

ФОТОПОГЛОЩЕНИЕ В СТАТИСТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ АТОМА. МОДЕЛЬ НЕЗАВИСИМЫХ ЭЛЕКТРОНОВ И ВЛИЯНИЕ ПОЛЯРИЗАЦИИ

С. Ф. Гаранин, Е. М. Палагина*

*Российский федеральный ядерный центр,
Всероссийский научно-исследовательский институт экспериментальной физики
607190, Саров, Нижегородская обл., Россия*

Поступила в редакцию 14 августа 2006 г.

Рассмотрены два подхода к описанию фотопоглощения многоэлектронного атома: квазиклассический метод решения кинетического уравнения с помощью нахождения компонент Фурье дипольного момента электронов без учета поляризации атома (модель независимых электронов, МНЭ) и метод расчета сечения фотопоглощения на сложных атомах, основанный на решении кинетического уравнения методом частиц с учетом поляризации (прямой метод частиц, ПМЧ). В ходе разработки метода МНЭ была одновременно решена задача о классическом излучении заряженной частицы при движении в произвольном центрально-симметричном потенциале. С использованием методов МНЭ и ПМЧ было вычислено распределение сил осцилляторов $df/d\omega$ нейтрального атома Томаса–Ферми для всего томас-фермиевского диапазона частот $27 \text{ эВ} \ll \hbar\omega \ll 27Z^2 \text{ эВ}$. Сравнение результатов, полученных этими методами, позволило оценить величину эффектов поляризации. Влияние поляризации заметно сказывается только на низких частотах, а на средние характеристики, в том числе на логарифмическую среднюю энергию возбуждения, поляризация влияет не сильно. При учете поляризации эта величина получается равной $I = 7.95Z \text{ эВ}$ и находится вблизи экспериментально найденного диапазона. Проведено сравнение результатов расчетов $df/d\omega$ с экспериментальными данными.

PACS: 31.15.Bs, 32.70.Cs, 32.80.Fb

1. ВВЕДЕНИЕ

Попытки решения задачи об использовании модели Томаса–Ферми для описания оптических характеристик многоэлектронного атома начались с работы Блоха [1], предложившего гидродинамический подход к описанию вырожденного электронного газа атома. Однако для применимости гидродинамического подхода требовалось бы, чтобы расстояния, которые проходят электроны во время колебаний пространственного заряда (эффективный пробег), были малы по сравнению с характерными расстояниями (расстояние от ядра). Но область частот, в которую дают вклад электроны, находящиеся на некотором расстоянии r от ядра, как раз определяется соотношением $\omega \sim v/r$ (v — скорость электронов), и, таким образом, их путь порядка характерного расстояния.

Тем не менее, основываясь на этом подходе, в работе [2], использующей дополнительные модельные представления о локальном отклике электронной плотности на действующее поле, и работе [3], последовательно для всего атома проводящей подход Блоха, проводились расчеты динамических свойств атома, которые в случае атома Томаса–Ферми представляются в универсальной форме, пригодной для любых тяжелых атомов.

Одновременно развивался подход, не учитывающий автомодельность характеристик тяжелых атомов и использующий статическое приближение, т. е. предполагающий, что потенциал, в котором движутся электроны, является постоянным, и пренебрегающий динамической поляризацией атома. Каждый из электронов описывался при этом своей волновой функцией, которая определялась с помощью численного решения уравнения Шредингера в потенциале Томаса–Ферми или Хартри–Фока–Слэтера (см.,

*E-mail: sfgar@vniief.ru

например, [4] и ссылки там). При этом для частот ω , меньших или порядка характерной частоты обращения электронов в тяжелых атомах Zme^4/\hbar^3 [5] (Z — атомный номер), ошибка составляет величину порядка единицы, хотя в задаче имеется малый параметр Z^{-1} , используемый для приближения Томаса–Ферми или Хартри–Фока.

В работе [6] был предложен метод расчета сечения фотопоглощения на сложных атомах, основанный на решении кинетического уравнения методом частиц (прямой метод частиц, ПМЧ) с учетом поляризации. Используя последовательный, основанный на параметре малости Z^{-1} квазиклассический подход, мы нашли низкочастотную и высокочастотную асимптотики сечения фотопоглощения на атоме Томаса–Ферми. В настоящей работе мы разовьем подход, представленный в работе [6], что позволит рассчитывать сечение фотопоглощения не только в низкочастотном пределе, но и во всем томас-фермиевском диапазоне частот.

В разд. 2 предложен квазиклассический метод описания динамического отклика многоэлектронного атома (или любой многоэлектронной системы: иона, сжатого атома и т. д.) на действие электромагнитной волны без учета поляризации атома (модель независимых электронов, МНЭ). В ходе разработки этого метода, основанного на рассмотрении движения электронов по поверхности Ферми в заданном потенциале, была одновременно решена задача о классическом излучении заряженной частицы при движении в произвольном центрально-симметричном потенциале. Сравнение результатов, найденных этим методом, с результатами, полученными с учетом поляризации, позволяет оценить величину эффектов поляризации.

