

## 1. Историческое развитие теории многоэлектронных систем

Классические исследования Э. Резерфорда, выполненные в 1911 г., показали, что атомы, из которых построены все микроскопические тела, не могут быть описаны в рамках классической механики Ньютона, и для описания строения и свойств даже простейшего одноэлектронного атома водорода необходима качественно новая теория. Эта теория, названная квантовой механикой, была создана в 1924-26 гг. Э.Шредингером и В.Гейзенбергом. В ее рамках задача описания строения атомов требовала решения *уравнения Шредингера* для  $N$  электронов с отрицательным электрическим зарядом  $e$  (в атомной системе единиц заряд  $e$  принят за единицу) и ядра с зарядом противоположного знака  $Z|e|$  ( $Z = N$  для нейтрального атома). Все составляющие атома взаимодействуют между собой по закону Кулона. Притяжение электронов к ядру определяет строение атома, в первую очередь тот факт, что его электроны образуют с ядром связанные состояния. Простейший мыслимый подход при описании структуры атомов с  $Z > 1$  называется *водородоподобным приближением*, в котором электроны считаются движущимися в экранированном поле ядра с зарядом  $Z_{\text{эфф}} < Z$ . Эта модель может быть несколько улучшена, если ввести вместо одного  $Z_{\text{эфф}}$  разные его значения для электронов, находящихся на разных расстояниях от ядра. Однако водородоподобное приближение крайне грубо описывает многоэлектронные атомы.

В течение многих лет полагалось, что наилучшее одночастичное приближение, развитое Д.Р. Хартри и В.А. Фоком в 1928-30 гг. [1,2], в рамках которого электроны считаются движущимися независимо друг от друга в некотором среднем, *самосогласованном* поле, неплохо описывает строение атомов и процессы с их участием. Разработанное ими приближение учитывает часть межэлектронного взаимодействия, связанную со стационарным распределением электронной плотности внутри атома и с обменом между электронами.

Использование *приближения Хартри-Фока* (ХФ) существенно улучшило возможности количественного и качественного описания электронной структуры атомов. В условиях сравнительно ограниченных возможностей эксперимента в 50-х годах прошлого века сложилось твердое убеждение, что приближение ХФ фактически достаточно для описания атомов и их ионов, а также процессов с их участием. При этом считалось, что электронные корреляции, являющиеся проявлением той части взаимодействия электронов, которая не учитывается в рамках приближения

самосогласованного поля, приводят лишь к малым поправкам. И действительно, корреляционная энергия взаимодействия электронов в атоме много меньше ее полной ХФ энергии.

Однако применение метода ХФ к вычислению многих атомных свойств не дало удовлетворительных результатов. Обычно такая ситуация имеет место, когда приближение ХФ используется для вычисления сечения фотопоглощения или упругого и неупругого рассеяния электронов на атомах. Ярким примером здесь является невозможность в рамках метода ХФ воспроизвести даже качественно сечение упругого рассеяния низкоэнергетических электронов на атомах благородных газов, таких как Ar, Kr и Xe. Действительно, сечение во всех из них имеет очень глубокий минимум, открытый Рамзауэром [3] и Таунсендом [4] в 1921 г. Но такой минимум не обнаруживается в ХФ расчетах. Поэтому в результате этих и последующих экспериментов стало очевидным, что необходимо выйти за рамки простого приближения ХФ.

Одна из возможностей улучшить метод ХФ состоит в том, чтобы включить с самого начала не только сам атом-мишень, но и вылетающую частицу или поле налетающих фотонов. В этом случае получаем приближение ХФ для атома во внешнем электромагнитном поле или для налетающих частиц вместе с атомом-мишенью. Соответствующее обобщение ХФ было предложено Д.Д. Таулесом [5]. Однако, уравнения этого метода, получившего название зависящего от времени приближения ХФ (ЗВХФ), слишком сложны и используются очень редко.

Существенный и интересный вопрос о коллективном поведении атомных электронов появился в связи с изучением бесконечных в пространстве однородных электронных систем: *электронного газа* или *электронной жидкости*. Вопрос, могут ли атомные электроны перемещаться коллективно, является по существу противоречащим основной идее метода ХФ. Изучение движения электронов в металлах привело к открытию так называемых *Ленгмюровских колебаний* или *плазмонов* (открытых И. Ленгмюром в 1929 г. [6]). Они представляют собой коллективное когерентное движение всех электронов проводимости в металле по отношению к положительным ионам, фиксированным в пространстве. Рассмотрение, базирующееся на классической физике, позволяет определить частоту этих колебаний, которая задается выражением:

