

Глава 3. Рассеяние электронов - теоретический подход

3.1. Наиболее важное о рассеянии частиц на атомах

Рассеяние электронов - процесс, который происходит и в естественных условиях, и в лаборатории. Данные о характеристиках этого процесса требуются 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 рассеяние 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 He. 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 испуститься в виде фотона или быть передана атому-мишени, ведя к его возбуждению или ионизации. Ионизация - 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 ХФ в Разделе 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 Разделе 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 снаряда r , бего спина σ и его энергии $E = p^2 / 2$ [1]:

$$U(r, \vec{\sigma}, E) = V(r, \vec{\sigma}, E) + iW(r, \vec{\sigma}, E), \quad (3.1)$$

где $V(r, \vec{\sigma}, E)$ и $W(r, \vec{\sigma}, E)$ - вещественные функции, последняя из которых прежде всего ответственна за поглощение частицы, описываемой волновой функцией $\psi_E(\vec{r}, \vec{\sigma})$. Уравнение для $\psi_E(\vec{r}, \vec{\sigma})$ выглядит следующим способом:

$$\left[-\frac{\Delta}{2} - \frac{Z}{r} + V(r, \vec{\sigma}, E) + iW(r, \vec{\sigma}, E) \right] \psi_E(\vec{r}, \vec{\sigma}) = E \psi_E(\vec{r}, \vec{\sigma}). \quad (3.2)$$

Это уравнение может быть представлено в интегральной форме [2]:

$$\psi_E(\vec{r}) = \varphi_E(\vec{r}) + \int G_{E(0)}^{(0)}(\vec{r}, \vec{r}') U(r, \vec{\sigma}, E) \psi_E(\vec{r}') d\vec{r}', \quad (3.3)$$

где $\varphi_E(\vec{r})$ - функция свободного движения налетающей частицы с энергией E , $G_E^{(0)}(\vec{r}, \vec{r}')$ - функция Грина кулоновского потенциала с зарядом Z . Эта функция Грина является решением уравнения [2]

$$\left[-\frac{\Delta}{2} - \frac{Z}{r} - E \right] G_E^{(0)}(\vec{r}, \vec{r}') = -\delta(\vec{r} - \vec{r}'). \quad (3.4)$$

Если на «снаряд» действует дополнительный потенциал $\delta U(r)$, то имеем вместо (3.3) следующее интегральное уравнение (см. [ЛЛ]):

$$\psi_E^{\delta U}(\vec{r}) = \psi_E(\vec{r}) + \int G_E^{(U)}(\vec{r}, \vec{r}') \delta U(r, \vec{\sigma}, E) \psi_E^{\delta U}(\vec{r}') d\vec{r}', \quad (3.5)$$

где $G_E^{(U)}(\vec{r}, \vec{r}')$ - решение (3.4) с $U(r, \vec{\sigma}, E)$, добавленным к $-Z/r$.

Выражение (3.1) значительно упрощается в двух предельных случаях: при очень высоких $E = p^2/2 \gg I$, и очень низких $0 < E \ll I$, где I - потенциал ионизации мишени, энергиях E . В обоих случаях можно положить $W(r, \vec{\sigma}, E) = 0$. Что касается $V(r, \vec{\sigma}, E)$, он становится энергетически независимым, и при $E \rightarrow \infty$ равен [3]

$$V(r, \vec{\sigma}, E)|_{E \rightarrow \infty} = -\frac{Z}{r} + \int \frac{\rho(r')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{r}', \quad (3.6)$$

где Z - заряд ядра и $\rho(r)$ - атомная электронная плотность.

При $E \ll I$ потенциал $V(r, \vec{\sigma}, E)$ на больших расстояниях r убывает как [3]

$$V(r, \vec{\sigma}, E) = -\frac{\alpha_d}{2r^4}, \quad (3.7)$$

где α_d - дипольная поляризуемость мишени [см. (1.86)]. Спиновой зависимостью потенциала (3.1), обычно слабой, мы пренебрегаем, так что $U = U(r, E)$ ю

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 $\psi_E(\vec{r}, \vec{\sigma}) - P_{El}(r)$ [см. (1.57)] - может быть представлена при $r \rightarrow \infty$ как

$$P_{El}(r)|_{r \rightarrow \infty} \rightarrow \frac{1}{\sqrt{\pi r}} \sin[pr - l\pi/2 + \delta_l(E)] \quad (3.8)$$

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 $d\sigma_E^{el}(\theta)/d\Omega$ выражается через фазовые сдвиги $\delta_l(E)$ с помощью следующей формулы [ЛЛ]:

$$\frac{d\sigma^{el}(E)}{d\Omega} = \sum_{l,l'=0}^{\infty} \frac{1}{E} (2l+1)(2l'+1) \left(e^{2i\eta_l(E)-2\mu_l(E)} - 1 \right) \left(e^{-2i\eta_{l'}(E)-2\mu_{l'}(E)} - 1 \right) P_l(\cos\theta) P_{l'}(\cos\theta). \quad (3.13)$$

Полное сечение упругого рассеяния получаем после интегрирования (3.13) по $d\Omega$

$$\sigma^{el}(E) \equiv \sum_{l=0}^{\infty} \sigma_l^{el}(E) = \frac{2\pi}{E} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \eta_l(E) e^{-2\mu_l(E)}. \quad (3.14)$$

Аналогично можно получить выражения для сечений неупругого и полного рассеяния [ЛЛ]:

$$\sigma^{in}(E) \equiv \sum_{l=0}^{\infty} \sigma_l^{in}(E) = \frac{2\pi}{E} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) (1 - e^{-4\mu_l(E)}). \quad (3.15)$$

$$\sigma^{tot}(E) \equiv \sum_{l=0}^{\infty} \sigma_l^{tot}(E) = \frac{2\pi}{E} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) [1 - \cos \eta_l(E) e^{-2\mu_l(E)}]. \quad (3.16)$$

Если фазы $\delta_l(E)$ чисто вещественны, что случается, когда каналы неупругого рассеяния закрыты, сечение упругого рассеяния даётся формулой

$$\sigma^{el}(E) = \frac{2\pi}{E} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l(E). \quad (3.17)$$