В разд. 3 мы учли поляризацию атома и вычислили сечение фотопоглощения на атоме Томаса–Ферми, решая кинетическое уравнение методом частиц (ПМЧ), для произвольной частоты излучения.

Проведенный нами анализ позволяет универсальным образом описывать сечения для любых тяжелых элементов, хотя в конкретных случаях точность описания сечений может оказаться не очень высокой. Оценки точности нашего подхода для томас-фермиевского интервала частот приведены в работе [6] и не превышают величину порядка $Z^{-5/9}$, а фактически для некоторых диапазонов частот расчетные значения сечений могут значительно отличаться от экспериментальных. Тем не менее для понимания общих зависимостей и примерных величин сечений необходимо иметь общую основу описа-

ния сечений, опираясь на которую можно было бы изучать конкретные детали. Полученные результаты могут помочь в оценках эффектов поляризации, поскольку их учет в прямых квантовомеханических расчетах довольно затруднителен и, насколько нам известно, в настоящее время нет работ, где бы он проводился. Кроме того, для интегральных по спектру величин, таких как логарифмическая средняя энергия возбуждения (см. п. 3.3) или интенсивность излучения плотного вещества [6], конкретные детали электронной структуры элементов будут усредняться, и можно ожидать обычной квазиклассической точности описания порядка $Z^{-2/3}$.

На протяжении всей работы, кроме некоторых окончательных формул, мы будем использовать атомные единицы $e = \hbar = m = 1$. Для характеристики динамических свойств атомов будем рассматривать сечение фотопоглощения $\sigma(\omega)$ или распределение сил осцилляторов $df/d\omega$. Эти величины связаны соотношением (в обычных единицах)

$$\sigma = \frac{2\pi^2 e^2}{mc} \frac{df}{d\omega}. \quad (1)$$

2. СЕЧЕНИЕ ФОТОПОГЛОЩЕНИЯ НА АТОМЕ ТОМАСА–ФЕРМИ БЕЗ УЧЕТА ПОЛЯРИЗАЦИИ

2.1. Общие формулы

Задачу расчета сечения фотопоглощения на тяжелых атомах можно значительно упростить, если не учитывать поляризацию атома под воздействием падающей электромагнитной волны. В данном разделе мы разработаем метод решения этой задачи, последовательно используя квазиклассическое приближение, основанное на больших квантовых числах многоэлектронной системы и, соответственно, на использовании параметра малости $N^{-1/3}$, где N — количество электронов в атоме или ионе (в случае нейтрального атома $N = Z$).

Пусть на атом падает электромагнитная волна с частотой ω . Кванты с энергией ω могут вырывать атомные электроны, находящиеся на уровнях энергии ε , не более глубоких, чем ω (предполагаем, что энергия Ферми $\varepsilon_F = 0$). Поскольку для больших квантовых чисел n можно считать $\omega \approx \varepsilon_{TF}/n \ll \varepsilon_{TF}$ (ε_{TF} — характерная энергия электрона в томас-фермиевском атоме), число вырываемых электронов в единичном объеме фазового пространства будет определяться разностью функций

распределения электронов после и до поглощения квантов

$$f_0(\varepsilon - \omega) - f_0(\varepsilon) \approx -\omega \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}, \quad (2)$$

где f_0 — равновесная функция распределения электронов в атоме. Величина f_0 для распределения Ферми равна [5]

$$f_0 = \frac{\eta(-\varepsilon)}{4\pi^3} \quad (3)$$

($\eta(-\varepsilon)$ — функция Хевисайда) с учетом того, что в ячейке фазового пространства может находиться по два электрона, а

$$\varepsilon = \frac{p^2}{2} + U(r)$$

— полная энергия электрона с импульсом p и потенциальной энергией $U(r)$. Таким образом, согласно формуле (2) в соответствии с результатами работы [6] в фотопоглощении будут принимать участие электроны, лежащие на ферми-поверхности.

После интегрирования по импульсам получим число электронов в единице объема:

$$-\omega \int \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} d\mathbf{p} = \frac{\omega p_F}{\pi^2},$$

где p_F — граничный импульс распределения Ферми.

В каждой точке пространства электроны равномерно распределены по направлениям скорости, поэтому легко получить их функцию распределения по моментам:

$$\frac{M}{\sqrt{M_m^2(r) - M^2}} \frac{dM}{M_m},$$

где

$$M_m(r) = r\sqrt{-2U(r)}$$

— максимальный момент, который может иметь электрон с нулевой энергией, находящийся на радиусе r . Таким образом, число вырываемых электронов в объеме dV с моментом M равно

$$\frac{\omega p_F}{\pi^2} \frac{M}{\sqrt{M_m^2(r) - M^2}} \frac{dM}{M_m} dV.$$

Сечение фотопоглощения на электроне, движущемся во внешнем поле, связано с интенсивностью его излучения формулой [7]

$$\sigma(\omega) = \frac{\pi^2 c^2}{\omega^3} I_\omega,$$

где I_ω — компонента Фурье интенсивности дипольного излучения электрона,

$$I_\omega = \frac{4\omega^4}{3c^3} |\mathbf{d}_\omega|^2,$$

\mathbf{d} — дипольный момент электрона.