$$\Omega_0^2 = 4\pi\rho, \quad (1.1)$$

где  $\rho$  обозначает электронную плотность. В 1952 г. Д. Бом и Д. Пайнс разработали квантово-механический подход к бесконечному в пространстве электронному газу, который по несущественным для нас причинам был назван *Приближением Случайных Фаз* (ПСФ) [7]. Они обнаружили, что эта система действительно имеет коллективные колебания, и определили их закон дисперсии  $\Omega = \Omega(q)$ , т.е. зависимость частоты от волнового числа колебаний  $q$ . Длина волны колебаний  $\lambda$  связана с  $q$  соотношением

$$\lambda = 2\pi/q. \quad (1.2)$$

Для малых значений  $q$  закон дисперсии записывается в виде:

$$\Omega(q) \cong \Omega_0 + aq^2 \quad (1.3)$$

Как и в методе ХФ, уравнения ПСФ могут быть легко применены к системам с другим, нежели чисто кулоновским межэлектронным взаимодействием. Поэтому ПСФ использовалось и используется до сих пор, к примеру, также в ядерной проблеме многих тел [8]. Упрощенная версия ПСФ использовалась в физике элементарных частиц в форме уравнений *Тамма-Данкова* задолго до того, как было предложено использовать ПСФ для электронного газа.

В 1956-7 гг. Л. Д. Ландау [9] создал теорию *Ферми-жидкости*, бесконечной в пространстве однородной системы сильно взаимодействующих частиц, с силами между ними короткого радиуса действия. Примером такой системы является жидкий гелий, состоящий из атомов  $\text{He}^3$ . Ландау обнаружил, что в Ферми-жидкости коллективные колебания существуют в виде так называемого *нулевого звука*, частота которого пропорциональна волновому числу (импульсу)  $q$ , так что закон дисперсии записывается в виде:

$$\Omega = v_0 q \quad (1.4)$$

Здесь  $v_0$  есть скорость распространения нулевого звука. Отметим, что (1.4) существенно отличается от закона дисперсии плазмонов в электронном газе (1.3).

Коллективные колебания были обнаружены также и в атомном ядре. Было открыто, что в сечении фотопоглощения при частоте  $\Omega$  существует мощный максимум, связанный с полным числом нуклонов  $A$  в ядре следующим соотношением:

$$\Omega = bA^{-1/3}, \quad (1.5)$$

где  $b$  - коэффициент пропорциональности. Максимум при частоте  $\Omega$ , задаваемой (1.5), был назван *гигантским резонансом*. В 1944 г. он был описан А.Б. Мигдалом [10] как

коллективные колебания, или точнее как когерентное движение всех протонов данного ядра относительно всех его нейтронов.

Вполне естественно, уже в то время мог быть поставлен вопрос, существуют ли подобные коллективные колебания в атомах, т.е. возможно ли когерентное движение всех электронов относительно ядра. Однако в реальности этот вопрос был исследован существенно позже.

Важно заметить, что уравнения, описывающие коллективные движения в ПСФ, в теории Ферми-жидкости и в микроскопической теории ядра, которые приводят к выражениям (1.3)–(1.5), похожи. В действительности, они не просто похожи, но являются теми же самыми уравнениями, применимыми к разным физическим объектам. Глубокая связь между различными коллективными колебаниями, а именно, гигантскими резонансами, плазмонами и нулевым звуком, была недавно рассмотрена в обзорной статье [11].

В конце 50-х годов стало ясно, что эти уравнения и их различные модификации могли быть получены относительно просто и элегантно. Это было сделано с использованием техники так называемых *фейнмановских диаграмм*, разработанной в 1947-48 гг. *Р.П.Фейнманом* в ходе создания *квантовой электродинамики (КЭД)*, которая объединила релятивистскую квантовую механику с идеей античастиц, и классическую электродинамику, созданную Максвеллом. КЭД основана на использовании уравнения Дирака, которое является естественным обобщением уравнения Шредингера на релятивистские системы. При описании частицы, движущейся со скоростью, близкой к скорости света, античастица появилась из уравнений Дирака как объект, противоположный частице во всех отношениях. Так, она должна иметь противоположный частице электрический заряд. Она может "родиться" вместе с одной частицей из вакуума или аннигилировать, т.е. "исчезнуть" вместе с ней путем испускания фотона, который уносит полную энергию и импульс пары "частица-античастица". Дирак предложил рассматривать античастицу как дырку, или вакансию, возникшую после удаления частицы из вакуума, который, согласно его пониманию, является пространственно бесконечным "морем" частиц.

В КЭД взаимодействие электронов и фотонов является слабым и характеризуется так называемой постоянной тонкой структуры  $\alpha = 1/c \cong 1/137$ . Поэтому теория возмущений по электрон-фотонному взаимодействию является очень существенным моментом КЭД. Однако оказалось, что в ряде процессов низкий порядок приближения

недостаточен, и поправки более высокого порядка, так называемые радиационные поправки, должны быть учтены. Фейнман изобрел новую технику [12], которая позволяет с использованием очень небольшого набора правил и графических обозначений изобразить все разнообразие электродинамических процессов и написать для них соответствующие аналитические выражения. Последние определяют вероятности различных электродинамических процессов и поправки к ним более высоких порядков.

