

УДК 537.56

ФОРМФАКТОРЫ ЛЕГКИХ АТОМОВ И ИОНОВ С ЧИСЛОМ ЭЛЕКТРОНОВ $N \leq 10$

*А.К.Каминский**

Получены простые аналитические выражения для упругих и неупругих формфакторов атомов с $Z \leq 10$ и любых ионов с числом электронов $N \leq 10$. Упругие формфакторы $F(q)$ описывают когерентное рассеяние рентгеновских γ -квантов на атомах или ионах, неупругие формфакторы $S(q)$ описывают некогерентное комптоновское рассеяние γ -квантов. Эти же формфакторы необходимы для описания дифференциальных и полных сечений рассеяния, возбуждения и ионизации при быстрых ионно-атомных столкновениях. Проведено сравнение с имеющимися таблицами $F(q)$ и $S(q)$.

Работа выполнена в Лаборатории высоких энергий ОИЯИ.

Atomic Form Factors and Incoherent Scattering Functions of Atoms and Ions with the Number of Electrons $N \leq 10$

A.K.Kaminsky

Simple analytic expressions for atomic form factors and incoherent scattering functions of atoms with $Z \leq 10$ and arbitrary ions with the number of electrons $N \leq 10$ have been obtained. The atomic form factors $F(q)$ are used for evaluations of X-ray coherent scattering on atoms and ions; the incoherent scattering functions $S(q)$ are necessary to describe the incoherent X-ray Compton scattering. The same functions $F(q)$ and $S(q)$ are necessary for evaluations of the differential and total cross sections of the scattering, excitation and ionization processes in fast ion-atom collisions. The values of $F(q)$ and $S(q)$ are compared with the existing tabulated ones.

The investigation has been performed at the Laboratory of High Energies, JINR.

Величины упругих $F(q)$ и неупругих $S(q)$ атомных формфакторов необходимы для расчетов сечений рассеяния заряженных частиц и γ -квантов на атомах и ионах [1—6], полных [7—9] и дифференциальных [10—15] эффективных сечений процессов рассеяния и ионизации при ионно-атомных столкновениях с использованием правила сумм. Поэтому для большинства атомов вычислены таблицы [2,6] для формфакторов, при этом использованы различные приближения для атомных волновых функций. В ряде работ [3—5] выполнены численные расчеты поправок к формфакторам для отдельных атомов.

*НИИ ядерной физики им.Д.В.Скобельцына МГУ им.М.В.Ломоносова, Москва

Для ионов имеются лишь отдельные расчеты [2], для абсолютного большинства ионов формфакторов в литературе нет, а таблицы для атомных формфакторов при расчете формфакторов ионов использовать нельзя.

В то же время величины формфакторов ионов необходимы не только для исследований процессов взаимодействия γ -квантов и заряженных частиц (в том числе ионов) с атомами и ионами, но и для ряда научно-технических приложений, связанных с использованием пучков γ -квантов (в частности, рентгеновского лазера) и ионных пучков ускорителей. В частности, величина $N^2 F^2(q)$ равна отношению интенсивности I упругого рассеяния рентгеновского излучения на атоме или ионе к интенсивности I_0 падающего излучения [2]. При этом длина волны λ и угол θ излучения связаны с величиной переданного импульса q соотношением $q = 4\pi\lambda^{-1} \sin \theta/2$. Здесь и ниже величина q дана в единицах a_0^{-1} , где $a_0 = 0,529 \cdot 10^{-8}$ см.

Величина $NS(q)$, называемая также в литературе функцией некогерентного рассеяния, равна аналогичному отношению I/I_0 для некогерентного комптоновского рассеяния γ -квантов на атоме или ионе [2]. Эти же формфакторы $F(q)$ и $S(q)$ необходимы для теоретических расчетов энергетических и угловых распределений ионов и электронов после ионно-атомных столкновений [10—15] и для анализа и интерпретации современных экспериментальных данных по ионно-атомным столкновениям.

Нами получены выражения для упругих $F(q)$ и неупругих $S(q)$ формфакторов для атомов с $z \leq 10$ и любых ионов с числом необданных электронов $N \leq 10$. Используемым методом могут быть получены формфакторы $F(q)$ и $S(q)$ и для атомов с $z > 10$ и ионов с $N > 10$.