Распределение сил осцилляторов, связанное с сечением фотопоглощения соотношением (1), определяется с помощью интегрирования вкладов от всех электронов:

$$\frac{df}{d\omega} = \frac{2\omega^2}{3\pi^2} \times \int d_\omega^2(M) p_F \frac{M}{\sqrt{M_m^2(r) - M^2}} \frac{dM}{M_m(r)} dV. \quad (4)$$

При расчете $df/d\omega$ следует учесть, что движение электронов с энергией $\varepsilon = \varepsilon_F$ в потенциале Томаса–Ферми финитно, хотя их траектории не являются замкнутыми линиями. Поэтому величина d_ω^2 в формуле (4) может быть представлена в виде

$$d_\omega^2 = \sum_{n=0}^{\infty} d_n^2 \delta(\omega - \omega_n), \quad (5)$$

где d_n^2 — квадрат компоненты Фурье дискретной гармоника с частотой ω_n , и формулу (4) можно переписать в виде

$$\frac{df}{d\omega} = \frac{2\omega^2}{3\pi^2} \int \sum_{n=0}^{\infty} d_n^2(M) \delta(\omega - \omega_n) p_F \times \frac{M}{\sqrt{M_m^2(r) - M^2}} \frac{dM}{M_m(r)} dV. \quad (6)$$

Таким образом, задача нахождения $df/d\omega$ сводится к определению компонент Фурье d_n классического излучения электронов, движущихся в потенциале Томаса–Ферми.

Можно показать, что при вычислении $df/d\omega$ по формуле (6) выполняется правило сумм:

$$\int_0^{\infty} \frac{df}{d\omega} d\omega = N.$$

2.2. Излучение электрона при движении в центральном поле

Рассмотрим общую задачу излучения классического электрона при финитном движении в произвольном центральном поле. Решение этой задачи для движения электронов в потенциале Томаса–Ферми позволит найти компоненты Фурье интенсивности излучения, необходимые для вычисления $df/d\omega$ с помощью формулы (6).

Введем в плоскости движения электрона декартову x, y и полярную r, ϕ системы координат. Запишем координату x электрона следующим образом:

$$x(t) = r(t) \cos \phi(t) = r(t) \cos (\bar{\phi}(t) + \tilde{\phi}(t)), \quad (7)$$

где $\bar{\phi}$ — средняя скорость изменения угла электрона, а функция

$$\tilde{\phi}(t) \equiv \phi(t) - \bar{\phi}t$$

является периодической функцией времени. Величина $\bar{\phi}$ равна

$$\bar{\phi} = \frac{\Delta\phi}{T},$$

где T — период функции $r(t)$,

$$T(M) = 2 \int_{r_{min}(M)}^{r_{max}(M)} \frac{dr}{v_r(M)} = 2 \int_{r_{min}(M)}^{r_{max}(M)} \frac{r dr}{\sqrt{M_m^2(r) - M^2}}, \quad (8)$$

$\Delta\phi$ — изменение угла за период T . Перепишем выражение (7) в виде фурье-разложения:

$$x(t) = \frac{1}{2} e^{i\bar{\phi}t} \sum_{n=-\infty}^{\infty} a_n e^{-i\omega_0 n t} + \frac{1}{2} e^{-i\bar{\phi}t} \sum_{n=-\infty}^{\infty} b_n e^{-i\omega_0 n t}. \quad (9)$$

В этом выражении частота $\omega_0 = 2\pi/T$, а коэффициенты a_n и b_n находятся по формулам

$$a_n = \frac{1}{T} \int_0^T r(t) e^{i\bar{\phi}t} e^{i\omega_0 n t} dt, \quad (10)$$

$$b_n = \frac{1}{T} \int_0^T r(t) e^{-i\bar{\phi}t} e^{i\omega_0 n t} dt.$$

Нетрудно показать, что коэффициенты a_n и b_n вещественны и связаны соотношением

$$a_{-n} = b_n. \quad (11)$$

Из формул (9), (10) следует, что в разложении в ряд координат и, следовательно, дипольного момента $\mathbf{d}(t)$ присутствуют частоты из двух наборов частот,

$$\omega_{n-} = \omega_0 n - \bar{\phi}, \quad \omega_{n+} = \omega_0 n + \bar{\phi},$$

