

01; 02

© 1990 г.

УПРУГОЕ И КВАЗИУПРУГОЕ РАССЕЯНИЕ МЕДЛЕННЫХ ЭЛЕКТРОНОВ НА АТОМАХ И ИОНАХ С ОДНОЙ ВАКАНСИЕЙ В ЗАМКНУТОЙ ОБОЛОЧКЕ

*М. Я. Амусья, В. А. Сосникер, Н. А. Черепков, Л. В. Чернышева,
С. И. Шефтель*

В рамках приближения случайных фаз с обменом (ПСФО) исследован процесс упругого рассеяния электронов на атомах и ионах с вакансией в одной из замкнутых оболочек. Рассмотрен также переворот спина в этом процессе (квазиупругое рассеяние). Учтена возможность наличия у атома мишени произвольного орбитального момента и большой поляризуемости.

Рассчитаны дифференциальные сечения упругого и квазиупругого рассеяний электронов на однократных положительных ионах аргона и полное сечение квазиупругого рассеяния электронов на атомах К. Получено удовлетворительное согласие с экспериментом.

Введение

В ряде теоретических работ были исследованы дифференциальные сечения рассеяния медленных электронов на некоторых ионах. В [1] в одночастичном приближении вычислена энергетическая зависимость сечения рассеяния назад на сферически симметричных ионах при энергиях, меньших первого порога возбуждения. В [2] описано поведение дифференциальных сечений рассеяния электронов на s -состояниях ионов в окрестности автоионизационных резонансов — двухэлектронных возбуждений нейтральных атомов.

В данной работе разработан подход, с помощью которого можно исследовать процессы как упругого, так и неупругого рассеяний электронов любой энергии на таких мишенях, условно обозначенных A^+ , конфигурация которых соответствует одной вакансии (дырке) в замкнутой оболочке. При этом используется LS -связь. Рассматриваемая здесь система электрон+мишень при полном спине $S=0$ аналогична промежуточному и конечному состояниям атома с замкнутыми оболочками в процессе фотоионизации. Для $S=1$ рассматриваемая нами система e^-+A^+ эквивалентна триплетному возбуждению атома с заполненными оболочками. Это позволяет в отличие от [2] ограничиться учетом лишь простейших возбуждений системы e^-+A^+ типа частица—дырка также и при упругих столкновениях $e^-—A^+$. Образование произвольной частично-дырочной пары в упругом рассеянии $e^-—A^+$ возможно лишь в качестве промежуточного состояния за счет межэлектронных взаимодействий. Переворот спина налетающего и атомного электронов в упругом столкновении в работе рассматривается отдельно и в дальнейшем будет называться квазиупругим рассеянием. Роль межэлектронных взаимодействий в этих процессах удобно изучать в приближении случайных фаз с обменом (ПСФО) [3]. Оно учитывает все переходы частично-дырочной пары из одного состояния в другое. Существенно, что это приближение обеспечивает очень хорошее совпадение результатов расчета с экспериментом для процесса фотоионизации [3]. Вычисление вклада межэлектронных корреляций в фазы, дифференциальные и полные сечения упругого и квазиупругого рассеяний медленных электронов на мишенях с одной вакансией в замкнутой оболочке по методу ПСФО и составляет цель данной работы.

В отличие от дипольного процесса фотоионизации атомов с замкнутым и оболочками при упругом рассеянии электронов на мишенях A^+ полный орбитальный момент L системы $e^- + A^+$ может быть любым. Поскольку в работе рассматривается мишень с произвольным орбитальным моментом l_j , то при получении амплитуды процесса следует провести парциально-волновое суммирование не только по орбитальным моментам l налетающей частицы, но также по полному орбитальному моменту L , удовлетворяющему равенству $\vec{L} = \vec{l} + \vec{l}_j$, и спиновому моменту S . Некоторые из необходимых для этого формул были получены нами в [4].

Дальнейшее изложение построено следующим образом. В разделе 1 обсуждается используемое приближение, приводится выражение для фаз упругого рассеяния $e^- - A^+$. В разделе 2 рассматривается упругое рассеяние электронов на однократных положительных ионах аргона Ar^+ при энергиях от 0.04 до 2.3 Ry, рассчитываются угловые распределения рассеянных электронов, а также сечение упругого рассеяния назад в реакции $e^- - Ar^+$. В разделе 3 в рамках предложенного подхода исследуется квазиупругое (с переворотом спина) рассеяние электронов на ионах аргона. В разделе 4 результаты предыдущей части работы обобщаются на мишени с большой поляризуемостью. Рассчитывается сечение квазиупругого рассеяния на атоме калия, электронная структура которого рассматривается как одна вакансия во внешней оболочке отрицательного иона K^- . Проведено сравнение с имеющимися экспериментальными данными и теоретическими расчетами.

В работе используется атомная система единиц $e = \hbar = m = 1$, энергия выражается в ридбергах.

