

УСПЕХИ ФИЗИЧЕСКИХ НАУК

ТЕОРИЯ РАССЕЯНИЯ МЕДЛЕННЫХ ЭЛЕКТРОНОВ *)

Г. Мессу

1. ВВЕДЕНИЕ

Необходимо провести различие между быстрыми и медленными столкновениями электронов с атомами. Пусть v —скорость падающего электрона и u —порядок величины скорости атомного электрона. Будем называть столкновение быстрым, если $v \gg u$, и медленным в противном случае. Построение общей теории рассеяния быстрых электронов, применимой как для упругих, так и для неупругих столкновений, не связано с принципиальными трудностями. Это хорошо известное первое борновское приближение. Для медленных столкновений такого общего метода не существует. В настоящем обзоре мы рассмотрим, насколько удалось продвинуться в этом направлении. Для того чтобы избежать излишних усложнений, при рассмотрении различных методов мы ограничимся в большинстве случаев рассмотрением столкновений электронов с атомами водорода. Большая часть используемых приемов хорошо иллюстрируется этим случаем, для которого, благодаря его простоте, достигнуты наибольшие успехи. Обобщение на более сложные атомы обычно не представляет существенных трудностей, если не считать увеличения объема работы при выполнении численных оценок.

Мы уделим особое внимание таким столкновениям, которые приводят к возбуждению уровней, принадлежащих к основной конфигурации атома или иона. Эффективные сечения таких столкновений находят важное применение в астрофизике и физике атмосферы.

В этом обзоре основное внимание обращено на задачу достаточно точного вычисления эффективных сечений столкновений, и не затрагиваются общие вопросы теории столкновений. Везде предполагается, что существуют решения, удовлетворяющие определенным граничным условиям, хотя с математической точки зрения доказательство соответствующих теорем существования может оказаться весьма затруднительным.

2. СТОЛКНОВЕНИЯ ЭЛЕКТРОНОВ С АТОМАМИ ВОДОРОДА

В этом случае волновое уравнение для двухэлектронной задачи имеет вид

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m} (\nabla_1^2 + \nabla_2^2) + E - \frac{e^2}{r_{12}} + \frac{e^2}{r_1} + \frac{e^2}{r_2} \right] \Psi = 0, \quad (1)$$

где r_1 и r_2 — координаты двух электронов. Если электрон с волновым числом k_0 падает на атом, находящийся в основном состоянии

*) Reviews. of Modern. Physics. 28, 171 (1956).

с энергией E_0 , то полная энергия дается выражением

$$E = E_0 + \frac{\hbar^2}{2m} k_0^2. \quad (2)$$

Чтобы получить приближение, удобное для определения сечений упругих и неупругих столкновений электрона с атомами, обычно представляют Ψ в форме

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \left(\sum + \int \right) \phi_n(\mathbf{r}_1) F_n(\mathbf{r}_2), \quad (3)$$

где мы пока пренебрегли неразличимостью электронов и обозначили падающий электрон индексом 2. ϕ_n есть собственные функции атома; знак интегрирования относится к функциям непрерывного спектра. Подставляя (3) в (1) и учитывая, что

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 + E_n + \frac{e^2}{r_1} \right) \phi_n(\mathbf{r}_1) = 0, \quad (4)$$

получим

$$\left(\sum_n + \int \right) \left\{ \frac{\hbar^2}{2m} (\nabla_2^2 + k_n^2) + \frac{e^2}{r_2} - \frac{e^2}{r_{12}} \right\} \phi_n(\mathbf{r}_1) F_n(\mathbf{r}_2) = 0, \quad (5)$$

где

$$k_n^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E - E_n). \quad (6)$$

Умножая на $\phi_n^*(\mathbf{r}_1)$ и интегрируя по $d\mathbf{r}_1$, мы получим бесконечную систему дифференциальных уравнений для F_n

$$(\nabla_2^2 + k_n^2) F_n = \left(\sum_n + \int \right) U_{nm} F_m, \quad (7)$$

где

$$U_{nm} = \frac{2me^2}{\hbar^2} \int \phi_n^* \left(\frac{1}{r_{12}} - \frac{1}{r_2} \right) \phi_m d\mathbf{r}_1. \quad (8)$$

Требуется найти такие решения этих уравнений, которые являются гладкими функциями и имеют асимптотическую форму

$$F_n \sim r_2^{-1} e^{ik_n r_2} f_n(\theta, \varphi) + e^{ik_0 r} \delta_{0n}. \quad (9)$$

Дифференциальное сечение возбуждения n -го состояния тогда равно

$$I_n(\theta, \varphi) d\omega = |f_n(\theta, \varphi)|^2 d\omega, \quad (10)$$

где $d\omega$ есть элемент телесного угла в направлении (θ, φ) .

Для практического решения уравнений (7) необходимо развить приближенные методы. Далее мы обсудим имеющиеся возможности.

3. БОРНОВСКОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ

Если предположить, что взаимодействие электрона с атомом мало, что справедливо, если энергия падающего электрона $k^2 \hbar^2 / 2m \gg E_0$, то уравнение (7) можно решать, подставляя в правые части

$$F_n = 0 \text{ при } n \neq 0, \quad F_0 = e^{ik_0 r} \quad (11)$$

так, что

$$(\nabla_2^2 + k_n^2) F_n = U_{n0} e^{ik_0 r} \quad (12)$$

и

$$f_n(\theta, \varphi) = -\frac{1}{4\pi} \int U_{n0} e^{i(\mathbf{k}_0 - \mathbf{k}_n) \cdot \mathbf{r}_2} d\mathbf{r}_2, \quad (13)$$

где

$$|\mathbf{k}_0 - \mathbf{k}_n| = (k_0^2 + k_n^2 - 2k_0 k_n \cos \theta)^{\frac{1}{2}}.$$

4. ПРИБЛИЖЕНИЕ ДВУХ СОСТОЯНИЙ—МЕТОД ИСКАЖЕННЫХ ВОЛН (DW)*)

Для медленных столкновений приближение Борна уже неприменимо. Чтобы ослабить сделанные там допущения, мы предположим, что в уравнениях (7) диагональные матричные элементы U_{nn} много больше недиагональных. Поэтому всеми недиагональными элементами, за исключением тех, которые связаны с начальным состоянием, можно пренебречь по сравнению с диагональными. Тогда получаем уравнения:

$$(\nabla^2 + k_0^2 - U_{00})F_0 = 0, \quad (14)$$

$$(\nabla^2 + k_n^2 - U_{nn})F_n = U_{n0}F_0, \quad n \neq 0. \quad (15)$$

Уравнение для упруго рассеянной волны F_0 имеет такой же вид, как и уравнение для частицы, движущейся в статическом поле с потенциалом $\hbar^2 U_{00}/2m$.

