

Глава 4. Результаты вычислений

4.1. Способ представления данных и используемые формулы

В этой главе мы даем описание рисунков и таблиц, которые представляют данные, полученные в исследовании упругих и неупругих сечений рассеяния медленных, средней энергии и быстрых электронов e^- и позитронов e^+ . Мы представим полные и парциальные дифференциальные по углу и энергии сечения упругого и неупругого рассеяния, сечение комптоновского рассеяния для ряда атомов и ионов, и положительных и отрицательных. Приведенные обобщенные силы осцилляторов позволяют описать рассеяние любых быстрых заряженных частиц - e^- , протонов и т.п. В ряде случаев будут представлены и экспериментальные данные.

Нумерация рисунков организована, как и в главе 2, следующим образом: сначала идет номер соответствующего раздела, следующие буквы обозначают атом согласно Периодической системе элементов Менделеева. Маленькая буква отвечает за соответствующую рассматриваемую характеристику, обозначая:

a – полные сечения упругого и неупругого рассеяния в приближении Хартри – Фока - ХФ и упрощенном варианте приближения случайных фаз с обменом (ПСФО) – УПСФО,

b – парциальные, соответствующие определённой волне налетающей частицы, сечения упругого рассеяния в ХФ и УПСФО,

c – дифференциальные по углу сечения упругого рассеяния в тех же самых приближениях,

d - s -, p -, d -, и f - фазы рассеяния,

e – плотности обобщенных сил осцилляторов (ОСО) различных мультипольностей в приближениях ХФ и ПСФО,

f - ОСО дискретных уровней, дипольных и октупольных, квадрупольных и монопольных,

g – дифференциальные по углу сечения комптоновского рассеяния с ионизацией или возбуждением дискретных уровней,

h - сечения комптоновского рассеяния для дискретных уровней

i - сечения упругого и неупругого рассеяния позитрона на атоме.

Последняя цифра представляет номер рисунка в рассмотренной группе. Например Рис. 4.2_Ag_a1, обозначает первый рисунок характеристики а атома Ag.

Однако не все упомянутые выше данные доступны для каждого атома. В таких случаях не все буквы будут использоваться в приведенных рисунках. В некоторых случаях мы сравним результаты наших вычислений с экспериментальными данными.

Приведем перечень формул, которые использовались, чтобы описать различные характеристики рассеяния электрона и позитрона.

Упругие и неупругие полные сечения рассеяния определены с помощью соотношений (3.14), (3.17), (3.15) и (3.16), соответственно. Дифференциальные по углу сечения рассеяния получены из (3.13). Фазовые сдвиги s -, p -, d -, и f -волн найдены из асимптотического представления волновых функций (3.8) или по формуле (3.10). Поляризационные поправки в рамках упрощенного ПСФО (УПСФО) получены из (3.46), решая (3.45) с поляризационным взаимодействием, взятым из (3.38) и (3.39).

Полные и парциальные плотности ОСО получены в ХФ из (3.58), в то время как в ПСФО - из (3.65) и (3.66).

Дифференциальные по углу испускания фотона полные и парциальные сечения комптоновского рассеяния определены из (3.70) и (3.71). Парциальный по переданному атому-мишени угловому моменту сечения комптоновского рассеяния получены, используя (3.79) и (3.80). Сечение для дискретного уровня комптоновское возбуждение дается ф-лой (3.76). Отношения сечений комптоновского рассеяния получены, используя ф-л (3.77) и (3.79). Интегральные по углу испускаемого фотона и дифференциальные по его энергии ω сечения комптоновского рассеяния в ХФ и ПСФО даются ф-лами (3.83) и (3.84). Сечения комптоновского сечения возбуждения дискретных уровней определяются в (3.85) и (3.86). Относительные сечения комптоновского возбуждения дискретных уровней даются в (3.78)

Полные упругие и неупругие сечения рассеяния позитрона получены, используя ф-лы (3.14) - (3.16) с хартриевскими фазами и поляризационными поправками к ним, данными в (3.89), где поляризационное взаимодействие определяется ф-лой (3.91). Существенно, что в (3.91) приближенно учтена возможность образования виртуального позитрония Ps.

Напомним, что, как уже отмечалось в Главе 2, нашей целью является не возможно более точное теоретическое описание данных опыта по конкретному атому или иону, а проведение массовых расчётов. Мы выбираем наилучшее, пригодное для такой цели приближение – ПСФО или упрощённое ПСФО (УПСФО), его различные обобщения. Нашей целью является также и демонстрация, попутно, путём сравнения с результатами в ХФ, важности межэлектронных корреляций. Фактически, цель – создание нового исходного приближения, что стимулировало бы последующее проведение более точных измерений и необходимых для их интерпретации более сложных расчётов.

На самих рисунках ХФ, ПСФО и УПСФО обозначены в соответствии со своими английскими названиями HF (Hartree-Fock) и RPAE (Random Phase Approximation with Exchange), SRPAE.

Как и в Главе 2, для удобства читателя и последовательности мы располагаем рассмотренные атомы и ионы в соответствии с периодической системой элементов Менделеева, с тем только изменением, что начнём с атомов и некоторых ионов благородных газов.

Как правило, даже ранее полученные в рамках используемых здесь теоретических подходов и опубликованные результаты, как и в Главе 2, специально пересчитывались для этой книги. Поэтому ссылка на них даётся не просто номером в списке литературы, к примеру, [1], но указанием (см. [1]).

Расчеты сечений электронного (позитронного) и комптоновского рассеяния гораздо более трудоёмки, чем для фотоионизации, а потому проведены для меньшего числа атомов.

4.2. Атомы благородных газов

В этом разделе представлены результаты наших уже известных и новых вычислений полных и парциальных сечений упругого рассеяния электронов и позитронов на всех атомах благородных газов в ХФ и с учётом поляризационного взаимодействия в Упрощённом приближении случайных фаз с обменом – УПСФО (см. Разделы 3.3 и 3.4 и [АИЧЧ]) и виртуального образования позитрония (См. Раздел 3.8). В формировании поляризационного взаимодействия учтены возбуждения электронов $1s^2$ в He, $2s^2, 2p^6$ в Ne, $3s^2, 3p^6$ в Ar, $3d^{10}, 4s^2, 4p^6$ в Kr и $4d^{10}, 5s^2, 5p^6$ в Xe В этом же приближении

вычислены s, p, d, f – фазы рассеяния и соответствующие парциальные сечения.. Представлены результаты дифференциальных по углу рассеяния сечений для некоторых энергий. Приведены обобщённые силы осцилляторов (ОСО) и сечения комптоновского рассеяния фотонов с учётом ПСФО корреляций упомянутых выше электронов. Приведены ОСО и сечения комптоновского возбуждения нескольких первых дискретных уровней некоторых атомов благородных газов. Даются также ОСО для $3d_{5/2}, 3d_{3/2}$ электронов Хе.

Рисунки 4.2_He представляют результаты вычислений для He.

Рис. 4.2_He_a1 изображает сечение упругого (в ХФ и УПСФО) и неупругого (в УПСФО) рассеяния электронов на атоме He (см. [1,2]). Эксперимент из [3-5]. Видна значительнейшая роль УПСФО поправок, убывающих по мере уменьшения энергии налетающего электрона от 30 eV до 0.

Рис. 4.2_He_b1 представляет вклад $s-, p-, d-, f$ – парциальных волн в сечение упругого рассеяния электронов на атоме He. Как и должно быть, при малых энергиях доминирует вклад s – волны. Вклады других волн растут от $E = 0$.

Рис. 4.2_He_c1 даёт дифференциальное по углу сечение рассеяния электронов с различными импульсами p на атоме He. В сечении доминирует максимум рассеяния вперёд и имеется максимум в рассеянии назад.

Рис. 4.2_He_d1 приводит фазы различных парциальных волн в рассеянии электронов на атоме He. При импульсе электрона $p \rightarrow 0$ все фазы, кроме δ_s , как и должно быть стремятся к нулю. При $p \rightarrow 0$ фаза s – волны отличается от других знаком производной – она отрицательна.

Рис. 4.2_He_e1. представляет плотности монополярных обобщенных сил осцилляторов атома He в ПСФО как функции переданной атому энергии при различных q (см. [6, 7]). С ростом q в ОСО возникает максимум на пороге, смещающийся затем в сторону больших энергий ω .

Рис. 4.2_He_e2 изображает плотности дипольных обобщенных сил осцилляторов атома He в ПСФО как функции переданной атому энергии при различных q (см. [7]). Видно, как с ростом q формируется второй максимум и подавляется, вплоть до исчезновения при $q = 0$ первый.

Рис. 4.2_He_e3 даёт плотности квадрупольных обобщенных сил осцилляторов атома He в ПСФО как функции переданной атому энергии при различных q (см. [7]). Заслуживает внимания максимум, который сдвигается в сторону больших ω с ростом q .

Рис. 4.2_He_f1 приводит обобщенные силы осцилляторов дискретных монополярных возбуждений He из 1s-состояния (1s-2s, 1s-3s, 1s-4s) как функции переданного атому момента (см. [7]). Экспериментальные данные взяты из [8]. Обращает внимание согласие с опытом, оказавшимся способным различить сравнительно близко лежащие дискретные уровни.

Рис. 4.2_He_f2 изображает обобщенные силы осцилляторов дискретных дипольных возбуждений He из 1s-состояния (1s-2p, 1s-3p, 1s-4p) как функции переданного атому момента. Экспериментальные данные взяты из [8]. Согласие эксперимент – расчёт хорошее.

Рис. 4.2_He_f3 представляет обобщенные силы осцилляторов дискретных квадрупольных возбуждений He из 1s-состояния (1s-3d, 1s-4d, 1s-5d) как функции переданного атому момента. Виден квадрупольный максимум.

Рис. 4.2_He_f4 даёт обобщенные силы осцилляторов дискретных дипольного 1s-3p и

квадрупольного $1s-4d$ возбуждений Ne как функции переданного атому момента и их сумма. Экспериментальные данные взяты из [8]. Комбинацию дипольного и квадрупольного уровней полезно рассмотреть потому, что они экспериментально почти неразличимы из-за близости энергий. Однако влияние квадрупольного перехода пренебрежимо мало

Рис. 4.2_Ne_f5 изображает обобщенные силы осцилляторов дискретных дипольного $1s-4p$ и квадрупольного $1s-4d$ возбуждений Ne как функций переданного атому момента и их сумма. Экспериментальные данные взяты из [8]. Обсуждение см. при Рис. 4.2_Ne_f4

Рис. 4.2_Ne_i1 даёт сечение упругого (в ХФ и УПСФО) и неупругого (в УПСФО) рассеяния позитронов на атоме Ne. Заметим, что УПСФО для $e^+ + A$ рассеяния включает учёт образования виртуального позитрония (см. [9, 10]). Вклад неупругого рассеяния вплоть до энергии позитрона $16eV$ пренебрежимо мал. Эксперимент взят из [11].

Рисунки 4.2_Ne приводит результаты вычислений для атома Ne

Рис.4.2_Ne_a1. изображает сечение упругого (в ХФ и УПСФО) (см. [1, 2]) и неупругого (в УПСФО) рассеяния электронов на атоме Ne. Роль корреляций при малых энергиях электрона $E < 25eV$ становится всё более значительной.

Рис. 4.2_Ne_b1 представляет вклады парциальных волн в сечение упругого рассеяния электронов на атоме Ne. Наибольший вклад вносит максимум в p – волне, определяющий форму сечения упругого рассеяния при малых E . С ростом энергии электронов всё более значителен вклад высоких парциальных волн.

Рис. 4.2_Ne_c1 даёт дифференциальное по углу сечение рассеяния электронов с различными моментами на атоме Ne. Экспериментальные данные взяты из [12].

Рис. 4.2_Ne_d1 приводит ХФ фазы различных парциальных волн в рассеянии электронов на атоме Ne. Здесь не только s -, но и p - фаза имеют отрицательную производную во всём рассмотренном диапазоне энергий.

Рис. 4.2_Ne_e1 даёт плотности монополярных обобщенных сил осцилляторов атома Ne в ПСФО как функции переданной атому энергии при различных q (см. [13]). Видно, как с ростом q монополярная ОСО быстро растёт и явственно проступает максимум в ОСО, смещающийся с ростом q в сторону больших энергий.

Рис. 4.2_Ne_e2 изображает плотности дипольных обобщенных сил осцилляторов атома Ne в ПСФО как функции переданной атому энергии при различных q (см. [14]). В отличие от Рис. 4.2_Ne_e1, максимум присутствует при всех q , смещаясь слегка в сторону больших переданных энергий, и несколько убывая при этом по величине.

Рис. 4.2_Ne_e3 представляет плотности квадрупольных обобщенных сил осцилляторов атома Ne в ПСФО как функции переданной атому энергии при различных q (см. [13]). Поведение второго максимума (на вставке) резко отличается от случая дипольных ОСО (ср. вставку на Рис. 4.2_Ne_e2).

Рис. 4.2_Ne_e4 приводит плотности октупольных обобщенных сил осцилляторов атома Ne в ПСФО как функции переданной атому энергии при различных q (см. [14]). Здесь рост q имеет своим результатом весьма значительное увеличение энергии максимума.

Рис. 4.2_Ne_f1 даёт обобщенные силы осцилляторов двух очень близких по энергии дискретных монополярного и квадрупольного возбуждений $2p-3p$ атома Ne как функции квадрата переданного атому момента q в ПСФО (см. [13]). Видно, что второй максимум есть только у квадрупольного уровня. На эксперименте различить столь близкие уровни крайне сложно, а потому приводится сумма ОСО двух уровней.

Рис. 4.2_Ne_f2 изображает обобщенные силы осцилляторов дискретных монополярного

и квадрупольного возбуждений 2p-4p атома Ne как функции квадрата переданного атому момента q в ПСФО (см. [2.13]). Картина близка к изображённой на Рис. 4.2_Ne_f1.

Рис. 4.2_Ne_f3 представляет обобщенные силы осцилляторов дискретных квадрупольных возбуждений 2p-4f и 2p-5f атома Ne как квадрата переданного атому момента q в ПСФО (см. [2.13]). Виден быстрый рост ОСО с увеличением q^2 вплоть до достижения максимума при $q^2 \approx 0.3$.