Оказалось, что эта техника очень эффективна. Ее применение позволило выполнить вычисления с очень высокой степенью точности в КЭД. В то же самое время техника Фейнмана универсальна в том смысле, что она может быть также применена и к другим системам, например, при описании взаимодействия между нуклонами и носителями их взаимодействия -  $\pi$ -мезонами.

В конце 50-х годов техника Фейнмана с ее языком диаграмм после относительно небольшой модификации была применена почти одновременно несколькими исследователями к нерелятивистской многочастичной проблеме. Это было сделано в ряде статей при рассмотрении электронного газа в металлах [13,14], Ферми-жидкости [15], газа твёрдых шаров [16] и ядерной материи [17]. В ряде публикаций А.Б. Мигдала и его школы, которые были сведены вместе в монографии [18], идеи теории Ферми-жидкости вместе с диаграммной техникой были применены к такой конечной многочастичной системе как атомное ядро с  $Z \gg 1$ .

Переход от КЭД к многочастичным системам является вполне естественным. Действительно, ферми-частицы при нулевой температуре могут рассматриваться как образующие вакуум до того, как учтено межчастичное взаимодействие. В этом состоянии все энергетические уровни ниже так называемого *ферми-уровня* ( $F$ ) заняты частицами, а выше – пусты. Чтобы возбудить такую систему, по крайней мере одна из частиц должна перейти из своего состояния ниже ферми-уровня на уровень выше него. Таким образом, создается вакансия, или дырка, которая является аналогом античастицы в КЭД, и процесс рождения вакансии и частицы выше ферми-уровня описывается простой диаграммой. Учет межчастичного взаимодействия внутри системы достигается рассмотрением нескольких дополнительных диаграмм и написанием соответствующих аналитических выражений.

Существенным упрощением нерелятивистской многочастичной проблемы для атомов, ферми-жидкостей и ядра по сравнению с КЭД является то, что межчастичное

взаимодействие описывается потенциалом, не зависящим от времени. В КЭД же зависимость от времени межэлектронного взаимодействия, его "запаздывание", должна быть принята во внимание. Вот поэтому в КЭД скорость электронов может быть близка к скорости носителя взаимодействия - фотона, т.е. скорости света. Однако, наряду с этим упрощением, многочастичная проблема для атома, ядра и ферми-жидкости имеет очень существенные осложнения. А именно, по крайней мере, часть взаимодействия во всех этих системах достаточно сильна и должна быть учтена не по теории возмущений, т.е. без какого-либо приближения. Для атомов имеется и дополнительная сложность: необходимость аккуратно учесть действие атомного ядра, без которого атом должен был бы развалиться.

Существует еще одно важное различие между атомом как многочастичной системой и другими системами, такими как ферми-жидкость и ядро. Действительно, в атомах межчастичное взаимодействие является чисто кулоновским и известно с высокой степенью точности. Релятивистские поправки к нему весьма малы и обычно могут быть учтены по теории возмущений. Поэтому при решении атомной многочастичной проблемы в большинстве случаев возникает желание выполнить вычисления *ab initio* или, другими словами, исходя из основных принципов и без дополнительных приближений. Это предполагает расчеты без введения каких-либо *подгоночных* параметров, которые позволили бы достичь относительно хорошего согласия с экспериментом.

Ситуация с ядром и ферми-жидкостью в этом смысле качественно другая: взаимодействие между частицами малоизвестно, не ясно также в какой мере трех- или многочастичные взаимодействия действительно несущественны. В таком случае межчастичное взаимодействие следует рассматривать как эффективное, со свободными параметрами, выбранными так, чтобы они могли описать наблюдаемые характеристики самой многочастичной системы. Этот подход был выбран в теории ферми-жидкости, разработанной Л.Д. Ландау и его последователями. В таком подходе считается, что эффективное взаимодействие учитывает и трех- и многочастичные силы, если они существуют. Другая возможность - это выбрать межчастичный потенциал таким образом, чтобы он описывал двухчастичные взаимодействия максимально точно. Тогда многочастичная проблема формулируется в предположении, что только эти силы действуют между составляющими многочастичной системы. В этом направлении

ядерная многочастичная проблема разрабатывалась, начиная с пионерских работ К. Бракнера [19].