Используя обобщенную функцию Грина, можно решить уравнение для F_n , что даст¹

$$f_n(\theta, \varphi) = -\frac{1}{4\pi} \int \mathcal{F}_n(r_2, \pi - \Theta) U_{n0}(r_2) F_0(r_2 \theta_2) dr_2, \quad (16)$$

где

$$\cos \Theta = \cos \theta \cos \theta_2 + \sin \theta \sin \theta_2 \cos(\varphi - \varphi_2),$$

F_0 есть решение уравнения (14) с асимптотической формой (9), а \mathcal{F}_n — аналогичное решение однородного уравнения соответствующего (15), т. е.

$$(\nabla^2 + k_n^2 - U_{nn})\mathcal{F}_n = 0, \quad (17)$$

$$\mathcal{F}_n \sim e^{ik_n r_2} + f_n(\theta_2, \varphi_2) r_2^{-1} e^{-ik_n r_2}. \quad (18)$$

Сравнение с первым борновским приближением (13) показывает, что при этом учитывается искажение падающей и рассеянной волн статическим полем атома в его начальном и конечном состояниях соответственно.

5. ПРИБЛИЖЕНИЕ ДВУХ СОСТОЯНИЙ—СЛУЧАЙ СИЛЬНОЙ СВЯЗИ

В методе искаженных волн предполагается, что промежуточные состояния не играют роли при возбуждении. Поэтому для получения уравнений (14) и (15) мы могли бы непосредственно воспользоваться разложением (3) приближенно записав его в виде

$$\Psi = \psi_0(\mathbf{r}_1) F_0(\mathbf{r}_2) + \psi_n(\mathbf{r}_1) F_n(\mathbf{r}_2). \quad (19)$$

Тогда получим

$$(\nabla^2 + k_0^2 - U_{00})F_0 = U_{0n}F_n, \quad (20)$$

$$(\nabla^2 + k_n^2 - U_{nn})F_n = U_{n0}F_0. \quad (21)$$

Если решить уравнения методом последовательных приближений, то первая итерация дает приближение искаженных волн. В случае слабой связи, т. е. когда $|U_{0n}|$ мало, нет необходимости брать следующие приближения. Однако может случиться, что хотя промежуточными состояниями можно пренебречь, но $|U_{0n}|$ не мало. Тогда удовлетворительное приближение может быть получено с помощью (20) и (21).

*) В зарубежной литературе установились определенные сокращенные обозначения различных приближенных методов (например: DW—distorted wave approximation). В дальнейшем мы даем русские названия методов, но сохраняем английские сокращенные обозначения для удобства пользования литературой. Список обозначений приведен в таблице I. *Прим. пер.*

6. УЧЕТ ОБМЕНА

До сих пор мы не учитывали неразличимость двух электронов. Однако, нет никаких оснований опускать в выражении (19) такие члены, как $\phi_0(\mathbf{r}_2)F_0(\mathbf{r}_1)$ или $\phi_n(\mathbf{r}_2)F_n(\mathbf{r}_1)$, так как они описывают атом в тех же энергетических состояниях, что и учтенные члены. Эти члены соответствуют в разложении (3) состояниям непрерывного спектра со столь большой энергией, что вычисляемая с помощью формулы (6) величина $k_n^2 < 0$. В этом смысле учет обмена выходит за рамки приближения двух состояний. Тем не менее мы можем получить обобщение уравнений (20) и (21), которое можно в некотором смысле рассматривать как приближение двух состояний с учетом обмена. Для этого напомним

$$\Psi^\pm = \phi_0(\mathbf{r}_1)F_0^\pm(\mathbf{r}_2) \pm \phi_0(\mathbf{r}_2)F_0^\pm(\mathbf{r}_1) + \phi_n(\mathbf{r}_1)F_n(\mathbf{r}_2) \pm \phi_n(\mathbf{r}_2)F_n^\pm(\mathbf{r}_1), \quad (22)$$

т. е. используем функции, которые либо симметричны, либо антисимметричны по координатам электронов, но учтем только два состояния. После подстановки в (1) с помощью той же процедуры, что и раньше, приходим к уравнениям

$$\begin{aligned} (\nabla^2 + k_0^2 - U_{00})F_0^\pm(\mathbf{r}_2) \pm \int K_{00}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_2')F_0^\pm(\mathbf{r}_2')d\mathbf{r}_2' = \\ = U_{n0}F_n^\pm \mp \int K_{0n}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_2')F_n^\pm(\mathbf{r}_2')d\mathbf{r}_2', \end{aligned} \quad (23)$$

$$\begin{aligned} (\nabla^2 + k_n^2 - U_{nn})F_n^\pm(\mathbf{r}_2) \pm \int K_{nn}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_2')F_n^\pm(\mathbf{r}_2')d\mathbf{r}_2' = \\ = U_{n0}F_n^\pm \mp \int K_{n0}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_2')F_0^\pm(\mathbf{r}_2')d\mathbf{r}_2', \end{aligned} \quad (24)$$

где

$$K_{00} = \phi_0^*(\mathbf{r}_1)\phi_0(\mathbf{r}_2) \left\{ k_0^2 - \frac{2m}{\hbar^2} \left(\frac{e^2}{r_{12}} + E_0 \right) \right\}, \quad (25)$$

$$K_{nn} = \phi_n^*(\mathbf{r}_1)\phi_n(\mathbf{r}_2) \left\{ k_n^2 - \frac{2m}{\hbar^2} \left(\frac{e^2}{r_{12}} + E_n \right) \right\}, \quad (26)$$

$$K_{0n} = \phi_n^*(\mathbf{r}_1)\phi_0(\mathbf{r}_2) \left\{ k_n^2 - \frac{2m}{\hbar^2} \left(\frac{e^2}{r_{12}} + E_0 \right) \right\} = K_{n0}^*. \quad (27)$$

Таким образом, вместо системы двух дифференциальных уравнений (20), (21) получаем систему интегродифференциальных уравнений. Ядра K_{00} , K_{nn} и K_{0n} представляют собой дополнительные (обменные) взаимодействия, вообще говоря, зависящие от скорости. Первые два дают вклад в искажения падающей и рассеянной волн соответственно, а последнее непосредственно входит в недиагональные матричные элементы переходов между двумя состояниями.