Рис. 4.2_Ne_f4 сопоставляет обобщенные силы осцилляторов дискретных дипольных возбуждений 2p-3s, 2p-4s атома Ne как функции квадрата переданного атому момента q в ХФ и ПСФО (см. [14]). Формы подобны, а величины заметно различаются. При $q^2 \approx 9$ ОСО для обоих уровней имеют максимум, хотя и уступающий ОСО при $q^2 = 0$ более, чем на два порядка.

Рис. 4.2_Ne_f5 даёт обобщенные силы осцилляторов дискретных дипольных возбуждений 2p-3d, 2p-4d атома Ne как функции квадрата переданного атому момента q в ХФ и ПСФО (см. [14]). ОСО с ростом q убывают монотонно и заметно меньше, чем у $p-s$ переходов, изображённых на Рис. 4.2_Ne_f4.

Рис. 4.2_Ne_f6 изображает обобщенные силы осцилляторов дискретных октупольных возбуждений 2p-3d, 2p-4d атома Ne как функции квадрата переданного атому момента q в ХФ и ПСФО (см. [14]). Формы ОСО для обоих переходов просты и совпадают.

Рис. 4.2_Ne_f7 представляет обобщенные силы осцилляторов дискретных дипольного и октупольного возбуждений 2p-3d атома Ne как функции квадрата переданного атому момента q в ПСФО (см. [14]). Хотя поведение уровней существенно различно, они столь близки по энергии, что стоит говорить лишь о сумме их ОСО.

Рис. 4.2_Ne_f8 даёт обобщенные силы осцилляторов дискретных дипольного и октупольного возбуждений 2p-4d атома Ne как функции квадрата переданного атому момента q в ПСФО (см. [13]).

Рис. 4.2_Ne_g1 приводит сечение монопольного комптоновского рассеяния электронов энергии $E = 2000Ry$ на атоме Ne в ПСФО как функцию переданных атому момента q , различных энергий ω и при переданном угловом моменте $L = 0$ (см. [15]). Обращаем внимание на большой диапазон рассмотренных значений q , $0 < q < 8$. С ростом ω максимум снижается и перемещается в сторону больших q .

Рис. 4.2_Ne_g2 изображает сечение дипольного комптоновского рассеяния электронов энергии $E = 2000Ry$ на атоме Ne в ПСФО как функцию переданных атому момента q , при различных энергиях ω и при переданном угловом моменте $L = 1$ (см. [15]). Второй максимум с ростом ω уходит в сторону больших q .

Рис. 4.2_Ne_g3 представляет сечение квадрупольного комптоновского рассеяния электронов энергии $E = 2000Ry$ на атоме Ne в ПСФО как функцию переданных атому момента q , различных энергий ω и при переданном угловом моменте $L = 2$ (см. [15]). Второй максимум с ростом ω уходит в сторону больших q .

Рис. 4.2_Ne_g4 даёт сечение октупольного комптоновского рассеяния электронов энергии $E = 2000Ry$ на атоме Ne в ПСФО как функцию переданных атому момента q , при различных энергиях ω и при переданном угловом моменте $L = 3$ (см. [15]). Второй максимум находится вне пределов рисунка.

Рис. 4.2_Ne_h1 приводит относительное сечение комптоновского возбуждения дипольных уровней $2p-3s$ и $2p-4s$ атома Ne в ПСФО (см. [16]). Обращает внимание наличие двух максимумов в сечении.

Рис. 4.2_Ne_h2 изображает относительное сечение комптоновского возбуждения дипольного и октупольного уровней $2p-3d$ атома Ne в ПСФО (см. [16]). Здесь, в отличие от Рис. 4.2_Ne_h1, максимум в сечении – один.

Рис. 4.2_Ne_h3 представляет относительное сечение комптоновского возбуждения квадрупольного и монопольного почти точно вырожденных уровней $2p-3p$ атома Ne в ПСФО (см. [16]). Отчётливо видны два максимума в сечении.

Рис. 4.2_Ne_h4 даёт относительное сечение комптоновского возбуждения ряда близких по энергии дипольных, монопольных, октупольных и квадрупольных уровней $2p-3d, 2p-4p, 2p-4d, 2p-4s$ атома Ne в ПСФО (см. [16]). Как и в Рис. 4.2_Ne_h3, видны два максимума в сечении.

Рис. 4.2_Ne_i1 приводит сечение упругого и неупругого рассеяния позитронов на атоме Ne в ХФ и УПСФО (см. [10]). Поляризационное взаимодействие учитывает возбуждение $2s, 2p$ подболочек и образование виртуального позитрония. Экспериментальные данные взяты из [17] и согласие с ними очень хорошее.

Рисунки 4.2_Ar содержат результаты вычислений для Ar

Рис. 4.2_Ar_a1 приводит сечение упругого (в ХФ и УПСФО) и неупругого (в УПСФО) рассеяния электронов на атоме Ar (см. [1, 2]). Экспериментальные данные взяты из [18, 19]. Минимум в сечении, именуемый *минимумом Рамзауэра* [20], возникает лишь при учёте поляризационного взаимодействия.

Рис. 4.2_Ar_b1 изображает вклад парциальные волн в сечение упругого рассеяния электронов на атоме Ar в УПСФО. Обращает на себя внимание мощный максимум в d -волне, который с дальнейшим ростом заряда ядра переходит в связанный $3d$ -уровень. Именно он определяет сечение упругого рассеяния за минимумом Рамзауэра.

Рис. 4.2_Ar_c1 даёт дифференциальное по углу сечение рассеяния электронов на атоме Ar. Имеется три максимума – при 0^0 , 100^0 и 180^0 Экспериментальные данные взяты из [21]. Согласие их с результатами расчёта хорошее.

Рис. 4.2_Ar_c2 представляет дифференциальное по углу сечение рассеяния электронов на атоме Ar. Результаты близки к представленным на Рис. 4.2_Ar_c1. Данные эксперимента взяты из [12]. Роль корреляций заметна и улучшает согласие с опытом.

Рис. 4.2_Ar_d1 приводит ХФ фазы различных парциальных волн в рассеянии электронов на атоме Ar. Как и должно быть в соответствие с (3.21), при нулевой энергии электрона s -фаза равна 3π , p -фаза - 2π , а d, f фазы обращаются в нуль, если их все определить так, что при $E \rightarrow \infty$ фазы $\delta_l \rightarrow 0$.

Рис. 4.2_Ar_e1 изображает плотности монопольных обобщенных сил осцилляторов атома Ar в ПСФО как функции переданной атому энергии при различных q (см. [7]). Видно увеличение энергии максимума с ростом q .

Рис. 4.2_Ar_e2 даёт плотности дипольных обобщенных сил осцилляторов атома Ar в ПСФО как функции переданной атому энергии при различных q (см. [7]). Величина дипольных ОСО на порядок больше и монопольных (Рис. 4.2_Ar_e1) и квадрупольных (Рис. 4.2_Ar_e3.)

Рис. 4.2_Ar_e3 представляет плотности квадрупольных обобщенных сил осцилляторов атома Ar в ПСФО как функции переданной атому энергии при различных q (см. [7]).

Отчётливо видно движение максимума в сторону больших энергий с ростом q .

Рис. 4.2_Ag_e4 приводит плотности октупольных обобщенных сил осцилляторов атома Ag в ПСФО как функции переданной атому энергии при различных q (см. [7]). Отмечается смещение максимума к более высоким энергиям с ростом q .

Рис. 4.2_Ag_f1 содержит обобщенные силы осцилляторов дискретных монополюного и квадрупольного возбуждений 3p-4p атома Ag как функции квадрата переданного электроном атому момента q в ПСФО (см. [13]). Квадрупольные ОСО имеет два максимума, но вследствие близости монополюного и квадрупольного уровня измеримо лишь ОСО суммы, где следом максимума остаётся небольшой перегиб (см. врезку).

Рис. 4.2_Ag_f2 изображает обобщенные силы осцилляторов дискретных монополюного и квадрупольного возбуждений 3p-4p атома Ag как функции переданного атому момента q в ПСФО (см. [13]). В рассмотренной области q ОСО имеет один максимум. Экспериментальные данные взяты из [22]. Видно заметное различие по величине, увеличивающееся с ростом $q^2 > 0.5$.

Рис. 4.2_Ag_f3 изображает обобщенные силы осцилляторов дискретных монополюного и квадрупольного возбуждений 3p-5p атома Ag как функции квадрата переданного электроном атому момента q в ПСФО (см. [13]). Оба перехода имеют максимум при $q^2 < 0.5$, тогда как в квадрупольной ОСО имеется второй, малый максимум при $q^2 < 10$.

Рис. 4.2_Ag_f4 сопоставляет обобщенные силы осцилляторов дискретных квадрупольных возбуждений 3p-4f и 3p-5f атома Ag как функции квадрата переданного электроном атому момента q в ПСФО (см. [13]). В рассмотренной области q ОСО имеет один максимум.

Рис. 4.2_Ag_f5 приводит обобщенные силы осцилляторов дискретных дипольных возбуждений 3p-4s и 3p-5s атома Ag как функции квадрата переданного электроном атому момента q в ПСФО (см. [14]). В обоих уровнях ОСО имеет характерный, при одинаковых q^2 , максимум.

Рис. 4.2_Ag_f6 изображает обобщенные силы осцилляторов дискретных дипольных возбуждений 3p-3d и 3p-4d атома Ag как функции квадрата переданного электроном атому момента q в ПСФО (см. [14]). ОСО монотонно убывает с ростом q .

Рис. 4.2_Ag_f7 даёт обобщенные силы осцилляторов дискретных октупольных возбуждений 3p-3d и 3p-4d атома Ag как функции квадрата переданного электроном атому момента q в ПСФО (см. [14]). Как и все, кроме дипольной, данная ОСО растёт с увеличением q от $q=0$, достигая максимума при $q^2 \approx 1.7$.

Рис. 4.2_Ag_f8 представляет обобщенные силы осцилляторов дискретных дипольных и октупольных возбуждений 3p-3d атома Ag как функции квадрата переданного электроном атому момента q в ПСФО (см. [14]). Поскольку уровни по энергии очень близки, представлена также и сумма их ОСО. Октупольная ОСО имеет один максимум при $q^2 \approx 1.25$, а дипольная стремительно убывает с ростом q^2 до 3, с тем, чтобы образовать широкий и небольшой максимум при $q^2 \approx 17$.

Рис. 4.2_Ag_f9 приводит обобщенные силы осцилляторов дискретных дипольного и октупольного возбуждений 3p-4d атома Ag как функции квадрата переданного электроном атому момента q в ПСФО (см. [14]). Из-за близости уровней наблюдаемой величиной является по сути лишь сумма их ОСО.

Рис.4.2_Ar_f10 изображает обобщенные силы осцилляторов дискретных дипольных возбуждений $3p-3d$, $5s$ атома Ag как функции переданного атому момента q в ПСФО (см. [14]). ОСО быстро убывает с ростом q до $q^2 \approx 1$, а затем выходит на плато. Экспериментальные данные взяты из [22]. Согласие представляется удовлетворительным.

Рис. 4.2_Ar_f11 даёт обобщенную силу осциллятора дискретного дипольного возбуждения $3p-4s$ атома Ag как функцию квадрата переданного электроном атому момента q в ХФ и ПСФО (см. [23]). Экспериментальные данные взяты из [22]. Расчёт хорошо передаёт положение минимума в ОСО. Различие в его глубине может быть отчасти связано с разрешающей способностью экспериментальной установки в [22], но может быть и отражением необходимости выхода в окрестности минимума за рамки первого борновского приближения.

Рис. 4.2_Ar_f12 изображает обобщенную силу осциллятора дискретного монополюсного возбуждения $3p-4p$ атома Ag как функцию квадрата переданного электроном атому момента q в ХФ и ПСФО (см. [13]). Экспериментальные данные взяты из [24]. Имеется качественное согласие, но существенное количественное различие.

Рис. 4.2_Ar_f13 представляет обобщенную силу осциллятора дискретного квадрупольного возбуждения $3p-4p$ атома Ag как функцию квадрата переданного электроном атому момента q в ХФ и ПСФО (см. [13]). ОСО имеет два максимума, первый из которых, при меньшем q , на порядок больше второго. Экспериментальные данные взяты из [24]. Имеется качественное согласие, но существенное количественное различие.

Рис. 4.2_Ar_g1 приводит сечение монополюсного комптоновского рассеяния электронов энергии $E = 2000Ry$ на атоме Ag в ПСФО как функцию переданных атому момента q , различных энергий ω и при переданном угловом моменте $L = 0$ (см. [15]). Обращаем внимание на большой диапазон рассмотренных значений q , $0 < q < 8$ и систематическое смещение максимума в сторону больших q с ростом ω .

Рис. 4.2_Ar_g2 изображает сечение дипольного комптоновского рассеяния электронов энергии $E = 2000Ry$ на атоме Ag в ПСФО как функцию переданных атому момента q , различных энергий ω и при переданном угловом моменте $L = 1$ (см. [15]). Максимум с ростом ω переходит в сторону больших q .

Рис. 4.2_Ar_g3 представляет сечение квадрупольного комптоновского рассеяния электронов энергии $E = 2000Ry$ на атоме Ag в ПСФО как функцию переданных атому момента q , различных энергий ω и при переданном угловом моменте $L = 2$ (см. [15]). Сечение имеет два максимума, которые с ростом ω уходят в сторону больших q .

Рис. 4.2_Ar_g4 даёт сечение октупольного комптоновского рассеяния электронов энергии $E = 2000Ry$ на атоме Ag в ПСФО как функцию переданных атому момента q , различных энергий ω и при переданном угловом моменте $L = 3$ (см. [15]). Виден один максимум, который с ростом ω уменьшается по величине и перемещается, как и на предыдущих рисунках, в сторону больших q .

Рис. 4.2_Ar_h1 приводит относительные сечения комптоновского возбуждения дипольных уровней $3p-4s$, $3p-5s$ атома Ag в ПСФО (см. [16]). Отчётливо видна двугорбая структура ОСО. При переходе от $3p-4s$ к $3p-5s$ ОСО значительно убывает.

Рис. 4.2_Ar_h2 изображает относительные сечения комптоновского возбуждения дипольных и октупольных уровней $3p-3d$ атома Ag в ПСФО (см. [16]).