с соответствующими для каждого набора частот коэффициентами разложения. Используя (9), (10), с учетом (11) находим величины d_n^2 и $|\omega_n|$ ($df/d\omega$ определяется для положительных частот ω , поэтому записываем модули частот ω_n), необходимые для вычислений по формуле (6):

$$d_{0\pm}^2 = \frac{1}{2} a_0^2 = \frac{1}{2} b_0^2, \quad |\omega_{0\pm}| = \bar{\phi},$$

$$d_{n-}^2 = \frac{1}{2} a_n^2, \quad |\omega_{n-}| = |\omega_0 n - \bar{\phi}|, \quad (12)$$

$$d_{n+}^2 = \frac{1}{2} b_n^2, \quad |\omega_{n+}| = \omega_{n+} = \omega_0 n + \bar{\phi}.$$

Таким образом, в случае движения в произвольном центральном поле частоты, присутствующие в разложении в ряд интенсивности излучения, являются целыми кратными основной частоты, сдвинутыми на некоторую величину. Сдвиг частот появляется из-за незамкнутости траектории. Используя формулу (12), можно найти интенсивность излучения электрона с частотой $\omega_{n\pm}$ [8]:

$$I_{n\pm} = \frac{4}{3c^3} \omega_{n\pm}^4 d_{n\pm}^2.$$

2.3. Распределение сил осцилляторов нейтрального атома Томаса – Ферми

Запишем формулу (4) в виде, универсальном для атомов с любым зарядом Z ядра. Для этого введем новые величины: частоту $\Omega = \omega/Z$, радиус $\tilde{r} = Z^{1/3}r$ и время $\tilde{t} = Zt$. Момент в этом случае станет равным $\tilde{M} = M/Z^{1/3}$, импульс $\tilde{p} = p/Z^{2/3}$, а квадрат компоненты Фурье дипольного момента $\tilde{d}_\Omega^2 = Z^{5/3}d_\omega^2$ (или $\tilde{d}_n^2 = Z^{2/3}d_n^2$ для дискретных гармоник). После подстановки новых переменных в формулу (4) получим:

$$\frac{df}{d\omega} = \frac{8\Omega^2}{3\pi} \int_0^{\tilde{M}_0} \tilde{M} \tilde{d}_\Omega^2(\tilde{M}) \times$$

$$\times \int_{\tilde{r}_{min}(\tilde{M})}^{\tilde{r}_{max}(\tilde{M})} \frac{\tilde{r} d\tilde{r}}{\sqrt{\tilde{M}_m^2(\tilde{r}) - \tilde{M}^2}} d\tilde{M}. \quad (13)$$

Из формулы (13) видно, что $df/d\omega$ для любых атомов зависит только от переменной $\Omega = \omega/Z$.

В последующих рассуждениях текущего раздела будем использовать новые величины \tilde{r} , \tilde{t} и т. д., но знак « \sim » над буквами будем опускать.

Используя выражение (8) для периода T и формулы (5) и (12) в выражении (13) и интегрируя затем его по моментам, найдем:

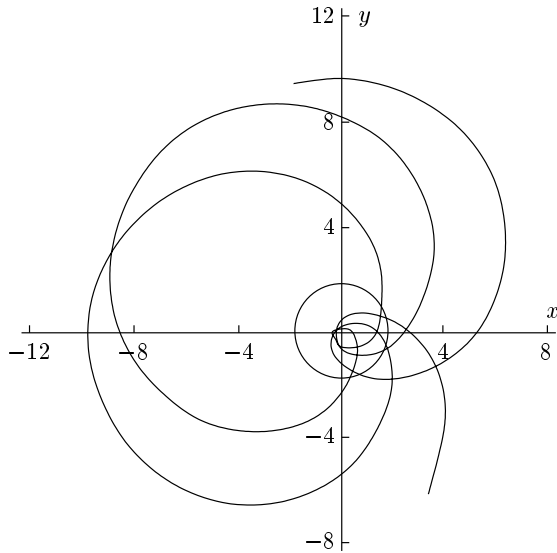


Рис. 1. Траектории электронов с нулевой энергией с моментами $M = 0.630$ и $M_0 = 0.928$ в потенциале Томаса – Ферми

$$\frac{df}{d\omega} = \frac{2}{3\pi} \Omega^2 \left[\left(\frac{MT(M)a_0^2(M)}{d\bar{\phi}/dM} \right) \Big|_{M(\bar{\phi}=\Omega)} + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\left(\frac{MT(M)a_n^2(M)}{d\Omega_{n-}/dM} \right) \Big|_{M(\Omega_{n-}=\Omega)} + \left(\frac{MT(M)b_n^2(M)}{d\Omega_{n+}/dM} \right) \Big|_{M(\Omega_{n+}=\Omega)} \right) \right]. \quad (14)$$