В этой книге основное внимание будет сконцентрировано на атомной многочастичной проблеме, к которой мы будем применять теорию возмущений и технику фейнмановских диаграмм, приспособленных к рассмотрению межэлектронного взаимодействия без запаздывания. В качестве первого шага надо выбрать начальное, или нулевое приближение. Лучшим кандидатом для этого является метод ХФ. Сегодня этот подход сам формирует целую область в атомной физике и описан в ряде книг (см., например, [ИС] или [20]). Первая попытка решить атомную многочастичную проблему вне рамок ХФ путем учета как возмущения части межэлектронного взаимодействия (называемой обычно остаточным взаимодействием), которой пренебрегалось в ХФ, была предпринята Х.П. Келли и его школой, начиная с 1956 г. [21]. Он разработал *многочастичную теорию возмущений* (МТВ), основная идея которой состояла в том, чтобы начать с приближения ХФ, а затем учесть остаточное межэлектронное взаимодействие в нескольких первых порядках теории возмущений, иногда вплоть до третьего. К сожалению, число диаграмм, которые следует учесть в МТВ, увеличивается экспоненциально с ростом рассматриваемого порядка теории возмущений.

В то время как различные характеристики невозбужденных легких атомов были вычислены в МТВ сравнительно легко и с высокой точностью, ситуация с атомными процессами, особенно для средних и тяжелых атомов, оказалась гораздо более сложной. Выяснилось, что здесь недостаточно первого и второго порядков. В то же время последовательное включение третьего порядка требует рассмотрения слишком большого числа различных диаграмм. В дополнение к сказанному выше, существенно, что этот подход исключает саму возможность, чтобы некоторый вид коллективных возбуждений, подобных плазмонам в металле или гигантским резонансам в ядрах, вообще существовал в атомах. Чисто теоретически, трудно вообразить, чтобы многоэлектронные атомы были бы исключением в этом смысле. Поэтому в некоторых работах был развит подход, который рассматривает атомные электроны как малый элемент бесконечного электронного газа (см. например, [22,23] и ссылки там). При этом была высказана идея о существовании в атомных электронных оболочках коллективных возбуждений, атомного аналога плазменного колебания или *атомного плазмона* [22]. Однако, при таком рассмотрении неоднородность распределения

плотности атомных электронов учитывалась недостаточно аккуратно, так что ни оцениваемые частоты коллективных колебаний, ни само заключение об их существовании не нашли экспериментального подтверждения в дальнейшем.

Заключение о роли корреляций в атомных процессах было сделано в 1964 г., когда были проведены измерения сечений фотоионизации атомов благородных газов Кг и Хе, почти одновременно А.П. Лукирским, И.А. Брытовым и Т.М. Зимкиной в СССР [24,25] и Д.Л. Эдерером в США [26]. Эти измерения вместе с результатами измерений Дж.А. Сэмсона [27] для Аг показали, что сечение поглощения фотонов атомами в области энергий фотонов от 10 до 100 эВ не только количественно, но даже и качественно отличается от предсказаний метода ХФ, не говоря уже о водородоподобном приближении. Качественное расхождение эксперимента с результатами расчета в подходе ХФ указывало на то, что, по крайней мере, в процессе фотопоглощения роль электронных корреляций не мала и не может рассматриваться как малая поправка к тому, что учитывается приближением ХФ.

В 1964 г. было экспериментально обнаружено, что сечение фотопоглощения атома ксенона достаточно далеко за порогом ионизации промежуточной  $4d$  оболочки имеет мощный максимум, названный гигантским резонансом [25,26,28]. Этот результат находился в очевидном противоречии с предсказаниями водородоподобной модели фотоионизации, общепринятой в то время. Сила этого резонанса, сходство с хорошо известными гигантскими резонансами в атомных ядрах вело к предположению, что обнаруженный атомный максимум имеет коллективную природу. Казалось очевидным, что этот максимум мог быть описан качественно как результат возбуждения налетающим фотоном когерентного колебательного движения, по крайней мере, всех десяти электронов, принадлежащих  $4d^{10}$  оболочке атома ксенона относительно его ядра. Открытие гигантского резонанса в Хе дало важный толчок попытке сформулировать *ab initio* подход к атомной многочастичной проблеме, который позволил бы продемонстрировать существование коллективных движений в атомах, если таковые вообще существуют. Аналогия с электронным газом наталкивала на мысль использовать для многоэлектронных атомов Приближение Случайных Фаз (ПСФ) (см. [22,23] и ссылки там).

Несколько попыток применить к описанию новых данных ранее разработанные подходы, к примеру, метод парных корреляций [29], метод случайной фазы в упрощенном варианте [30], метод наложения конфигураций [31], а также теорию

многих тел с сильно упрощенным межэлектронным взаимодействием в так называемом сепарабельном приближении [32], не привели к согласию с данными эксперимента. Это означало, что требуется развить более точный подход, в рамках которого было бы возможно достаточно четко отделить многоэлектронные поправки от вклада одноэлектронного приближения, и аккуратно учесть эти поправки. Кроме того, желательно было разработать такой подход, который позволял бы единообразно рассматривать не только один процесс - фотопоглощение, но множество других атомных процессов и характеристик, в которых роль многоэлектронных корреляций, как следовало из качественных оценок, должна была быть очень большой.

Описанию этого нового подхода, т.е. созданию теории многоэлектронных эффектов, и ее применению к расчету широкого круга атомных процессов и характеристик и посвящена настоящая книга, написанная в значительной степени на базе работ авторов и их сотрудников.