Рис. 4.2_Ar_h3 представляет относительные сечения комптоновского возбуждения квадрупольного и монопольного $3p-4p$ уровней, почти точно вырожденных, атома Ar в ПСФО (см. [16]). Виден след квадрупольного максимума в сечении.

Рис. 4.2_Ar_h4 даёт относительные сечения комптоновского возбуждения квадрупольного и монопольного $3p-4p$ уровней, почти точно вырожденных, атома Ar в ПСФО (см. [16]). Виден след квадрупольного максимума в сечении.

Рис. 4.2_Ar_h5 приводит относительное сечение комптоновского возбуждения ряда уровней: монопольного, дипольного, квадрупольного и октупольного $3p-5p, 3p-3d, 3p-4d, 3p-5s$ и некоторых их комбинаций для атома Ar в ПСФО (см. [16]). Уровни близки по энергии. Обращает внимание наличие двух максимумов в «дипольном + октупольном» сечении, не заметный после суммирования по другим близким переходам и разным мультипольностям.

Рис. 4.2_Ar_i1. даёт сечение упругого рассеяния позитронов на атоме Ar в ХФ и УПСФО (см. [10]). Экспериментальные данные взяты из [17]. Поляризационное взаимодействие учитывает возбуждение $3s, 3p$ подболочек и образование виртуального позитрония. Однако отличие от данных эксперимента велико, хотя расчёт и воспроизводит значительное изменение в скорости убывания сечения при 2-2.5 эв.

Рисунки 4.2_Kr содержат результаты вычислений для Kr

Рис. 4.2_Kr_a1 изображает сечение упругого (в ХФ и УПСФО) и неупругого (в УПСФО) рассеяния электронов на атоме Kr (см. [1, 2]). Роль электронных корреляций велика вплоть до энергии электрона в 20 эв. Минимум Рамзауэра [20] возникает лишь при учёте поляризационного взаимодействия. В вычислениях полагалось, что вклад в него вносят подболочки $3d, 4s, 4p$.

Рис. 4.2_Kr_b1 представляет вклад парциальные волны в сечение упругого рассеяния электронов на атоме Kr. Обращает на себя внимание мощный максимум в d -волне, который с дальнейшим ростом заряда ядра переходит в связанный $4d$ -уровень. Именно он определяет глубину минимума Рамзауэра. Учитывался вклад в поляризационное взаимодействие от подболочек $3d, 4s, 4p$.

Рис. 4.2_Kr_c1 даёт дифференциальное по углу сечение рассеяния электронов с различными моментами на атоме Kr. Помимо максимумов в рассеянии вперёд и назад, дифференциальное сечение имеет ещё два максимума против одного в аргоне – см. Рис. 4.2_Ar_c1.

Рис. 4.2_Kr_d1 изображает ХФ фазы различных парциальных волн в рассеянии электронов на атоме Kr. Как и должно быть в соответствие с (3.21), при нулевой энергии электрона s -фаза равна 4π , p -фаза - 3π , d -фаза - 2π , а f фаза обращается к нулю, если их определить так, что при $E \rightarrow \infty$ все фазы $\delta_l \rightarrow 0$.

Рис. 4.2_Kr_e1 приводит плотности монопольных обобщенных сил осцилляторов атома Kr в ПСФО как функции переданной атому энергии при различных q (см. [7]). Кривые довольно сложные. Их максимумы с ростом q перемещаются в сторону больших энергий.

Рис. 4.2_Kr_e2 представляет плотности дипольных обобщенных сил осцилляторов атома Kr в ПСФО как функции переданной атому энергии при различных q (см. [7]). Величина дипольных ОСО на порядок больше и монопольных (Рис. 4.2_Kr_e1) и квадрупольных (Рис. 4.2_Kr_e3). Максимумы с ростом q уменьшаются и перемещаются в сторону больших энергий.

Рис. 4.2_Kr_e3 даёт плотности квадрупольных обобщенных сил осцилляторов атома Кг в ПСФО как функции переданной атому энергии при различных q (см. [7]). Кривые ОСО в рассмотренной области q и ω имеют два максимума. Первый, на порядок больший, с ростом q смещается в сторону больших энергий. Второй показан на врезке. Видно перемещение максимума в сторону больших энергий с ростом q .

Рис. 4.2_Kr_e4 изображает плотности октупольных обобщенных сил осцилляторов атома Кг в ПСФО как функции переданной атому энергии при различных q (см. [7]). Поведение ОСО весьма экзотично, и характеризуется многими максимумами, притом для высоких энергий весьма большими.

Рис. 4.2_Kr_f1 приводит обобщенные силы осцилляторов дискретных монополюсного и квадрупольного возбуждений 4р-5р атома Кг как функции квадрата переданного атому момента q в ПСФО (см. [13]). Квадрупольные ОСО имеет два максимума, но вследствие близости монополюсного и квадрупольного уровня измеримо лишь ОСО суммы, где следом максимума остаётся очень небольшой перегиб (см. врезку).

Рис. 4.2_Kr_f2. изображает обобщенные силы осцилляторов дискретных монополюсного и квадрупольного возбуждений 4р-6р атома Кг как функции квадрата переданного атому момента q в ПСФО (см. [13]). Квадрупольный максимум фактически невидим в полном ОСО уровня.

Рис. 4.2_Kr_f3 даёт обобщенные силы осцилляторов дискретных квадрупольных возбуждений 4р-4f и 4р-5f атома Кг как функции квадрата переданного атому момента q в ПСФО (см. [13]).

Рис. 4.2_Kr_f4 представляет обобщенные силы осцилляторов дискретных дипольных возбуждений 4р-5s и 4р-6s атома Кг как функции квадрата переданного атому момента q в ХФ и ПСФО (см. [14]). Примечательно, что в обоих уровнях ОСО имеет характерный, при одинаковых q^2 , максимум.

Рис. 4.2_Kr_f5 приводит обобщенные силы осцилляторов дискретных дипольных возбуждений 4р-4d и 4р-5d атома Кг как функции квадрата переданного атому момента q в ХФ и ПСФО (см. [14]). Роль корреляций незначительна.

Рис. 4.2_Kr_f6 изображает обобщенные силы осцилляторов дискретных октупольных возбуждений 4р-4d и 4р-5d атома Кг как функции квадрата переданного атому момента q в ХФ и ПСФО (см. [14]). Кривые имеют один максимум, при $q^2 \approx 1.25$. Роль корреляций заметна, но невелика.

Рис. 4.2_Kr_f7 даёт обобщенные силы осцилляторов дискретных дипольного и октупольного возбуждений 4р-4d атома Кг как функции квадрата переданного атому момента q в ПСФО (см. [14]). В октупольном переходе есть максимум при, $q^2 \approx 1$, а в дипольном он расположен в нуле. Поскольку уровни по энергии очень близки, представлена сумма их ОСО, максимум которой лишь в нуле..

Рис. 4.2_Kr_f8 представляет обобщенные силы осцилляторов дискретных дипольного и октупольного возбуждений 4р-5d атома Кг как функции квадрата переданного атому момента q в ПСФО (см. [14]). Из-за близости уровней наблюдаемой величиной является по сути лишь сумма их ОСО.

Рис. 4.2_Kr_f9 приводит ХФ и ПСФО обобщенные силы осцилляторов и их отношение для 3d электронов Кг (см. [7]). Видна заметная роль ПСФО поправок, достигающая по абсолютной величине 20%.

Рис. 4.2_Kr_f10 даёт ХФ и ПСФО обобщенные силы осцилляторов и их отношение для

4s электронов Kr (см. [7]). Роль ПСФО поправок гораздо больше, чем на Рис. 4.2_Kr_f9. При малых энергиях и больших q она достигает 4.

Рис. 4.2_Kr_f11 изображает ХФ и ПСФО обобщенные силы осцилляторов и их отношение для 4p электронов Kr (см. [7]). Роль ПСФО поправок гораздо больше, чем на Рис. 4.2_Kr_f9.

Рис. 4.2_Kr_g1 приводит сечение монополюсного комптоновского рассеяния электронов энергии $E = 2000Ry$ на атоме Kr в ПСФО как функции переданного атому момента q , различных энергий ω (переданный угловой момент $L = 0$) (см. [15]). Сечение характеризуется максимумом, уменьшающимся по величине с ростом энергии и перемещающимся при этом в сторону больших q . Обращаем внимание на большой диапазон рассмотренных значений q , $0 < q < 8$.

Рис. 4.2_Kr_g2 изображает сечение дипольного комптоновского рассеяния электронов энергии $E = 2000Ry$ на атоме Kr в ПСФО как функцию переданных атому момента q , при различных значениях энергии ω (переданный угловой момент $L = 1$) (см. [15]). Максимум с ростом ω уходит в сторону больших q .

Рис. 4.2_Kr_g3 представляет сечение квадрупольного комптоновского рассеяния электронов энергии $E = 2000Ry$ на атоме Kr в ПСФО как функцию переданных атому момента q , различных энергий ω (переданный угловой момент $L = 2$) (см. [15]). Вторым максимумом с ростом ω уходит в сторону больших q .

Рис. 4.2_Kr_g4 даёт сечение октупольного комптоновского рассеяния электронов энергии $E = 2000Ry$ на атоме Kr в ПСФО как функцию переданных атому момента q , различных энергий ω (переданный угловой момент $L = 3$) (см. [15]). Вторым максимумом находится вне пределов рисунка.

Рис. 4.2_Kr_h1 изображает относительное сечение комптоновского возбуждения дипольного и октупольного уровней 4p – 4d атома Kr в ПСФО (см. [16, 25]). В отличие от Рис. 4.2_Kr_h1, здесь максимум в сечении – один.

Рис. 4.2_Kr_h2 представляет относительное сечение комптоновского возбуждения квадрупольного и монополюсного почти точно вырожденных уровней 4p – 5p атома Kr в ПСФО (см. [16, 25]). Отчётливо видны два максимума в квадрупольном сечении, сливающиеся в один в ОСО.

Рис. 4.2_Kr_i1 даёт сечение упругого рассеяния позитронов на атоме Kr в ХФ и УПСФО (см. [10]). Экспериментальные данные взяты из [17, 26, 27], результаты более сложных расчётов можно найти в [28]. Поляризационное взаимодействие учитывает возбуждение 4s, 4p подболочек и образование виртуального позитрония.

Рисунки 4.2_ Xe содержат результаты вычислений для Xe

Рис. 4.2_Xe_a1 приводит сечение упругого рассеяния электронов на атоме Xe в ХФ и УПСФО (см. [1, 2]). Роль электронных корреляций велика. Вслед за узким минимумом Рамзауэра идёт двугорбый максимум. Экспериментальные данные взяты из [29]. Минимум Рамзауэра [20] возникает лишь при учёте поляризационного взаимодействия. В вычислениях полагалось, что вклад в него вносят подболочки 4d, 5s, 5p.

Рис. 4.2_Xe_b1 изображает вклад отдельных парциальных волн в сечение упругого рассеяния электронов на атоме Xe в УПСФО. Минимум Рамзауэра узок и глубок из-за большой величины максимума в d-волне, хотя максимум есть и в p-волне, а в f-волне их два. Как и в Рис. 4.2_Xe_a1, учитывалось поляризационное взаимодействие.

Рис. 4.2_Хе_d1 даёт ХФ фазы различных парциальных волн в рассеянии электронов на атоме Хе. Как и должно быть в соответствии с (3.21), при нулевой энергии электрона s -фаза равна 5π , p -фаза - 4π , d -фаза - 2π , а f фаза обращается к нулю, если их определить так, что при $E \rightarrow \infty$ все фазы $\delta_l \rightarrow 0$.

Рис. 4.2_Хе_e1 приводит плотности монополярных обобщенных сил осцилляторов атома Хе в ПСФО как функции переданной атому энергии при различных q (см. [7]). Максимум с ростом q перемещается в сторону больших энергий.

Рис. 4.2_Хе_e2 содержит плотности дипольных обобщенных сил осцилляторов атома Хе в ПСФО как функции переданной атому энергии при различных q (см. [7]). Величина дипольных ОСО на порядок больше и монополярных (Рис. 4.2_Хе_e1) и квадрупольных (Рис. 4.2_Хе_e3). Максимум с ростом q перемещается в сторону больших энергий. В районе $\omega = 7Ry$ виден гигантский дипольный резонанс, проявляющийся при всех q .

Рис. 4.2_Хе_e3 приводит плотности квадрупольных обобщенных сил осцилляторов атома Хе в ПСФО как функции переданной атому энергии при различных q (см. [7]). Видно перемещение максимума в сторону больших энергий с ростом q . Структура ОСО как функции ω весьма сложна. Так, при значительных q есть три максимума.

Рис. 4.2_Хе_e4 изображает плотности октупольных обобщенных сил осцилляторов атома Хе в ПСФО как функции переданной атому энергии при различных q (см. [7]). Как и в Кг, поведение ОСО весьма экзотично, и характеризуется многими максимумами, при том весьма большими.

Рис. 4.2_Хе_e5 приводит плотности монополярных обобщенных сил осцилляторов $3d_{5/2}$ и $3d_{3/2}$ электронов атома Хе в ХФ и СП ПСФО как функции переданной атому энергии при различных q (см. [30]). Расчёт проведен согласно описанию в самом конце раздела 3.6 и в Разделе 1.10. Видно сильное воздействие электронов уровня $3/2$ на ОСО уровня $5/2$ при малых q .

Рис. 4.2_Хе_e6 изображает плотности дипольных обобщенных сил осцилляторов $3d_{5/2}$ и $3d_{3/2}$ электронов атома Хе в ХФ и СП ПСФО как функции переданной атому энергии при различных q (см. [30]). Как и на Рис.4.2_Хе_e1, результаты получены согласно описанному в Разделах 1.10 и 3.6. Воздействие $3/2$ электронов приводит к дополнительному максимуму в СП ПСФО ОСО электронов $5/2$ уровня при ≈ 52 эВ при всех рассмотренных q . Ситуация подобна имеющей место в фотоэффекте – см. Рис.2.2_Хе_b7.