Упругий $F(q)$ и неупругий $S(q)$ формфакторы атома или иона с N электронами определяются формулами [6]:

$$F(q) = N^{-1} \sum_{j=1}^N |\Psi|^2 \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r}_j/\hbar) d\mathbf{r}, \quad (1)$$

$$S(q) = N^{-1} \left[\sum_{j \neq s}^N \int |\Psi|^2 \exp(i\mathbf{q}(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_s)/\hbar) d\mathbf{r} - |NF(q)|^2 \right] \quad (2)$$

Интегрирование в (2.9)—(2.10) ведется по всем радиусам-векторам \mathbf{r}_j всех N электронов иона или атома B , через \mathbf{q} и \mathbf{k} обозначены векторы передачи импульса иона и импульса выбитого электрона соответственно, Ψ — волновая функция начального состояния N электронов иона или атома.

Точное решение для Ψ получено лишь для одноэлектронной системы, известно и выражение для формфакторов этой системы [1]. При численных расчетах $F(q)$ и $S(q)$ для атомов с $z \geq 2$ использовались приближенные волновые функции Ψ различной сложности (см. ссылки в [2—5]).

Для получения аналитических выражений для формфакторов $F(q)$ и $S(q)$ мы использовали волновые $\Psi_B(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$ функции в виде линейных комбинаций типа Хартри-Фока — Фока

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = \sum_t \alpha_t \prod_{j=1}^N \psi_j(z_j, \mathbf{r}_j) \chi_j(m_{sj}) \quad (3)$$

одноэлектронных кулоновских волновых функций

$$\psi_j(z_j^*, \mathbf{r}_j) = R_{nl}(z_{nl}^*, r_j) Y_{lm}(\theta_j, \varphi_j) \quad (4)$$

и спиновых функций $\chi_j(m_{sj})$. Здесь $Y_{lm}(\theta_j, \varphi_j)$ — сферические функции, $R_{nl}(z_{nl}^*, r)$ — кулоновские радиальные волновые функции в поле с зарядом z_{nl}^* . Функции $R_{nl}(z_{nl}^*, r)$ для различных подоболочек выбраны с различными зарядами z_{nl}^* , они соответствуют различным гамильтонианам и не ортогональны друг другу. Ортогональность одноэлектронных волновых функций обеспечивается ортогональностью угловых $Y_{lm}(\theta_j, \varphi_j)$ и спиновых $\chi_j(m_{sj})$ функций. Не ортогональными друг другу являются только функции (4) для ns -состояний, для них применяется искусственная ортогонализация общепринятым методом.

Коэффициенты α_t в (3) представляют собой произведение многих коэффициентов Клебша — Гордана. Их выбор обеспечивает соответствие функции (3) полному набору квантовых чисел системы N электронов: полному моменту количества движения J , орбитальному моменту L , полному спину S , а также проекциям M_J, M_L, M_S этих моментов на выбранную ось. Волновая функция (3) обладает также необходимыми свойствами симметрии, обеспечивающими принцип Паули. Отметим, что выбранная схема построения полной волновой функции (3), (4) позволяет варьировать явный вид радиальных волновых функций $R_{nl}(z_{nl}^*, r)$, это скажется лишь на величине одноэлектронных матричных элементов, без изменения общей структуры формфакторов. В частности, формфакторы для ионов различных атомов с одним и тем же числом N необданных электронов вычисляются по тем же самым формулам, меняются лишь значения z_{nl}^* .

Волновые функции (3), (4) не учитывают в явном виде электронные корреляции, роль которых более заметна во внешних оболочках атомов. Вносимые при таком выборе волновых функций в величины формфакторов $F(q)$ и $S(q)$ неточности будут оценены ниже путем сравнения с детальными численными расчетами $F(q)$ и $S(q)$.