Если найти решение с указанной выше асимптотической формой, то дифференциальное сечение возбуждения n -го состояния равно

$$I_n(\theta, \varphi)d\omega = \left\{ \frac{1}{4} |f_n^+(\theta)|^2 + \frac{1}{4} |f_n^-(\theta)|^2 \right\} d\omega. \quad (28)$$

Веса, приписываемые соответственно симметричному и антисимметричному рассеянию, определяются вероятностью того, параллельны или антипараллельны спины сталкивающихся электронов при условии, что полная волновая функция антисимметрична по двум электронам.

Обобщенная форма метода искаженных волн получается, если предположить, что U_{0n} и K_{0n} малы и уравнения (23), (24) можно решать методом последовательных приближений, начиная с F_0^\pm . Тогда

вместо (14) и (15) получим

$$(\nabla^2 + k_0^2 - U_{00})F_0^\pm \pm \int K_{00}(\mathbf{r}'_2, \mathbf{r}_2)F_0^\pm(\mathbf{r}'_2)d\mathbf{r}'_2 = 0, \quad (29)$$

$$(\nabla^2 + k_n^2 - U_{nn})F_n^\pm \pm \int K_{nn}(\mathbf{r}'_2, \mathbf{r}_2)F_n^\pm(\mathbf{r}'_2)d\mathbf{r}'_2 = \\ = U_{n0}F_0^\pm \pm \int K_{n0}(\mathbf{r}'_2, \mathbf{r}_2)F_0^\pm(\mathbf{r}'_2)d\mathbf{r}'_2. \quad (30)$$

Первое уравнение дает упругое рассеяние, и отличается от уравнения (14) учетом обменного взаимодействия. Указанное обобщение метода искаженных волн будем называть приближением искаженных волн с обменом и обменным возмущением (EPDE).

Симметричная и антисимметричная части дифференциального сечения возбуждения n -го состояния теперь имеют вид

$$\dot{I}_n^\pm(\theta, \varphi)d\omega = |f_n^\pm(\theta, \varphi)|^2 d\omega, \quad (31)$$

где

$$f_n^\pm(\theta, \varphi) = -\frac{1}{4\pi} \left[\int \mathcal{F}_n^\pm(r_1, \pi - \Theta) \left\{ U_{n0}F_0^\pm(r_1, \theta_1) \mp \right. \right. \\ \left. \mp \int K_{n0}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}')F_0^\pm(r', \theta')d\mathbf{r}' \right\} d\mathbf{r}_1 \right]. \quad (32)$$

F_0^\pm — решение уравнения (29) с асимптотической формой (9), а \mathcal{F}_n^\pm — решение однородного уравнения, соответствующего (30), с асимптотической формой (18).

Таким образом, учет обмена проявляется как в дополнительном возмущении падающей и рассеянной волн, так и в дополнительной связи, приводящей к переходам.

Возможны следующие два упрощенных варианта этого метода.

Первый состоит в пренебрежении обменным возмущением, т. е. членами K_{00} и K_{nn} в уравнениях (24) и (30) (метод искаженных волн с обменом). В тех случаях когда величина K_{0n} не является пренебрежимо малой, этот метод, однако, мало эффективен.

Второй вариант возникает в результате дальнейших упрощений, а именно при полном пренебрежении искажением. При этом F_0 и \mathcal{F}_n в (32) заменяются плоскими волнами, и мы приходим к предложенной Оппенгеймером² модификации первого борновского приближения.

$$f_n^\pm(\theta, \varphi) = -\frac{1}{4\pi} \left[\int U_{n0} e^{i(\mathbf{k}_0 - \mathbf{k}_n) \cdot \mathbf{r}_1} d\mathbf{r}_1 \mp \right. \\ \left. \mp \iint e^{i(\mathbf{k}_0 \mathbf{r}_1 - \mathbf{k}_n \mathbf{r}_2)} \left\{ k_n^2 - \frac{2m}{\hbar^2} \left(\frac{e^2}{r_{12}} + E_0 \right) \right\} \phi_0(\mathbf{r}_2) \phi_n^*(\mathbf{r}_1) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \right]. \quad (33)$$

Этот метод справедлив только при больших скоростях, когда второй интеграл значительно меньше первого, если только первый интеграл вообще не обращается тождественно в нуль.

Различные методы удобнее всего классифицировать, исходя из уравнений (23) и (24). Принимаемые в каждом методе допущения, а также сокращенное обозначение методов приведены в таблице I.

7. УЧЕТ ПРОМЕЖУТОЧНЫХ СОСТОЯНИЙ

В некоторых случаях необходимо принимать во внимание взаимодействие более чем двух состояний. Примером могут служить переходы между состояниями одной и той же конфигурации. Так, например, основная конфигурация $2p^4$ в OI содержит три термина: 3P , 1D , 1S (в порядке возрастания энергии). Было показано^{3, 4}, что для получения

достаточно точных значений сечений столкновений медленных электронов с атомами кислорода надо принять во внимание сильную связь между тремя указанными термами. Это особенно важно при столкновениях, приводящих к переходам между этими термами, но может оказаться существенным и для других случаев. Вообще при расчете сечений переходов между двумя термами одной конфигурации необходимо учитывать сильную связь этих термов с другими состояниями той же конфигурации. Сильно увеличивающиеся при этом расчетные трудности могут быть преодолены с помощью электронных счетных машин.

