

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 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, являются сами по себе весьма сложными системами. Они - всё ещё объекты 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 построен 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, их содержащей, 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, разрешает проводить относительно точные вычисления, используя довольно сложные теоретические подходы.

Результат такого подхода - предмет нашей книги. Главное внимание мы будем уделять представлению результатов вычислений. 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 приближения - Хартри – Фоковского (ХФ), 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, при том 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 объем этих вычислений были определены не только спросом на соответствующие данные, но и техническими возможностями проведения соответствующих вычислений. Вероятно, первой в этом направлении была книга [0.1]. Затем появилось несколько других публикаций [0.2-0.4], где атомные данные сведены в таблицы, с увеличением шаг за шагом качества данных.

В [0.5] и [0.6] 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 около-пороговой 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 надёжностью. 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 вычислениях. Мы представим только главные пункты процедур вычисления.

Предлагаемая книга будет полезна для очень многих специалистов 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 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 [0.1– 0.6].

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, почти все, связанные с 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 два фундаментальных нестареющих руководства - книги: 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*, Наука, Москва, 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 см. и сейчас современную книгу И. И. Собельмана *Введение в теорию атомных спектров*, ГИФМЛ, Москва, 1963. Далее ссылки на все эти источники будут даваться как [ЛЛ], [БЛП], и [ИС], соответственно.

Имеется значительное перекрытие, особенно в обозначениях, диаграммах, которые представляют физические процессы, и в представлении математических формул, используемых в настоящей книге, с предыдущими публикациями: М. Я. Amusia, *Atomic Photoeffect*, Plenum Press, New York and London, 1990 (М. Я. Амусья, *Атомный фотоэффект*, Москва, «Наука», 1987) и М. Я. Amusia and L.V.Chernysheva, *Computation of atomic processes*, IOP Publishing Ltd: Bristol and Philadelphia, 1997 и М. Я. Амусья, В. К. Иванова, Н. А. Черепкова и Л. В. Чернышевой *Процессы в многоэлектронных атомах*, Санкт-Петербург, «Наука», 2006. Ссылки на эти книги будут даваться как [АМ], [АС], и [АИЧЧ], соответственно.

Везде в книге мы используем так называемую *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 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 = $5.29 \cdot 10^{-1}$ нм; энергия $\varepsilon_0 = 2 R_{\infty} = me^4 / \hbar^2 \approx 27.21$ 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 $v_0 = (\varepsilon_0 / m)^{1/2} = e^2 / \hbar \approx 2.188 \cdot 10^6$ 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 $c \approx 137.04$.

Литература к Предисловию

- [0.1] F. Herman and S. Skillman, *Atomic Structure Calculations*, Prentice-Hall Inc., Englewood Cliffs, N.J. (1963).
- [0.2] C. Froese, *Some Hartree-Fock Results for the Atomic Helium to Radon*, University of British Columbia Report, Vancouver, B. C., 1968.
- [0.3] C. W. Nestor, T. C. Tucker, T. A. Carlson, L. D. Roberts, F. B. Malik, , and C. Froese, *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.
- [0.4] C. C. Lu, T. A. Carlson, F. B. Malik, T. C. Tucker, and C. W. Nestor, Jr., *Relativistic Hartree-Fock-Slater Eigenvalues, Radial Expectation Values, and potentials for Atoms, $2 \leq Z \leq 126$* , Atomic Data, **3**, 1-131, 1971.
- [0.5] J. J. Yeh and I. Lindau, *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, **32**, 1-155, 1985.
- [0.6] J. J. Yeh, *Atomic Calculation of Photoionization Cross-Sections and Asymmetry Parameters*, Gordon and Breach Science Publishers, Langhorne, PE (USA), 1993.
- [ЛЛ] Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика. Нерелятивистская теория*, М., Физматгиз, 1962.
- [БЛП] В. Б. Берестецкий, Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский, *Квантовая электродинамика*, Наука, Москва, 1980.
- [ИС] И. И. Собельман *Введение в теорию атомных спектров*, ГИФМЛ, Москва, 1963.
- [АМ] М. Я. Амуся, *Atomic Photoeffect*, Plenum Press, New York and London, 1990 (М. Я. Амуся, *Атомный фотоэффект*, Москва, «Наука», 1987)
- [АС] М. Я. Амуся and L. V. Chernysheva, *Computation of atomic processes*, IOP Publishing Ltd: Bristol and Philadelphia, 1997.
- [АИЧЧ] М. Я. Амуся, В. К. Иванов, Н. А. Черепков и Л. В. Чернышева *Процессы в многоэлектронных атомах*, Санкт-Петербург, «Наука», 2006.