Существенным преимуществом выбора волновых функций в виде (3)—(4) является то, что это позволяет получить аналитические выражения для формфакторов $F(q)$ и $S(q)$, применимые для любых ионов с данным числом N электронов (в том числе и для атомов с $Z=N$). Подстановка функций (3), (4) в (1) дает для упругого формфактора простое выражение.

$$F(q) = N^{-1} [N_{1S} L(1s, 1s) + N_{2S} L(2s, 2s) + \dots] \quad (5)$$

Здесь через $L(nlm, n'l'm')$ обозначен одночастичный матричный элемент

$$L(nlm, n'l'm') = \int \Psi_{nlm}^*(\mathbf{r}) \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}/\hbar) \Psi_{n'l'm'}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}. \quad (6)$$

Величины $L(nlm, n'l'm')$ для кулоновских функций $\Psi_{nlm}(\mathbf{r})$ приведены в [15] и в приложении.

Коэффициенты N_{ns} в (5) являются числами электронов в ns -оболочках данного атома. Для состояний с $l > 0$ коэффициенты при матричных элементах с различными значениями m могут быть дробными числами, определяемыми коэффициентами векторного сложения моментов. Это соответствует тому, что подоболочки с различными m ничем не выделены, и электроны могут с определенной вероятностью находиться в любом из этих состояний. Исключением являются лишь ионы или атомы с $N=7$ и $N=10$, в первом случае в каждом состоянии p -оболочки находится по одному электрону, во втором — по два. Коэффициенты N_{2p_0} и N_{2p_1} в (5) для $5 \leq N \leq 10$ оказываются равными:

$$N_{2p_0} = (N-4)/3, \quad N_{2p_1} = 2(N-4)/3. \quad (7)$$

При получении коэффициентов (5) и в приведенном ниже выражении для $S(q)$ учтено, что матричные элементы $L(nlm, n'l'm')$ с $m=+1$ и $m=-1$ равны, запрещены лишь переходы между состояниями с разными m .

Выражения для $S(q)$ оказываются более громоздкими, в них входят и недиагональные матричные элементы $L(nlm, n'l'm')$. Эти выражения для $N \leq 10$ можно записать в виде

$$\begin{aligned} S(q) = N^{-1} [& N - a_1 L^2(1s, 1s) - a_2 L^2(2s, 2s) - a_3 L^2(1s, 2s) - \\ & a_4 L^2(2p_0, 2p_0) - a_5 L^2(2p_1, 2p_1) - a_6 L^2(1s, 2p_0) - \\ & - a_7 L^2(2s, 2p_0) - a_8 L(2p_0, 2p_0) L(2p_1, 2p_1)]. \end{aligned} \quad (8)$$

Величины коэффициентов a_i для различных ионов приведены в табл.1, при этом пустые клетки в таблице соответствуют нулевым значениям соответствующих коэффициентов.

Представленные формулами (5)—(8), а также таблицей выражения для формфакторов $F(q)$ и $S(q)$ для атомов H и He общеизвестны [1], для атомов и ионов с $N \leq 7$ они имеются в [15].

Таблица. Величины коэффициентов a_i в формуле (8) для неупругого формфактора $S(q)$ для иона или атома с $N \leq 10$

N	Конфигурация	a_1	a_2	a_3	a_4	a_5	a_6	a_7	a_8
1	$^2S_{1/2}$	1							
2	1S_0	2							
3	$^2S_{1/2}$	2	1	2					
4	1S_0	2	2	4					
5	$^2P_{1/2}$	2	2	4	1/9	4/9	2/3	2/3	4/9
6	3P_0	2	2	4	4/9	10/9	4/3	4/3	4/9
7	$^4S_{3/2}$	2	2	4	1	2	2	2	
8	3P_2	2	2	4	10/9	22/9	8/3	8/3	4/9
9	$^3P_{3/2}$	2	2	4	13/9	28/9	10/3	10/3	4/9
10	1S_0	2	2	4	2	4	4	4	

На рис.1 и 2 приведены результаты расчета формфакторов $F(q)$ и $S(q)$ для атомов и ионов кислорода, проведено сравнение наших расчетов с вариационными зарядами z_{nl}^* из [16] и с z_{nl}^* из энергий связи [17,18], а также с табличными величинами из [2].

Отметим характерные особенности формфакторов $F(q)$ и $S(q)$ для ионов и атомов. При $q \rightarrow 0$ величины $F(q) \cong 1 - \alpha q^2$ для любых атомов и ионов, где α определяется конфигурацией иона или атома и величинами z_{nl}^* . Сечение когерентного рассеяния γ -квантов на электронах атомов и ионов равно [19,20]:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{e^4}{2m^2c^4} (1 + C^2 \sin^2 \vartheta) F^2(q) N^2. \quad (9)$$

Следовательно, при малых θ сечение $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ пропорционально $(1 - A\theta^2)$, при этом оба множителя в (9) дают сравнимый вклад в постоянную A .