Рис. 4.2_Хе_e7 даёт плотности квадрупольных обобщенных сил осцилляторов $3d_{5/2}$ и $3d_{3/2}$ электронов атома Хе в ХФ и СП ПСФО как функции переданной атому энергии при различных q (см. [30]). Роль взаимодействия $5/2$ и $3/2$ уровней сводится лишь к появлению небольшого дополнительного максимума при $\approx 50.6eV$ в ОСО уровня $5/2$.

Рис. 4.2_Хе_f1 представляет обобщенные силы осцилляторов дискретных монополярного и квадрупольного возбуждений $5p$ - $6p$ атома Хе как функции квадрата переданного атому момента q в ПСФО (см. [13]). Два квадрупольных максимума видны и в полной ОСО.

Рис. 4.2_Хе_f2. даёт обобщенные силы осцилляторов дискретных монополярного и квадрупольного возбуждений $5p$ - $7p$ атома Хе как функции квадрата переданного атому момента q в ПСФО (см. [13]). Квадрупольный максимум виден и в полной ОСО.

Рис. 4.2_Хе_f3 приводит обобщенные силы осцилляторов дискретных квадрупольных

возбуждений $5p-4f$ и $5p-5f$ атома Хе как функции квадрата переданного атому момента q в ХФ и ПСФО (см. [13]).

Рис. 4.2_Хе_f4 представляет обобщенные силы осцилляторов дискретных дипольных возбуждений $5p-6s$ и $5p-7s$ атома Хе как функции квадрата переданного атому момента q в ХФ и ПСФО (см. [14]). Примечательно, что, как и в Кг (см. Рис. 4.2_Кг_f4), в обоих уровнях ОСО имеет характерный, при одинаковых q^2 , максимум.

Рис. 4.2_Хе_f5 изображает обобщенные силы осцилляторов дискретных дипольных возбуждений $5p-5d$ и $5p-6d$ атома Хе как функции квадрата переданного атому момента q в ПСФО (см. [14]).

Рис. 4.2_Хе_f6 даёт обобщенные силы осцилляторов дискретных октупольных возбуждений $5p-5d$ и $5p-6d$ атома Хе как функции квадрата переданного атому момента q в ПСФО (см. [14]). ОСО обоих уровней имеет максимумы при примерно тех же q .

Рис. 4.2_Хе_f7 приводит обобщенные силы осцилляторов дискретных дипольного и октупольного возбуждений $5p-5d$ атома Хе как функции квадрата переданного атому момента q в ПСФО (см. [14]). Поскольку уровни по энергии очень близки, представлена сумма их ОСО. Октупольный максимум маскируется в полном ОСО.

Рис. 4.2_Хе_f8 приводит обобщенные силы осцилляторов дискретных дипольного и октупольного возбуждений $5p-6d$ атома Хе как функции квадрата переданного атому момента q в ПСФО (см. [14]). Из-за близости уровней, наблюдаемой величиной является по сути лишь сумма их ОСО. Как и на Рис. 4.2_Хе_f7, октупольный максимум маскируется в полном ОСО.

Рис. 4.2_Хе_f9 приводит ХФ и ПСФО обобщенные силы осцилляторов и их отношение для $4d$ электронов Хе. Видна заметная роль ПСФО поправок.

Рис. 4.2_Хе_f10 даёт ХФ и ПСФО обобщенные силы осцилляторов и их отношение для $5s$ электронов Хе. Роль ПСФО поправок гораздо больше, чем на Рис. 4.2_Хе_f9.

Рис. 4.2_Хе_f11 изображает ХФ и ПСФО обобщенные силы осцилляторов и их отношение для $5p$ электронов Хе. Роль ПСФО поправок значительна, достигая фактора 1.7.

Рис. 4.2_Хе_g1 представляет сечение монопольного комптоновского рассеяния электронов энергии $E = 2000Ry$ на атоме Хе в ПСФО как функцию переданных атому момента q , при различных значениях энергий ω (переданный угловой момент $L = 0$) (см. [15]). Обращаем внимание на большой диапазон рассмотренных значений q , $0 < q < 8$. С ростом ω максимум перемещается в сторону больших q .

Рис. 4.2_Хе_g2 изображает сечение дипольного комптоновского рассеяния электронов энергии $E = 2000Ry$ на атоме Хе в ПСФО как функцию переданных атому момента q , при различных значениях энергий ω (переданный угловой момент $L = 1$) (см. [15]). Второй максимум с ростом ω уходит в сторону больших q . Как и на Рис. 4.2_Хе_g1, с ростом ω максимум перемещается в сторону больших q .

Рис. 4.2_Хе_g3 содержит сечение квадрупольного комптоновского рассеяния электронов энергии $E = 2000Ry$ на атоме Хе в ПСФО как функцию переданных атому момента q , при различных значениях энергий ω (переданный угловой момент $L = 2$) (см. [15]). Максимумы с ростом ω уходят в сторону больших q , при чём второй оказывается за границей рисунка.

Рис. 4.2_Хе_g4 даёт сечение октупольного комптоновского рассеяния электронов энергии $E = 2000Ry$ на атоме Хе в ПСФО как функцию переданных атому значений момента q , при различных значениях энергий ω (переданный угловой момент $L = 3$) (см. [15]). Второй максимум находится вне пределов рисунка.

Рис. 4.2_Хе_h1 приводит относительное сечение комптоновского возбуждения дипольного уровня $5p - 6p$ атома Хе в ПСФО (см. [25]). Обращает внимание наличие асимметричного максимума в сечении.

Рис. 4.2_Хе_h2 изображает относительное сечение комптоновского возбуждения дипольных уровней $5p - 6s$ и $5p - 7s$ атома Хе в ПСФО (см. [25]). Здесь, в отличие от Рис. 4.2_Хе_h1, здесь максимумов в сечении – два.

Рис. 4.2_Хе_h3 представляет относительное сечение комптоновского возбуждения - квадрупольного и монопольного почти точно вырожденных уровней $5p - 6p$ атома Хе в ПСФО (см. [25]). Отчётливо видны два максимума в сечении.

Рис. 4.2_Хе_h4 даёт относительное сечение комптоновского возбуждения ряда близких по энергии дипольных, монопольных, октупольных и квадрупольных уровней $5p - 5d, 5p - 6p, 5p - 5d, 5p - 6s$ атома Хе в ПСФО (см. [25]). Как и на Рис. 4.2_Хе_h3, видны следы двух максимумов в сечении, второй из которых обусловлен квадрупольным переходом.

Рис.4.2_Хе_h5. Относительное сечение комптоновского возбуждения дипольных, октупольных и монопольных уровней $5p-7s, 5p-6d, 5p-7p$ атома Хе в ПСФО (см. [25]). И здесь, как и на Рис. 4.2_Хе_h3 и Рис. 4.2_Хе_h4, виден след второго – октупольного максимума.

Рис. 4.2_Хе_i1 представляет сечение упругого рассеяния позитронов на атоме Хе в ХФ и УПСФО (см. [10]). Экспериментальные данные взяты из [17, 31]. Поляризационное взаимодействие учитывает возбуждение $4d, 5s, 5p$ подболочек и образование виртуального позитрония. Обращаем внимание на сильное расхождение УПСФО с экспериментом.

Таблица 4.2. Обобщенные силы осцилляторов при $q=0.00001$.

Приведены ОСО Ne, Ar, Kr, Xe . При столь малых q ОСО близки к оптическим, т.е. дипольным силам осциллятора. Роль ПСФО корреляций значительна.

4.3. Атомы и ионы I группы периодической системы элементов

В этом Разделе представлены результаты наших уже известных и новых вычислений полных и парциальных сечений упругого рассеяния электронов и позитронов на некоторых атомах и ионах элементов I группы периодической системы элементов в ХФ и с учётом поляризационного взаимодействия в Упрощённом приближении случайных фаз с обменом – УПСФО (см. Разделы 3.3 и 3.4 и [АИЧЧ]) и виртуального образования позитрония (см. Раздел 3.8). В формировании поляризационного взаимодействия учтены возбуждения электронов $1s^2, 2s$ в Li , $1s^2$ в Li^+ , $1s^2, 2s^2$ в Li^- , $2s^2, 2p^6, 3s$ в Na , $2s^2, 2p^6$ в Na^+ , $3s^2, 3p^6, 4s$ в K , $3s^2, 3p^6$ в K^+ . В этом же приближении вычислены s, p, d, f – фазы рассеяния и соответствующие парциальные сечения. Приведены обобщённые силы осцилляторов с учётом ПСФО корреляций упомянутых выше электронов. Даются также ОСО для $3d_{5/2}, 3d_{3/2}$ электронов Cs.

Рисунки 4.3_Li содержат результаты вычислений для Li

Рис. 4.3_Li_a1 изображает сечение упругого (в ХФ и УПСФО) и неупругого (в УПСФО) рассеяния электронов на атоме Li. Учитываемый неупругий канал – ионизация $2s$ электронов Li.

Рис. 4.3_Li_b1 представляет вклад парциальных волн в сечение упругого рассеяния электронов на атоме Li. Вклад s волны доминирует только при очень малой энергии. Резко растёт вклад p и d , а затем, уже с $5eV$, и d волны, который, однако, уступает вкладу p и d . Отметим небольшой максимум при 2 эв в s – волне.

Рис. 4.3_Li_d1 даёт ХФ фазы различных парциальных волн в рассеянии электронов на атоме Li. Здесь s -фаза имеет отрицательную производную во всём рассмотренном диапазоне энергий. Как и должно быть в соответствие с (3.21), при нулевой энергии электрона s -фаза равна 2π , а p, d, f фазы обращаются в нуль, если их все определить так, что при $E \rightarrow \infty$ фазы $\delta_l \rightarrow 0$.

Рис. 4.3_Li_e1 приводит плотности монополярных обобщенных сил осцилляторов атома Li в ПСФО как функции переданной атому энергии при различных q . Большой радиус атома и, как следствие, быстрые осцилляции фактора $\exp(i\vec{q}\vec{r})$ уже при сравнительно малых q приводят к весьма сложному поведению ОСО.

Рис. 4.3_Li_e2 содержит плотности дипольных обобщенных сил осцилляторов атома Li в ПСФО как функции переданной атому энергии при различных q . Первый максимум, от $2s$ -электрона, смещается в сторону больших энергий с ростом q , тогда как второй, происходящий от ионизации $1s$ электронов, стоит на месте. Дипольные ОСО значительно больше монополярных и квадрупольных.

Рис. 4.3_Li_e3. изображает плотности квадрупольных обобщенных сил осцилляторов атома Li в ПСФО как функции переданной атому энергии при различных q . Примечательно, что с ростом q первый максимум убывает, тогда как второй – растёт.

Рис. 4.3_Li_i1 даёт сечение упругого (в ХФ и УПСФО) и неупругого (в УПСФО) рассеяния позитронов на атоме Li (см. [10]). Поляризационное взаимодействие, в котором учитывается образование виртуального позитрония, резко увеличивает сечение (см. обсуждение в конце Раздела 3.8)

Рисунки 4.3_Li⁺ содержат результаты вычислений для Li⁺

Рис. 4.3_Li⁺_a1 приводит сечение упругого рассеяния электронов на ионе Li⁺ в ХФ и УПСФО. Включены вклады s, p, d, f -волн.

Рис. 4.3_Li⁺_b1 изображает полное сечение и парциальные вклады s, p, d, f волн упругого рассеяния электронов на ионе Li⁺ в УПСФО. В сечение явно виден второй максимум, складывающийся в основном из сечений d, f волн.

Рис. 4.3_Li⁺_d1 представляет ХФ фазы различных парциальных волн в рассеянии электронов на ионе Li⁺. Поведение всех фаз как функций энергии похоже.

Рис. 4.3_Li⁺_e1 даёт плотности монополярных обобщенных сил осцилляторов иона Li⁺ в ПСФО как функции переданной атому энергии при различных q . С ростом q проявляется максимум в ОСО.

Рис. 4.3_Li⁺_e2 приводит плотности дипольных обобщенных сил осцилляторов иона Li⁺ в ПСФО как функции переданной иону энергии при различных q . Вклад дипольных ОСО примерно на порядок превосходит вклад монополярных и квадрупольных.

Рис. 4.3_Li⁺_e3 отражает плотности квадрупольных обобщенных сил осцилляторов атома Li⁺ в ПСФО как функции переданной атому энергии при различных q . С ростом q

формируется максимум, который смещается в сторону больших ω .

Рис. 4.3_Li⁺_i1 изображает полное сечение упругого рассеяния позитрона на ионе Li⁺ и вклад в него парциальных s, p, d, f волн. Примечателен второй максимум, формируемый вкладом d, f волн.

Рис.4.3_Li⁺_i2. дает фазы различных парциальных волн в рассеянии позитронов на ионе Li⁺. Зависимость всех рассмотренных фаз от энергии позитрона подобна. С ростом орбитального момента фазы увеличиваются.

Рисунки 4.3_Li содержат результаты вычислений для Li

Рис. 4.3_Li⁻_a1 изображает сечение упругого (в ХФ и УПСФО) и неупругого (в УПСФО) рассеяния электронов на ионе Li⁻. Сечение чрезвычайно быстро убывает с ростом энергии электрона. При 5 эв имеется небольшой минимум.

Рис. 4.3_Li⁻_b1 представляет вклад парциальных волн в сечение упругого рассеяния электронов на ионе Li⁻. Наибольший вклад вносят волны рассеяние с большим орбитальным моментом.

Рис.4.3_Li⁻_d1 дает фазы различных парциальных волн в рассеянии электронов на ионе Li⁻. Поведение s – и p - фаз как функций энергии довольно сложное.

Рисунки 4.3_Na содержат результаты вычислений для Na

Рис. 4.3_Na_a1 изображает сечение упругого (в ХФ и УПСФО) и неупругого (в УПСФО) рассеяния электронов на атоме Na. Поляризационное взаимодействие определяется вкладом $2p, 3s$ электронов. Сечение упругого рассеяния быстро убывает с ростом энергии налетающего электрона.

Рис. 4.3_Na_b1 даёт вклад s, p, d, f парциальных волн в сечение упругого рассеяния электронов на атоме Na. Примечательно, сколь быстро убывает вклад s – волны.