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 нуль: $\delta_l(E)|_{E \rightarrow \infty} \rightarrow 0$. Тогда есть две возможности для записи $\delta_l(0)$. Если нет никакого обмена между налетающими частицами и атомными электронами, т. е. они не идентичны, 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, обусловленное 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 служат так называемые минимумы 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 всё ещё 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 представлен в начальном i (конечном f) состоянии как произведение плоской волны, описывающей снаряд, и волновой функции мишени $\psi_{i(f)}^{At}(x_1, \dots, x_N)$

$$\Psi_E^{i(f)}(x, x_1, \dots, x_N) = e^{i\vec{p}_i \vec{r}} \psi_{i(f)}^{At}(x_1, \dots, x_N). \quad (3.23)$$

Амплитуда $i \rightarrow f$ перехода $M_{i \rightarrow f}$ даётся выражением

$$M_{i \rightarrow f}(q) = \langle e^{i\vec{p}_f \vec{r}} \psi_f^{At}(x_1, \dots, x_N) | \sum_{j=1}^N \frac{1}{|\vec{r}_j - \vec{r}|} | e^{-i\vec{p}_i \vec{r}} \psi_i^{At}(x_1, \dots, x_N) \rangle. \quad (3.24)$$

После интегрирования по r получаем следующее выражение [ЛЛ]

$$\begin{aligned}
M_{i \rightarrow f}(q) &= \frac{4\pi}{q^2} \sum_{j=1}^N \langle \psi_i^{At}(x_1, \dots, x_j \dots x_N) | e^{i\vec{q}\vec{r}_j} | \psi_f^{At}(x_1, \dots, x_j \dots x_N) \rangle = \\
&= \frac{4\pi}{q^2} \sum_{j=1}^N \int \psi_i^{*At}(x_1, \dots, x_j \dots x_N) e^{i\vec{q}\vec{r}_j} \psi_f^{At}(x_1, \dots, x_j \dots x_N) dx_1 \dots dx_j \dots dx_N
\end{aligned} \tag{3.25}$$

где $\vec{q} = \vec{p}_f - \vec{p}_i$.

Сечение рассеяния выражается через амплитуду $M_{i \rightarrow f}(q)$ с помощью формулы:

$$\frac{d\sigma_{i \rightarrow f}(q)}{d\Omega} = |M_{i \rightarrow f}(q)|^2. \tag{3.26}$$

Следующее выражение называют обобщенной силой осцилляторов (ОСО):

$$G_{i \rightarrow f} = \frac{4\pi}{q^2} |M_{i \rightarrow f}(q)|^2, \tag{3.27}$$

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 (1.5). 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 (1.6):

$$\Sigma_f G_{i \rightarrow f}(q) = N, \tag{3.28}$$

Отметим, что суммирование по f в (3.28) подразумевает и интегрирование по ε .

Очень часто, чтобы описать рассеяние не слишком быстрого 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]):

$$\sigma^{\text{sup}}(E) |_{p \rightarrow 0} = a/p. \tag{3.29}$$

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 \vec{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 \vec{l} характеризует электронные состояния. Поэтому, *спин-орбитальный* потенциал представлен, (см., к примеру, [ИС]), в следующей форме:

$$V_{ls}(r) = \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial r} V(r)(\vec{l}\vec{s}) . \quad (3.30)$$

Таким образом, волновая функция налетающего электрона в одноэлектронном приближении определяется следующим уравнением

$$\left[-\frac{\Delta}{2} - \frac{Z}{r} + V(r) + \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial r} V(r)(\vec{l}\vec{s}) \right] \varphi_E(\vec{r}, \vec{\sigma}) = E \varphi_E(\vec{r}, \vec{\sigma}) . \quad (3.31)$$

В наших вычислениях в качестве одноэлектронного мы используем ХФ приближение, которое рассматривает на равных основаниях налетающий и атомные электроны. Это приближение было описано выше, в разделе 1.2. Волновая функция налетающего электрона $\varphi_E(x)$ есть решение уравнения

$$\begin{aligned} -\frac{\Delta}{2} \varphi_E(x) - \frac{Z}{r} \varphi_E(x) + \sum_{k=1}^N \int dx' \varphi_k^*(x') \frac{1}{|\vec{r}' - \vec{r}|} [\varphi_k(x') \varphi_E(x) - \varphi_E(x') \varphi_k(x)] = \\ = E \varphi_E(x) . \end{aligned} \quad (3.32)$$

Волновые функции занятых состояний $\varphi_k(x)$ ($1 \leq k \leq N; x \equiv \vec{r}, \vec{s}$) определены уравнением, подобным (3.32):

$$\begin{aligned} -\frac{\Delta}{2} \varphi_j(x) - \frac{Z}{r} \varphi_j(x) + \sum_{k=1}^N \int dx' \varphi_k^*(x') \frac{1}{|\vec{r}' - \vec{r}|} [\varphi_k(x') \varphi_j(x) - \varphi_j(x') \varphi_k(x)] = \\ = \varepsilon_j \varphi_j(x) . \end{aligned} \quad (3.33)$$

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 $\varphi_k(x) \equiv \varphi_{\varepsilon(n)lm\sigma}(\vec{r}, s)$ - 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:

$$\varphi_{\varepsilon(n)lm\sigma}(\vec{r}, s) = r^{-1} P_{\varepsilon(n)l}(r) Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \chi_{\sigma}, \quad (3.34)$$

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 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

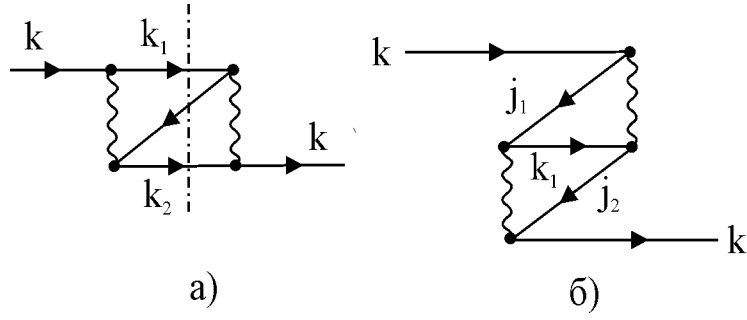
Поляризационное взаимодействие между электроном - снарядом и мишенью-атомом есть результат деформации мишени в ходе процесса столкновения. Налетающий электрон вызывает смещение заряда в атоме-мишени, которое приводит к созданию дипольного момента. Этот дипольный момент действует на налетающий электрон 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 $V(r, \vec{\sigma}, E) \rightarrow \text{Const}$ при $r \rightarrow 0$. Поэтому при любых r потенциал $V(r, \vec{\sigma}, E)$ можно представить полуфеноменологически [3,5] в следующем виде

$$V(r, \vec{\sigma}, E) = -\frac{\alpha_d}{2(r^2 + b^2)^2}, \quad (3.35)$$

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, что бы обеспечить возможно хорошее описание рассеяние 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. Следующие диаграммы описывают его в самом низком порядке теории возмущений по межэлектронному взаимодействию

$$(3.36)$$



(3.37)