1. Упругое рассеяние электронов на атомах с одной вакансией в замкнутой оболочке

Система $e^- + A^+$ представляет собой частично-дырочное возбуждение атома с замкнутыми оболочками, что позволяет непосредственно использовать методы теории многих тел. В этой теории за нулевое приближение принимают обычно приближение Хартри—Фока (ХФ) [3], в котором частицей считается возбужденное состояние сверхзаполненных оболочек. Поэтому волновая функция налетающего электрона рассчитывается как функция $(N+1)$ -й частицы φ_k^{N+1} (N — число электронов, которые содержали бы заполненные оболочки мишени; k — импульс налетающей частицы). Поскольку исследуемая нами система $e^- + A^+$ состоит из N электронов, то физически более оправданным является приближение, в котором волновая функция налетающего электрона рассчитывается в самосогласованном ХФ поле атома-мишени с дыркой в состоянии j . При этом будем рассматривать два приближения. В первом (ХФ-I) по проекциям орбитального момента дырки проводим усреднение (волновую функцию налетающего электрона обозначаем φ_k^N), во втором (ХФ-II) считаем, что для системы налетающего электрона и атома-мишени с дыркой j фиксированы полный орбитальный момент L и спин S (волновая функция налетающего электрона $\varphi_{(j)k}^{N(LS)}$). Расчет в обоих случаях проводим в поле «замороженной» дырки [3].

Волновая функция φ_k^{N+1} ортогональна к одноэлектронным волновым функциям атома [3]. Поэтому в теории многих тел данная функция выбирается в качестве исходного приближения для налетающей (рассеянной) частицы. Очевидно, что основное влияние на фазу $e^- - A^+$ -рассеяния в этом случае оказывает учет кулоновского взаимодействия электрона и вакансии. В ПСФО его можно представить совокупностью голдстоуновских диаграмм [3], часть из которых может быть учтена в приближении ХФ включением кулоновского поля вакансии. Процесс рассеяния частицы в результате кулоновского взаимодействия электрона и вакансии, т. е. перерассеяние частицы на дырке, показан на рис. 1, где линия со стрелкой направо означает ХФ электронное, а со стрелкой налево дырочное состояние, волнистая линия — кулоновское взаимодействие, вертикальная стрелка — проекцию спина электрона и дырки, v_i — совокупность квантовых чисел n_i, l_i, m_i . Слева на рис. 1 обозначена искомая сумма бесконечной последовательности диаграмм.

По всем промежуточным частично-дырочным состояниям ν_5, ν_6, \dots (возможные спиновые состояния показаны стрелками) проводится суммирование или интегрирование, если они относятся соответственно к дискретному или сплошному энергетическому спектру.

Диаграммы рис. 1 описывают процесс упругого рассеяния поляризованных электронов на поляризованных мишенях. Исходным приближением для этого процесса служит диаграмма 1, а. Диаграммы типа 1, б, в, г, и описывают одно- и многократные акты рассеяния. Возможен также и процесс «аннигиляции», проиллюстрированный на рис. 1, е—з, к. В последовательности графиков рис. 1 содержатся и такие, которые описывают квазиупругое рассеяние $e^- - A^+$ с изменением проекции спина частицы и дырки. Такого типа процессы возможны только за счет обмена налетающего электрона с электроном мишени и изобра-

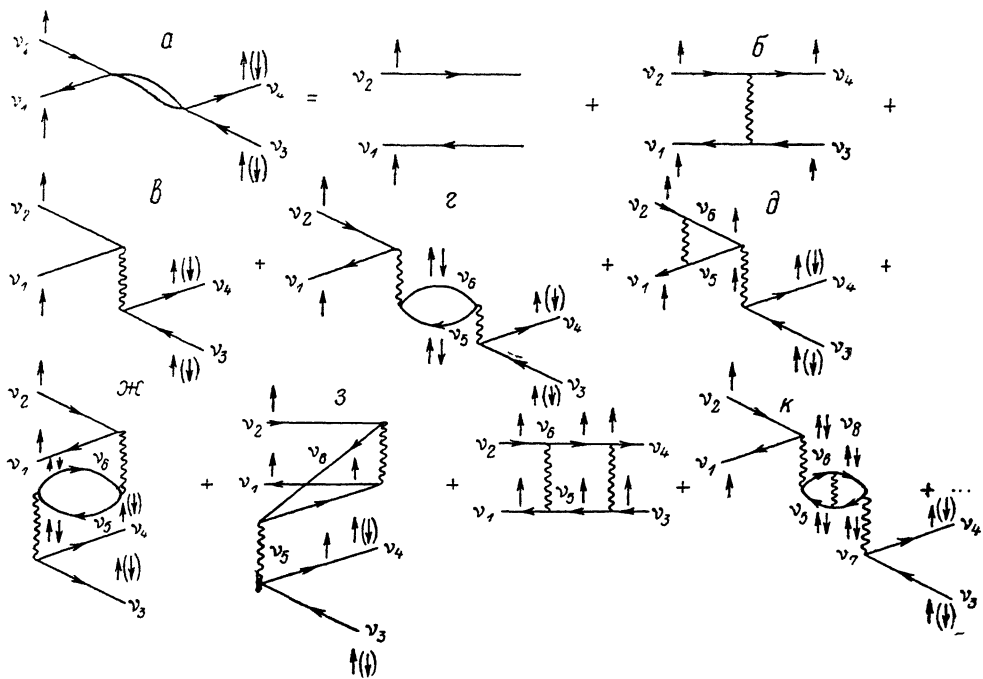


Рис. 1. Перерассеяние частицы на дырке в ПСФО (время растёт слева направо).