Рис. 4.3_Na_d1 представляет фазы различных парциальных волн в рассеянии электронов на атоме Na. УПСФО поправки происходят от поляризационного взаимодействия, создаваемого виртуальным возбуждением $2p, 3s$ электронов. Как и должно быть в соответствие с (3.21), при нулевой энергии электрона s - фаза равна 3π , p – фаза - π , а d, f фазы обращаются в нуль, если их все определить так, что при $E \rightarrow \infty$ фазы $\delta_l \rightarrow 0$.

Рис. 4.3_Na_i1 приводит вклад парциальные волн в сечение упругого рассеяния позитронов на атоме Na. Заметив, что при очень малой энергии позитрона сечение на Li гораздо больше (см. Рис.4.3_Li_i1) (см. [10]).

Рис. 4.3_Na_i2 изображает фазы различных парциальных волн в рассеянии позитронов на атоме Na.

Рисунки 4.3_Na⁺ содержат результаты вычислений для Na⁺

Рис. 4.3_Na⁺_a1 представляет сечение упругого рассеяния электронов на ионе Na⁺ в ХФ и УПСФО. Имеется очевидное сходство с Рис.4.3_Li_a1 - сечением упругого рассеяния электронов на атоме Li.

Рис. 4.3_Na⁺_a2 изображает вклад s, p, d, f парциальных волн в сечение упругого рассеяния электронов на ионе Na⁺. Примечателен дополнительный максимум в s -волне и по два максимума во вкладах других волн. Отметим рост вклада с увеличением углового момента парциальной волны

Рис. 4.3_Na⁺_a3 даёт фазы различных парциальных волн в рассеянии электронов на ионе Na⁺. Отмечается естественный для кулоновского поля рост фазы при $E \rightarrow 0$.

Рис. 4.3_Na⁺_i1 приводит полное сечение упругого рассеяния позитрона на ионе Na⁺ и

вклад в него парциальных s, p, d, f волн. Примечателен второй максимум, формируемый вкладом d, f волн. Сечение Na^+ весьма похоже на сечение Li^+ (см. Рис.4.3_Li⁺_i1).

Рис.4.3_Na⁺_i2. дает фазы различных парциальных волн в рассеянии позитронов на ионе Na^+ . Примечательно, что фазы увеличиваются с ростом углового момента.

Рисунки 4.3_K содержат результаты вычислений для K

Рис.4.3_K_a1. дает полное сечение упругого (в ХФ и УПСФО) и неупругого (в УПСФО) рассеяния электронов на атоме K. ХФ максимум упругого рассеяния исчезает в УПСФО.

Рис. 3_K_b1 изображает вклад s, p, d, f парциальных волн в сечение упругого рассеяния электронов на атоме K.. Наибольший вклад – от высших орбитальных моментов.

Рис. 4.3_K_d1 представляет фазы s, p, d, f парциальных волн в рассеянии электронов на атоме K. При нулевой энергии электрона s -фаза равна 4π , p -фаза - 2π , а d, f фазы обращаются в нуль, если их все определить так, что при $E \rightarrow \infty \delta_l \rightarrow 0$. Фазы существенно меняются при малых энергиях.

Рис. 4.3_K_i1 приводит полное и парциальные s, p, d, f сечения упругого рассеяния позитронов на атоме K. Учитываются s, p, d, f волны и вклад $3s, 3p, 4s$ подболочек в поляризационном взаимодействии, которое находится с учётом образования виртуального позитрония.

Рис. 4.3_K_i2 даёт фазы различных парциальных волн в рассеянии позитронов на атоме K.

Рисунки 4.3_K⁺ содержат результаты вычислений для K⁺

Рис. 4.3_K⁺_a1 изображает сечение упругого (в ХФ и УПСФО) и неупругого (в УПСФО) рассеяния электронов на ионе K⁺. Учитываются s, p, d, f волны и вклад $3s, 3p, 4s$ подболочек в поляризационном взаимодействии.

Рис. 4.3_K⁺_b1 предлагает вклад s, p, d, f парциальных волн в сечение упругого рассеяния электронов на ионе K⁺ в УПСФО. Поляризационное взаимодействие происходит от $3s, 3p$ подболочек. При малых E доминирует вклад f, d парциальных волн.

Рис. 4.3_K⁺_d1 приводит фазы s, p, d, f парциальных волн в рассеянии электронов на ионе K⁺. Поляризационное взаимодействие происходит от $3s, 3p$ подболочек.

Рис. 4.3_K⁺_e1 даёт плотности монополярных обобщенных сил осцилляторов иона K⁺ в ХФ и ПСФО как функции переданной ему энергии при различных q . ОСО растут с ростом q .

Рис. 4.3_K⁺_e2 предлагает плотности дипольных обобщенных сил осцилляторов атома K⁺ в ХФ и ПСФО как функции переданной атому энергии при различных q . При $\omega \leq 3Ry$ дипольные ОСО превосходят монополярные и квадрупольные более, чем на порядок (ср с Рис. 4.3_K⁺_e1 и Рис.4.3_K⁺_e3).

Рис. 4.3_K⁺_e3 представляет плотности квадрупольных обобщенных сил осцилляторов атома K⁺ в ХФ и ПСФО как функции переданной атому энергии при различных q . ОСО увеличивается с ростом q .

Рис. 4.3_K⁺_i1 изображает вклады s, p, d, f парциальных волн и полное сечение упругого рассеяния электронов на ионе K⁺. Примечателен второй максимум, формируемый вкладом d, f волн. Сечение K⁺ крайне похоже на сечение Li⁺ и Na⁺ (см. Рис.

4.3_Li⁺_i1 и Рис. 4.3_Na⁺_i1).

Рисунки 4.3_Cs содержат результаты вычислений для Cs

Рис. 4.3_Cs_e1 приводит плотности монополярных обобщенных сил осцилляторов $3d_{5/2}$ и $3d_{3/2}$ электронов атома Cs в ХФ и СП ПСФО как функции переданной атому энергии при различных q (см. [30]). Расчёт проведен согласно описанию в самом конце раздела 3.6 и в разделе 1.10. Видно сильное воздействие $3/2$ на $5/2$ уровень при малых q .

Рис. 4.3_Cs_e2 изображает плотности дипольных обобщенных сил осцилляторов $3d_{5/2}$ и $3d_{3/2}$ электронов атома Cs в ХФ и СП ПСФО как функции переданной атому энергии при различных q (см. [30]). Как и на Рис.4.3_Cs_e1, результаты получены согласно описанному в Разделах 1.10 и 3.6. Воздействие $3/2$ электронов приводит к дополнительному максимуму в СП ПСФО ОСО электронов $5/2$ уровня при $\approx 55eV$ при всех рассмотренных q .

Рис. 4.3_Cs_e3 даёт плотности квадрупольных обобщенных сил осцилляторов $3d_{5/2}$ и $3d_{3/2}$ электронов атома Cs в ХФ и СП ПСФО как функции переданной атому энергии при различных q (см. [30]). Роль взаимодействия $5/2$ и $3/2$ уровней сводится лишь к появлению небольшого дополнительного максимума при $\approx 54.2eV$ в ОСО уровня $5/2$.

Таблица 4.3 содержит квадрупольные и монополярные обобщенные силы осцилляторов Li и Li^+ при $q=0.00001$. Из-за малой величины ОСО погрешность расчёта велика.

4.4. Атомы II группы периодической системы элементов

В этом Разделе представлены результаты наших уже известных и новых вычислений полных и парциальных сечений упругого рассеяния электронов на атомах II группы в ХФ и с учётом поляризационного взаимодействия в Упрощённом приближении случайных фаз с обменом – УПСФО (см. Разделы 3.3 и 3.4 и [АИЧЧ]). В формировании поляризационного взаимодействия учтены возбуждения электронов $1s^2$ в Be, $2s^2, 2p^6, 3s^2$ в Mg, $3s^2, 3p^6, 4s^2$ в Ca, $3p^6, 3d^{10}, 4s^2$ в Zn, $4p^6, 4d^{10}, 5s^2$ в Cd и $4d^{10}, 5s^2, 5p^6, 5s^2$ в Ba. В этом же приближении вычислены s, p, d, f – фазы рассеяния и их парциальные вклады в сечение. Приведены обобщённые силы осцилляторов (ОСО) с учётом ПСФО корреляций упомянутых выше электронов. Приведены ОСО и сечения комптоновского возбуждения нескольких первых дискретных уровней некоторых атомов благородных газов. Для Be и Mg даются сечения рассеяния позитронов. Приведены также ОСО для $3d_{5/2}, 3d_{3/2}$ электронов Ba.

Рисунки 4.4_Вe содержат результаты вычислений для Ве

Рис. 4.4_Ве_a1 изображает сечение упругого (в ХФ и УПСФО) и неупругого (в УПСФО) рассеяния электронов на атоме Ве. Включён вклад s, p, d, f волн. Поляризационный потенциал учтён решением уравнения Дайсона из Раздела 3.4 (SCAT), тогда как само поляризационное взаимодействие находится приближённо, согласно принятого в УПСФО. Сечение имеет мощный максимум при $0.5eV$ и резкий перегиб при $\approx 1eV$. SHIFT представляет результаты вычисления сечения, в которых поляризационное взаимодействие учитывается в низшем порядке теории возмущений, а не решением уравнения Дайсона.

Рис. 4.4_Ве_b1 представляет вклады s, p, d, f парциальных волн в сечение упругого

рассеяния электронов на атоме Ве. Видно, что главный максимум при $0.5eV$ образуется вкладом p волны, а вклад d волны имеет максимум при $5eV$, след которого виден и в полном сечении (Рис.4.4_Ve_a1)

Рис. 4.4_Ve_d1 приводит фазы различных парциальных волн в рассеянии электронов на атоме Ве, вычисленные в результате решения уравнения Дайсона. На врезке s – фаза при $E=0$ равна 2π , тогда как остальные фазы равны 0 - в соответствие с (3.21). На основном рисунке s – фаза сдвинута для компактности кривых на 2π .

Рис. 4.4_Ve_e1 даёт плотности монополярных обобщенных сил осцилляторов атома Ве в ПСФО как функции переданной атому энергии при различных q . С ростом q ОСО приобретает явный, почти симметричный максимум при $E \approx 0.9eV$.

Рис. 4.4_Ve_e2 приводит плотности дипольных обобщенных сил осцилляторов атома Ве в ПСФО как функции переданной атому энергии при различных q (см. [32]). С ростом q зависимость ОСО от энергии становится весьма сложной.

Рис. 4.4_Ve_e3 изображает плотности квадрупольных обобщенных сил осцилляторов атома Ве в ПСФО как функции переданной атому энергии при различных q . Как и на Рис. 4.4_Ve_e2, с ростом q первый максимум в ОСО смещается в сторону больших ω .

Рис. 4.4_Ve_i1 представляет сечение упругого рассеяния позитронов на атоме Ве (см. [10]). Изображены вклады различных парциальных волн в сечение и фазы s, p, d, f парциальных волн атома Ве.

Рисунки 4.4_Mg содержат результаты вычислений для Mg

Рис. 4.4_Mg_a1 даёт сечение упругого (в ХФ и УПСФО) и неупругого (в УПСФО) рассеяния электронов на атоме Mg. Учитывается вклад s, p, d, f волн.

Рис. 4.4_Mg_b1 приводит вклады парциальных волн в сечение упругого рассеяния электронов на атоме Mg. Видно, что уже при малых E доминирует f -волна, вклад которой имеет максимум при 0.7 эв, а вклад d -волны имеет максимум при 3.5 эв.

Рис. 4.4_Mg_d1 представляет s, p, d, f фазы различных парциальных волн в рассеянии электронов на атоме Mg. Фазы определены в рамках приближения SCAT. В соответствие с (3.21), при нулевой энергии электрона s - фаза равна 3π , p – фаза - π , а d, f фазы обращаются в нуль, если их все определить так, что при $E \rightarrow \infty$ фазы $\delta_i \rightarrow 0$. Вблизи $E=0$ p - фаза быстро нарастает, что говорит о приближении $3p$ уровня уже в соседнем атоме - Al. Уточнение поляризационного потенциала приводит к резонансу в сечении упругого рассеяния – предвестнику образования отрицательного иона "Mg⁻".

Рис. 4.4_Mg_i1 изображает сечение упругого (в ХФ и УПСФО) и неупругого (в УПСФО) рассеяния позитрона на атоме Mg.

Рис. 4.4_Mg_i2 даёт вклады парциальных s, p, d, f волн в сечение упругого рассеяния позитронов на атоме Mg. Доминирует вклад s – волны.

Рис. 4.4_Mg_i3 приводит фазы s, p, d, f парциальных волн в рассеянии электронов на атоме Mg в приближении SCAT. Обращает внимание вариация в s – фазе в 2.5 радиана при энергии от $0-3$ эв.

Рисунки 4.4_Ca содержат результаты вычислений для Ca

Рис. 4.4_Ca_a1 представляет сечение упругого (в ХФ и УПСФО) и неупругого (в УПСФО) рассеяния электронов на атоме Ca. Учтён вклад s, p, d, f волн (см также [33,34]).

Рис. 4.4_Ca_b1 изображает вклад парциальных волн в сечение упругого рассеяния электронов на атоме Ca. Учтён вклад s, p, d, f волн. Вычисления проведены в рамках

приближения УПСФО SCAT, путём решения уравнения Дайсона (3.45) с использованием (3.46) (см. также [35,36]). Поляризационный потенциал включает вклады $3s, 3p, 4s$ электронов.

Рис. 4.4_Ca_d1 приводит фазы различных парциальных волн в рассеянии электронов на атоме Ca в приближении УПСФО SCAT. Фазы при нулевой энергии, в согласии с (3.21) равны: s фаза - 4π а p фаза - 2π . Обратим внимание на то, что p фаза очень быстро нарастает, почти достигая 3π . Это означает, что при несколько более сильном поляризационном взаимодействии возможно образование связанного состояния $e + Ca$, т.е. отрицательного иона Ca^- . На основном рисунке фазы нормированы так, что все они обращаются в нуль при $E=0$. Более аккуратный расчёт поляризационного взаимодействия и использование уравнения Дайсона (Раздел 3.4) позволили описать отрицательные ионы Ca и ряда других атомов второй группы [35,36]

Рис. 4.4_Ca_e1 даёт плотности монополярных обобщенных сил осцилляторов атома Ca в ХФ и ПСФО как функции переданной атому энергии при различных q . С ростом q первый максимум смещается в сторону больших ω . Рис. 4.4_Ca_e2 передаёт плотности дипольных обобщенных сил осцилляторов атома Ca в ХФ и ПСФО как функции переданной атому энергии при различных q .

