространства внешним полем, т.е. в электрических и магнитных ловушках.

Несколько замечаний об общем стиле данной книги. Мы стараемся избегать сложных математических доказательств, заменяя их качественными и интуитивно ясными аргументами. Предполагается, однако, что потенциальный читатель знаком с основными положениями квантовой механики и электродинамики при описании атомных структур и процессов. В качестве книг-ссылок по данному предмету мы можем порекомендовать две следующие: Л.Д. Ландау и Е.М. Лифшиц, *Квантовая механика. Нерелятивистская теория*, М., Физматгиз, 1962 и Н.Б. Берестецкий, Е.М. Лифшиц, Л.П. Питаевский, *Квантовая электродинамика*, Наука, Москва, 1980. При расчетах атомных характеристик и сечений рассеяния обычно радиальные, угловые и спиновые переменные разделены, интегрирование по угловым переменным и суммирование по проекциям спина выполняются аналитически. В качестве руководства по этим операциям может служить книга И.И. Собельмана *Введение в теорию атомных спектров*, ГИФМЛ, Москва, 1963 г. Ссылки на эти источники будут обозначены как [ЛЛ], [БЛП] и [ИС], соответственно.

Нами предпринята попытка сделать эту книгу самосогласованной в том смысле, что каждый может понять все, что написано, почти без использования других книг и оригинальных статей. Таким образом, большинство ссылок дается только для того, чтобы показать, где представленный результат был получен впервые. Кроме того, в связи с широким разнообразием обсуждаемых проблем нам кажется наиболее удобным

иметь отдельный лист ссылок для каждой главы. Поэтому кросс-ссылки даются с упоминанием номера соответствующей главы.

Существует значительное перекрытие, особенно заметное в обозначениях, диаграммах, которые представляют физические процессы, и в написании математических формул и приближений, используемых в данной книге, со следующими публикациями: М.Я. Амусья *Атомный фотоэффект*, ГИФМЛ, Москва, 1987; М.Ya. Amusia, *Atomic Photoeffect*, Plenum Press, New York-London, 1990 и М.Ya. Amusia and L.V. Chernysheva, *Computation of Atomic Processes*, Institute of Physics Publishing, Bristol and Philadelphia, 1997. Ссылки к ним будут даны как [АМ], [АМУ] и [АЧ], соответственно.

## Список принятых обозначений и аббревиатур.

### Аббревиатура основных ссылок

- [ЛЛ] – Л.Д. Ландау и Е.М. Лифшиц, *Квантовая механика. Нерелятивистская теория*, М., Физматгиз, 1962
- [БЛП] – Н.Б. Берестецкий, Е.М. Лифшиц, Л.П. Питаевский, *Квантовая электродинамика*, Наука, Москва, 1980
- [ИС] – И.И. Собельмана *Введение в теорию атомных спектров*, ГИФМЛ, Москва, 1963
- [АМ] – М.Я. Амусья *Атомный фотоэффект*, ГИФМЛ, Москва, 1987
- АМУ] – М.Ya. Amusia, *Atomic Photoeffect*, Plenum Press, New York-London, 1990
- [АЧ] – М.Ya. Amusia and L.V. Chernysheva, *Computation of Atomic Processes*, Institute of Physics Publishing, Bristol and Philadelphia, 1997

### Аббревиатура основных методов и физических эффектов

- ХФ приближение – приближение Хартри-Фока
- ЗВХФ приближение – зависящее от времени приближение Хартри-Фока
- ПСФ – приближение случайных фаз
- ПСФО - приближение случайных фаз с обменом
- РПСФ – релятивистское приближение случайных фаз
- КЭД – квантовая электродинамика
- МТВ - многочастичная теория возмущений
- ОПСФО – обобщенный метод ПСФО
- СП ПСФО - спин - поляризованный вариант ПСФО
- ВПС - взаимодействия после столкновения
- ОИ – отрицательные ионы
- ГАР – гигантский автоионизационный резонанс
- МПДФ – многоконфигурационное приближение Дирака-Фока
- КСВ – квазисвободное выбивание
- ОСО – обобщенные силы осцилляторов
- ТИ – тормозное излучение
- ПТИ – поляризационное тормозное излучение
- КДУР – круговой дихроизм в угловом распределении
- ЛДУР – линейный дихроизм в угловом распределении
- МДУР – магнитный дихроизм в угловом распределении

### Наиболее часто используемые обозначения

- $Z$  – заряд ядра
- $N$  – число электронов в атоме
- $\Omega$  - частота колебаний
- $\rho$  - электронная плотность
- $\omega$  – энергия (частота) фотона

$q$  – волновое число  
 $\lambda$  – длина волны  
 $F$  – уровень Ферми  
 $v_0$  – скорость распространения  
 $p_0$  – импульс Ферми  
 $E, \varepsilon_0$  – энергия состояния или частицы  
 $A$  – число нуклонов в ядре  
 $c$  – скорость света  
 $\alpha$  – постоянная тонкой структуры  
 $V$  – потенциал взаимодействия между частицами  
 $\Psi(\vec{r}, t)$  – волновая функция  
 $U(\vec{r}, t)$  – потенциал внешнего поля  
 $\varphi_j(\vec{r})$  – одночастичная волновая функция в состоянии  $j$   
 $R_{nl}(r)$  – радиальная часть волновой функции  
 $Y_{lm}(r) \equiv Y_{lm}(\theta, \phi)$  – угловая часть волновой функции  
 $\chi_\sigma$  – спиновая часть волновой функции  
 $\sigma(\phi)$  – сечение процесса  
 $\hat{M}$  – оператор перехода  
 $\hat{H}_0, \hat{H}_0$  – оператор Гамильтона  
 $G_0(\vec{r}', E), G(\vec{r}', E)$  – одночастичная функция Грина