жаются «аннигиляционными» (обменными) графиками. На графиках е—з, к рис. 1 спиновое состояние конечной частично-дырочной пары в квазиупругом рассеянии показано стрелкой, заключенной в скобки. В других графиках рис. 1 запрещено изменение спиновой проекции, поскольку она, согласно правилам соответствия [3], сохраняет свое направление вдоль электронной линии.

Кроме взаимного перерассеяния электрона на дырке, определенное влияние на упругие столкновения $e^- - A^+$ может оказать учет поляризации оболочек A^+ , обусловленной межэлектронными взаимодействиями, выходящими за рамки ПСФО [3]. Если мишень обладает малой поляризуемостью, то корреляциями этой группы можно пренебречь. Однако в случае рассеяния на щелочных атомах, поляризуемость которых велика, такие корреляции необходимо учитывать.

В работе [3] показано, что существенную часть корреляций ПСФО, отвечающую последовательности графиков рис. 1, направленных «вперед во времени», в которых дырочные состояния одинаковы, а электронные отличаются только значениями энергии, можно включить в определение ХФ поля. Для этого вместо волновой функции налетающего электрона φ_k^{N+1} следует использовать функцию φ_k^N , ортогонализированную к одноэлектронным волновым функциям основного состояния атома [3]. В определении волновой функции можно учесть также вклад от суммирования по проекциям орбитального и спинового моментов дырки

$m_j l_j$ и частицы m_μ [3], которое выполняется построением волновой функции двухэлектронной системы в представлении $LSM_L M_S$ [5]. При этом волновую функцию φ_k^{N+1} следует заменить на $\varphi_{(j)k}^{N(LS)}$, а для учета оставшейся части корреляций в упругом рассеянии неполяризованных электронов на неполяризованных атомах из последовательности просуммированных по m_μ и m_j, μ графиков рис. 1 устранить уже учтенные ранее. К ним относятся, например, кроме \mathcal{J} и \mathcal{Z} , все диаграммы рис. 1, в которых одночастичные состояния удовлетворяют следующим условиям: $(n_1 l_1) = (n_3 l_3) = (n_5 l_5) = \dots$, $l_2 = l_4 = l_6 = \dots$ (остальные квантовые числа могут отличаться). Оставшаяся последовательность графиков сводится к следующему интегральному уравнению [3]:

$$\langle v_1 v_4 | \Gamma(\omega) | v_2 v_3 \rangle = \langle v_1 v_4 | u | v_2 v_3 \rangle - \left(\sum_{\substack{v_5 \leq F \\ v_6 > F}} - \sum_{\substack{v_5 > F \\ v_6 \leq F}} \right) \frac{\langle v_1 v_4 | u | v_2 v_5 \rangle \langle v_5 v_4 | \Gamma(\omega) | v_6 v_3 \rangle}{\omega - E_{v_5} + E_{v_6} + i\delta(1 - 2n_{v_5})}, \quad (1)$$

где $\langle v_1 v_3 | u | v_2 v_4 \rangle$ — разность «обменного» (рис. 1, \mathcal{B}) и «прямого» (рис. 1, \mathcal{A}) кулоновских матричных элементов; ω — произвольный энергетический параметр; условие $v_5 \leq F$ означает суммирование по занятым состояниям, $v_5 > F$ — по свободным, в том числе интегрирование по непрерывному спектру; n_{v_5} — так называемая ступенька Ферми [3]. Член с $\delta \rightarrow +0$ в знаменателе указывает правило обхода полюса при интегрировании.

Решениями уравнения (1) являются матричные элементы взаимодействия $\Gamma(\omega)$ в канале частица—дырка. Если в качестве волновой функции частицы k , находящейся в поле дырки j , выбрана функция $\varphi_{(j)k}^{N(LS)}$, то величина $\langle v_1 v_4 | \Gamma(\omega) | v_2 v_3 \rangle$ также зависит от полного орбитального момента L и спина S . После интегрирования по угловым переменным получаем

$$\langle n_1 l_1, n_4 l_4 | \Gamma^{LS}(\omega) | n_2 l_2, n_3 l_3 \rangle = \langle n_1 l_1, n_4 l_4 | u^{LS} | n_2 l_2, n_3 l_3 \rangle - \left(\sum_{\substack{n_5 \leq F \\ n_6 > F}} - \sum_{\substack{n_5 > F \\ n_6 \leq F}} \right) \times \\ \times \frac{\langle n_1 l_1, n_6 l_6 | u^{LS} | n_2 l_2, n_5 l_5 \rangle \langle n_5 l_5, n_4 l_4 | \Gamma^{LS}(\omega) | n_6 l_6, n_3 l_3 \rangle}{(2L+1)[\omega - E_{n_5} + E_{n_6} + i\delta(1 - 2n_{n_5})]}. \quad (2)$$