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 (3.36а) 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 членами диаграмм (3.36) и (3.37). Мнимая часть сдвига фаз происходит от части вклада диаграмм (3.36а) и (3.37а), возникающего, когда промежуточные состояния, обозначенные вертикальными пунктирными линиями, становятся реальными физическими состояниями. Заметим, что, как нетрудно убедиться, промежуточные состояния диаграмм (3.36б) и (3.37б) могут быть только виртуальными.

Оказалось, что в широкой области энергий налетающих электронов $E = p_k^2/2$ (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 способом:

$$\begin{aligned} & \langle E_i l | \hat{\Sigma}^l(E) | E_f l \rangle = \\ & \frac{1}{(2L+1)} \sum_{\substack{j \leq F, L \\ \varepsilon_1 l_1, \varepsilon_2 l_2 > F}} \int_0^\infty \frac{\langle E_i l, \varepsilon_j l_j | V_L | \varepsilon_1 l_1, \varepsilon_2 l_2 \rangle \langle \varepsilon_1 l_1, \varepsilon_2 l_2 | U_L | E_f l, \varepsilon_j l_j \rangle}{(2L+1)(E - \varepsilon_1 - \varepsilon_2 + \varepsilon_j + i\delta)} d\varepsilon_1 d\varepsilon_2. \end{aligned} \quad (3.38)$$

$$\begin{aligned} & \langle E_i l | \hat{\Sigma}^l(E) | E_f l \rangle = \\ & \frac{1}{(2L+1)} \sum_{\substack{j_1, j_2 \leq F, L \\ \varepsilon_2 l_2 > F}} \int_0^\infty \frac{\langle E_i l, \varepsilon_{j_2} l_{j_2} | V_L | \varepsilon_{j_1} l_{j_1}, \varepsilon_2 l_2 \rangle \langle \varepsilon_{j_1} l_{j_1}, \varepsilon_2 l_2 | U_L | E_f l, \varepsilon_{j_2} l_{j_2} \rangle}{(2L+1)(E - \varepsilon_{j_1} + \varepsilon_2 - \varepsilon_{j_2})} d\varepsilon_2 \end{aligned} \quad (3.39).$$

Здесь $E_{i(f)}l$ обозначает энергию и угловой момент начального (конечного) состояния налетающего электрона, $\varepsilon_1 l_1, \varepsilon_2 l_2$ обозначают 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

$$\Sigma(\vec{r}, \vec{r}', E) \equiv \text{Re} \Sigma(\vec{r}, \vec{r}', E) + i \text{Im} \Sigma(\vec{r}, \vec{r}', E). \quad (3.40)$$

Мнимая часть $\Sigma(\vec{r}, \vec{r}', E)$ определена членом $i\delta$ в (3.38):

$$\text{Im} \langle E_i \ell \| \hat{\Sigma}'(E) \| E_f \ell \rangle = \frac{\pi}{(2L+1)} \times \sum_{\substack{j \leq F, L \\ \varepsilon_1 \ell_1, \varepsilon_2 \ell_2 > F}} \frac{1}{(2L+1)} \int_0^\infty \langle E_i \ell, \varepsilon_j l_j \| V_L \| \varepsilon_1 \ell_1, \tilde{\varepsilon}_2 \ell_2 \rangle \langle \varepsilon_1 \ell_1, \tilde{\varepsilon}_2 \ell_2 \| U_L \| E_f \ell, \varepsilon_j l_j \rangle d\varepsilon_1, \quad (3.41)$$

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 способом

$$-\frac{\Delta}{2} \psi_E(x) - \frac{Z}{r} \psi_E(x) + \sum_{k=1}^N \int dx' \psi_k^*(x') \frac{1}{|\vec{r}' - \vec{r}|} [\psi_k(x') \psi_E(x) - \psi_E(x') \psi_k(x)] + \int dx' \Sigma(x, x', E) \psi_E(x') = E \psi_E(x). \quad (3.42)$$

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]

$$Z(E) = 1 / [1 - \partial \langle E | \hat{\Sigma}(E) | E \rangle / \partial E] < 1 \quad (3.44)$$

В реальных численных расчетах, однако, отклонением Z от 1 пренебрегают, и $\psi_k(x)$ для $k \leq F$ заменяется ХФ волновой функцией $\varphi_k(x)$.

Уравнение (3.42) удобно решить в интегральной форме и в энергетическом представлении,

которое для парциальной волны l имеет вид [8]

$$\begin{aligned} \langle E\ell | \hat{\Sigma}^l(E_1) | E'\ell \rangle &= \langle E\ell | \hat{\Sigma}^l(E_1) | E'\ell \rangle \\ + \sum_{E''} \langle E\ell | \hat{\Sigma}^l(E_1) | E''\ell \rangle &\frac{1}{E_1 - E'' + i\delta} \langle E\ell | \hat{\Sigma}^l(E_1) | E'\ell \rangle. \end{aligned} \quad (3.45)$$

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]

$$e^{i\Delta\delta_l(E)} \sin \Delta\delta_l(E) = \langle E\ell | \hat{\Sigma}^l(E) | E\ell \rangle. \quad (3.46)$$

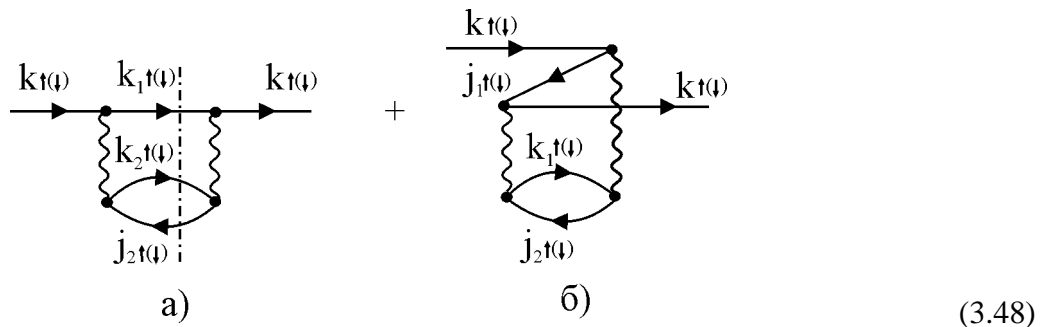
Если в (3.45) используются такие матричные элементы, как $\langle E\ell | \hat{\Sigma}^l(E_1) | E''\ell \rangle$ (3.38) и (3.39), то выражение (3.46) определяет поправки к фазам рассеяния в УПСФО.