В основу излагаемого подхода было положено физическое представление о том, что электронные корреляции в изолированных атомах и простых металлах качественно подобны. Это позволило предположить [22], что существенную роль в атомах играют коллективные эффекты, подобные плазменным колебаниям электронов в твердых телах [32,33]. В то же время представлялось необходимым, вследствие пространственной ограниченности и резкой неоднородности электронной плотности в атомах, с самого начала отказаться от всевозможных сильно упрощающих квазиоднородных приближений. Другим важным фактором, который следовало учесть, являлся обмен между атомными электронами. Очень большая роль межэлектронного обмена в атоме обнаруживается сравнением методов Хартри и Хартри - Фока: успех метода ХФ по сравнению с Хартри целиком обусловлен последовательным учетом обмена в рамках метода ХФ.

Первым шагом описываемой программы исследований была аккуратная численная реализация на электронных вычислительных машинах метода ХФ для основного и, что особенно важно, возбужденных состояний [34]. Следующим принципиально важным шагом было развитие метода учета корреляций, названного Приближением Случайных Фаз с Обменом (ПСФО) и отличающегося от ПСФ последовательным учетом обмена электронов [35-39]. Вскоре ПСФО было обобщено на системы с релятивистскими скоростями [40]. Соответствующая модификация получила название РПСФ. С помощью ПСФО и целого ряда его модификаций с 1969 г.

проводились многочисленные успешные расчеты различных физических процессов взаимодействия атомов с фотонами, электронами и позитронами.

Уже первые расчеты, выполненные в рамках ПСФО, дали очень хорошие результаты и описали максимум, наблюдаемый в сечении фотопоглощения атома ксенона как гигантский резонанс ядерного типа, но многоэлектронной природы. С того времени было предсказано и описано очень много проявлений сильных и необычных многоэлектронных или корреляционных эффектов в атомных характеристиках, а также процессах с участием атомов, ионов и многоатомных образований.

Язык диаграмм, используемый при выводе уравнений ПСФО в [36,37], позволил установить связи с МТВ и *Зависящим от Времени* приближением ХФ (ЗВХФ) [5]. Оказалось, что два метода, ПСФО и МТВ, могут быть успешно объединены. Метод МТВ может быть обобщен и преобразован из теории возмущений с чисто кулоновским межэлектронным взаимодействием в теорию возмущений с эффективным взаимодействием, при этом последнее определено в рамках ПСФО. Каждый порядок такого обобщения включает гораздо больше, чем обычный порядок МТВ. Детальное описание ПСФО для атомной многочастичной проблемы может быть найдено в [АМ] и [АЧ]. Как ХФ или ПСФ, ПСФО может быть применено к многочастичным системам с отличным от кулоновского межчастичным взаимодействием.

Существует важная особенность ХФ, ПСФ и ПСФО, которая делает их качественно отличными от обычной теории возмущений. Выражения, возникающие в рамках теории возмущений, включают только несколько порядков разложения по степеням межчастичного взаимодействия  $V$ . При решении дифференциальных или интегральных уравнений ХФ, ПСФ и ПСФО учитывается несколько бесконечных последовательностей в полном разложении по степеням  $V$ . Это означает, что ХФ, ПСФ и ПСФО учитывает не только некоторые члены и диаграммы данного порядка по  $V$ , но включает также и члены любого порядка по  $V$ , вплоть до бесконечного. Необходимо иметь в виду, что просуммировать все порядки теории возмущений по  $V$  или, что то же самое, просуммировать все диаграммы, эквивалентно точному решению уравнения Шредингера для рассматриваемой многочастичной системы, что не представляется возможным. Но имеются случаи, когда бесконечные по  $V$  последовательности диаграмм, другие, нежели включенные в ПСФО, ПСФ (и конечно, ХФ) должны быть учтены. Существует хорошо разработанные техники для суммирования бесконечных систем так называемых *лестничных диаграмм* [16] и *паркетных диаграмм* [41].

Уравнения, являющиеся результатом суммирования лестничных диаграмм, используются не только в ядерной, но также в атомной и в молекулярной физике. Они особенно важны при описании электронного рассеяния на наружных электронах [42,43], или при изучении спектра двух наружных электронов в поле, создаваемом атомным остовом с заполненными оболочками [44].

При сравнении результатов расчетов с экспериментальными данными были обнаружены также ситуации, когда использование ПСФО оказывается недостаточным, и требуется выйти за его рамки. Различные подходы к этой проблеме были предложены и развиты нами в 1980-90 гг., что позволило существенно расширить спектр рассматриваемых процессов и диапазон изучаемых энергий [АМ,АЧ,45]. В частности, были разработаны обобщенный метод ПСФО (ОПСФО) [45,46], спин - поляризованный вариант ПСФО (СП ПСФО) [47], метод уравнения Дайсона [48,49], методы, объединяющие ПСФО и ОПСФО с Многочастичной Теорией Возмущений (МТВ) [50]. Это позволило рассмотреть более широкий круг атомных процессов, к примеру, Взаимодействия После Столкновения (ВПС) [51], “реакции прямого выбивания” [50] и ряд других.