Как показал Ситон⁴, хорошее первое приближение может быть получено, если пренебречь разностью энергий между состояниями одной конфигурации. Получающиеся таким путем уравнения зачастую могут быть решены достаточно просто. Более детально это показано ниже (раздел 10.2).

Труднее учесть влияние большого числа состояний, каждое из которых дает малый вклад. Важным примером является влияние поляризации на упругое рассеяние. Если поляризация мала, а скорость не слишком велика, то удовлетворительную поправку можно получить, используя второе борновское приближение. Дальнейшее уточнение достигается с помощью вариационного метода Швингера⁵. Однако вычисление второго приближения представляет весьма трудоемкую задачу. В случае столкновений при малых энергиях, особенно для упругого рассеяния, можно использовать более простую процедуру, основанную на вариационном методе Хюльтена⁶. Примеры применения этих методов будут рассмотрены в разделе 11.

8. ОБЛАСТЬ ПРИМЕНИМОСТИ ПРИБЛИЖЕННЫХ МЕТОДОВ

Область применимости борновского приближения особенно для упругого рассеяния, хорошо известна⁷. До недавнего времени значительно меньше было известно относительно обсуждавшихся выше приближенных методов рассмотрения медленных столкновений. В последние годы в этом направлении достигнут существенный прогресс. Полученные выводы обсуждаются в разделе 12. Сейчас мы рассмотрим более детально отдельные методы.

9. ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА ИСКАЖЕННЫХ ВОЛН

9.1. Столкновение с атомами водорода — упругое рассеяние

С помощью метода искаженных волн упругое рассеяние можно рассматривать совершенно независимо от неупругого. Поэтому мы рассмотрим его в первую очередь.

Упруго рассеивающая волна F_0 определяется интегродифференциальным уравнением (29). Разложим F_0 по парциальным волнам:

$$F_0(r) = r^{-1} \sum_l f_l(r) P_l(\cos \theta). \quad (34)$$

Функции f_l должны удовлетворять уравнению

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + k_0^2 - U_{00} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] f_l^\pm \pm \int z_l(r, r') f_l^\pm(r') dr' = 0, \quad (35)$$

где

$$\alpha_l = \frac{4\pi r r'}{2l+1} \left[k_0^2 \delta_{0l} - \frac{2m}{\hbar^2} \{E_0 \delta_{0l} + e^2 \gamma_l(r, r')\} \right], \quad (36)$$

$$\gamma_l(r, r') = \frac{r'^l}{r^{l+1}} \text{ при } r > r'; \quad \gamma_l(r, r') = \frac{r^l}{r'^{l+1}} \text{ при } r < r'.$$

В принципе может быть найдено гладкое решение этого уравнения с асимптотической формой

$$f_l^\pm \sim \sin \left(k_0 r - \frac{1}{2} l \pi + \eta_l^\pm \right). \quad (37)$$

Дифференциальное сечение упругого рассеяния в этом случае имеет вид

$$I_0^\pm(\theta) = \frac{1}{4k_0^2} \left| \sum_l (2l+1) (e^{2i\eta_l^\pm} - 1) P_l(\cos \theta) \right|^2. \quad (38)$$

Таким образом, проблема сводится к определению фаз η_l^\pm .

При медленных столкновениях важны лишь фазы η_0^\pm . Например, для столкновений с атомами водорода только эти фазы могут быть порядка $\frac{\pi}{2}$. Все фазы высших порядков оказываются достаточно малыми и могут быть вычислены по теории возмущений:

$$\eta_l^\pm = -k_0 \left[\int_0^\infty r j_l(k_0 r) \left\{ r U(r) j_l(k_0 r) \pm \right. \right. \\ \left. \left. \pm \int_0^\infty \alpha_l(r, r') j_l(k_0, r') r' dr' \right\} dr \right] = \eta_{lB}^\pm, \quad (39)$$

где

$$j_l(x) = \left(\frac{\pi}{2x} \right)^{\frac{1}{2}} J_{l+\frac{1}{2}}(x).$$

Сечение $I_0(\theta)$ достаточно хорошо выражается формулой

$$I_0(\theta) = I_0^B(\theta) + \{I_0^B(\theta)\}^{\frac{1}{2}} k_0^{-1} (\sin 2\eta_0 - 2\eta_0^B) + \\ + \frac{1}{4k_0^2} [(\sin 2\eta_0 - 2\eta_0^B)^2 + (\cos 2\eta_0 - 1)^2], \quad (40)$$

где $I_0^B(\theta)$ дается первым борновским приближением. Интегродифференциальное уравнение (35) может быть решено численно методом последовательных приближений, как это впервые было выполнено Морзе и Аллисом. На рис. 1 приведены полученные ими фазы, а также фазы, полученные при пренебрежении обменом. Недавно Ситон⁹ вновь вычислил функцию η_0^\pm/k_0 при малом k_0 и показал, что результаты Морзе и Аллиса для η_0^\pm ошибочны в этой области. Исправленный ход $\eta_0^\pm(k_0)$ приведен на рис. 1. пунктиром.

Другой путь, который связан с меньшими вычислительными трудностями и допускает учет дополнительных эффектов (например, поляризации), состоит в использовании вариационного метода. Был предложен целый ряд вариантов, но наиболее широкое применение до настоящего времени нашли методы Хьюльена⁶ и Кона¹⁰.

В этих методах вычисляется интеграл вида

$$I^t = \int_0^{\infty} f_l^t(r) L f_l^t(r) dr, \quad (41)$$

где L — оператор левой части уравнения (35):

$$L = \frac{d^2}{dr^2} + k_0^2 - U_{00} - \frac{l(l+1)}{r^2} \pm \int \kappa_l(r, r') dr' \quad (42)$$

(последний член следует рассматривать как интегральный оператор).