При ионно-атомных столкновениях квазиупругая часть сечения взаимодействия налетающей частицы с ионом (или атомом мишени) равна [15] сечению взаимодействия с бесструктурной заряженной частицей, умноженному на величину $[1 - (n/z)F(q)]^2$

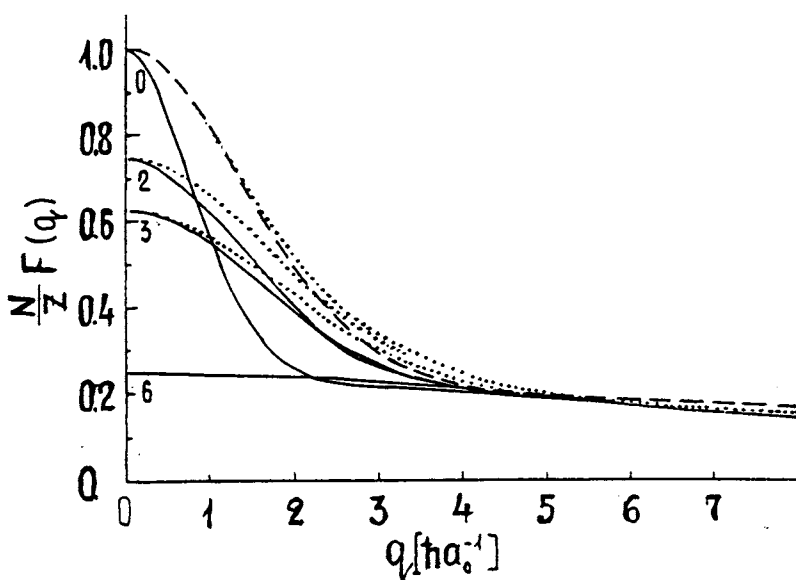


Рис.1. Величины $(N/z) F(q)$ для атомов и ионов кислорода. Сплошные кривые соответствуют расчетам с z_{nl}^* из энергий связи подболошек, пунктир — расчет для атома O с вариационными z_{nl}^* . Точечные кривые — данные из [2]. Заряды ионов указаны около кривых

вместо $F^2(q)$ в формуле (9). При малых q эта величина равна αq^2 для атома мишени и $[(z-N)z^{-1} + Nz^{-1}\alpha q^2]^2$ — для иона. При $q \rightarrow 0$ неупругие формфакторы $S(q)$ пропорциональны q^2 . Это соответствует малым вкладам неупругих процессов в сечении при малых q .

При промежуточных величинах $q \geq 1$ форма кривых $F(q)$ и $S(q)$ зависит от электронной структуры атома или иона, так как величины одноэлектронных матричных элементов (6) сильно зависят от состояния $|nlm\rangle$ при таких q . При больших q существует асимптотика $F(q) \rightarrow 0$ и $S(q) \rightarrow 1$, при этом когерентное рассеяние γ -квантов мало, практически все рассеяние идет в неупругий канал. При ионно-атомных столкновениях асимптотика $F(q) \rightarrow 0$ соответствует рассеянию на ядре мишени, экранировкой ядра мишени можно пренебречь. При $S(q) \rightarrow 1$ сечение ионно-атомных столкновений соответствует столкновениям налетающей частицы со слабо связанными электронами мишени.