В данной работе мы вычисляли $df/d\omega$ нейтрального атома Томаса – Ферми, в котором $\varepsilon_F = 0$, поэтому мы рассматривали траектории электронов с энергией $\varepsilon = 0$, движущихся в потенциале Томаса – Ферми. При движении частицы в центральном поле зависимости радиуса r и полярного угла ϕ от времени определяются уравнениями [9]

$$\frac{dr}{dt} = \pm \sqrt{2(\varepsilon - U(r)) - \frac{M^2}{r^2}}, \quad (15)$$

$$\frac{d\phi}{dt} = \frac{M}{r^2}. \quad (16)$$

Совокупность уравнений (15), (16) определяет траекторию электрона. В потенциале Томаса – Ферми эти траектории для произвольного момента представляют собой незамкнутые розетки (рис. 1). В этом поле существует также траектория электронов с максимальным моментом $M_0 = 0.928$, для которой сила $-\partial U/\partial r$, действующая на электрон, равна центробежной, и поэтому электроны с этим момен-

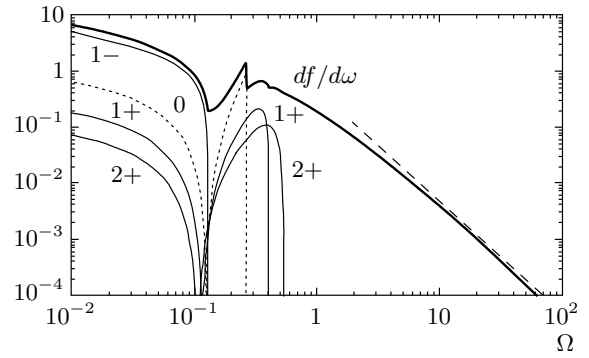


Рис. 2. Распределение сил осцилляторов $df/d\omega$ и величины $(df/d\omega)_0$, $(df/d\omega)_{1+}$, $(df/d\omega)_{1-}$, $(df/d\omega)_{2+}$. Штриховой линией показана асимптотика (17) при высоких частотах

том движутся по замкнутой круговой траектории с радиусом $r_0 = 1.863$.

2.4. Результаты численного расчета

Искомое распределение $df/d\omega$ находилось суммированием вкладов от каждой из гармоник $(df/d\omega)_{n\pm}$ по формулам, полученным из (14). Кроме того, для описания излучения высоких гармоник электронами с небольшими моментами мы использовали формулу для интенсивности высоких гармоник при движении в кулоновском поле по близкой к параболе орбите [8].

Результаты численного расчета представлены на рис. 2, который показывает, что в области $\Omega \approx 0.1-0.4$ величина $df/d\omega$ имеет несколько особенностей. Имеется скачок при частоте $\Omega = 0.267$, а также максимум при частоте $\Omega = 0.35$ и минимум при частоте $\Omega = 0.13$. Такое поведение функции $df/d\omega$ объясняется влиянием нескольких первых гармоник, которые дают основной вклад в $df/d\omega$ в указанной области частот. Это поведение значительно отличается от поведения монотонных плавных кривых $df/d\omega$, получаемых в различных модельных подходах: подходе [3], в котором электронный газ считается упругой поляризуемой средой, и плазменной модели [10], в которой атом описывается с помощью зависящей от радиуса диэлектрической проницаемости однородного электронного газа. Сложное поведение $df/d\omega$, полученное в нашем решении, указывает на то, что и при учете поляризации особенности $df/d\omega$ могут иметь место, хотя, как можно предположить, они могут быть несколько сглажены за счет поляризации.

На рис. 2 показана также высокочастотная асимптотика, к которой стремится функция $df/d\omega$ в области $\Omega \gg 1$ [6]:

$$\frac{df}{d\omega}(\Omega \rightarrow \infty) = \frac{8}{3\sqrt{3}\pi} \frac{1}{\Omega^2}, \quad (17)$$

найденная с учетом того, что при $\Omega \gg 1$ влияние поляризации несущественно.

3. СЕЧЕНИЕ ФОТОПОГЛОЩЕНИЯ НА АТОМЕ ТОМАСА – ФЕРМИ С УЧЕТОМ ПОЛЯРИЗАЦИИ

3.1. Основные уравнения

Для вычисления сечения фотопоглощения на сложных атомах в работе [6] был предложен кинетический квазиклассический подход. Поскольку движение электронов в тяжелом атоме квазиклассично, их можно описывать классической функцией распределения f и применять для их описания уравнения Власова.

Электрическое поле падающей электромагнитной волны считаем малым. Линеаризуем уравнения Власова относительно поля падающей волны $\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 g(t)$ (мы возвращаемся к обычным величинам r, p, t и т. д., которые использовались в разд. 2 до их переобозначения на автомодельные величины в п. 2.3). В результате получаем

$$\frac{\partial f_1}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial f_1}{\partial \mathbf{r}} + \nabla \varphi_0 \cdot \frac{\partial f_1}{\partial \mathbf{p}} = -\nabla \varphi_1 \cdot \frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{p}}, \quad (18)$$

$$\Delta \varphi_1 = -4\pi \rho_1, \quad (19)$$

$$\rho_1 = - \int f_1 d\mathbf{p}, \quad (20)$$

где φ — потенциал электрического поля, индекс «0» относится к равновесным величинам, «1» — к возмущенным. Поскольку длина волны падающего излучения велика по сравнению с размерами атома, на бесконечности считаем поле \mathbf{E} постоянным.