Здесь

$$\langle n_1 l_1, n_4 l_4 | u^{LS} | n_2 l_2, n_3 l_3 \rangle = \delta_{S0} \langle n_1 l_1, n_4 l_4 | V_L^{LS} | n_2 l_2, n_3 l_3 \rangle - \\ - \frac{1}{2}(2L+1) \sum_{l'_v} (-1)^{l'_v + L} \begin{Bmatrix} l_1 & l_2 & L \\ l_4 & l'_v & l_3 \end{Bmatrix} \langle n_1 l_1, n_4 l_4 | V_{l'_v} | n_3 l_3, n_2 l_2 \rangle, \quad (3)$$

$$\langle n_1 l_1, n_4 l_4 | V_{l'_v}^{LS} | n_2 l_2, n_3 l_3 \rangle =$$

$$= 2 \sqrt{(2l_1+1)(2l_2+1)(2l_3+1)(2l_4+1)} \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & L \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_4 & l_3 & L \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \left(\int_0^\infty dr_2 \int_0^{r_2} dr_1 P_{n_1 l_1}^{(LS)}(r_1) \times \right. \\ \times P_{n_2 l_2}^{(LS)}(r_1) \frac{r_1^{l'_v}}{r_2^{l'_v+1}} P_{n_4 l_4}^{(LS)}(r_2) P_{n_3 l_3}^{(LS)}(r_2) + \int_0^\infty dr_2 \int_{r_2}^\infty dr_1 P_{n_1 l_1}^{(LS)}(r_1) P_{n_2 l_2}^{(LS)}(r_1) \times \\ \left. \times \frac{r_2^{l'_v}}{r_1^{l'_v+1}} P_{n_4 l_4}^{(LS)}(r_2) P_{n_3 l_3}^{(LS)}(r_2) \right), \quad (4)$$

$P_{n_i l_i}^{(LS)}$ являются радиальными частями волновых функций $\varphi_{(j)k}^{N(LS)}$.

Разность матричных элементов, обозначенная $\langle n_1 l_1, n_4 l_4 | u^{LS} | n_2 l_2, n_3 l_3 \rangle$, соответствует сумме графиков \mathcal{A} и \mathcal{B} рис. 1, причем «обменная диаграмма» \mathcal{I} , \mathcal{B} дает вклад лишь в синглетный канал ($S=0$).

Волновые функции $P_{n_i l_i}^{(LS)}(r)$ рассчитываются по программам, описанным в [6]. Их асимптотику задает сумма фаз рассеяния в кулоновском и короткодей-

ствующем ХФ потенциалах, которая учитывается нами в нулевом приближении. Сдвиг фазы, вызванный эффективным взаимодействием $\Gamma(\omega)$ частицы и дырки в определенном состоянии, определяется [4] по формуле

$$\exp[i\Delta\delta_{ij}^{LS}(k, n_j)] \sin \Delta\delta_{ij}^{LS}(k, n_j) = - \frac{\pi}{(2L+1)} \langle n_j l_j, \epsilon l \| \Gamma^{LS}(E) \| \epsilon l, n_j l_j \rangle, \quad (5)$$

где ϵ — энергия налетающего электрона; $E = \omega = \epsilon - E_j$, E_j — энергия дырки в j -м состоянии; E — энергия, которую необходимо сообщить нейтральному атому, чтобы удалить электрон из j -го состояния и перевести его в сплошной спектр с энергией ϵ .

При энергиях E , расположенных ниже первого дискретного возбуждения мишени, из условия унитарности для Γ -матрицы [7] следует вещественность фазового сдвига $\Delta\delta_{ij}^{LS}(k, n_j)$, а значит, и полной фазы упругого рассеяния $\delta_{ij}^{LS}(k, n_j)$, поскольку кулоновская и ХФ фазы вещественны. Если же энергия E становится равной или большей, чем энергия возбуждения первого дискретного уровня, то фаза упругого рассеяния становится комплексной. Причем при значении энергии $E = E_v - E_{v_c}$ (рис. 1), где E_{v_c} принадлежит дискретному спектру, возникает ситуация, которая соответствует автоионизационному резонансу [3]. Однако в данной работе дифференциальное сечение усреднено в окрестности резонанса.