Появление новых электронных вычислительных машин, в особенности персональных компьютеров последних поколений, необычайно расширило возможности и области применения развитых в данной работе теоретических методов, устранив ряд чисто технических ограничений, таких как малое число точек интегрирования, малое число одновременно учитываемых электронных переходов и т.п. Удалось также сделать развитые методы достоянием не только ближайших коллег, но и широкой научной общественности, как в России, так и за ее рубежами, что стало возможным благодаря публикации в виде отдельных препринтов и книг не только методов расчета и полученных результатов, но и вычислительных программ (см.[52] и ссылки там). Так, был опубликована книга [АЧ], которая содержала дискету с вычислительными программами. В то же время непрерывно продолжалось развитие самой теории многоэлектронных эффектов и методов учета корреляций. Это позволило расширить области применения уже разработанных методов и применять их не только к атомам и ионам, положительным и отрицательным [53-55], но и к квазиатомным образованиям, таким как кластеры металлов и фуллерены [56], двухатомные молекулы [57].

Важная проблема атомной теории многих тел – это выход за рамки ПСФО, согласованно включая другие бесконечные последовательности диаграмм. Имеется несколько упомянутых выше [45-47] обобщений метода ПСФО, но ни один из них не разработан так хорошо и последовательно как ПСФО. Многие из этих обобщений остаются на уровне интуитивных предположений [58].

Для того чтобы решить на чисто теоретической основе, какие последовательности диаграмм должны быть учтены, а какие могут быть опущены, необходимо знать так называемую *область обоснованности* конкретного приближения. Сравнительно легко определить эти диаграммы для бесконечных однородных систем, таких как электронный газ или газ твёрдых шаров радиуса  $a$ . Свойства этих систем определяются их плотностью  $\rho$ . Последняя связана со скоростью частицы на ферми-уровне  $v_0$ , равной своему импульсу  $p_0$  в атомной системе единиц, следующей зависимостью:

$$\rho = p_0^3 / 3\pi^2. \quad (1.6)$$

Область применимости для ПСФ определяется условием  $1/\pi p_0 \ll 1$ , которое означает, что плотность системы должна быть высокой, в то время как для газа твёрдых шаров  $p_0 a \ll 1$ , т.е. плотность должна быть низкой. Эти параметры означают, что за рамками этих приближений поправки оказываются малыми, порядка  $1/\pi p_0 \ll 1$  или  $p_0 a \ll 1$ , соответственно. В отношении ПСФО в работе [59] показано, что его область применимости гораздо шире, чем ПСФ. Она определяется соотношением  $1/\pi p_0 < 1$ , а не  $1/\pi p_0 \ll 1$ . Видно, что требования ПСФО менее ограничивающие, что, возможно, объясняет его успех в атомной многочастичной проблеме.

Из этих выражений, которые включают  $p_0$ , видно, что почти невозможно определить реальный малый параметр для сильно неоднородных систем, таких как атом или ядро, где плотность меняется от нуля на поверхности до некоторого значения внутри. Поэтому выбор соответствующего приближения и подтверждение его обоснованности становится очень сложной проблемой для конечных неоднородных систем.

Прежде чем обсуждать детали применения методов ХФ, ПСФО и МТВ к атомной многочастичной проблеме, напомним некоторые другие подходы, которые применяются для решения атомной многочастичной проблемы, но основаны на существенно других идеях. Здесь, во-первых, вспомним так называемый *метод R-матрицы* [60,61], *приближение сильной связи* [62] и *метод наложения конфигураций*

[63]. Весьма эффективным является метод R-матрицы, который дал много интересных результатов. В основном все эти методы, в противоположность ХФ, МТВ и ПСФО, в принципе точны. Но то, что верно в принципе, не всегда верно в реальности. Действительно, чтобы получить конкретные результаты в рамках этих точных методов, необходимыми становятся существенные упрощения. Кроме того, когда используются такие методы как R-матрица или приближение сильной связи, трудно сказать, что реально учитывается в них и чем пренебрегается. Применяя их, трудно дать также физическую интерпретацию механизмов различных рассматриваемых процессов. Прямое сравнение этих методов между собой и с ХФ, МТВ или ПСФО очень сложно.

Развитие теории многоэлектронных эффектов в атомных процессах и проведение с ее помощью массовых расчетов для большого числа атомов и ионов, как положительных, так и отрицательных, продолжается уже в течение более чем тридцати лет. Отметим, что исходные физические формулы, используемые при выводе наших уравнений, брались из известных книг и учебников [ЛЛ,БЛП,ИС].