Рис.4.4_Ca_e2. изображает плотности дипольных обобщенных сил осцилляторов атома Ca в ХФ и ПСФО как функции переданной атому энергии при различных q .

Рис. 4.4_Ca_e3 представляет плотности квадрупольных обобщенных сил осцилляторов атома Ca в ХФ и ПСФО как функции переданной атому энергии при различных q .

Рисунки 4.4_Zn содержат результаты вычислений для Zn

Рис. 4.4_Zn_a1 изображает сечение упругого (в ХФ и УПСФО) и неупругого (в УПСФО) рассеяния электронов на атоме Zn. Учитывается вклад s, p, d, f волн, а вклад в поляризационное взаимодействие вносят $3d, 4s$ электронов. Заметно влияние электронных корреляций, приводящих к отличию УПСФО от ХФ.

Рис. 4.4_Zn_b1. Вклад парциальных волн s, p, d, f в сечение упругого рассеяния электронов на атоме Zn. Поляризационное взаимодействие создаётся виртуальным возбуждением $3d, 4s$ электронов. Основным является максимум в p волне, сигнализирующий о появлении связанного $4p$ - электрона в соседнем Галлии. Остальные максимумы гораздо меньше.

Рис. 4.4_Zn_d1 приводит фазы s, p, d, f парциальных волн в рассеянии электронов на атоме Zn в приближении УПСФО. Фазы (на врезке) при нулевой энергии, в согласии с (3.21), равны: s фаза - 4π , p фаза обращается 2π , а d фаза - π . На основном рисунке фазы нормированы так, что все обращаются в нуль при $E=0$.

Рисунки 4.4_Cd содержат результаты вычислений для Cd

Рис. 4.4_Cd_a1 изображает сечение упругого (в ХФ и УПСФО) и неупругого (в УПСФО) рассеяния электронов на атоме Cd. Учитывается вклад s, p, d, f волн, а вклад в поляризационное взаимодействие вносят $4d, 5s$ электроны. Весьма заметно влияние электронных корреляций, приводящих к отличию УПСФО от ХФ.

Рис. 4.4_Cd_b1 представляет вклад парциальных s, p, d, f волн в сечение упругого рассеяния электронов на атоме Cd. Поляризационное взаимодействие создаётся виртуальным возбуждением $4d, 5s$ электронов. Основным, как и в других элементах II группы, является максимум в p - волне. Вполне заметен и вклад широкого d максимума.

Примечательно наличие второго максимума в s волне.

Рис.4.4_Cd_d1 даёт фазы s, p, d, f парциальных волн в рассеянии электронов на атоме Cd. Фазы (на врезке) при нулевой энергии, в согласии с (3.21), равны: s фаза - 5π , p фаза обращается 3π , а d фаза - 2π . На основном рисунке фазы нормированы так, что все обращаются в нуль при $E=0$.

Рисунки 4.4_Va содержат результаты вычислений для Va

Рис. 4.4_Va_a1 изображает сечение упругого (в ХФ и УПСФО) и неупругого (в УПСФО) рассеяния электронов на атоме Va. Очень велико влияние электронных корреляций, приводящих к появлению минимума (типа минимума Рамзауэра [20]) и максимума в УПСФО сечении, в отличие от ХФ.

Рис. 4.4_Va_b1 представляет вклад s, p, d, f парциальных волн в сечение упругого рассеяния электронов на атоме Va. Поляризационное взаимодействие создаётся виртуальным возбуждением $5d, 6s$ электронов. Основным является максимум в p и d волнах, вполне заметен и вклад широкого f максимума. Как и в Cd, имеется второй максимум в s волне.

Рис. 4.4_Va_d1 предлагает фазы различных парциальных волн в рассеянии электронов на атоме Va. Фазы при нулевой энергии, в согласии с (3.21) равны: s фаза - 6π , p фаза - 4π , и d фаза - 2π . Обратим внимание на то, что p фаза около $E=0$ стремительно нарастает, почти достигая 5π . Это означает, что при несколько более сильном поляризационном взаимодействии возможно образование связанного состояния $e+Va$, т.е. отрицательного иона Va [35. 36]. На основном рисунке фазы нормированы так, что все обращаются в нуль при $E=0$.

Рис. 4.4_Va_e1 приводит плотности монополярных обобщенных сил осцилляторов атома Va в ХФ и ПСФО как функции переданной атому энергии при различных q . С ростом энергии, при $\omega \geq 2Ry$ начинают доминировать вклады больших q .

Рис. 4.4_Va_e2 даёт плотности дипольных обобщенных сил осцилляторов атома Va в ХФ и ПСФО как функции переданной атому энергии при различных q . С ростом q ОСО при данной энергии убывают.

Рис. 4.4_Va_e3 изображает плотности квадрупольных обобщенных сил осцилляторов атома Va в ХФ и ПСФО как функции переданной атому энергии при различных q . При практически любых ω начинают доминировать вклады всё больших q .

Рис. 4.4_Va_e4 предлагает плотности монополярных обобщенных сил осцилляторов $3d_{5/2}$ и $3d_{3/2}$ электронов атома Va в ХФ и СП ПСФО как функции переданной атому энергии при различных q (см. [30]). Расчёт проведен согласно описанию в самом конце Раздела 3.6 и в Разделе 1.10. Видно сильное воздействие $3/2$ на $5/2$ уровень при малых q .

Рис. 4.4_Va_e5 приводит плотности дипольных обобщенных сил осцилляторов $3d_{5/2}$ и $3d_{3/2}$ электронов атома Va в ХФ и СП ПСФО как функции переданной атому энергии при различных q (см. [30]). Как и на Рис.4.4_Va_e1, результаты получены согласно описанному в Разделах 1.10 и 3.6. Воздействие $3/2$ электронов приводит к дополнительному максимуму в СП ПСФО ОСО электронов $5/2$ уровня в районе $\approx 58.3 \div 59 eV$ для всех рассмотренных q .

Рис. 4.4_Va_e6 изображает плотности квадрупольных обобщенных сил осцилляторов $3d_{5/2}$ и $3d_{3/2}$ электронов атома Va в ХФ и СП ПСФО как функции переданной атому энергии при различных q (см. [30]). Роль взаимодействия $5/2$ и $3/2$ уровней сводится лишь

к появлению небольшой дополнительной осцилляции при $\approx 58.2eV$ в ОСО уровня $5/2$.

4.5. Атомы и ионы IV и V групп периодической системы элементов

В этом разделе представлены результаты наших вычислений обобщённых сил осцилляторов (ОСО) в ХФ и с учётом ПСФО корреляций в следующих взаимодействующих подоболочках: $2p^6, 3s^2, 3p^3 \uparrow$ в Si^- , $2s^2, 2p^3 \uparrow$ в N и $2p^6, 3s^2, 3p^3 \uparrow$ в P.

Рисунки 4.5_Si⁻ содержат результаты вычислений для иона Si^-

Рис. 4.5_Si⁻_e1¹ изображает плотности монополюных обобщенных сил осцилляторов иона Si^- в ХФ и СП ПСФО как функции переданной ему энергии при различных q . С ростом q максимум ОСО смещается в сторону высоких энергий.

Рис. 4.5_Si⁻_e2 представляет плотности дипольных обобщенных сил осцилляторов иона Si^- в ХФ и СП ПСФО как функции переданной ему энергии при различных q . Влияние корреляций электронов, учитываемых в рамках СП ПСФО, велико. Как обычно, дипольные ОСО больше монополюных и квадрупольных.

Рис. 4.5_Si⁻_e3 даёт плотности квадрупольных обобщенных сил осцилляторов иона Si^- в ХФ и СП ПСФО как функции переданной ему энергии при различных q . С ростом q формируется высокий максимум, а затем снижается и смещается в сторону больших ω .

Рисунки 4.5_N содержат результаты вычислений для иона N

Рис. 4.5_N_e1 изображает плотности монополюных обобщенных сил осцилляторов атома N в ХФ и СП ПСФО как функции переданной атому энергии при различных q . С ростом q ОСО при данном ω растёт.

Рис.4.5_N_e2 представляет плотности дипольных обобщенных сил осцилляторов атома N в ХФ и СП ПСФО как функции переданной атому энергии при различных q . Как это весьма характерно для ОСО, максимум с ростом q смещается в сторону больших переданных энергий. Как обычно, дипольные ОСО больше монополюных (см. Рис. 4.5_N_e1) и квадрупольных (см. Рис.4.5_N_e3) примерно на порядок. В отличие от монополюных и квадрупольных ОСО, дипольные ОСО убывают с ростом q .

Рис.4.5_N_e3 даёт плотности квадрупольных обобщенных сил осцилляторов атома N в ХФ и СП ПСФО как функции переданной атому энергии при различных q . С ростом q ОСО при данном ω растёт.

Рисунки 4.5_P содержат результаты вычислений для иона P

Рис.4.5_P_e1 предлагает плотности монополюных обобщенных сил осцилляторов атома P в ХФ и СП ПСФО как функции переданной атому энергии при различных q . С ростом q картина поведения ОСО упрощается и в ней появляется главный максимум, смещающийся в сторону больших энергий с ростом q .

Рис.4.5_P_e2 изображает плотности дипольных обобщенных сил осцилляторов атома P в ХФ и СП ПСФО как функции переданной атому энергии при различных q . Под влиянием электронных корреляций возникает чёткая структура с двумя максимумами, относительная сила которых меняется с ростом q . Дипольные ОСО примерно на порядок превосходят монополюные (Рис.4.5_P_e1) и квадрупольные (Рис. 4.5_P_e3).

Рис. 4.5_P_e3 представляет плотности квадрупольных обобщенных сил осцилляторов атома N в ХФ и СП ПСФО как функции переданной атому энергии при различных q . Роль корреляций невелика. С ростом q появляется максимум, сначала нарастающий, а затем – убывающий.

4.6. Ионы VII группы периодической системы элементов

В этом Разделе представлены результаты наших вычислений полного и частичных сечений упругого рассеяния электронов на отрицательном ионе фтора F^- в ХФ и с учётом поляризационного взаимодействия в Упрощённом приближении случайных фаз с обменом – УПСФО (см. Разделы 3.3 и 3.4 и [АИЧЧ]). В формировании поляризационного взаимодействия учтены возбуждения электронов. В этом же приближении вычислены s, p, d, f – фазы рассеяния. Приведены обобщённые силы осцилляторов (ОСО) с учётом ПСФО корреляций электронов $4d^{10}, 5s^2, 5p^6$ в Γ .

Рисунки 4.6_F- содержат результаты вычислений для отрицательного иона F^-

Рис. 4.6_F_a1 изображает сечение упругого (в ХФ и УПСФО) и неупругого (в УПСФО) рассеяния электронов на отрицательном ионе F^- . При 5 эВ имеется небольшой максимум, связанный с резонансом в d – волне.

Рис. 4.6_F_b1 представляет вклады частичных s, p, d, f волн в сечение упругого рассеяния электронов на отрицательном ионе F^- в ПСФО. В p, d, f волнах имеется по два максимума в сечениях.

Рис. 4.6_F_d1 даёт фазы s, p, d, f частичных волн в рассеянии электронов на отрицательном ионе F^- . Как и должно быть, все кулоновские фазы расходятся при $E=0$.

Рисунки 4.6_I содержат результаты вычислений для отрицательного иона I^-

Рис. 4.6_I_e1 предлагает плотности монополярных обобщённых сил осцилляторов отрицательного иона I^- в ХФ и ПСФО как функции переданной атому энергии при различных q . Видно смещение максимумов с ростом q в сторону больших энергий. Примечательно крайне малое значение ОСО при $q = 2$ вплоть до $\omega \approx 4Ry$.

Рис. 4.6_I_e2 даёт плотности дипольных обобщённых сил осцилляторов отрицательного иона I^- в ХФ и ПСФО как функции переданной атому энергии при различных q . В кривых доминируют два резонанса, связанные с ионизацией внешней $5p^6$ и многоэлектронной промежуточной $4d^{10}$ подоболочками. Оба максимума весьма мощны и выглядят как два, а не один, как в Хе, гигантский резонанс. Дипольные ОСО, как обычно, примерно на порядок больше монополярных (Рис. 4.6_I_e1) и квадрупольных (Рис. 4.6_I_e3).

Рис. 4.6_I_e3 изображает плотности квадрупольных обобщённых сил осцилляторов отрицательного иона I^- в ХФ и ПСФО как функции переданной атому энергии при различных q . Здесь с ростом q ОСО сначала растут, и в них доминирует один максимум. При $q > 0.7$ ОСО начинают убывать, а максимум – расширяться и уменьшаться.

4.7. Краткое обсуждение результатов

В данной Главе объектов исследования заметно меньше, чем в Главе 2. Это понуждает провести несколько подробнее общее обсуждение полученных результатов.

Сечения упругого и неупругого рассеяния были получены в ХФ и в ПСФО (УПСФО) для ряда атомов с заполненными и полузаполненными оболочками.

Как видно, во всех случаях только включение электронных корреляций, то есть выход за рамки одноэлектронного приближения ХФ, позволил воспроизвести наблюдаемые на

опыте минимумы Рамзауэра в сечениях.

Расчеты ОСО для многих атомов выполнены в очень широкой области переданных в процессе рассеяния энергий ω (до 100 Ry) и импульсов q (до 8 ат. ед.). Результаты получены в ХФ и с учетом многоэлектронных корреляций в рамках ПСФО. Рассматривались четыре значения L , и ОСО найдены для дипольных, монопольных, квадрупольных и, в ряде случаев, октупольных переходов. Были продемонстрированы вариации роли корреляционных эффектов с ростом ω и q .