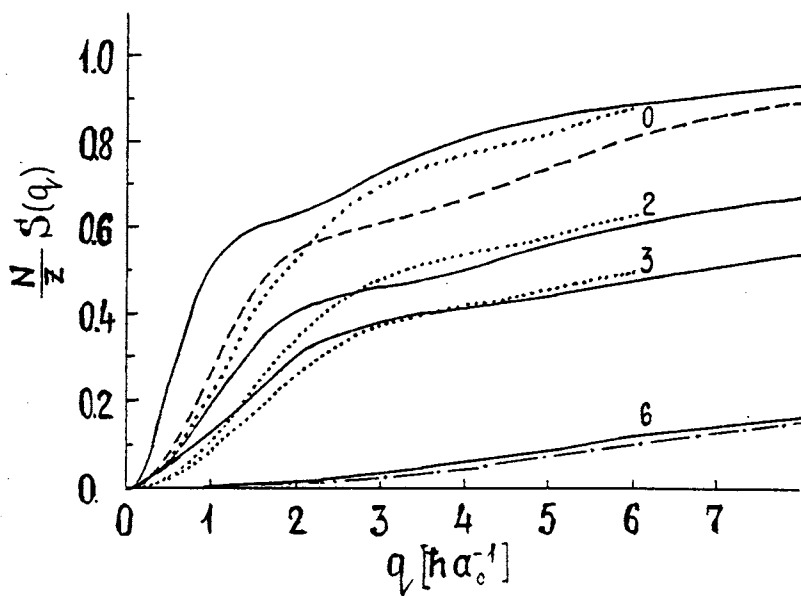


Рис.2. Величины $(N/z)S(q)$ для атомов и ионов кислорода. Обозначения кривых те же, что и на рис.1. Для O^{+5} штрихпунктиром нанесены данные из [21]

Вид формул (1)—(8) не зависит от выбора эффективных зарядов z_{nl}^* подболочек исследуемых ионов или атомов, это сказывается лишь на величине одноэлектронных матричных элементов (6).

При расчетах результатов, приведенных на рис.1. и 2, для формфакторов атомов были использованы вариационные значения z_{nl}^* из [16] и величины $z_{nl}^* = (nI_{nl}/13,6 \text{ эВ})^{1/2}$, где n — главное квантовое число и I_{nl} — энергия связи электрона в электронвольтах [17]. Для ионов вариационных значений z_{nl}^* в литературе нет. Энергии связи I_{nl} подболочек ионов можно определить с помощью линейной интерполяции между значениями I_{nl} для атомов из [16] и ионизационными потенциалами последовательно обдираемых ионов из [18].

Как видно на рис.1 и 2, вычисленные с вариационными зарядами z_{nl}^* формфакторы $F(q)$ и $S(q)$ при малых q лучше согласуются с табличными значениями из [2], это определяется выбором волновых функций в большинстве расчетов, собранных в [2].

Расчеты $F(q)$ и $S(q)$ для атома Ag с учетом электронных корреляций [5] показали, что вклад таких корреляций в $F(q)$ не превышает 2% для всех q . Величины $S(q)$ в [5]

при $q < 1$ на 20% меньше, чем вычисленные в приближении Хартри — Фока без учета корреляций, но при $q < 1$ сами величины $S(q)$ малы, мал вклад неупругих процессов в сечения. Малость вклада электронных корреляций в $S(q)$ для O^{+6} проиллюстрирована на рис.2 также данными из [21], где такие корреляции учтены.

Сравнение величин полученных нами формфакторов с расчетами $F(q)$ и $S(q)$ с другими волновыми функциями показывает, что приведенные выше аналитические выражения для $F(q)$ и $S(q)$ являются удовлетворительным приближением для решения большого класса задач по расчетам сечений когерентного и комптоновского рассеяния γ -квантов, дифференциальных и полных сечений рассеяния, возбуждения и ионизации при электронно-атомных и ионно-атомных столкновениях. При расчете сечений для случая столкновений с атомами мишени аналитические выражения более удобны, чем таблицы [2], а для большинства ионов других данных по формфакторам в литературе просто нет. При расчетах эффективных сечений ионизации величины q удобно выбирать в единицах $z_{nl}^* \hbar a_0^{-1}$, где z_{nl}^* — эффективный заряд ионизируемой оболочки, в этом случае в формулах (10)—(16) приложения величина z^* равна z_{nl}^* . При расчетах рассеяния заряженных частиц и γ -квантов величины q выбираются в единицах $\hbar a_0^{-1}$, и $z^* = 1$.