Эти исследования развивались в тесном взаимодействии с экспериментаторами, работающими в атомной физике. Особые возможности для исследований электронных корреляций в атомных процессах открылись при использовании синхротронного излучения, источники которого функционируют в основном за рубежом России. Многие предсказания, сделанные в рамках работ настоящего цикла, были подтверждены в исследованиях видных зарубежных экспериментаторов.

В данной книге используется аппарат теории многих тел, основанный на последовательном развитии теории возмущений и делающей её особенно наглядной и удобной технике диаграмм. Аппарат квантовой теории многих тел вместе с «рецептами» по использованию диаграммной технике приведены в Главе 2. Краткое изложение этой техники позволяет научиться пользоваться указанным подходом без последовательного изучения его сложных теоретических основ.

Во всех подходах, используемых в данной книге, первым шагом является приближение Хартри-Фока для начального (основного), или дискретного возбужденного состояний атома, и для возбужденных состояний сплошного спектра. К изложению приближения Хартри-Фока мы обратимся в первом разделе 1 Главы 3. Рассмотрению основанных на этом приближении методов ПСФО и обобщений ПСФО посвящены разделы 3.2 и 3.3, соответственно.

В последующих Главах изучаются конкретных физические процессы.

## Литература к гл. 1

1. Хартри Д.Р. Расчеты атомных структур М.: Атомиздат, 1960.
2. Fock V. A. Z. Phys. 1930. V. 61. P. 126 – 135. V. 62. P. 795 – 801.
3. Ramsauer A., Kollath B. Ann. d. Phys., 1921, V. 64. P. 513 - 546.
4. Townsend C., Bailey D., Phil. Mag. 1922. V. 43.P. 593 - 599.
5. Thouless D. J. The Quantum Mechanics of Many-Body Systems, N.-Y. – London: Academic Press, 1961.
6. Langmuir I., Phys. Rev. 1929. V. 33. P. 954-963.
7. Pines D., Bohm D. Phys. Rev. 1952. V. 85. P. 332-341.
8. Brown G. E. 1972, Many-Body problems. North-Holland, Amsterdam, 1972.
9. Landau L. D. Zhur. Exp. Theor. Fiz. 1956. V. 30, P.1058-1066 (in Russian), Soviet Phys. JETP.1956. V. 3. P. 920-927.
10. Migdal A. B. Journal of Physics. 1944. V. 8. P. 331-345.
11. Amusia M. Ya., Connerade J.-P. Rep. Prog. Phys. 2000. V. 63. P. 41 - 70.
12. Feynman R. P. Quantum Electrodynamics. N.-Y., 1961.
13. Goldstone J. Proc. Roy. Soc. London. 1957. V. 239. P. 267 - 277.
14. Pines D. Elementary Excitations in Solids. N.-Y., 1963.
15. Landau L. D. :Zhur. Exp. Theor. Phys. 1958. V. 35. P. 97 - 106 (in Russian), Soviet Physics JETP. 1958. V. 8. P. 70-78.
16. Application of Quantum Field Theory Methods to Many-Body Problems . / Galitskii V.M. Moscow: Gosatomizdat (in Russian), 1963.
17. Bethe H. A. Annual Review of Nuclear Science. 1971. V. 21 P. 93 - 244.
18. Migdal A. B. Theory of Finite Fermi systems and Applications to Atomic Nuclei, N.-Y.: Wiley (Interscience), 1967.
19. Brueckner K. A. Theory of Nuclear Structure. N.-Y.: Wiley, 1959.
20. Froese-Fischer Ch. The Hartree- Fock Method for Atoms. N.-Y.: Wiley (Interscience), 1977.
21. Atomic Inner-Shell Processes, edited by B. Crasemann / Kelly H. P., N.-Y.: Academic Press, 1963.
22. Amusia M. Ya. Phys. Lett., 1965. V. 14. N 1, P. 36-39.
23. Kirzhnits D.A., Lozovik Yu.E., Shpatakovskaya G.V. Uspekhi Fiz. Nauk, 1975. V. 117, P.3-24.
24. Лукирский А.П., Зимкина Т.М., Изв. АН СССР, сер. физическая, 1963. Т. 27, № 327. P. 817-822.
25. Лукирский А. П., Брытов И. А., Зимкина Т. М. Оптика и спектроскопия. 1964. Т. 17. С. 438 -449.
26. Ederer D. L. Phys. Rev. Lett. 1964. V. 13. P. 760-763.
27. Samson J.A.R.. Adv. At. Mol. Phys. 1966. V. 2. P. 178.
28. Лукирский А.П., Зимкина Т.М., Брытов И.А. Известия АН СССР, сер. физическая. 1964. Т. 28. С. 772 - 783.
29. Синаноглу О. Многоэлектронная теория атомов, молекул и их взаимодействий. Ред. С.В.Тябликов. М.: Мир, 1966.
30. Altick P. L., Glassgold A. E. Phys. Rev. A. 1964. V. 133. P. 632-640.
31. Int. Conference on Physics of Electronic and Atomic Collisions, Abstracts of Papers / Lipskii L. M.-L.: Nauka, 1967. P. 197.
32. Brandt W., Eder L., Lundquist S. J. Quant. Spectr. Rad. Transfer. 1967. V. 7. P. 185 -195.