При малом поляризационном взаимодействии поправка к фазе определяется вместо (3.46) следующим соотношением [10]

$$\Delta\delta_l(E) = \langle E\ell | \hat{\Sigma}^l(E) | E\ell \rangle. \quad (3.47)$$

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. Раздел 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 Разделе 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 оболочками, 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):



(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 (СП ПСФО) для матричных элементов $\langle E\ell \uparrow(\downarrow) | \hat{\Sigma}'_{\uparrow(\downarrow)}(E_1) | E''\ell \uparrow(\downarrow) \rangle$ 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 $\sigma_{\uparrow(\downarrow)}^{el}(E)$ $\sigma_{\uparrow(\downarrow)}^{in}(E)$ $\sigma_{\uparrow(\downarrow)}^{tot}(E)$, соответственно.

3.5. Неупругое рассеяние электронов низких и средних энергий

Этот процесс обычно рассматривают в так называемом *борновском приближении искаженных волн*. Следующая диаграмма представляет соответствующую амплитуду

(3.50)

Состояния налетающего и уходящих, так же как атомных электронов определены в ХФ приближении. Амплитуда, которая соответствует (3.49), даётся матричным элементом

$$F_{i \rightarrow f j} \equiv \langle E_i j | V | E_f \epsilon \rangle - \langle E_i j | V | \epsilon E_f \rangle. \quad (3.51)$$

Следующее отношение определяет сечение неупругого рассеяния $\sigma_i^{(in)}$ в этом приближении [ЛЛ]

$$\sigma_i^{(in)} = \frac{2\pi}{E_i} \sum_{i \leq F} \int_0^\infty |F_{i \rightarrow f j}|^2 \delta(E_i - E_f - \epsilon + \epsilon_j) dE_f d\epsilon \quad (3.52)$$

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. В качестве примера представим следующую поправку:

$$(3.53)$$

Однако все такие поправки - 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) в области малых q они просто пропорционально либо сечению фотоионизации (1.4), либо силе осциллятора, в зависимости от конечного состояния: является ли оно дискретным возбуждением или принадлежит непрерывному спектру. Энергия ω , переданная атому в процессе столкновения, равна

$$\omega = p^2 / 2M - (\bar{p} - \bar{q})^2 / 2M \quad (3.54)$$

где $E_p = p^2 / M$ - энергия налетающей быстрой частицы. Энергия ω входит в ОСО непосредственно через множитель в (3.27) и косвенно, через энергию E_f состояния f .

В приближении ХФ уравнение (3.24) значительно упрощается, сводясь к следующему

$$g_{fi}(\omega, q) = \frac{2\omega}{q^2} \left| \int \phi_f^*(\vec{r}) \exp(i\vec{q}\vec{r}) \phi_i(\vec{r}) d\vec{r} \right|^2, \quad (3.55)$$

где $\phi_{f,i}(\mathbf{r})$ - волновые ХФ функции. Оператор перехода $\hat{A}(\vec{q}) = \exp(i\vec{q}\vec{r})$ может быть представлен как сумма вкладов с различными мультипольностями. Возьмем хорошо известное соотношение (см., к примеру, [ИС])

$$\exp(i\vec{q}\vec{r}) = \sum (2L+1) j_L(qr) P_L(\cos \theta). \quad (3.56)$$

Здесь $j_L(qr)$ - сферическая функция Бесселя, $P_L(\cos \zeta)$ - полином Лежандра и ζ - угол между векторами \mathbf{q} и \mathbf{r} . Отделяя угловые части одноэлектронной ХФ волновой функций, с помощью (3.56) аналитически выполняем интегрирования по углам в матричных элементах уравнения

(3.55). В результате, наряду с $g_{fi}(\omega, q)$ можно ввести парциальные одноэлектронные ОСО $g_{nl, \ell'}^L(\omega, q)$, с ℓ' , значения которых лежат в следующих пределах $|L - \ell'| \leq \ell' \leq L + 1$.

В вычислениях, представленных в этой книге, мы сохраняем вносящие наибольший вклад в ОСО члены в разложении ОСО, а именно дипольные $L=1$, монопольные $L=0$, квадрупольные $L=2$, и октупольные $L=3$ парциальные ОСО. Так, выполняя численное интегрирование $\hat{A}_l(q)$ и произведения двух ХФ волновых функций, получаем ОСО амплитуды, которые являются матричными элементами $\hat{A}_l(q)$.

Оператор взаимодействия между быстрой заряженной частицей и атомными электронами может быть представлен также в иной форме, нежели $\hat{A}(q) = \exp \hat{A}^r(q) \equiv \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r})$. Эту форму, аналогично случаю фотоионизации [см. (1.3)], можно назвать формой *длины*. Другая подобна форме *скорости* в фотоионизации и выглядит [АС, 14]

$$\hat{A}^v(\omega, q) = \frac{1}{\omega} [\exp(i\vec{q}\vec{r})(\vec{q}\vec{\nabla} - (\vec{q}\vec{\nabla})\exp(i\vec{q}\vec{r}))], \quad (3.57)$$

где верхняя стрелка в $\vec{\nabla}$ подразумевает, что этот оператор действует на функцию, стоящую в матричном элементе слева.