Если f_l^t есть точное решение уравнения (35), то I^t обращается в нуль. Если же f_l^t не является точным решением, а представляет собой гладкую функцию с асимптотической формой

$$f_l^t \sim \sin \left(k_0 r - \frac{1}{2} l \pi \right) + a \cos \left(k_0 r - \frac{1}{2} l \pi \right), \quad (43)$$

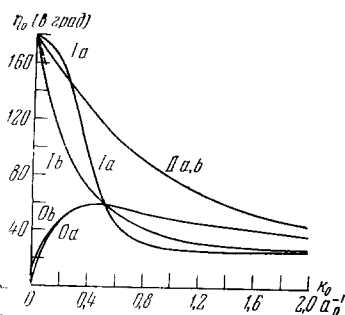


Рис. 1. Фазы η_0^{\pm} для рассеяния электронов атомом водорода. Кривые O вычислены без учета обмена. Кривые I и II — с учетом обмена (симметричный и антисимметричный случаи). a — получено точным численным интегрированием, b — получено вариационным методом Хюльтена.

то можно показать, что I^t удовлетворяет вариационному условию. Если f_l^t варьируется так, что в ее асимптотической форме (43) изменяется лишь a , то вариационное уравнение имеет вид

$$\delta \left(I^t + \frac{a}{k_0} \right) = 0. \quad (44)$$

Пробная функция f_l^t содержит, помимо a , еще ряд параметров c_1, \dots, c_n . Подставляя эту функцию в (43), получаем $I^t(c_1, \dots, c_n, a)$. Параметры c_1, \dots, c_n, a определяются уравнениями

$$\frac{\partial I^t}{\partial c_r} = 0, \quad r = 1, \dots, n; \quad \frac{\partial I^t}{\partial a} = \frac{1}{k_0}. \quad (45)$$

Так как при точных f_l^t : $a = \text{tg } \eta_l$ и $I^t = 0$, то для пробных f_l^t из (43) следует

$$\text{tg } \eta_l = I^t k_0 + a. \quad (46)$$

Изложенная процедура представляет собой метод Кона. Метод Хюльтена отличается заменой последнего из уравнений (45) условием

$$I^t = 0 \quad (47)$$

и, следовательно,

$$\text{tg } \eta_l = a. \quad (48)$$

Наличие квадратного уравнения (47), дающего два значения для η является существенным недостатком этого метода.

Для устранения указанной неопределенности необходимо добавить еще одно условие, например интегральное уравнение

$$\sin \eta_l = -k_0 \int_0^{\infty} r j_l(k_0 r) \left[r U(r) f_l(k_0 r) \pm \int_0^{\infty} \kappa_l(r, r') f_l(kr') r' dr' \right] dr. \quad (49)$$

Изложенные методы применялись для расчета η_0^\pm по (46) и (48) Мессии и Моисеевичем¹¹, которые использовали предложенные Хуангом¹² пробные функции вида

$$f_0 = \sin k_0 r + \left(a + b e^{-\frac{r}{a_0}} \right) \left(1 - e^{-\frac{r}{a_0}} \right) \cos k_0 r. \quad (50)$$

Эти функции включают, помимо a , лишь один параметр. На рис. 1 сравниваются фазы, полученные методом Хюльтена и численным решением уравнения (35)⁸. Результаты хорошо согласуются, особенно для η_0^- . Оба вариационных метода дают практически совпадающие значения для этой фазы. Однако метод Кона приводит к заметно отличному от метода Хюльтена результату для η_0^+ . Существенно, что в этом случае согласие с точными расчетами менее удовлетворительно. Поэтому сравнение данных, полученных двумя методами, представляет полезную проверку точности вариационных расчетов. В случае согласующихся результатов те и другие, по-видимому, приблизительно правильны. При наличии существенных расхождений, вероятно, следует отдавать предпочтение методу Хюльтена, однако это утверждение нуждается в дополнительной проверке.

Хотя даваемые вариационным методом фазы правильны с точностью до второго порядка, это может не иметь места для самих волновых функций. Тем не менее, они, по-видимому, представляют собой хорошее приближение для тех применений, которые будут рассмотрены в следующих разделах. В таблице I пробные функции, полученные без учета обмена, сравниваются с точными решениями. Согласие вполне удовлетворительное.

Таблица I

Систематика приближений

| Допущения в уравнениях (23), (24) | Название метода | Сокращенное*) обозначение |
|--|---|---------------------------|
| $K_{00}=K_{nn}=K_{0n}=U_{00}=U_{nn}=0$, U_{0n} —мало | Первое приближение Борна | B |
| $K_{00}=K_{nn}=U_{00}=U_{nn}=0$; U_{0n} , K_{0n} —малы | Приближение Борна—Оппенгеймера | BO |
| $K_{00}=K_{nn}=K_{0n}=0$; U_{0n} —мало | Приближение искаженных волн | DW |
| $K_{00}=K_{nn}=0$; U_{0n} и K_{0n} —малы | Приближение искаженных волн с обменом | PDE |
| U_{0n} и K_{0n} —малы | Приближение искаженных волн с обменным возмущением и обменными переходами | EPDE |
| $K_{00}=K_{nn}=K_{0n}=0$ | Приближение сильной связи без обмена | CC |
| Точные уравнения | Приближение сильной связи с обменом | ECC |

*) См. сноску на стр. 591.

Экспериментальные данные для рассеяния на атомарном водороде, по-видимому, отсутствуют (см., однако, раздел 11). Соответствующие расчеты для He, которые могут быть подвергнуты экспериментальной проверке, описаны в разделе 9.6. Роль поляризации при расчете сечений упругого рассеяния обсуждается в разделе 11.

9.2. Столкновения с атомами водорода— возбуждение 2s-уровня

При применении EPDE приближения к возбуждению 2s-уровня атома водорода необходимо определить не только функцию F_0 для движения падающего электрона в потенциальном и обменном поле нормального атома, но и функцию \mathcal{F}_n для движения рассеянного электрона в соответствующем поле возбужденного атома. Имея в виду успехи вариационных методов при определении F_0 , Эрскин и Мессе¹³ применили их для определения \mathcal{F}_n . Аналогично F_0 \mathcal{F}_n представляется в виде

$$\mathcal{F}_n = r^{-1} \sum_l f_{n,l}(r) P_l(\cos \theta). \quad (51)$$

В поле возбужденного атома искажаются лишь функции $f_{n,l}$ с $l=0$ и 1, причем искажение функции $f_{n,0}$ особенно сильно. Поэтому Эрскин и Мессе ограничивались рассмотрением возбуждения атома электронами с нулевым орбитальным моментом. Сравнением с точным решением без учета обменного возмущения ($K_{nn}=0$ в (30)) они показали, что пробная функция типа (50) в данном случае непригодна. Поэтому она была заменена функцией

$$f_{n,0}^t = \left(1 + ce^{-\frac{r}{a_0}}\right) \sin k_n r + a \left(1 - e^{-\frac{r}{a_0}}\right) \cos k_n r, \quad (52)$$

включающей, помимо a , еще один варьируемый параметр.