Для реализации численного расчета кинетического уравнения (18) методом частиц можно использовать следующую его интерпретацию: левая часть (18) описывает движение частиц в томас-фермиевском потенциале, а правая соответствует рождению частиц — электронов (если $f_1 > 0$) и дырок (если $f_1 < 0$). Подставляя в правую часть (18) f_0 из формулы (3), легко увидеть, что частицы рождаются с нулевой энергией, с ламбертовским распределением по углам вылета, дырки — вдоль поля, а электроны — против.

Поскольку потенциал φ_1 в нашей задаче может зависеть только от двух векторов, \mathbf{E} и \mathbf{r} , а вектор \mathbf{E} должен входить в выражение для φ_1 линейно, потенциал φ_1 должен иметь вид

$$\varphi_1 = -(\mathbf{E}_0 \cdot \mathbf{r})\psi(r).$$

При этом $\psi(r \rightarrow \infty) = g(t)$, поскольку электрическое поле на бесконечности равно $\mathbf{E}_0 g(t)$. Величина ψ' связана с суммарным дипольным моментом P частиц внутри некоторой области радиуса r соотношением [6]

$$P(r) = \frac{E_0}{3} r^4 \psi'(r). \quad (21)$$

Интересующее нас сечение фотопоглощения можно найти как отношение поглощенной в атоме энергии q [6],

$$q = \int E dP, \quad (22)$$

к потоку энергии, прошедшему через единицу площади:

$$\sigma = \frac{q}{\int \frac{cE^2}{4\pi} dt}. \quad (23)$$

Зависимость электрического поля от времени, $g(t)$, для заданной частоты имеет синусоидальный характер, а интеграл в знаменателе и числителе следует, вообще говоря, рассматривать за сколь угодно большой промежуток времени, включающий бесконечное число периодов колебаний. Зная зависимость дипольного момента атома от времени, можно с помощью формул (22), (23) вычислить сечение фотопоглощения.

3.2. Метод численного расчета

Кинетическое уравнение (18) интегрируется методом частиц. Из (18) находится связь между числом частиц, рождающихся в единицу времени, и функцией $\psi(r)$ [6].

Уравнения движения частиц с энергией $\varepsilon = 0$ в потенциале Томаса – Ферми обсуждались в разд. 2. При решении кинетического уравнения (18) по начальным координатам и углам вылета дырок и электронов относительно поля, полученным в результате розыгрыша вероятностей с помощью генератора случайных чисел, определялась плоскость движения частиц. Положения дырки и электрона в плоскости их движения в произвольный момент времени t находились интегрированием уравнений (15) и (16). Таким образом вычислялись координаты частиц в трехмерном пространстве, необходимые для нахождения дипольного момента $P(r)$.

Для численного расчета потенциала использовалась сетка по радиусу с шагом, величина которого выбиралась в зависимости от частоты внешнего поля ω . Суммарный дипольный момент $P(r)$ частиц внутри данного радиуса вычислялся так же, как было описано в работе [6]. Интегрируя уравнение (19) с граничным условием $\psi(r \rightarrow \infty) = g(t)$, находили зависимость $\psi(r)$ во всем пространстве.

Поскольку в численных расчетах решалась динамическая задача отклика атома на действие электрического поля падающей волны, для определения сечения фотопоглощения на частоте ω необходимо было задавать фиксированную гармонику и рассматривать ее действие в течение достаточно большого времени. В расчетах, однако, для наименьшего искажения спектра воздействующего поля по сравнению с монохроматическим синусоидальное поле включалось и выключалось постепенно, чтобы спектр воздействующего поля был сосредоточен вблизи несущей частоты и не имел далеких высокочастотных крыльев. При этом задаваемое в расчетах число периодов поля N_T давало для $df/d\omega$ погрешность процентного уровня.

3.3. Результаты численных расчетов

Для численных расчетов мы использовали переменные $\Omega = \omega/Z$, $\tilde{r} = Z^{1/3}$, $\tilde{t} = Zt$ и т. д., введенные в п. 2.3. В последующих рассуждениях будем использовать величины \tilde{r} , \tilde{t} и т. д., но, как и раньше, знак « \sim » над буквами будем опускать.

Расчеты показывают, что с уменьшением веса частиц и переходом к более тонкой сетке (при фиксированной частоте внешнего поля) происходит уменьшение флуктуаций и уточнение результатов. Результаты расчетов $df/d\omega$ для различных частот излучения представлены в таблице и на рис. 3. Указанные в таблице погрешности определялись с помощью сравнения результатов различных расчетов, они включают в себя как статистическую неопределенность, обусловленную методом Монте-Карло, так и систематическую погрешность из-за таких факторов, как конечное число периодов колебаний поля N_T , использованное в расчетах разрешение сетки и т. д.