Выражение для ОСО перехода i - f с мультипольностью L в ХФ-приближении $g_{fi}^L(q, \omega_{fi}^{HF})$ следует из (3.54)

$$\begin{aligned} g_{fi}^L(q, \omega_{fi}^{HF}) &= \frac{2\omega_{fi}^{HF}}{q^2} \left| \int \varphi_f^*(\vec{r}) j_L(qr) P_L(\cos \vartheta) \varphi_i(\vec{r}) d\vec{r} \right|^2 \equiv \\ &\equiv \frac{2\omega_{fi}^{HF}}{q^2} \left| \langle f | j_L(qr) | i \rangle \right|^2 \end{aligned} \quad (3.58)$$

где $\varphi_{f,i}(\vec{r}) = R_{\varepsilon_f(n_{f,i})}(r) Y_{l_{f,i} m_{f,i}}(\theta_{\vec{r}}, \varphi_{\vec{r}}) \chi_{s_{f,i}}$ - ХФ одноэлектронные волновые функции с их радиальными, угловыми и спиновыми частями, соответственно; энергия возбуждения i - f обозначена как ω_{fi}^{HF} . Электронная энергия (главное квантовое число), угловой момент, его проекция и спиновые квантовые числа начального i и конечного f состояний обозначены как $\varepsilon_f(n_{f,i})$, $l_{f,i}$, $m_{f,i}$ и $s_{f,i}$, соответственно.

Следующим шагом в вычислении ОСО должен быть учет многоэлектронных корреляций [14]. Это можно сделать только приближённо, из-за очень сложной структуры точных волновых функций $\psi_{f,i}(\vec{r}_1 \dots \vec{r}_N)$. Мы учитываем многоэлектронные корреляции, как правило, в рамках Приближения случайных фаз с Обменом (ПСФО), уже описанного в Разделе 1.5. Это приближение очень успешно применялось и применяется в изучении фотоионизации уже в течение многих лет (см. [АМ] и Глава 2), давая количественно хорошее описание сечений, включая ряд их определенных особенностей, типа Гигантских Резонансов (ГР) в абсолютных сечениях и интерференционных, гигантских автоионизационных и спиново-дублетных резонансов в парциальных сечениях [см. Раздел 1.5]

Чтобы получить матричные элементы оператора перехода $\hat{A}_r(\omega, q)$ в рамках ПСФО, должно было быть решено интегральное уравнение, подобное (1.37). Это уравнение может

быть 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 Разделе 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 Резонансы ОСО, которые при $q \rightarrow 0$ совпадают с Гигантским Резонансом в фотоионизации.

Как и в фотоионизации (см. Раздел 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 $\hat{A}_R^{(o)}(\omega_{IR}, q)$ намного больше, чем $A^{(0)}(q)$. Это обусловлено большой амплитудой $\hat{A}_R^{(i)}(\omega_{IR}, q)$ взаимодействия быстрых заряженных частиц с внутренней подболочкой, которая сильно связана с внешней межбололочным взаимодействием $\hat{U}^{(io)}$ [см. (1.47)]

$$\hat{A}_R^{(o)}(\omega_{IR}, q) \approx \hat{A}_R^{(i)}(\omega_{IR}, q) \times \hat{\chi}^{(i)}(\omega) \times \hat{U}^{(io)} \gg A^{(0)}(q). \quad (3.62)$$

Проявлением деструктивной интерференции является КМ такой, что $\hat{A}_R(\omega_{CM}, q) = 0$, в то время как $A^{(0)}(q) \neq 0$.

Не символически уравнение (3.59) обычно представляют в матричной форме, в которой оно, естественно, выглядит более сложно (для дипольной амплитуды фотоионизации это иллюстрируется (1.37)):

$$\begin{aligned} \langle f | \hat{A}_R(\omega, q) | i \rangle &= \langle f | \hat{A}^{r,v}(q) | i \rangle + \\ &+ \left(\sum_{n' \leq F, k' > F} - \sum_{n' > F, k' \leq F} \right) \frac{\langle k' | \hat{A}_R(\omega, q) | n' \rangle \langle n' f | U | k' i \rangle}{\omega - \varepsilon_{k'} + \varepsilon_{n'} + i\eta(1 - 2n_{k'})} \end{aligned} \quad (3.63)$$

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 v

Процедура решения этого уравнения детально описана в [АЧ], [АМ] и для фотоионизации ПСФО уравнение представлено в Разделе 1.7. Единственное отличие состоит в том, что оператор $\hat{A}^{r,v}(q)$ следует разложить в бесконечный ряд, и дипольной его компонентой можно ограничиться далеко не всегда:

$$A^{r,v}(\vec{q}) = \sum_{L=0}^{\infty} A_L^{r,v}(q) P_L(\cos \theta), \quad (3.64)$$

где $P_L(\cos \theta)$ - полином Лежандра $L^{\text{го}}$ - порядка, θ - угол между \mathbf{r} и \mathbf{q} . После выполнения аналитически интегрирования по θ в (3.63), получаем систему уравнений, отдельно для каждого L . Заметим, что рассматриваемые q обычно заметно больше, чем $k = \omega/c$ - импульс фотона той же переданной энергии ω .

С помощью (3.58) и (3.63), можно представить ОСО с учетом многоэлектронных ПСФО-корреляций в следующей форме:

$$G_{fi}^R(\omega, q) = \frac{2\omega}{q^2} |\langle f | \hat{A}_R(\omega, q) | i \rangle|^2. \quad (3.65)$$

Здесь $\langle f |$ и $| i \rangle$, соответственно, конечное и начальное ХФ состояния.

Чтобы учесть многоэлектронные корреляции в ПСФО, следует решить систему уравнений (3.63), которая после разделения компонент с отличным L для r -формы имеет вид

$$\begin{aligned} \langle f | A_R^L(q, \omega) | i \rangle &= \langle f | j_L(qr) | i \rangle + \\ &+ \left(\sum_{n' \leq F, k' > F} - \sum_{n' < F, k' \leq F} \right) \frac{\langle k' | A_R^L(q, \omega) | n' \rangle \langle n' f | U | k' i \rangle_L}{\omega - \varepsilon_{k'} + \varepsilon_{n'} + i\eta(1 - 2n_{k'})}. \end{aligned} \quad (3.66)$$

Процедура решения этого уравнения детально описана в [АЧ] и Разделе 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, т.к. при $q=0$ ОСО прямо пропорционально интенсивно изучаемым сечениям фотоионизации, результаты для которых представлены в Главе 2. Чрезвычайно сильные многоэлектронные эффекты были найдены в очень широкой области частоты фотона - от внешних подоболочек до значений ω далеко над порогом внутренних подоболочек. Известно, что целый набор разнообразных корреляционных эффектов, а именно внутри- и межоболочечного 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 Разделе 1.10. Приведенные там формулы будут использованы, однако, не только для дипольной, но и других компонент, заменяя в формулах (1.96, 1.97) и им подобным 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 проведено подобно тому, как это сделано в Главе 2, при описании Рис. 2.2_Хе_b7, но с учётом наличия не только дипольного перехода, но и переходов других мультипольностей.