Необходимость перехода от (50) к (52) обусловлена тем, что поле возбужденного атома имеет значительно большую протяженность, чем поле нормального атома. Поэтому фаза η_0 в функции $f_{n,0}$ может превышать π в рассматриваемом интервале энергии (фаза η_0 падающей волны всегда меньше π).

Полученные таким образом парциальные сечения нулевого порядка приведены в таблице II. Как и выше, при расчетах с учетом обмена необходимо учитывать симметричные и антисимметричные сечения и в случае возбуждения неполяризованным электронным пучком брать их взвешенные средние значения.

Таблица II

Сравнение волновых функций $f_0(kr)$ для рассеяния электронов атомами водорода, вычисленных путем численного интегрирования и с помощью вариационного метода Хьютена (в обоих случаях без учета обмена)

| $ka_0=0,2$ | | | $ka_0=1,0$ | |
|-----------------|--|-----------------------|-----------------------------|-----------------------|
| $\frac{r}{a_0}$ | численное ¹ интегрирование | вариационный метод | численное интегрирование | вариационный метод |
| 0,2 | +0,309 | 0,309 | +0,425 | +0,421 |
| 0,4 | +0,517 | 0,519 | +0,695 | +0,701 |
| 0,6 | +0,658 | 0,664 | +0,849 | +0,864 |
| 0,8 | +0,755 | 0,764 | +0,913 | +0,933 |
| 1,0 | +0,823 | 0,834 | +0,908 | +0,926 |
| 2 | +0,968 | 0,977 | +0,238 | +0,227 |
| 3 | +0,998 | 1,000 | -0,691 | -0,703 |
| 4 | +0,979 | 0,981 | -0,981 | -0,985 |
| 5 | +0,920 | 0,921 | -0,369 | -0,370 |
| 6 | +0,824 | 0,825 | +0,583 | -0,582 |
| 7 | +0,695 | 0,696 | +0,999 | -0,999 |
| 8 | +0,538 | 0,539 | +0,496 | +0,498 |
| 9 | +0,360 | 0,361 | -0,463 | -0,461 |
| 10 | +0,168 | 0,169 | -0,996 | -0,996 |

В таблице III приведены величины сечений, вычисленные в различных приближениях. На первый взгляд из сравнения результатов, даваемых методами В и DW (без учета обмена), может показаться, что искажение обычным потенциалом несущественно. Однако совпадение величин, приведенных во втором и третьем столбцах, иллюзорно,

Таблица III

Сравнение вычисленных различными методами сечений возбуждения 2s-уровня водорода электронами с нулевым угловым моментом

| Волновое число падающего электрона k_0 (ат. ед.) | Энергия над уровнем электрона (эв) | Теоретический максимум $(1/k_0^2)$ | Сечения в единицах πa_0^2 | | | | | | | | |
|---|---------------------------------------|------------------------------------|--------------------------------|-------|--------|-----------------|--------|----------|--------|---------|-------|
| | | | Без учета обмена | | | С учетом обмена | | | | | |
| | | | | | | сим. | | антисим. | | среднее | |
| | | | B | DW | CC | BO | EPDE | BO | EPDE | BO | EPDE |
| 0,866 | 10,2 | ... | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 1,0 | 13,5 | 1,00 | 0,198 | 0,239 | 0,204 | 0,287 | 0,711 | 2,02 | 0,0316 | 1,59 | 0,178 |
| 1,2 | 19,4 | 0,694 | 0,127 | 0,118 | 0,102 | 0,011 | 0,344 | 0,668 | 0,010 | 0,503 | 0,094 |
| 1,5 | 30,4 | 0,44 | 0,0585 | 0,045 | 0,045 | 0,014 | 0,127 | 0,134 | 0,010 | 0,104 | 0,035 |
| 2,0 | 54 | 0,250 | 0,0194 | 0,014 | 0,0155 | 0,018 | 0,0255 | 0,0205 | 0,006 | 0,020 | 0,011 |

так как соответствующие амплитуды имеют противоположные знаки. Это находит свое отражение в том, что при использовании приближения ВО симметричное сечение оказывается значительно больше антисимметричного, в то время как метод EPDE приводит к противоположному результату.

Метод ВО приводит к антисимметричному сечению, которое при $k_0 a_0 = 1$ существенно превышает теоретический предел π/k_0^2 , допускаемый законом сохранения числа частиц. Приближение EPDE дает значения для обоих сечений ниже максимального. Однако даже в этом случае величина симметричного сечения составляет 0,7 от максимума при $k_0 a_0 = 1$. Это указывает на то, что при таких условиях приближение слабой связи не вполне правильно.

Бранкден и Макси¹⁴ рассчитали этот случай в приближении сильной связи без обмена (СС) путем численного решения системы дифференциальных уравнений. Результаты также приведены в таблице III. Они хорошо согласуются с результатами, полученными методом (DW) и, следовательно, обычная связь U_{on} может считаться слабой. Расчеты в приближении ЕСС до настоящего времени еще не производились, хотя они и представляют большой интерес (ср., однако, раздел 9.6). Как и в случае упругого рассеяния соответствующие экспериментальные данные отсутствуют.

9.3. Столкновения с атомами водорода — возбуждение 2p-уровня

При расчете возбуждения 2p-уровня возникают трудности, связанные с угловой зависимостью волновой функции. Задача была сформулирована Кашаба и Месси¹⁵. Волновую функцию, представляющую движение рассеянного электрона в поле атома в 2p-состоянии, можно разложить по гармоникам (которые теперь зависят от азимутального угла). Радиальные функции этого разложения являются решениями системы интегродифференциальных уравнений. После ряда допущений

относительно членов связи были получены предварительные численные результаты, которые указывают на большую роль искажений в уменьшении вклада, вносимого падающими электронами с нулевым орбитальным моментом. Это особенно важно для расчета поляризации излучения с уровня $2p$ атома водорода, возбужденного электронным ударом при энергиях вблизи порога.