2. Упругое рассеяние электронов на однократных положительных ионах Ar^+

На основе вычисленных фаз по формулам, приведенным в [4], рассчитаны угловые распределения электронов, рассеянных на ионе Ar^+ , и сечение упругого рассеяния назад $e^- - \text{Ar}^+$ в области энергий 0.04—2.3 Ry. При этом оказались достаточным учесть следующие 5 парциальных волн в синглетном и триплетном каналах: $l=0, L=1$; $l=1, L=0$; $l=1, L=2$; $l=2, L=1$; $l=2, L=3$. Расчет показал, что вклад парциальных волн с большим l в угловые распределения пренебрежимо мал. Согласно оценкам, изменением квантового числа l в данном процессе можно пренебречь [4]. Расчеты были проведены в приближениях ХФ-I и ХФ-II, а также в ПСФО. Поскольку в приближении ХФ-II уже учтена часть многочастичных поправок к приближению ХФ-I, описанная в предыдущей части работы, то по разнице в результатах двух ХФ расчетов можно оценить о роли этих поправок.

Угловые распределения, рассчитанные в ХФ-I, ХФ-II, а также в кулоновском приближении, приведены на рис. 2, а, а в ПСФО — на рис. 2, б. Очень большим является отличие резерфордского сечения от обоих хартри-фоковских. Для ряда ионов в s -состояниях аналогичный результат получен в [1]. Влияние короткодействующего потенциала становится существенным при углах рассеяния $\theta \geq 90^\circ$ во всем энергетическом диапазоне. Причем с ростом энергии налетающего электрона роль ХФ взаимодействия становится значительной также и при меньших углах. Как видно из рис. 2, а, при энергии налетающего электрона $\epsilon = 2\text{Ry}$ вклад от этого взаимодействия заметен уже при углах $\theta \sim 30^\circ$. Значительным также является отличие между кривыми 2 и 3, построенными по результатам обоих ХФ расчетов. Следовательно, большой вклад вносится теми корреляциями, которые учтены в одночастичном приближении ХФ-II, но не включены в ХФ-I. Из сказанного следует, что они должны быть наиболее значительны при больших углах, что наглядно показано на рис. 2, в, где приводится сечение упругого рассеяния назад $e^- - \text{Ar}^+$. Здесь же приведены результаты расчета в ПСФО. Угловые распределения электронов в ПСФО в сравнении с результатами в приближении ХФ-II приведены на рис. 2, б.

Расчет в ПСФО показал, что поправка за счет оставшихся неучтенными в $\delta_{ij}^{LS}(k, n_j)$ корреляций существенна только в дипольных переходах ($L=1$). Мы рассмотрели также монопольные и квадрупольные возбуждения двух внеш-

них оболочек атома Ag. Основной вклад в поправку к фазе вносят корреляции внутри перехода $3p \rightarrow \epsilon d(^1P)$. Вклад перехода $3p \rightarrow \epsilon s(^1P)$ оказался малым.

Сравнивая кривые в приближениях ХФ и ПСФО на рис. 2, *a—в*, можно сделать вывод о том, что корреляции, учитываемые переопределением ХФ поля, более значительны, чем те, которые нельзя включить в самосогласованное поле. Последние также становятся важными, начиная с энергий $\sim 0.5\text{ Ry}$ и при углах,

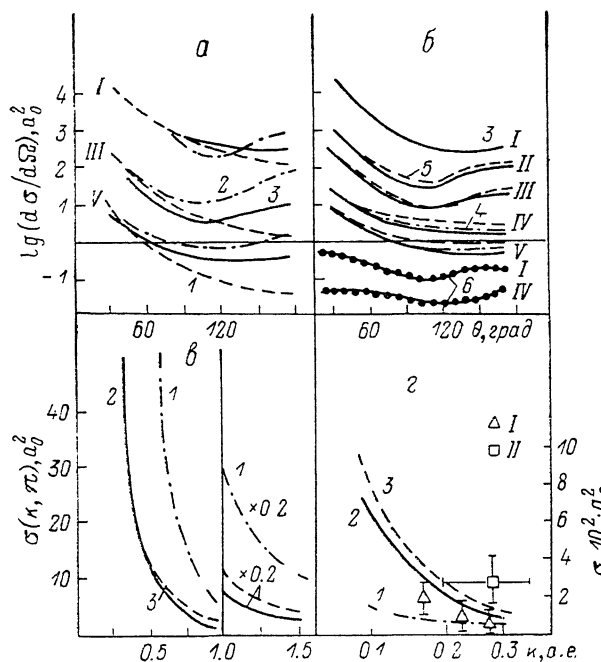


Рис. 2.

a, б — дифференциальные сечения $e^- \text{—} \text{Ag}^+$ -рассеяния (I — $\epsilon = 0.04$, II — 0.17, III — 0.37, IV — 1.00, V — 2.00 Ry; упругое рассеяние: 1 — приближение Резерфорда, 2 — приближение ХФ-I, 3 — приближение ХФ-II, 4 — ПСФО с учетом корреляций в рамках одного перехода, 5 — ПСФО с учетом межоболочечных корреляций; квазиупругое рассеяние: 6 — ПСФО с учетом межоболочечных корреляций); *в* — сечение упругого $e^- \text{—} \text{Ag}^+$ -рассеяния назад (1 — приближение ХФ-I, 2 — приближение ХФ-II, 3 — ПСФО с учетом межоболочечных корреляций); *г* — полное сечение квазиупругого $e^- \text{—} \text{K}$ -рассеяния (1 — УПСФО, 2 — учет поляризации атома K, 3 — приближение сильной связи [8]). I, II — эксперимент из [10], [11] соответственно.