ОСО незаполненных оболочек следует рассматривать подобно тому, как это описано для дипольного перехода в Разделе 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 выгядит следующим образом [БЛП]:

$$\hat{K} = \sum_{i=1}^N \left(-\frac{1}{c} \hat{p}_i \vec{A}(\vec{r}_i) + \frac{1}{2c^2} \vec{A}^2(\vec{r}_i) \right), \quad (3.68)$$

где $\vec{A}(\vec{r}_i)$ - векторный потенциал электромагнитного поля, \vec{r}_i и \hat{p}_i - координата импульс i -го электрона, c - скорость света. Сечение неупругого или комптоновского рассеяние фотонов выражается через вторую степень оператора $\hat{p}_i \vec{A}(\vec{r}_i)/c$ и первую степень $\vec{A}^2(\vec{r}_i)/2c^2$. Но вклад члена $\hat{p}_i \vec{A}(\vec{r}_i)/c$ 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 $\vec{A}^2(\vec{r}_i)/2c^2$.

Для внешнего электромагнитного поля имеем выражение $\vec{A}(\vec{r}_i) \sim \vec{e} \exp(i\vec{k}\vec{r}_i)$, где \vec{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 $\exp(i\vec{k}\vec{r}_i)$:

$$\frac{d\sigma_{if}^C(\omega)}{d\Omega} = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_0 \frac{E - \omega}{E} \sum_f \left| \left\langle i \left| \sum_{j=1}^N e^{i\vec{q}\vec{r}_j} \right| f \right\rangle \right|^2. \quad (3.69)$$

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 \vec{q} - импульс, переданный атому в процессе комптоновского рассеяния, $\vec{q} = \vec{k} - \vec{k}'$, \vec{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 и остаточный ион» в конечном состоянии.

Вклад последнего члена справа в (3.68) может быть выражен через ОСО, данные формулой (3.27), которые определяют неупругое сечение рассеяния быстрой заряженной частицы на атоме. Тогда (3.69) может быть записано следующим способом:

$$\frac{d\sigma_{if}^C(\omega)}{d\Omega} = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_0 \frac{E - \omega}{E} \frac{q^2}{2\omega} \sum_f G_{f \rightarrow i}(\omega, q). \quad (3.70)$$

Комптоновское рассеяние представляет интерес при высоких энергиях E , для средних и тяжёлых атомов приблизительно при десятках и даже сотнях keV , 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 , $\omega \leq 100Ry$, получаем ограничение $\omega/E \ll 1$. Пренебрегая поправками порядками $\omega/E \ll 1$, получаем следующее соотношение

$$q = \frac{2E}{c} \left(1 - \frac{\omega}{2E} \right)^{1/2} \sin \mathcal{G}, \quad (3.71)$$

где $\mathcal{G} = \theta/2$ и θ - угол рассеяния улетающего фотона.

В ХФ приближении сечение комптоновского рассеяния дается (3.70) с ОСО, определенными (3.58):

$$\frac{d\sigma_{HF}^C(\omega)}{d\Omega} = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_0 \frac{E - \omega}{E} \frac{q^2}{2\omega} \sum_{s>F, t \leq F} g_{s \rightarrow t}(\omega, q). \quad (3.72)$$

Здесь суммирование выполняется по всем одноэлектронным состояниям $t \leq F$, занятым в начальном состоянии i атома и возбужденным $s > F$, которые удовлетворяют закону сохранения энергии $\varepsilon_s = \omega + \varepsilon_t$.

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.

Следующий пункт в нашем рассмотрении комптоновского рассеяния должен учесть 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 (3.64) 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 Главе 2, давая в результате матричные элементы $\langle nl | \hat{A}_R^{(L)}(\omega, q) | \mathcal{E}' \rangle$. С помощью этих матричных элементов можно получить парциальные по L значения в ПСФО:

$$G_{nl, \mathcal{E}'}^{RL}(\omega, q) = \frac{2\omega}{q^2} \left| \langle nl | \hat{A}_R^L(\omega, q) | \mathcal{E}' \rangle \right|^2. \quad (3.74)$$

Затем значениями $G_{nl, \mathcal{E}'}^{RL}(\omega, q)$ следует заменить $g_{st}(\omega, q)$ в (3.70), что приводит к соотношению

$$\frac{d\sigma_R^C(\omega, q)}{d\Omega} = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_0 \frac{E - \omega}{E} \frac{q^2}{2\omega} \sum_{s>F, t \leq F, L>0} G_{nl, \mathcal{E}', L}^R(\omega, q). \quad (3.75)$$

которое есть комптоновские сечения 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]:

$$\frac{d\sigma_{i \rightarrow f, L_{if}}^{CR}(\omega_{if}, q)}{d\Omega} = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_0 \frac{E - \omega_{if}}{E} \frac{q^2}{2\omega_{if}} G_{i, f, L_{if}}^R(\omega_{if}, q). \quad (3.76)$$

Здесь $i \rightarrow f$ обозначает дискретный переход из состояния i в f , с энергией возбуждения ω_{if} угловым моментом L_{if} .

В вычислениях сечения комптоновского рассеяния мы ограничимся монопольным, дипольным, квадрупольным и октупольным, $L=0, 1, 2, 3$ переходами. Мы вычисляем $g_{nl, \mathcal{E}'}^L(\omega, q)$ и $G_{nl, \mathcal{E}'}^{RL}(\omega, q)$ в довольно широкой области значений q , $0 \leq q \leq 8 \text{ at.un.}$ и ω до 100-120 Ry. Для разумных значений E , $E > 1000 \text{ Ry}$ с точностью 1-2 %, можно упростить (3.71), сведя его к $q = (E/c)\theta$. Тогда вместо (3.75) получаем

$$\left(\frac{d\sigma_{nl,\varepsilon}^{RC}(\omega, q)}{d\Omega} \right) \bigg/ \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_0 = \frac{q^2}{2\omega} G_{nl,\varepsilon}(\omega, q) \equiv \zeta_{nl,\varepsilon}^R(\omega, q) = \sum_{L=0}^3 \zeta_{nl,\varepsilon,L}^R(\omega, q).$$

$$G_{nl,\varepsilon}(\omega, q) = \sum_{L=0}^3 \sum_{l'} G_{nl,\varepsilon,l'}^L(\omega, q) \quad (3.77)$$

$$\varepsilon = \omega - I_{nl}, \quad q = E\theta/c.$$

Величину $\zeta_{nl,\varepsilon}^L(\omega, q)$ в Главе 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

$$\left(\frac{d\sigma_{nl,\varepsilon}^{C,R}(\omega)}{d\Omega} \right) \bigg/ \left(\frac{d\sigma_{nl,\varepsilon}^{C,HF}}{d\Omega} \right) = G_{nl,\varepsilon}(\omega, q) / g_{nl,\varepsilon}(\omega, q). \quad (3.79)$$