9.4. Учет сильной связи между возбужденными состояниями с различными угловыми моментами

Имеющиеся данные показывают, что возбуждение $2s$ - и $2p$ -состояния водорода можно с достаточно хорошей точностью описывать в приближении метода искаженных волн. Однако следует учитывать одно дополнительное обстоятельство. $2s$ - и $2p$ -состояния рассматривались до сих пор независимо, т. е. функции \mathcal{F}_n относились к движению рассеянного электрона в поле атома в $2s$ - и $2p$ -состояниях соответственно.

Наличие орбитального вырождения, по-видимому, требует использования существенно более сложных функций, которые являются решением системы уравнений, включающих как $2s$ -, так и $2p$ -состояния. Иными словами, между этими состояниями имеет место сильная связь. В настоящее время проводятся расчеты для проверки этой точки зрения. Подобная же ситуация возникает при возбуждении атома кислорода. Однако в этом случае связаны три терма основной конфигурации, так что усложнения относятся к функциям, эквивалентным F_0 (см. раздел 10.3).

9.5. Возбуждение $2s$ -состояния He^+

Брансден и Далгарно¹⁶ вычислили сечение $2s$ -состояния He^+ методом, аналогичным тому, который использовался Эркином и Мессии для Н. Дополнительные трудности возникают благодаря наличию кулоновского поля иона и приводят к усложнению пробных функций. Было показано, что в этом случае связь существенно слабее, чем для водорода, и метод искаженных волн всегда приводит к разумным результатам, если отвлечься от орбитального вырождения.

9.6. Столкновения с гелием

Метод искаженных волн применялся Моисеевичем¹⁷ для расчета упругого рассеяния и Мессии и Моисеевичем¹⁸ для расчета возбуждения 2^1S - и 2^3S -уровней. Кроме того, Марриот¹⁹ выполнил подробное исследование ударов 2-го рода, приводящих к переходу $2^1S \rightarrow 2^3S$. Полученные результаты показывают, что метод искаженных волн хорошо описывает переходы из основного состояния, хотя, по-видимому, следует учитывать сильную обменную связь между уровнями 2^1S и 2^3S .

В случае трехэлектронной задачи полная волновая функция Ψ системы имеет вид, отличный от (22). Если обозначить три электрона индексами 1, 2, 3 и ограничиться рассмотрением упругого рассеяния и возбуждения $2S$ -уровней, то:

$$\Psi(1, 2, 3) = \sum_{\text{цикл}} \{ \phi_0(r_1, r_2) F_0(r_3) \chi^-(1, 2, 3) + \\ + \phi_1(r_1, r_2) F_1(r_3) \chi^-(1, 2, 3) + \phi_3(r_1, r_2) F_3(r_3) \chi^+(1, 2, 3) \}; \quad (53)$$

где ϕ_0 , ϕ_1 и ϕ_3 — волновые функции состояний 1^1S , 2^1S и 2^3S гелия, χ^- и χ^+ — дублетные спиновые функции:

$$\begin{aligned}\chi^-(1, 2; 3) &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\alpha_1\beta_2 - \alpha_2\beta_1) \alpha_3, \\ \chi^+(1, 2; 3) &= \frac{1}{\sqrt{6}} \{(\alpha_1\beta_2 + \alpha_2\beta_1) \alpha_1 - 2\alpha_1\alpha_2\beta_3\},\end{aligned}\quad (54)$$

а α и β — обычные одноэлектронные спиновые функции. Функция (53) соответствует дублетному состоянию и удовлетворяет принципу Паули.

Подставляя Ψ в волновое уравнение и используя свойства функций ϕ_0 , ϕ_1 , ϕ_3 , получим систему интегродифференциальных уравнений для F_0 , F_1 , F_3 . При этом нужно учитывать, что ϕ_1 , ϕ_2 , ϕ_3 известны лишь приближенно. В работе Мессии и Мойсеевича получены следующие уравнения:

$$\begin{aligned}[\nabla_3^2 + k_i^2 - U_{ii}] F_i(\mathbf{r}_3) - \int \int F_i(\mathbf{r}_1) K_{ii}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 = \\ = \sum_{j, k} \left[\alpha_{ij} \int \int F_j(\mathbf{r}_1) K_{ij}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 + U_{ij} F_j(\mathbf{r}_3) \right] \quad (55)\end{aligned}$$

где $i, j, k = 0, 1, 3$ и

$$\begin{aligned}U_{ij} &= \frac{2me^2}{\hbar^2} \int \int \phi_i^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \left(-\frac{2}{r_3} + \frac{1}{r_{13}} + \frac{1}{r_{23}} \right) \phi_j(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2, \\ K_{ij} &= [\phi_j(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) \nabla_1^2 \phi_i^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) + \phi_i^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \nabla_2^2 \phi_j(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) + \phi_i^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \nabla_3^2 \phi_j(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) + \\ &+ \frac{2me^2}{\hbar^2} \left(\frac{2}{r_1} + \frac{2}{r_2} + \frac{2}{r_3} - \frac{1}{r_{12}} - \frac{1}{r_{13}} - \frac{1}{r_{23}} + E \right) \phi_i^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \phi_j(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3)]. \quad (56)\end{aligned}$$

k_0 , k_1 , k_3 — волновые числа падающего электрона и электрона рассеянного после возбуждения состояний 2^1S и 2^3S ; $\alpha_{01} = 1$, $\alpha_{03} = \alpha_{13} = -\sqrt{3}$. Из соображений симметрии ясно, что $U_{03} = U_{13} = 0$.