больших 60° . Особенно велики они при углах $\sim 180^\circ$, что следует из рис. 2, *в*. На рис. 2, *a, б* можно также обнаружить, что наибольшее значение многочастичные поправки ПСФО принимают при энергиях 1—2 Ry. В этом энергетическом диапазоне заметными оказались одновременно как корреляции внутри перехода $3p \rightarrow \epsilon p(^1P)$, так и межоболочечные корреляции, учитывающие взаимное влияние двух возбуждений $3p \rightarrow \epsilon d(^1P)$ и $3s \rightarrow \epsilon p(^1P)$. При энергиях 0.04—0.5 Ry многочастичные поправки в ПСФО главным образом определяются межэлектронными корреляциями в рамках одной оболочки. Если разница между обсуждаемыми кривыми в этой области ничтожна мала, то нами приводится одна кривая.

3. Квазиупругое рассеяние электронов на ионах Ag^+

Чтобы описать переворот спина в квазиупругом рассеянии, следует учесть то, что каждый акт частично-дырочного взаимодействия в этом случае описывается единственным «обменным» слагаемым кулоновской матрицы. Поэтому из всей совокупности диаграмм рис. 1 для описания квазиупругого рассеяния необходимо выделить определенную подпоследовательность, приведенную на рис. 3. Слева на этом рисунке обозначена искомая сумма ряда. Для ее вычис-

ления функции μ (6), к которому можно свести последовательность диаграмм рис. 3,

$$\langle \nu_1 \nu_4 | M(\omega) | \nu_2 \nu_3 \rangle = \langle \nu_1 \nu_4 | V | \nu_2 \nu_3 \rangle - \left(\sum_{\substack{\nu_4 \leq F \\ \nu_3 > F}} - \sum_{\substack{\nu_3 > F \\ \nu_4 \leq F}} \right) \frac{\langle \nu_1 \nu_6 | V | \nu_2 \nu_5 \rangle \langle \nu_5 \nu_4 | M(\omega) | \nu_6 \nu_3 \rangle}{\omega - E_{\nu_5} + E_{\nu_6} + i\delta(1 - 2n_{\nu_5})}, \quad (6)$$

где $\langle \nu_1 \nu_4 | V | \nu_2 \nu_3 \rangle$ — «обменная» кулоновская матрица.

Выполнив в (6) интегрирование по угловым переменным, можно получить уравнение, аналогичное (2), где, однако, вместо «полной» стоит «обменная» приведенная кулоновская матрица. Для нее оказывается справедливым выражение, подобное (4), но без множителя 2, который возникал ранее в результате суммирования по проекциям спина. В качестве одночастичных в равенстве (6) удобно выбрать функции $\varphi_{(j)k}^{N(L)}$, при вычислении которых не выполняется суммирование ХФ потенциала по проекциям спина. В этом случае волновая функция будет зависеть от проекций спинов частицы μ и дырки μ_j . Если $\mu = \mu_j$,

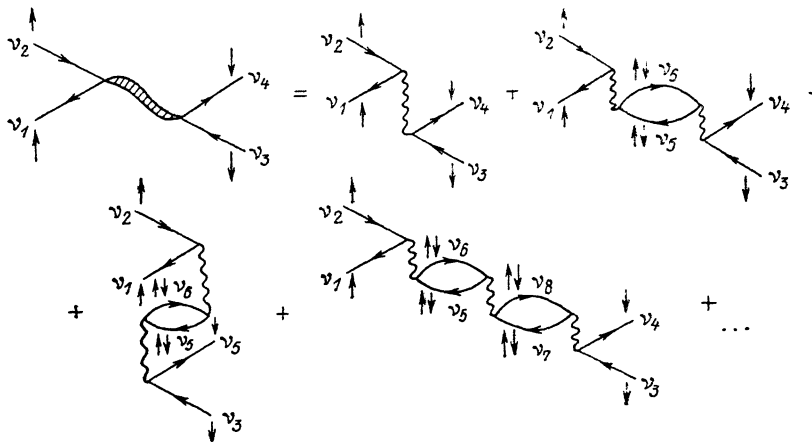


Рис. 3. Квазиупругое рассеяние в ПСФО.

то в нулевом приближении окажутся учтенными те же диаграммы, что и в случае $S=0$, но только с одинаковыми спиновыми проекциями частиц и соответственно дырок в начальном и конечном состояниях. Следовательно, диаграммы, направленные «вперед во времени», и диагональные по квантовым числам $n_j l_j$ дырки и l частицы (но с разными спиновыми проекциями) необходимо учитывать в амплитуде квазиупругого рассеяния. Искомые фазовые сдвиги определялись по формуле (5) с заменой в ней $\Gamma(\omega)$ на $M(\omega)$.