Как и в случае отсутствия поляризации (рис. 2), $df/d\omega$ является немонотонной функцией частоты излучения. Сравнение рис. 2 и рис. 3 показывает, что поляризация сказывается только на низких частотах. Кроме того, особенности функции $df/d\omega$, которые видны на рис. 2, несколько размываются при учете поляризации. При высоких частотах, $\Omega \gg 1$, функция $df/d\omega$ стремится к асимптотике (17).

Ω	$df/d\omega$
0.001	10.0 ± 0.2
0.01	5.5 ± 0.1
0.03	3.50 ± 0.03
0.05	2.62 ± 0.08
0.07	2.06 ± 0.07
0.1	1.34 ± 0.04
0.12	0.63 ± 0.01
0.15	0.24 ± 0.02
0.2	0.57 ± 0.01
0.25	0.95 ± 0.02
0.28	0.732 ± 0.015
0.3	0.58 ± 0.02
0.34	0.630 ± 0.012
0.5	0.453 ± 0.010
1	0.200 ± 0.005
2	0.071 ± 0.004
5	0.0148 ± 0.0007
8	0.0062 ± 0.0003
10	0.0041 ± 0.0003
15	0.0018 ± 0.0003

Используя теоретические степенные зависимости $df/d\omega$ атома Томаса–Ферми при низких и высоких частотах, мы подобрали интерполяционную формулу, позволяющую вычислять $df/d\omega$ при любой частоте излучения. Численные коэффициенты, входящие в эту формулу, находились методом наименьших квадратов так, чтобы значения $df/d\omega$, вычисленные с помощью интерполяции, в пределах погрешностей согласовывались со значениями из таблицы. Результаты расчета $df/d\omega$ по этой формуле также представлены на рис. 3.

Интеграл, определяющий правило сумм, при подстановке в подынтегральное выражение интерполяционной формулы для $df/d\omega$ равен

$$\int_0^{\infty} \frac{df}{d\omega} d\Omega = 1.008.$$

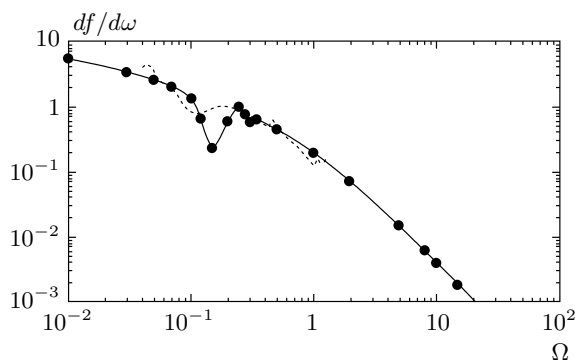


Рис. 3. Распределение сил осцилляторов $df/d\omega$, полученное в численных расчетах (точки) и по интерполяционной формуле (сплошная линия). Линия проведена через точки с учетом погрешностей численных расчетов. Пунктирная линия — распределение $df/d\omega$, полученное при усреднении экспериментальных данных [12]

Таким образом, правило сумм выполняется с точностью 0.8 %.

Логарифмическая средняя энергия возбуждения, фигурирующая в задачах об ионизационных потерях заряженных частиц [5],

$$\ln I = \ln Z + \int_0^{\infty} \frac{df}{d\omega} \ln \Omega d\Omega, \quad (24)$$

при подстановке в (24) интерполяционной формулы для $df/d\omega$ получается равной $I = 7.95Z$ эВ. Это значение в 1.2 раза больше величины $I = 6.62Z$ эВ, вычисленной в случае отсутствия поляризации. Таким образом, поляризация, оказывая заметное влияние на $df/d\omega$ при низких частотах, на логарифмическую среднюю энергию возбуждения влияет несильно. Сама же величина $I = 7.95Z$ эВ находится довольно близко к экспериментально найденному диапазону $I/Z = 9.5\text{--}16$ эВ [11]. Здесь надо иметь в виду, что величина I/Z уменьшается с ростом Z . Поэтому нижняя граница экспериментально найденного диапазона $I/Z = 9.5$ эВ соответствует самым тяжелым элементам и разница между нашим значением I/Z и экспериментальными данными для них составляет около 20 %. Использование нашего значения I/Z как асимптотического при $Z \rightarrow \infty$ может позволить уточнить значения I/Z при конечных Z , если считать, что при больших Z величина I/Z ведет себя как

$$I/Z = 7.95 \text{ эВ} + C/Z^{2/3},$$

и с помощью экспериментальных данных вычислить константу C .