Вычислим также полные сечения комптоновского рассеяния. Для данного переданного углового момента L имеем в ХФ и ПСФО (обозначенного 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 расчётах, что приводит к уравнению

$$\frac{d^2\sigma^{CR,HF}(\omega, q)}{d\omega dq} = \sum_{L=0}^3 \frac{d^2\sigma^{CR,HF,L}(\omega, q)}{d\omega dq} \quad (3.82)$$

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):

$$\sigma_{nl,n'l'}^{CHF}(\omega_{nl,n'l'}) = \frac{1}{2\omega_{nl,n'l'}c^2E^2} \int_0^{q_{\max}} q^3 \left[1 - \frac{1}{2} \left(\frac{qc}{E} \right)^2 \right] g_{nl,n'l'}^L(\omega_{nl,n'l'}, q) dq, \quad (3.85)$$

$$\sigma_{nl,n'l'}^{CR}(\omega_{nl,n'l'}) = \frac{1}{2\omega_{nl,n'l'}c^2E^2} \int_0^{q_{\max}} q^3 \left[1 - \frac{1}{2} \left(\frac{qc}{E} \right)^2 \right] G_{nl,n'l'}^L(\omega_{nl,n'l'}, q) dq, \quad (3.86)$$

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 $\sigma_{nl}^{CHF,R}(\omega)$. Формулы (3.85) и (3.86) будет использоваться ниже, в Главе 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

$$\sigma_0 = \frac{8\pi}{3c^4} \approx 2.3755 \times 10^{-8} \text{ at.un.} \quad (3.87)$$

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

$$\sigma_{nl}^{CHF,R}(\omega) = \frac{c^2}{E^2} \sigma_0 A_{nl}^{HF,R}(\omega). \quad (3.88)$$

В качестве примера, факторы $A_{nl}^{HF,R}(\omega)$ 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 keV, 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, данного (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

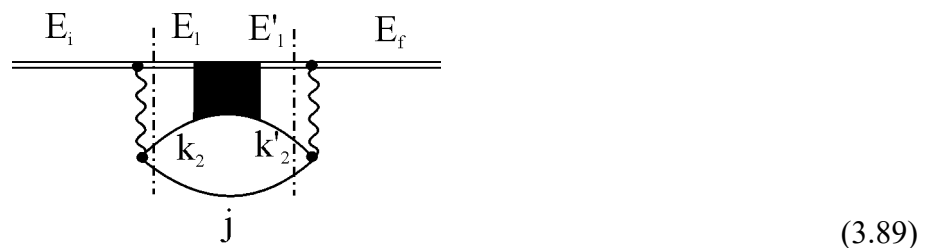
тех же самых объектах. Влияние взаимодействия «мишень-снаряд» наиболее сильно при низких энергиях столкновения. Поэтому мы концентрируемся здесь на этой области энергий.

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 столкновению «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, для позитронов. Например, использование приближения второго порядка при вычислении поляризационного взаимодействия, обсуждённое в Разделе 3.3 и 3.4, должно привести к успеху и при рассмотрении рассеяния позитрона на атоме. При этом ненулевой вклад вносит лишь диаграмма (3.36а). Можно было ожидать, что этот подход, по крайней мере одинаково хорош в описании рассеяния позитрона на атоме, как 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 (3.36а) - единственная диаграмма второго порядка, которая описывает поляризационное взаимодействие позитрона, следующим образом



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

$$\begin{aligned}
& \langle E_i \ell \parallel \hat{\Sigma}^l(E) \parallel E_f \ell \rangle = \\
& \frac{1}{(2l+1)} \sum_{\substack{j \leq F, L \\ \varepsilon_2 l_2 > F}} \int_0^\infty \frac{\langle E_i \ell, \varepsilon_j l_j \parallel V_L \parallel E_1 l_1, \varepsilon_2 l_2 \rangle \langle E_1 l_1, \varepsilon_2 l_2 \parallel V_\ell \parallel E_f \ell, \varepsilon_j l_j \rangle}{(2L+1)(E - E_1 - \varepsilon_2 + \varepsilon_j + i\delta)} dE_1 d\varepsilon_2
\end{aligned} \quad (3.90)$$

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 Ps , I_{Ps} в энергетический знаменатель в (3.90):

$$\begin{aligned}
& \langle E_i \ell \parallel \hat{\Sigma}_{Ps}^l(E) \parallel E_f \ell \rangle = \\
& \frac{1}{(2l+1)} \sum_{\substack{j \leq F, L \\ \varepsilon_2 l_2 > F}} \int_0^\infty \frac{\langle E_i \ell, \varepsilon_j l_j \parallel V_L \parallel E_1 l_1, \varepsilon_2 l_2 \rangle \langle E_1 l_1, \varepsilon_2 l_2 \parallel V_\ell \parallel E_f \ell, \varepsilon_j l_j \rangle}{(2L+1)(E - E_1 - \varepsilon_2 + \varepsilon_j + I_{Ps} + i\delta)} dE_1 d\varepsilon_2
\end{aligned} \quad (3.91)$$

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 $|E_1 l_1, \varepsilon_2 l_2 \rangle$ 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 , выраженное через парциальные фазы рассеяния $\delta_\ell(E)$, даются выражениями (3.14-3.16).

