

Заключительные замечания

В настоящей книге собраны результаты вычислений сечений и вероятностей широкого круга атомных процессов с участием фотонов и электронов. Приведены:

- а) полные и парциальные сечения фотопоглощения,
- б) дипольные и недипольные параметры анизотропии фотоэлектронов,
- в) сечения упругого рассеяния медленных электронов и позитронов,
- г) обобщённые силы осцилляторов возбуждений дискретных и сплошного спектра,
- д) сечения комптоновского рассеяния с ионизацией или возбуждением,
- е) Оже- и радиационных распадов образующихся в этих процессах вакансий.

В качестве мишеней фигурируют атомы, относящиеся ко всем группам периодической системы элементов Менделеева. В ряде случаев рассматриваются также и некоторые ионы – положительные и отрицательные – целого ряда атомов. В качестве примеров, приводятся данные для эндоэдральных атомов, т. е. атомов, помещённых в оболочку фуллерена C_{60} .

Для наибольшего числа атомов проведены расчёты сечений фотоионизации фотоионизации, для наименьшего – данные по сложным Оже-распадам вакансий. Количество рассмотренных примеров определяется как трудоёмкостью расчёта процесса, достигнутой степени его автоматизации, так и оцениваемой нами, а потому возможно несколько субъективно, необходимости в соответствующих массовых данных. С разной степенью подробности освещаются и теоретические подходы, использованные в расчётах, в основном, в зависимости от того, в какой мере и степени тот или иной процесс или характеристика обсуждаются в литературе.

В расчётах в качестве простейшего, было принято одноэлектронное приближение Хартри – Фока (ХФ), а неучтённое в его рамках межэлектронное взаимодействие – в рамках в основном Приближения случайных фаз с обменом (ПСФО) и его различных модификаций. Ряд результатов получен с помощью Многочастичной теории возмущений (МТВ). Исползованные вычислительные программы описаны и частично приведены в [АЧ]. Однако с момента публикации этой книги прошло заметное время, и содержащиеся в ней программы существенно модифицированы и дополнены. Эти изменения учитывают, в том числе, и совершенствование вычислительных машин, в первую очередь, персональных вследствие увеличения скорости операций и объёма памяти – оперативной и дисковой. В результате, появилась возможность учитывать значительно большее число взаимодействующих электронов.

При проведении массовых расчётов важным является контроль точности получаемых результатов. Мы имеем в виду величину чисто математической погрешности, неизбежную при проведении конкретных вычислений в рамках выбранной физической модели либо подхода. Надёжность численного результата контролируется не только проверкой задания исходных данных, ростом числа точек, в которых находятся волновые функции при решении исходных уравнений ХФ, числа точек по энергии в конечных суммах, которыми заменяются интегралы по возбуждениям в сплошном спектре с бесконечным верхним пределом.

Удобной проверкой численной точности расчёта сечений фотоионизации – полных и парциальных, дифференциальных по углу испускания фотоэлектрона служит согласие результатов расчётов в формах «длины» и «скорости» (1.60). Результаты должны совпадать как с точными волновыми функциями в начальном и конечном состояниях, так и в рамках ПСФО [АМ]. В рамках МТВ, ХФ и различных обобщениях ПСФО результаты в

формах «длины» и «скорости» могут различаться. Заметим, что совпадение результатов в формах «длины» и «скорости» не означает высокую точность выбранного приближения в смысле близости с данными надёжных, проверенных экспериментов, равно как различие не означает, что принятое приближение плохо. К примеру, обладающий весьма низкой точностью в описании эксперимента локальный одноэлектронный потенциал, одинаковый для атомных и вылетающих электронов, приводит к совпадению результатов расчета в формах «длины» и «скорости», но сильному отличию от эксперимента.

Сказанное в предыдущем абзаце справедливо и для обобщённых сил осциллятора (ОСО), для которых операторы в формах «длины» и «скорости» записываются в виде (3.56) и (3.57), соответственно. Мы считали различие результатов в пределах 2-3% удовлетворительным, и в этом случае приводили лишь одно, усреднённое, значение. Большее отличие свидетельствует обычно о том, что вклады не всех электронных подболочек и переходов из них учтены. Это, как правило, вызвано, в свою очередь, ограничениями наших вычислительных возможностей.