Чтобы проверить численную точность наших вычислений, последние были выполнены в двух формах оператора взаимодействия $\hat{A}(q)$, а именно форме длины $\hat{A}^r(q)$ и её модификации (3.57) - форме скорости $\hat{A}^v(q)$. В ПСФО результаты в этих двух формах должны совпасть так же, как в вычислениях с точными волновыми функциями. В качестве приемлемого по точности, рассматриваем согласие с ошибкой 1-2 %

Результаты демонстрируют неожиданное разнообразие взаимного влияния при росте энергии ω и импульсов q для всех рассмотренных ОСО: монопольных, дипольных, квадрупольных и октупольных, во всех атомах. Особенно сильны многоэлектронные эффекты в Kг и еще больше - в Хе. С ростом q гигантские и корреляционные резонансы сильно меняются (см, к примеру, [37]). Кроме них, с увеличением q появляются новые максимумы для всех, т.е. дипольных, монопольных и квадрупольных ОСО. Межэлектронное взаимодействие драматично воздействует на ОСО малоэлектронных субвалентных подоболочек ns^2 [38]. При высоких ω эти подоболочки значительно влияют на ОСО соседних многоэлектронных оболочек.

Из расчётов следует, что с увеличением q относительная роль корреляций, особенно межоболочечных, меняется кардинальным образом. Качественная причина этого состоит в том, что осцилляции оператора $\exp(iqr)$ как функции r влияет по-разному на матричные элементы переходов из внешних, субвалентных и внутренних подоболочек рассмотренных атомов. В результате, относительная роль вторых и первых членов в (3.66) становится различной, таким образом, ведя к значительным модификациям ОСО для данных значений ω и q .

Начнем с обсуждения дипольных ОСО. В Ne и Ar влияние внешних подоболочек $2p^6$ и $3p^6$ на $2s^2$ и $3s^2$, соответственно, уменьшается с ростом q , как это видно из рис. 4.2_Ne_e1-4 и рис. 4.2_Ar_e1-4. Это приводит к результатам, которые ближе к ХФ значениям, чем при малых q . Однако из-за колебаний $\exp(iqr)$ с ростом q ХФ значения ОСО как функции ω приобретают дополнительный максимум по сравнению с тем, что имеет место при малом q . Для Kг и Хе ситуация оказалась более сложной. Действительно, как видно из рис. 4.2_Kr_e1-4 и рис. 4.2_He_e1-4, роль десяти электронов в $3d$ -оболочке Kг и $4d$ в Хе, будучи важной уже при малых q , становится с ростом q абсолютно доминирующей. ОСО для $4p$ - и $4s$ -оболочек Kг и $5p$, $5s$ в Хе почти полностью определены влиянием десяти электронов $3d$ и $4d$ -подоболочек в Kг и Хе, соответственно. В целом, ОСО в Ne, Ar, Kг и Хе, оказались под более сильным влиянием многоэлектронных корреляций, и относительная роль последних не только не уменьшается, но даже увеличивается с ростом q .

Сравнительно недавно были выполнены измерения ОСО не только дипольных, но также впервые и недипольных низших дискретных переходов в Ar [22]. Данные были получены в неупругом рассеянии электронов с энергией 2.5 кэВ на Ar, и покрывают область переданных энергий до 20 eV и импульсов q до 2.5-3.0 а.е. Три четких максимума были идентифицированы при 11.8 eV, 13.4 эВ, и 14.2 эВ. Имея в виду значения энергии и зависимость ОСО от q , эти уровни интерпретировались как $3p^6-3p^5$ ($4s$, $4s'$), $3p^6-3p^5$ ($4p$,

$4p'$) и $3p^6-3p^5$ ($5s, 5s', 3d, 3d'$) переходы, соответственно. Разрешение экспериментальной энергии было недостаточно, чтобы отличить возбуждения с различным полным моментом, $j = 3/2$ и $j = 1/2$, остова с вакансией $3p$ и отделить уровни $3p-3d$ и $3p-5s$.

ОСО для дипольных и недипольных переходов качественно иные при малых q , так как дипольные ОСО при $q \rightarrow 0$ отличны от нуля, в то время как все другие обращаются в нуль. Анализ ситуации с ОСО для $3p^6-3p^5$ ($4p, 4p'$) переходов привёл авторов [22] к заключению, что это – квадрупольный уровень.

Чтобы проверить интерпретацию этого уровня как квадрупольного и сравнить расчетные и измеренные ОСО для дипольных переходов, мы выполнили вычисления ОСО в ХФ и ПСФО [13]. Вычисления были проведены также для внешнего возбуждения электронов в Ne, Kr и Xe.

Так как близкорасположенные дискретные уровни нельзя различить в эксперименте, мы представляем несколько их сумм: на рис. 4.2_He_f4 сумму $(1s-3p) + (1s-3d)$ и на рис. 4.2_He_f5 - сумму $(1s-4p) + (1s-4d)$ переходов в He наряду с экспериментальными данными из [8]. Аналогично, рис. 4.2_Ar_f8, представляет сумму дипольных и октупольных вкладов $3p-3d$, в то время как рис. 4.2_Ar_f9 дает то же самое для $3p-4d$ переходов. Подобные суммы даны также для $4p-4d, 4p-5d$ переходов в Kr и $5p-5d, 5p-6d$ переходов Xe. Область рассмотренных значений q весьма широка, до $q \leq 4$ а.е.

Заметим, что энергия возбуждения ω , входящая в формулы (3.58, 3.65, 3.67) для дискретного $i-f$ перехода, в ПСФО обозначается ω_{fi}^R и отличается от ХФ значения $\omega_{fi}^{HF} \equiv \varepsilon_f - \varepsilon_i$. Процедура вычисления ω_{fi}^R описана в [АЧ]. Энергии в ПСФО для вышеупомянутых переходов Ne, Ar, Kr и Xe собраны в Таблице 4.2.

В наших вычислениях энергии возбуждения с различным полным моментом, $j = 3/2$ и $j = 1/2$, из остова с вакансией $3p$ те же самые принимались одинаковыми.

Обсудим более подробно результаты для Ar, где возможно сравнение с экспериментальными данными [22, 24]. ПСФО энергии рассмотренных возбуждений есть $\omega_{3p-4s}^R = 12.01eV$, $\omega_{3p-4p}^{R0} = 13.45eV$ монополюных и $\omega_{3p-4p}^{R2} = 13.70eV$ квадрупольных уровней $3p-4p$. Энергии дипольных уровней $3p-5s$ и $3p-3d$, соответственно, $\omega_{3p-5s}^R = 14.46eV$ и $\omega_{3p-3d}^R = 14.53eV$. Эти значения можно сравнить с экспериментальными значениями: $\omega_{3p-4s}^{exp} = 11.8eV$, $\omega_{3p-4p}^{exp} = 13.4eV$ и $\omega_{3p-5s,3d}^{exp} = 14.2eV$. Видно, что согласие довольно хорошее.

Монополюные и квадрупольные уровни отличаются только на 0.25 эВ и поэтому как очевидно из анализа экспериментальных данных, их чисто экспериментальное разделение весьма трудно. То же самое верно для $3p-5s$ и $3p-3d$ уровней, где различие еще меньше, только 0.07 eV. Расчетные ОСО (в ХФ и ПСФО) и измеренные значения [24] представлены вместе на рис. 4.2_Ar_f2 и рис. 4.2_Ar_f10. На рис. 4.2_Ar_f2 изображена сумма $G_{3p-4p}^0(q, \omega_{3p-4p}^{R0})$ и $G_{3p-4p}^2(q, \omega_{3p-4p}^{R2})$ (см. определение (3.67)). Она сравнивается с измеренным ОСО уровня $3p-4p$ в 13.4 eV. Рис. 4.2_Ar_f10 сопоставляет сумму $G_{3p-5s}(q, \omega_{3p-5s}^{R1})$, и $G_{3p-3d}(q, \omega_{3p-3d}^{R1})$ с ОСО уровня при 14.2 eV. Видно, что в обоих случаях согласие с экспериментом удовлетворительное.

Рис. 4.2_Ar_f1 представляет монополюные $G_{3p-4p}^0(q, \omega_{3p-4p}^{R0})$ и квадрупольные $G_{3p-4p}^2(q, \omega_{3p-4p}^{R2})$ ОСО. Видно, что вклад монополюного ОСО больше, демонстрируя что в

сумме расчетных значений, представленных на рис. 4.2_Ar_f2, главным является вклад монополюльного перехода. Следовательно, экспериментально - наблюдаемый максимум при 13.4 eV – это не квадрупольный уровень, как утверждалось в [22], а смесь монополюльного и квадрупольного, причём монополюльный вклад является доминирующим [13]. Заметим, что при $q > 1.3$ а.е. квадрупольные ОСО начинают увеличиться, в то время как монополюльный член уменьшается. При $q > 2$ а.е. доминирует уже квадрупольный член.

Недавно были вновь измерены ОСО нескольких первых уровней Ar [24]. Были рассмотрены дипольные $3p-4s$ и комбинация монополюльного и квадрупольного переходов $3p-4p$. Вклад монополюльного и квадрупольного уровней был разделён с помощью расчётных множителей. Полученные ОСО сравнивались с результатами расчета: для монополюльного возбуждения на рис. 4.2_Ar_f12, а для квадрупольного – на рис. 4.2_Ar_f13. Имеется качественное согласие и заметное количественное различие. Однако нет совпадения и суммарного результата, приведенного в [22] с суммой соответствующих ОСО из [24]. Определённо более высокая точность требуется от данных эксперимента.

Рис. 4.2_Ar_f11 демонстрирует разумное согласие с имеющимися данными опыта для $G_{3p-4s}(q, \omega_{3p-4s}^R)$. Эта ОСО как функции q идет в минимум при $q = 1.25$ и затем начинает увеличиваться. Заметим, что наиболее затронутый электронными корреляциями - $3p - 5s$ переход, хотя его ОСО значительно меньше, чем для $3p - 3d$ перехода.

Смесь компонентов, соответствующих различным мультипольностям тесно связана с временем жизни дискретных возбуждений. Например, монополюльный уровень может распасться с испусканием, по меньшей мере, двух фотонов, в то время как квадрупольный уровень распадается намного быстрее, испуская единственный квадрупольный фотон. Изменяя q , можно изменить относительный вес различных вкладов, таким образом, увеличивая или уменьшая скорость распада возбуждаемого при рассеянии с данным q состояния. В смеси компонент, сформированной при данном значении q , короткоживущая компонента исчезает быстрее, с ростом времени увеличивая относительный вес другой компоненты.

Важная проблема состоит в улучшении экспериментального разрешения, которое помогло бы отличать близко расположенные дискретные уровни. Другая возможность, как показано выше, состоит в том, чтобы изучать зависимость ОСО дискретных возбуждений и таким способом различать очень близко расположенные уровни.

Вычисления сечений комптоновской ионизации и возбуждения были выполнены для внешних подболочек и соответствующих дискретных переходов в атомах Ne, Ar, Kr и Xe. Именно, выбраны уровни $np - (n+1)$, $(n+2)p$, $L=0,2$, $np - n$, $(n+1)d$ [$2p-3d$, $4d$ для Ne], $L=1,3$ и $np - (n+1)$, $(n+2)s$, $L=1$ в Ne, Ar, Kr и Xe для переданного импульса $q < 8$ ат. ед. [16]. Различие в энергии между рассматриваемыми монополюльными и квадрупольными уровнями мало для всех исследованных атомов так же, как и различие между октупольными и дипольными уровнями. Для примера, ниже представлены энергии, в для Ne: $\omega_{2p-3p}^{L=0} = 1.5023$, $\omega_{2p-3p}^{L=2} = 1.4379$, $\omega_{2p-4p}^{L=0} = 1.6074$, $\omega_{2p-5p}^{L=2} = 1.5981$, $\omega_{2p-3d}^{L=1} = 1.5886$,

$$\omega_{2p-3d}^{L=3} = 1.6379, \omega_{2p-3s}^{L=1} = 1.3481, \omega_{2p-4s}^{L=1} = 1.5635, \text{ все - в Ry.}$$

Рис. 4.2_Ne_h1 представляет результаты для $2p-3s$ перехода, с характерной двугорбой структурой, еще более выраженной, чем для $2p-3p$ при почти всех q . Заметим, что сечение для $2p-3s$ приблизительно в пять раз больше, чем для перехода $2p-4s$.

Из-за близости энергий рассматриваемых уровней возбуждения, Рис. 4.2_Ne_h3 представляет относительное сечение для $2p-3p$ перехода и их монополюльных и

квадрупольных компонент в ПСФО при той же самой энергии $\omega_{2p-3p} = 1.5$. Рис. 4.2_Ne_h2 изображает намного меньший вклад дипольного и октупольного 2p-3d переходов. Энергия $\omega_{2p-3d} \approx 1.589 \approx 1.6$ почти совпадает с $\omega_{2p-4p} \approx 1.607 \approx 1.6$ и - близка к $\omega_{2p-4d} \approx 1.64$, с одной стороны и - относительно близка к $\omega_{2p-4s} \approx 1.564$ с другой, что делает их трудно различимыми экспериментально. Вот почему рис. 4.2_Ne_h4 представляет сумму вкладов, наряду с парциальными вкладами переходов 2p-3d, 2p-4p, 2p-4s и 2p-4d. Мы видим, что для всех q вклад 2p-4p перехода доминирует, однако вклад 2p-4s почти столь же велик.

Рис. 4.2_Ar_h1 представляет результаты для 3p-4s и 3p-5s переходов, которые снова, как и в Ne, имеет четкую структуру с двумя горбами. Заметим, что отношение вклада 3p-4s к вкладу 3p-5s в Ar больше, чем аналогичное отношение в Ne. В Ar, равно как и в Ne, ряд уровней весьма близок друг к другу. Именно поэтому на Рис. 4.2_Ar_h5, наряду с сечениями комптоновского возбуждения 3p-5p, 3p-3d, 3p-5s и 3p-4d уровней, приводится и их сумма. Доминирующим является вклад 3p-3d перехода, поскольку он проходит между состояниями с тем же самым главным квантовым числом.

Монопольный и квадрупольный 3p-4p уровни в Ar очень близки по энергии возбуждения, которая составляет $\omega_{3p-4p}^{L=0} = 1.0068$ и $\omega_{3p-4p}^{L=2} = 1.0059$, соответственно. Поэтому в расчётах их энергии были выбраны равными $\omega_{3p=4p} = 1Ry$. Полученные результаты приведены на рис. 4.2_Ar_h3.

Ситуация в Kr и Xe качественно сходна с имеющей место в Ne и Ar.