Первый шаг использованного в этой книге подхода – ХФ-расчеты, что означает 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 $\delta_\ell^{HF}(E)$ позитрона, должно быть решено следующее уравнение для волновой функции $\varphi_{e+}(\vec{r})$ позитрона

$$\left[-\frac{\Delta}{2} + \frac{Z}{r} - \int \frac{d\vec{r}' \rho(r')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \right] \varphi_{e+}(\vec{r}) = E \varphi_{e+}(\vec{r}). \quad (3.92)$$

Здесь $\rho(r)$ - плотность электронов в атоме. Асимптотика по r радиальной части $P_{El}^{e+}(r)$ функции $\varphi_{e+}(\vec{r})$ 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 $\Delta \delta_\ell(E)$ к ХФ парциальной фазе рассеяния позитрона, возникающую

вследствие действия $\hat{\Sigma}_{P_s}$, следующей формулой:

$$\Delta\delta_\ell(E) = -\pi \langle E\ell | \hat{\Sigma}_{P_s}^l(E) | E\ell \rangle, \quad (3.93)$$

где $\hat{\Sigma}_{(P_s)}^l(E)$ - ℓ -компонента $\hat{\Sigma}_{(P_s)}$, определенная из (3.91).

Сечение рассеяния с учетом поляризационного взаимодействия определено уравнениями (3.14-3.16), где $\delta_i^{HF}(E)$ заменяется фазами $\delta_\ell(E) = \delta_\ell^{HF}(E) + \Delta\delta_\ell(E)$ для E , до $E < I$, где I есть потенциал ионизации атома-мишени. Для более высоких энергий позитрона фазы рассеяния, данные (3.91), комплексны, и их мнимая часть $\text{Im} \Delta\delta_\ell(E) \equiv \mu_\ell(E)$ определяет сечение неупругого рассеяния позитрона атоме.

Сечение упругого рассеяния для $E > I$ описывается (3.14).

Фактически, метод, описанный в [21, 24], так же, как и (3.91), справедлив, в некотором смысле, и вне рамок второго порядка простой МТВ по межэлектронному взаимодействию. А именно, вычисляя ХФ волновую функцию $\varepsilon_2 l_2$ 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

$$V_{\text{pol}} = -\alpha(\varepsilon) / 2r^4. \quad (3.94)$$

где $\alpha(\varepsilon)$, в отличие от (3.7) и (3.35), есть дипольная динамическая поляризуемость атома, а ε - средняя энергия возбуждения налетающего электрона в промежуточном состоянии.

Следующим шагом, после ХФ, 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

$$V_{\text{pol}}^+ = -\alpha(\varepsilon - I_{P_s}) / 2r^4. \quad (3.95)$$

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 $(\varepsilon - I_{P_s})$ поляризуемость может стать отрицательной, что ведет к отталкивающего вместо притягивающего характера поляризационного взаимодействия (3.95). В таком случае поляризационный потенциал усилит действие потенциала ХФ. Это может повлиять на сечение рассеяния очень

существенно.

Отгалкивающий поляризационный потенциал V_{pol}^+ имеет место в щелочных атомах. Этим, вероятно, объясняется тот факт, что сечение рассеяния позитрона 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 развивающиеся методы, используемые здесь [29-32]. Для удобства, эти ссылки идут с заголовками работы, на которую ссылка даётся.

3.9. Литература к Главе 3

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. *Друкарев 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., Мессу Г.* Теория атомных столкновений. /Пер. с англ.; под ред. Е.Е. Никитина. М.: Мир, 1968.
6. *Kelly H. P.* Phys. Rev. 1968. V. 171. N 1. P. 54 – 60.
7. *Amusia M.Ya., Cherepkov N.A.* Case Studies in Atomic Physics. 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. V. 46, N 6. P. 387-388.
10. *Амусья М. Я., Танчич А., Черепков Н. А., Чернышева Л. В., Шапиро С. Г.* ЖЭТФ. 1975. Т. 68, N 6. С. 2023-2031
11. *Amusia M.Ya., N. A. Cherepkov, L.V. Chernysheva and S. G. Shapiro.* Phys. Lett. A. 1974. V. 46. N 6. P. 387.
12. *Абрикосов А.А., Горьков Л.П., Дзялошинский И.Е.* Методы квантовой теории поля в статистической физике, Издательство "[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., Zhivanovich Zh. and Yanev R.* J. of Phys. B: At. Mol. Phys. 1973. V. 6. P. 1028.
15. *Amusia M. Ya., Chernysheva L.V., Felfli Z. and Msezane A. Z.* Phys. Rev. A. 2002. V. 65. N 5, 54701.
16. *Pratt R. H.* Radiation Physics and Chemistry. 2008. V. 74. N. 6. P. 411-418.
17. *Amusia M. Ya., Chernysheva L. V., Felfli Z. and Msezane A. Z.* Surface Review and Letters. 2002. V. 9. N 2. P. 1155-60.
18. *Amusia M. Ya., Chernysheva L. V., Felfli Z., and Msezane A. Z.* Phys. Rev. A . 2002. V. 65. N. 6, 62705.
19. *M. Ya. Amusia M. Ya., L. V. Chernysheva L. V., Z. Felfli, and A. Z. Msezane.* J. Phys. B, **submitted**, 2009.
20. *Gribakin G. F. and Ludlow J.* Phys. Rev. A. 2004. V. 70. 032720.
21. *Amusia M. Ya., Cherepkov N. A., Chernysheva L. V. and Shapiro S. G.* J. Phys. B. 1976. V. 9, P. L531.
22. *Ficocelli Varracchio E.,* J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 1990. V. 23. P. L779-85.

23. *Ficocelli Varracchio E. and Parcell L. A.*, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 1992. V. 25 P. 3037-3048.
24. *Amusia M. Ya., Cherepkov N. A. and Chernysheva L. V.* JETP. 2003. V. **124** N. 1(7) P. 1-9.
25. *Gribakin G. F. and King W. A.* J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 1994. V. **27**. P. 2639.
26. *Dzuba V. A., Flambaum V. V., Gribakin G. F. and King W. A.* J. Phys. B.: At. Mol. Opt. Phys. 1996. V. **29**. P. 3151.
27. *Amusia M. Ya., Taulbjerg K.* Abstract of ICPEAC- XVII. 1995
28. *Batty C. J., Friedman E., and Gal A.* Physics Reports. 1998. V. **287**. P. 385.
29. *Amusia M. Ya.* The Many-body Approach to Electron-atom Collisions, in: *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, in: *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*, Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena. 2007. V. **161**. P. 112-120.
32. *Amusia M. Ya.*, Fast Electron scattering as a tool to study target's structure, *review*, Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena. 2007. V. **159**. P. 81–90.