Нами вычислены фазы 5 парциальных волн $3p \rightarrow \epsilon s (^1P)$, $3p \rightarrow \epsilon p (^1S)$, $3p \rightarrow \epsilon p (^1D)$, $3p \rightarrow \epsilon d (^1P)$, $3p \rightarrow \epsilon d (^1F)$. Наиболее существенным оказался вклад от межэлектронных корреляций в рамках дипольного перехода $3p \rightarrow \epsilon d (^1P)$. Велико влияние на него перехода $3s \rightarrow \epsilon p (^1P)$. Роль поправок в других переходах мала. Рассчитанные дифференциальные сечения приведены на рис. 2, б. Из него следует, что корреляции наиболее заметны при малых импульсах налетающего электрона. Наибольшим является вклад в рассеяние области малых углов ($0-30^\circ$), где велико влияние кулоновского взаимодействия на амплитуду квазиупругого процесса, а также больших ($150-180^\circ$) углов, где заметно возрастает роль межэлектронных корреляций. В отличие от упругого $e^- - \text{Ar}^+$ -рассеяния дифференциальное сечение квазиупругого процесса является конечным при $\theta=0$, поскольку в амплитуде отсутствует кулоновское слагаемое.

В отличие от ионов Ag^+ атомы K обладают большой поляризуемостью. Поэтому могут оказаться существенными поправки к фазам, обусловленные как рассеянием электрона, так и рассеянием дырки на поляризационном потенциале $\Sigma(\omega)$ атома-остатка. Этот процесс описывается диаграммами на рис. 4 [3], где заштрихованный блок $\Sigma(\omega)$ включает все возможные реальные и виртуальные возбуждения атома, вызванные распространением электрона или вакансии. Отметим, что эти процессы не учитываются в рамках ПСФО. Диаграммы б, г, ж рис. 4 приводят к смещению положения вакансии во внешней оболочке K^- . Влияние их на амплитуду рассеяния частицы значительно меньше, чем влияние поляризации атомных оболочек (рис. 4, а, в, д). Поэтому диаграммами типа б, г, ж мы пренебрегаем.

Таким образом, для описания квазиупругого рассеяния электронов на атомах K , кроме диаграмм рис. 3, необходимо учесть также такие, которые во всех

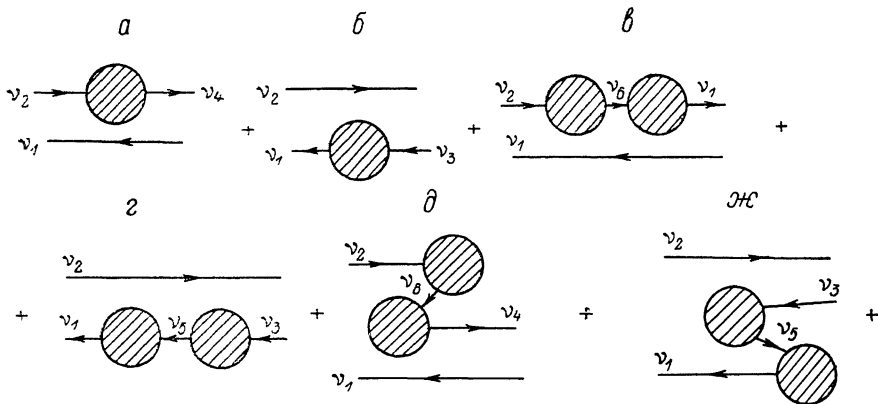


Рис. 4. Рассеяние электрона и дырки на поляризационном потенциале мишени A^+ .

электронных линиях содержат поляризационный потенциал $\Sigma(\omega)$, причем в любом порядке теории возмущений. Для решения этой задачи нами используется упрощенное приближение случайных фаз с обменом (УПСФО) [6], в котором матрица эффективного взаимодействия $M(\omega)$, определенная на рис. 3, учитывается лишь в низшем порядке метода возмущений по кулоновскому взаимодействию частицы и мишени (первая диаграмма последовательности рис. 3). Отметим, что УПСФО содержит учитываемую выбором одночастичных функций бесконечную последовательность графиков ПСФО, направленных «вперед во времени» и диагональных по дырочному состоянию. УПСФО было использовано в [6, 7] для определения поляризационного потенциала $\Sigma(\omega)$ взаимодействия электрона и атома с замкнутыми оболочками. В [8] также описан способ вычисления суммы ряда метода возмущений $\bar{\Sigma}(\omega)$ по потенциалу $\Sigma(\omega)$.