33. *Пайнс Д.* Элементарные возбуждения в твердых телах. Ред. В.Л. Бонч-Бруевич. М.: Мир, 1965
34. *Амусья М.Я., Черепков Н.А., Чернышева Л.В., Шефтель С.И.* ЖЭТФ. 1969. Т. 56. С. 1897-1903.
35. *Амусья М. Я., Черепков Н. А., Чернышева Л.В..* ЖЭТФ. 1971. Т. 60. С. 160-174.
36. *Amusia M. Ya., Cherepkov N. A.* Case Studies in Atomic Physics. 1975. V. 5. P. 47 -179.
37. *Амусья М. Я., Иванов В. К.* Успехи Физических Наук. 1987. Т. 152. С. 185-230.
38. *Amusia M. Ya., Cherepkov N. A., Chernysheva L. V.* Phys. Lett. A. 1970. V. 31. P. 553-554.
39. *Wendin G. J.* Phys. B. 1971. V. 4. P. 1080 - 1091.
40. *Johnson, W., Cheng, K.* Phys. Rev. A. 1979. V. 20. P. 978 - 988.
41. *Lande A., Smith R.A.* Phys. Rev. A. 1992. V. 45. P. 913 - 921.
42. *Sinanoglu O.* Adv. Chem. Phys. 1964. V. 6. P. 315-334.
43. *Nesbet R.K.* Phys. Rev. 1968. V. 155, P.51 - 56; 1969. V. 175, P.2-10.
44. *Green C.* Phys. Rev. A. 1999. V. 49. P. 3278-3285.
45. *Amusia M.Ya.* Applied Optics.1980. V. 19, N. 23. P. 4042-4050.
46. *Амусья М.Я., Иванов В.К., Шейнерман С.А., Шефтель С.И.* ЖЭТФ, 1980. Т. 78. С. 910-923.
47. *Амусья М.Я., Долматов В.К., Иванов В.К.* ЖЭТФ. 1983. Т. 85. С 115-123.
48. *Чернышева Л.В., Амусья М.Я., Давидович Д., Черепков Н.А.* Препринт ФТИ № 663. Л.: изд. ЛИЯФ, 1980.
49. *Грибакин Г. Ф., Гульцев Б. В., Иванов В. К., Кучиев М. Ю.* Изв. ВУЗов. Физика. 1990. Т. 33. С. 86 - 96.
50. *Amusia M.Ya., Gribakin G.F., Tsemekhman K.L., Tsemekhman V.L.* J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 1990. V. 23, N 3. P. 393-402.
51. *Кучиев М.Ю., Шейнерман С.А.* Успехи Физических наук. 1989. Т. 158, № 3. С. 353 - 387.
52. *Амусья М.Я., Чернышева Л.В.* Автоматизированная система исследования структуры атомов, М.-Л.: Наука, 1983.
53. *Correlations in clusters and related systems.* Ed. J.-P. Connerade / *Ivanov V.K.* Singapore: World Scientific Publ., 1996. P. 73-91.
54. *Ivanov V. K.* J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 1999. V. 32, N.1. P. R67-R101.
55. *Correlations in clusters and related systems".* Ed. J.-P. Connerade / *Ivanov V. K., Ipatov A. N.* Singapore: World Scientific Publ., 1996. P 141-167.
56. *Physics of clusters.* Eds. Lakhno V.D. and Chuev G.N / *Ipatov A.N., Ivanov V.K., Agap'ev B.D.* Singapore: Wold Scientific Publ. 1998. P. 224-272.
57. *Semenov S.K., Cherepkov N.A.* Chem. Phys. Lett. 1998. V. 291. P. 375-380.

58. Photoionization in VUV and Soft X-R Energy Region, Eds U. Becker and D. Shirley / *Amusia M. Ya.*, N.-Y. – London: Plenum Press, 1996. P.1 - 46.
59. *Shaginian V.R.* Solid State Communications. 1985. V. 55. P. 9-15.
60. Electronic and Atomic Collisions, ed. by G. Watel / *Burke P. G.* North-Holland, Amsterdam-N.-Y.-Oxford, 1978. P. 201.
61. .Atomic Collisions / *Burke P. G., Joachain C.J.* N.-Y-London.: Plenum Press, London, 1993
62. *Smith K., Henry R. J. W., Burke P. G.* Phys. Rev. 1966. V.147. P. 21-29.
63. *Bates G. N. and Altick P. L.* J. Phys. B. 1973. V. 6. P. 653-661.