Приложение

Величины матричных элементов $L(nlm, n'l'm')$

$$L(1s, 1s) = \frac{1}{(1 + a_1^2)^2}, \quad a_1 = \frac{qz^*}{2z_{1s}}, \quad (10)$$

$$L(2s, 2s) = \frac{1 - 3a_2^2 + 2a_2^4}{(1 + a_2^2)^4}, \quad a_2 = \frac{qz^*}{z_{2s}}, \quad (11)$$

$$L(2p_0, 2p_0) = \frac{1 - 5a_3^2}{(1 + a_3^2)^4}, \quad a_3 = \frac{qz^*}{z_{2p}}, \quad (12)$$

$$L(2p_1, 2p_1) = \frac{1}{(1 + a_3^2)^3}, \quad (13)$$

$$L(1s, 2s) = \frac{C}{\sqrt{1-C^2}} \left[\frac{1+a_4^2(z_{1S}+z_{2S})(z_{1S}-z_{2S})^{-1}}{(1+a_4^2)^3} - \frac{1}{(1+a_4^2)^2} \right],$$

$$C = \frac{\sqrt{8z_{1S}^3 z_{2S}^3 (z_{1S}-z_{2S})}}{(z_{1S}+1/z_{2S})^4}, \quad a_4 = \frac{qz^*}{(z_{1S}+1/2z_{2S})}, \quad (14)$$

$$L(1s, 2p_0) = \frac{\sqrt{2^5 z_{1S}^3 z_{2P}^5 a_5}}{(z_{1S}+1/2z_{2P})^4 (1+a_5^2)^3}, \quad a_5 = \frac{qz^*}{(z_{1S}+1/2z_{2P})}, \quad (15)$$

$$L(2s, 2p_0) = \frac{2^5 a_6 \sqrt{z_{2S}^3 z_{2P}^5} [2z_{2S}(a_6^2-2) + z_{2P}(1+a_6^2)]}{(z_{2S}+z_{2P})^5 (1+a_6^2)^4},$$

$$a_6 = \frac{2qz^*}{(z_{2S}+z_{2P})}. \quad (16)$$

Литература

1. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. — Квантовая механика, М., ГИФМЛ, 1963, с.633.
2. International tables for X-ray crystallography, Kynoch Press, Birmingham, England, v.3, 1968.
3. Kim Y.K., Inokuti M. — Phys. Rev., 1968, v.165, p.39.
4. Cromer D.T. — J. Chem. Phys., 1969, v.50, p.4857.
5. Naon M., Carnille M., Kim Y.K. — J. Phys. B, 1975, v.8, p.864.
6. Hubbel J.H., Veigele W.J., Briggs E.A. et al. — J. Phys. Chem. Reference Data, 1975, v.471.
7. Levy H. — Phys. Rev., 1969, v.185, p.7.
8. Каминский А.К., Мещеров Р.А., Николаев В.С. — Труды радиотехнического института АН СССР, №16, 1973, с.330.
9. Gillespie G.H., Kim Y.K., Cheng K. — Phys. Rev. A, 1978, v.17, p.1284.
10. Kaminsky A.K., Myakishev N.G., Popova M.L. — Phys. Rev. B, 1980, v.13, p.1161.
11. Kaminsky A.K., Meshcherov R.A., Popova M.I. et al. — Nucl. Instrum. and Meth., 1981, v.180, p.231.
12. Kaminsky A.K., Popova M.I. — J. Phys. B, 1982, v.15, p.403.
13. Day M.H. — Y. Phys. B, 1981, v.14, p.231.
14. Kaminsky A.K., Popova M.I. — Abstracts of contributed papers of XIII ICPEAC, Berlin, 1983, p.368.

15. Каминский А.К., Попова М.И. — ЖТФ, 1986, т.56, с.1287.
16. Omidvar K., Kyle H.L., Sullivan E.C. — Phys. Rev. A, 1972, v.5, p.1174.
17. Sevier K.D. — Atomic Data and Nuclear Data Tables, 1979, v.24, p.323.
18. Cralson T.A., Nestor C.W., Wasserman N. et al. — Atomic Data, 1970, v.2, No.2, p.63.
19. Ахиезер А.И., Берестецкий В.Б. — Квантовая электродинамика, М., ГИФМЛ, 1969, с.371.
20. Волков В.Ф., Герасимов С.А. — ЖТФ, 1985, т.55, с.2091.
21. Bartell L.S., Gavin R.M. — J. Chem. Phys., 1965, v.43, p.856.