Существенной проверкой для полных сечений фотопоглощения и ОСО, полученных с точными волновыми функциями, является дипольное «правило сумм» (см. к примеру, [AM]). Для сечения фотоионизации оно имеет вид (1.6). Заметим, что оно справедливо не только для точных волновых функций, но и в ПСФО. В рамках МТВ, ХФ и различных обобщениях ПСФО левая часть в (1.6) не совпадает, вообще говоря, с полным числом электронов в атоме. Чтобы применять правило сумм для проверки вычислительной точности, надо вычислять сечение вплоть до очень высоких значений энергии. Для приближённой оценки это не требуется: правило сумм приближённо выполняется для большинства атомных подболочек, даже если ограничиться областью энергий, не намного превосходящих положение максимума в сечении фотопоглощения данной подболочки.

Правило сумм, аналогичное (1.6), справедливо и для ОСО при любых q (3.65):

$$\sum_{f,i} G_{fi}(\omega, q) \equiv Q(q) = N, \quad (3a.1)$$

где суммирование по f включает дискретные возбуждения и интегрирование по сплошному спектру, а по i - содержит суммирования лишь по электронным занятым состояниям.

Отметим, что, поскольку, согласно определению ОСО, выражение $Q(0) = N$, в нуль должны обращаться суммы ОСО любой, n -ой производной по q в нуле: $Q^{(n)}(q)|_{q=0} = 0$. Пока такая проверка не проводится, хотя первая производная ОСО по q изучалась давно (см., к примеру, [1] где изучен случай He).

Проверками точности вычислений служит также достигаемая близость к надёжно установленным экспериментальным результатам. Здесь, однако, следует иметь в виду, что приведённые в книге результаты получены с использованием наилучших совместимых с идеей проведения массовых расчётов теоретических подходов. Сами по себе, эти подходы вовсе не гарантируют согласия с экспериментом. Наоборот, надёжно установленное отклонение между приведенными в настоящей книге данными и экспериментом должно привлечь внимание обоих заинтересованных сторон – оно может служить доказательством как ограниченности и недостаточности использованного теоретического подхода, так и

наличия ошибки, в первую очередь – систематической. Как заинтересованная в правильности расчётов сторона, отмечаем, что обнаружение различия теории - эксперимент совсем не столь редко обнаруживает погрешность в эксперименте. Так, сравнительно недавно рассчитанное в рамках используемых в данной книге приближений сечение фотоионизации $4d$ подболочки иода [2] в три раза больше, чем принятое в литературе значение. Последовавшие проверочные измерения [3] подтвердили правильность расчёта, сохранив, тем не менее, некоторые различия между результатами расчёта и опыта, что будет способствовать, надеемся, совершенствованию методов расчёта. Это – отнюдь не единственный случай.

В перспективе, в проблеме сбора и хранения данных нам видится, наряду с созданием базы результатов вычислений, представленных в данной книге, ещё и такое развитие техники расчётов, которое сделает возможным, при задании названия атома и указания представляющей интерес характеристики или сечения процесса, вычислить все необходимые данные в рамках предварительно разработанного и выбранного приближения, к примеру, ПСФО, представив их в виде таблиц или рисунков, при том - за секунды. Пока такая программа далека от реальности, но темп совершенствования вычислительных машин необычайно быстр, так что указанный подход заслуживает внимания. Отметим, что увеличение быстродействия и объёма памяти персональных компьютеров сделает возможным получение данных, сходных с приведенными в данной книге, не только для атомов, но и для простых молекул.

Как отмечалось в Предисловии, мы надеемся, что собранные нами данные и методы, используемые при их получении, могут быть полезны при теоретическом описании уже выполненных экспериментов, и в предложении новых, для которых теоретические оценки или даже вычисления могут быть выполнены заранее. Все это, как было сказано в Предисловии, сможет помочь экспериментаторам планировать их деятельность более эффективно, позволяя проводить перед реальным экспериментом гораздо более простой и менее трудоёмкий вычислительный эксперимент.

Литература к Заключительным замечаниям

1. M. Ya. Amusia, Zh. Zhivanovich, V. Radojevich and N. A. Cherepkov, Phys. Rev. A, **13**, p. 1466-1474, 1976.
2. Amusia M. Ya., Cherepkov N. A., Chernysheva L. V., Manson S.T. Phys. Rev. A 2000. V. 61. P. 020701-020704.
3. Kiildsen H., Andersen P., Folkmann F., Knudsen H., Kristensen B., West J.B., Andersen T. Phys. Rev. A. 2000. V. 62. N 020702(R).