На рис. 3 наряду с результатами расчетов представлена также функция $df/d\omega$, полученная усреднением экспериментальных значений [12] $df/d\omega$ для ряда элементов (Cu, Xe, Au, Rn, U). Из рис. 3 видно, что функция $df/d\omega$, полученная в расчетах, в общем согласуется с усредненными экспериментальными значениями. Однако минимум функции $df/d\omega$ при частоте $\Omega = 0.15$ и максимумы при $\Omega = 0.25$ и $\Omega = 0.35$, полученные в расчетах, не видны в экспериментальных данных. Таким образом, наши результаты позволяют описывать $df/d\omega$ тяжелых атомов, хотя особенности этой функции для атома Томаса–Ферми в области частот $\Omega \approx 0.1\text{--}0.4$ не имеют места в реальных веществах. Причина этого состоит в том, что даже для самых тяжелых элементов квантовые числа все еще остаются не слишком большими. Например, для атома урана максимально возможный орбитальный момент у связанных электронов равен $M_{max} = 3$ [5] (это соответствует движению электронов по орбите, близкой к круговой, чем определяется максимум при $\Omega \approx 0.25$ на кривых рис. 2, 3). Однако для следующего момента $M_{max} + 1 = 4$ эффективная потенциальная энергия с учетом центробежной [5] уже не имеет минимума (который в квазиклассическом подходе должен был бы быть, поскольку малые изменения моментов не должны сильно менять потенциал). Следовательно, невозможен переход электрона с $M = M_{max}$ на близкий квазистационарный уровень с $M = M_{max} + 1$, это привело бы к увеличению сечения фотопоглощения.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Рассмотрено два подхода к описанию динамического отклика многоэлектронного атома на действии электромагнитной волны: квазиклассический метод решения кинетического уравнения с помощью нахождения компонент Фурье дипольного момента электронов без учета поляризации атома (МНЭ) и предложенный в работе [6] метод расчета сечения фотопоглощения на сложных атомах, основанный на прямом, зависящем от времени, решении кинетического уравнения методом частиц (ПМЧ) с учетом поляризации.

В ходе разработки метода МНЭ, основанного на рассмотрении движения электронов по поверхности Ферми в заданном потенциале, была одновременно решена задача о классическом излучении заряженной частицы при движении в произвольном цен-

трально-симметричном потенциале. С использованием этого метода была вычислена функция $df/d\omega$ нейтрального атома Томаса–Ферми. Найдено, что эта функция имеет несколько особенностей, а именно, минимум при частоте $\Omega = 0.13$, скачок при частоте $\Omega = 0.267$ и небольшой максимум при частоте $\Omega = 0.35$.

Используя метод ПМЧ, мы нашли $df/d\omega$ для нейтрального атома Томаса–Ферми. Вычисленная функция $df/d\omega$ удовлетворяет правилу сумм с точностью 0.8%. Получено, что особенности функции $df/d\omega$ несколько размываются при учете поляризации. Влияние поляризации заметно сказывается только на низких частотах, в частности, низкочастотный предел без учета поляризации

$$\frac{df}{d\omega}(\Omega = 0) = 36.2$$

в 2.1 раза больше значения, вычисленного в работе [6] с учетом поляризации. Найдено, что на логарифмическую среднюю энергию возбуждения поляризация влияет несильно. Без учета поляризации эта величина равна $I = 6.62Z$ эВ, а при учете поляризации она получается равной $I = 7.95Z$ эВ. Вычисленное значение I находится вблизи экспериментально найденного диапазона. Сравнение результатов расчетов $df/d\omega$ с экспериментальными данными показывает, что полученные результаты позволяют описывать $df/d\omega$ тяжелых атомов, хотя особенности на расчетной кривой $df/d\omega$ атома Томаса–Ферми в области частот $\Omega \sim 0.1$ – 0.4 не имеют места в реальных веществах.

ЛИТЕРАТУРА

1. F. Bloch, *Z. Phys.* **81**, 363 (1933).
2. W. Brandt and S. Lundqvist, *Phys. Rev. A* **139**, 612 (1965).
3. J. A. Ball, J. A. Wheeler, and E. L. Fireman, *Rev. Mod. Phys.* **45**, 333 (1973).
4. А. Ф. Никифоров, В. Г. Новиков, В. Б. Уваров, *Квантостатистические модели высокотемпературной плазмы*, Наука, Москва (2000).
5. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика*, Наука, Москва (1974).
6. С. Ф. Гаранин, Е. М. Палагина, *ЖЭТФ* **125**, 1258 (2004).
7. В. Б. Берестецкий, Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский, *Квантовая электродинамика*, Физматлит, Москва (2001).
8. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Теория поля*, Наука, Москва (1967).
9. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Механика*, Наука, Москва (1973).
10. А. В. Виноградов, О. Н. Толстихин, *ЖЭТФ* **96**, 1204 (1989).
11. U. Fano, *Ann. Rev. Nucl. Sci.* **13**, 1 (1963).
12. B. L. Henke, P. Lee, T. J. Tanaka et al., *Atom. Data Nucl. Data Tables* **27**, 1 (1982).