Учитывая влияние эффективного поля $\bar{\Sigma}(\omega)$ на начальное и конечное электронные состояния для амплитуды квазиупругого рассеяния, из [5] можно получить

$$\exp[i\delta_l(k, n_j)] \sin \delta_l(k, n_j) = \frac{1}{2l+1} \langle n_j l_j, \epsilon l \| V_l \| \epsilon l, n_j l_j \rangle + \langle n_j l_j, \epsilon l \| V_l^\pi(\epsilon) \| \epsilon l, n_j l_j \rangle, \quad (7)$$

где

$$\langle n_j l_j, \epsilon l \| V_l^\pi(\epsilon) \| n_j l_j, \epsilon l \rangle = 2 \sum_{L_a} \frac{1}{2L_a + 1} \int \frac{d\epsilon'}{\epsilon - \epsilon' + i\delta} \times \langle n_j l_j, \epsilon' l \| V_l \| \epsilon l, n_j l_j \rangle \langle \epsilon l | \bar{\Sigma}_{L_a}(\epsilon) | \epsilon' l \rangle. \quad (8)$$

Здесь L_a — полный орбитальный момент частично-дырочной пары, порожденной при возбуждении атома-остатка уходящим электроном. Матричные эле-

менты $\langle \epsilon l | \sum L_{\mu}(\omega) | \epsilon' l \rangle$ вычислялись нами по программе, описанной в [6]. Интеграл по ϵ' включает суммирование по дискретному спектру. Однако нами были учтены только значения энергии ϵ' , принадлежащие непрерывному спектру. Погрешность, допущенная при этом, незначительна, поскольку малы матричные элементы поляризационного потенциала между связанными и свободными электронными состояниями.

При записи формул (7) и (8) учтено, что полный орбитальный момент системы $e^{-} + K$ совпадает с орбитальным моментом налетающего электрона.

Вычислив s -, p -, d -фазы, мы рассчитали сечение квазиупругого $e^{-} - K$ -рассеяния при энергиях $\epsilon \approx 0.1 - 1.5$ эВ (рис. 2, з). Наиболее существенным в этой энергетической области оказался вклад p -волны, т. е. дипольного возбуждения наружной оболочки системы $e^{-} + K$. В каждой из парциальных волн нами учитывались монополярные, дипольные и квадрупольные возбуждения атома K свободным электроном. Подавляющим оказался вклад в поляризационный потенциал от дипольного перехода валентного электрона. Как видно из рис. 2, з, влияние поляризации атома K на процесс квазиупругого рассеяния электрона на дырке в УПСФО весьма велико. Особенно существенным оно оказалось в околопороговой области энергий. Здесь сечение упругого рассеяния неполяризованных электронов на неполяризованных атомах K также резко возрастает при учете поляризационного взаимодействия [8]. Такое поведение сечения обусловлено наличием p -волнового резонанса формы при энергии $\epsilon \approx 0.019$ эВ [9]. В [8] в рамках метода сильной связи каналов было рассчитано также сечение квазиупругого (с переворотом спина) рассеяния электронов на атомах K , представленное на рис. 2, з кривой 3. На рис. 2 приведены также экспериментальные данные [10, 11]. Наблюдается удовлетворительное согласие с ними как наших, так и выполненных в [8] расчетов.

Заключение

В настоящей работе описан удобный метод для расчета сечений упругого и квазиупругого рассеяний электронов малых и средних энергий на многоэлектронных атомах и ионах при наличии вакансий в одной из замкнутых оболочек. Метод учитывает наличие у мишени произвольного орбитального момента. Он позволяет рассчитывать также неупругое рассеяние и учитывать автоионизационные резонансы.

Предлагается относительно простой способ учета большой поляризуемости мишени. Согласно эксперимента с расчетом сечения рассеяния электронов на атомах калия указывает на удовлетворительную точность используемой модели.

Список литературы

- [1] Друкaрев Г. Ф., Березина Н. Б. // ЖЭТФ. 1975. Т. 69. Вып. 3 (9). С. 829—832.
- [2] Лендьел В. И., Навроцкий В. Т., Сабад Е. П. // УФН. 1987. Т. 15. № 3. С. 425—468.
- [3] Амуся М. Я. Атомный фотоэффект. М.: Наука, 1987. 272 с.
- [4] Амуся М. Я., Сосникер В. А., Черепков Н. А. и др. Препринт ФТИ. № 981. Л., 1985. 32 с.
- [5] Собельман И. И. Введение в теорию атомных спектров. М.: Наука, 1977.
- [6] Амуся М. Я., Чернышева Л. В. Автоматизированная система исследований атомов. Л.: Наука, 1983. 180 с.
- [7] Иванов В. К. Канд. дис. Л., 1974. 158 с.
- [8] Karule E. M. // J. Phys. B. 1972. Vol. 5. N 11. P. 2051—2060.
- [9] Фабрикант И. И. // Опт. и спектр. 1982. Т. 53. Вып. 2. С. 223—227.
- [10] Collins R. E., Bederson E., Goldstein M. // Phys. Rev. A. 1971. Vol. 3. N 6. P. 1976—1987.
- [11] Campbell D. M., Brash H. M., Farago P. S. // Phys. Lett. A. 1971. Vol. 36. N 6. P. 449—450.

Физико-технический институт
им. А. Ф. Иоффе АН СССР
Ленинград

Поступило в Редакцию
7 июля 1988 г.
В окончательной редакции
25 декабря 1989 г.