Существенно заметить, что роль, играемая ПСФО корреляциями в сечениях комптоновского рассеяния, не слишком велика. Важными исключениями являются $np - (n+1)$, $(n+2)s$ переходы. Все кривые для $np - (n+1)$, $(n+2)p$ возбуждения имеют общую качественную особенность. А именно, сильный максимум, который проявляется главным образом при $q \approx 1$. Во всех кривых дополнительная интересная особенность появляется из-за квадрупольного вклада, имеющего два максимума: один при $q \approx 1$ и второй, который перемещается от $q \approx 4$ в Ne до $q \approx 2$ в Xe. Все кривые для $np-(n+1)$, $(n+2)s$ имеют структуру с двумя горбами и вклад $np-(n+1)s$ намного больше, чем от $np-(n+2)s$. Однако кривые для $p-d$ переходов, и дипольных и октупольных, по крайней мере в рассматриваемой q -области, имеют единственный максимум, находящийся для дипольного перехода при более малом q , чем для квадрупольного. Сила последнего быстро увеличивается, по мере перехода от Ne к Xe.

Остановимся несколько подробнее на рассеянии позитрона. Здесь мы представляем результаты наших расчетов сечения упругого рассеяния медленных позитронов на атоме [10] и демонстрируем эффективность очень простого метода (см. Раздел 3.8), который позволяет учесть образование виртуального позитрония в этом процессе.

Отсутствие решающего успеха после учета поляризационных поправок второго порядка (3.90) означает наличие качественно важного упущения. Мы предположили в [9], что причина - в пренебрежении формированием виртуального позитрония в промежуточном состоянии, который возникает вследствие временной связи налетающего позитрона и возбужденного, т.е. находящегося далеко от атомного ядра, электрона. Мы принимаем, что будучи почти не затрагиваемым действием остова, этот электрон и позитрон могут формировать связанное состояние, почти идентичное свободному позитронию Ps . Это меняет энергию промежуточного состояния, сдвигая её на I_{Ps} -

энергию связи позитрония, и изменяет волновую функцию промежуточного состояния, которое не является в действительности произведением ХФ волновых функций позитрона, возбужденного электрона и вакансии, созданной после виртуального возбуждения атомного электрона. Вместо этого, движение позитрона относительно электрона сильно изменено благодаря их связи.

Чтобы учесть сдвиг энергии, I_{ps} должно быть вычтено из суммы энергий позитрона и электрона $E_1 + \varepsilon_2$ в знаменателе поляризационного взаимодействия второго порядка, что и сделано в (3.91). Существенно иметь в виду, что если энергия связи позитрония больше энергии атома-мишени, $I_{ps} > I$, то дипольная поляризуемость атома $\alpha(I_{ps})$ есть комплексное величина, обычно со значительной мнимой частью.

Было бы намного проще использовать (3.94) вместо (3.93), но асимптотическое выражение (3.94) справедливо только на таких больших расстояниях от атома, вклад от которых в полный фазовый сдвиг мал. Вот почему в наших вычислениях использовались формулы (3.91) и (3.93).

Результаты упругого рассеяния позитронов на He, полученные с помощью (3.91, 3.93), демонстрируются на Рис. 4.2_He_i1. Видно, что сдвиг энергии из-за формирования позитрония ведет к заметному уменьшению сечения при низких энергиях. Чтобы получить приведенный результат, были учтены вклады s, p, d, f – фаз парциальных волн позитрона. Заметим, что образование виртуального позитрония ведет к заметным вариациям во всех вкладах парциальных волн.

Сечение упругого рассеяния для $(e^+ + He)$ при низкой энергии намного меньше, чем для $(e^- + He)$. Это можно объяснить качественно следующим образом. Самосогласованное поле V_{sc} , действующее на налетающий позитрон, является отталкивающим, тогда как поляризационный потенциал V_{pol} , который на больших расстояниях от атома r убывает как $[-\alpha(I_{ps})/2r^4]$ – притягивающий. Это происходит потому, что для He поляризуемость $\alpha(I_{ps})$, так же как $\alpha(0)$, положительна. Отметим, что для He V_{pol} и V_{sc} – величины того же порядка. Таким образом, вклады V_{sc} и V_{pol} компенсируют друг друга, уменьшая сечение упругого рассеяния. Что касается рассеяния электрона, то V_{sc} является притягивающим, так же, как V_{pol} , и вместо компенсации, соответствующие весьма большие вклады складываются друг с другом, резко увеличивая сечение.

В этой связи значительный интерес представляет сравнение рассеяния $(e^+ + He)$ и $(e^+ + Li)$, потому что $\alpha_{Li}(I_{ps})$ отрицательно, комплексно и по абсолютной величине намного больше, чем $\alpha_{He}(I_{ps})$. Отрицательный знак $\alpha_{Li}(I_{ps})$ означает, согласно (3.95), что поляризационный потенциал, вместо того, чтобы быть притягивающим, может оказаться также отталкивающим, как это было уже упомянуто в Разделе 3.8. Данный факт имеет общее значение в физике. Действительно, если «снаряд» и элемент мишени могут формировать связанную частицу в промежуточном состоянии, поляризационное взаимодействие может изменить свой знак, становясь притягивающим.

Оказывается, подобный случай можно найти, например, и в ядерной физике, а именно в π - мезон - ядерном рассеянии, где система (π -мезон + нуклон) формирует так называемый Δ_{33} - резонанс, ведущий к изменению знака в поляризационном

взаимодействии [3.28]. Что касается мнимой части, с точки зрения упругого рассеяния оно может быть существенным, отталкивающим или притягивающим, в зависимости от его величины. Таким образом, нужно ожидать, что благодаря тому, что V_{sc} и V_{pol} имеют один и тот же знак, они вносят существенный вклад, приводя к очень большому сечению, того же размера или даже больше, чем сечение $(e^- + Li)$.

Результаты для $(e^- + Li)$ - сечения представлены на Рис.4.3_Li_i1. Видно, что учёт сдвига энергии на величину, соответствующую формированию позитрония в виртуальном состоянии, значительно влияет на сечение при низких энергиях

Картина, описанная выше для рассеяния позитрона на He и Li качественно справедлива также для пары Ne - Na. Действительно, $(e^+ + Ne)$ сечение мало, значительно меньше геометрического, а сечение упругого рассеяния $(e^+ + Ne)$ очень велико.

Для более тяжелых атомов благородных газов, а именно Ar, Kr, Xe, поляризационное взаимодействие гораздо больше и сечения растут с ростом атомного номера. Для соседних щелочных атомов, подобно ситуации в паре Li-He, сечения рассеяния позитрона на щелочных атомах намного больше, чем на благородных газов. Результаты для Kr и Xe находятся в качественном согласии с полученными в работе [28], использующей намного более сложный метод.

Специального внимания заслуживает изучение мнимой части фаз рассеяния $\Delta\delta'_\ell(E)$. Она описывают соответствующие вклады парциальных волн в сечение неупругого рассеяния $e^+ + A \rightarrow Ps + A^+$. Это сечение $\sigma_{in}(E)$ выражается через мнимую часть фазового сдвига $\mu_\ell(E)$ согласно (3.14). Так же, как в вычислениях $\sigma(E)$, мы ограничиваемся учетом четырех первых парциальных волн, с $\ell=0, 1, 2, 3$. Соответствующие результаты для Li и Mg приводятся на Рис.4.3_Li_i1 и Рис.4.4_Mg_i1, соответственно.

Интересно узнать, можно ли в рамках простого подхода, который мы использовали здесь, описать связанные состояния в $(e^+ + A)$ - системе. Действительно, далеко не тривиально, что при отталкивающем характере V_{sc} и возможности также отталкивающего характера V_{pol} , может вообще существовать связанное состояние. Так, уместно было бы ожидать связанные состояния позитронов с теми атомами, для которых $\alpha_A(I_{Ps})$ является большим (гораздо больше, чем в благородных газах) и положительным $\alpha_A(I_{Ps}) > 0$, т.е. потенциал V_{pol} достаточно сильный и притягивающий. Интересной и привлекательной является возможность того, что $(e^+ + A)$ связанное состояние является результатом действия мнимой части $\text{Im}(V_{pol})$.

С другой стороны, связь может возникнуть вследствие взаимодействия Ps и A^+ за счет сил Ван дер Ваальса. Подобная связь особенно велика, если A^+ имеет электронную структуру, подобную атому первой группы таблицы Менделеева, т.е. если A относится ко второй группе. Чтобы обнаружить возможность формирования связанного состояния, следует изучить сдвиг фазы рассеяния при нулевой энергии: если он достигает π , связанное состояние в рассматриваемом канале образуется. Однако следует проверить, устойчиво ли это состояние относительно распада в канал $(Ps + A^+)$. Это требует знания

энергии связанного состояния. Найти ее намного более сложно, чем вычислить фазовые сдвиги при нулевой энергии позитрона e^+ .

4.8 Литература к Главе 4

1. M. Ya. Amusia and N. A. Cherepkov, Case Studies in Atomic Physics, North-Holland Publishing Company, **5**, 2, p. 47-179, 1975.
2. М. Я. Амусья, А. Танчич, Н. А. Черепков, Л. В. Чернышева и С. Г. Шапиро, ЖЭТФ, **68**, 6, p. 2023-2031, 1975
3. Andrick D., Adv. In At. and Mol. Phys. **9**, 1973. 207
4. D. E. Golden, J. Furst, and M. Mahgerefteh, Phys. Rev. A, **30**, 3, 1247-1254 (1988).
5. Ramsauer C and Kollath R. Ann.Phys. (Leipzig) **12**, 1932, 521-561
6. М. Я. Амусья, Н. А. Черепков, С. И. Шефтель, ЖЭТФ, **58**, 2, p. 618-623, 1970
7. M. Ya. Amusia, L. V. Chernysheva, Z. Felfli and A. Z. Msezane, Phys. Rev. A, **64**, 032711, 2001.
8. X.J. Liu, L.F. Zhu, Z.S. Yuan et al, Journal of electron spectroscopy and related phenomena, **135**, 15 2004
9. M. Ya. Amusia, N. A. Cherepkov, L. V. Chernysheva and S. G. Shapiro, J. of Phys. B: At. Mol. Phys., **9**, 17, p. L531-534, 1976.
10. M. Ya. Amusia, N. A. Cherepkov and L. V. Chernysheva, JETP, **124**, 1(7), pp. 1-9, 2003.
11. Jaduszliwer E., Paul D. A. L. Can. J. Phys. 1973. V. 51. P. 1565-1573
12. Linert I., Mielewska B., King G.C., Zubek M. Phys Rev A **74**, 042701 (2006).
13. M. Ya. Amusia, L. V. Chernysheva, Z. Felfli, and A. Z. Msezane, Phys. Rev. A **67**, 022703-1-8, 2003.
14. M. Ya. Amusia, L. V. Chernysheva, Z. Felfli, and A. Z. Msezane, Phys. Rev. A **75**, 062703, 2007.
15. M. Ya. Amusia, L. V. Chernysheva, Z. Felfli and A. Z. Msezane, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., submitted, 2008.
16. M. Ya. Amusia, L. V. Chernysheva, Z. Felfli, and A. Z. Msezane, Phys. Rev. A **65**(6), 62705-1-8, 2002.
17. M. S. Dababneh, W. E. Kauppila, J. B. Downing, F. Lapierre, V. Pol, J. H. Smart, and T. S. Stein., Phys.Rev.A, **22**, 1872 (1980)
18. D. E. Golden and H. W. Bandel, Phys. Rev. **138**, A14 (1965)
19. D. G. Thomson, Proc. Roy. Soc. **A294**, 160, 1966.
20. C. Ramsauer, Ann. Phys. (Leipzig) **64**, 513 (1921).
21. R. Panajotovic, D. Filipovic, B. Marinkovic, V. Pejcev, M. Kurepa, L. Vuskovic, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., **30**, 5877-5894, 1997.
22. X. W. Fang and K. T. Leung, Phys. Rev., **62**, 062703 (2000)
23. Z. Chen, M. Ya. Amusia, and A. Msezane, Phys. Rev. A, **60**, 6, p. 5115-5117, 1999.
24. Zhu L.F., Cheng H.D., Yuan Z.C., Liu X.J., Sun J.M. and Xu K.Z., Phys.Rev.A **73**, 042703 (2006)
25. M. Ya. Amusia, L. V. Chernysheva, Z. Felfli and A. Z. Msezane, Surface Review and Letters, **9** (2), 1155-60, 2002.
26. T. S. Stein and W. E. Kauppila, Adv. At. Mol. Phys., **18**, 53 (1982).
27. M. Charlton, Rep.Prog.Phys., **48**, 737 (1985).
28. R.N.Hewitt, C.J.Noble, and B.H.Bransden J.Phys.B.: At.Mol. Opt. Phys., **26**, 3661 (1993).

29. Dababneh M.S., Kauppila W.E., Downing J.B., Lapierre F., Pol V., Smart J.H., Stein T.S. // Phys. Rev. A. 1980. Vol. 22. P.1872-1884.
30. M. Ya. Amusia, L. V. Chernysheva, Z. Felfli, and A. Z. Msezane, Phys. Rev. A, **73**, 062716, 2006.
31. G. Sinapius, W. Raith and W. G. Wilson J. Phys. B13, 4079 (1980)
32. M. Ya. Amusia, Zh. Zhivanovich, V. Radojevich and N. A. Cherepkov, Journal of Chemical Physics, **71**, 4 p. 1761-1766, 1979.
33. М. Я. Амусья, В. А. Соснивкер, Н. А. Черепков и Л. В. Чернышева, ЖТФ, **55**, 12, p. 2304-2311, 1985.
34. М. Я. Амусья, В. А. Соснивкер, ЖТФ, **59**, 3, p. 28-32, 1989.
35. Ivanov V. K. J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 1999. V. 32, N 12. P. R67-R101.
36. Ivanov V. K. Radiation Physics and Chemistry. 2004. V. 70, P. 345-370.
37. M. Ya. Amusia, V. K. Ivanov and S. A. Sheinerman, J. Phys. B: At. Mol. Phys., **9**, 9, p. 1537-1553, 1976.
38. M. Ya. Amusia, N. A. Cherepkov, L. V. Chernysheva and S. I. Sheftel, Phys. Lett. A, **40**, 1, p. 5, 1972.