Приближение искаженных волн может быть теперь получено тем же путем, как и выше. Если U_{01} , K_{01} , K_{03} , K_{13} считаются малыми, то амплитуды возбуждения состояний 2^1S и 2^3S даются выражениями, подобными (32):

$$\begin{aligned}f_j(\theta) &= -\frac{1}{4\pi} \int \mathcal{F}_j(r, \pi - \Theta) \left[U_{ji} F_i(r, \theta) + \right. \\ &\quad \left. + \alpha_{ji} \int \int K_{ji}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}) F_i(\mathbf{r}_1, \theta_1) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \right] dr, \quad (57)\end{aligned}$$

где F_0 и \mathcal{F}_j — решения уравнения (55) без правой части, имеющие асимптотическую форму (18) причем $i=0$ для F_0 и $i=1$ или 3 для \mathcal{F}_j . Заметим, что самым серьезным из сделанных выше допущений является пренебрежение величиной K_{13} , которая выражает связь состояний с почти равными энергиями. Аналогичная ситуация имела место в случае орбитального вырождения для водорода (ср. раздел 9.4). На сильную связь между 2^1S - и 2^3S - состояниями указывают цитируемые ниже расчеты сечения для перехода $2^1S - 2^3S$. Для учета этой связи необходимо при вычислении функций \mathcal{F}_1 и \mathcal{F}_3 сохранить в правой части уравнения (55) члены, содержащие K_{13} . Естественно, что при этом расчетные трудности существенно возрастают.

При упругом рассеянии электронов с энергией ниже 20 эв заметный вклад в сечение вносят лишь парциальные волны с нулевым угловым моментом. Расчеты с помощью вариационного метода с использованием пробных функций типа (50) были выполнены Моисеевичем. Его результаты хорошо согласуются с результатами Аллиса и Морзе⁸, полученными путем численного решения интегродифференциального уравнения для F_0 , а также с экспериментальными данными для полного эффективного сечения вплоть до самых низких энергий. Даже для тепловых электронов расхождение с экспериментом не слишком велико. Вычисленное предельное значение для сечения медленных электронов равно $8,6 \pi a_0^2$, в то время как эксперимент²⁰ для тепловых электронов дает $6,1 \pi a_0^2$. Чтобы проиллюстрировать роль обменного возмущения при низких энергиях, укажем, что при пренебрежении членом K_{00} вычисленное значение для сечения возрастает до $79 \pi a_0^2$, что намного выше наблюдаемой величины.

При расчете возбуждения 2^1S - и 2^3S -состояний использовались те же самые функции F_0 . \mathcal{F}_1 и \mathcal{F}_3 определялись так же, как функции \mathcal{F}^\pm для водорода. В частности, в разложении (51) пренебрегалось

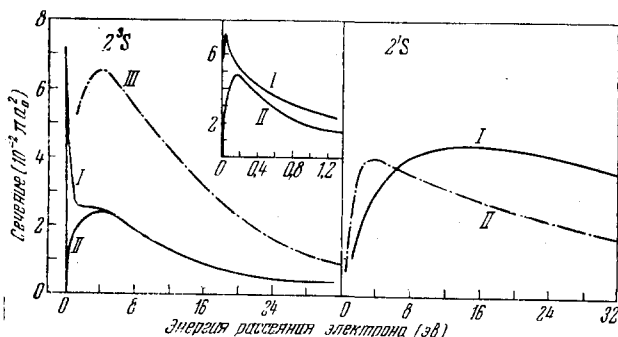


Рис. 2. Сечения возбуждения 2^3S - и 2^1S -уровней гелия электронным ударом. I—приближение EPDE, II—PDE, III—ВО (1/20). Вставка: I—EPDE, II—эксперименты Майера—Лейбница.

искажением всех волн, за исключением s -волны ($l=0$). Это допущение для гелия является несколько менее обоснованным, чем для водорода, так как в случае гелия рассеянная волна с $l=1$ испытывает заметное искажение, хотя и меньшее, чем для s -волны.

На рис. 2 приведены результаты, полученные для возбуждения уровня 2^3S . Хорошо видно уменьшение сечения для падающей волны с $l=0$ по сравнению с результатами, даваемыми методом Борна—Оппенгеймера. Имеющиеся экспериментальные данные²¹ показывают, что метод EPDE дает вполне удовлетворительные абсолютные значения сечений. Если отвлечься от области энергий, близкой к порогу, то результаты, даваемые этим методом, лишь незначительно отличаются от результатов приближения PDE. Вблизи же порога метод EPDE приводит к кривой с очень острым пиком, который отсутствует в результатах метода PDE. Этот пик возникает благодаря резонансному искажению волны \mathcal{F}_3 . При учете возмущения как обменным, так и обычным потенциалами фаза ζ_0^s s -компоненты \mathcal{F}_3 хотя и стремится к π при $k_3 \rightarrow 0$, но остается близкой к значению $\frac{3\pi}{2}$, вплоть до очень

малых k_3 , так что значение $\lim_{k_3 \rightarrow 0} \left(\frac{d\zeta_0^3}{dk_3} \right)$ весьма велико. Резонансный случай имеет место, если предел не ограничен, т. е. $\zeta_0^3 \rightarrow \frac{3\pi}{2}$. В этом случае сечение стремится к конечному пределу у порога. Острый пик указывает, что имеют место условия, близкие к резонансу. В приближении PDE $\lim_{k_3 \rightarrow 0} \left(\frac{d\zeta_0^3}{dk_3} \right)$ оказывается значительно меньше, чем в случае EPDE, и резонансный эффект не имеет места.

Трудно ожидать, что теория настолько точна, чтобы количественно описывать искажения при очень малых k_3 . Из экспериментов Майера — Лейбница^{21, 22} (см. рис. 2 вставка) однако видно, что в области порога действительно наблюдается острый пик. Независимо от того, подтвердятся ли это дальнейшими экспериментами, вряд ли можно сомневаться, что при возбуждении ряда состояний некоторых элементов вблизи порога имеют место условия, близкие к резонансу.

Результаты расчета эффективных сечений при возбуждении 2^1S -уровня представлены на рис. 2. В этом случае даже EPDE-приближение не указывает на существование резонанса вблизи порога *). Поведение фазы s -компоненты \mathcal{F}_1 дано на рис. 3.

Марриот¹⁹ подсчитал эффективное сечение удара второго рода с переходом $2^1S - 2^3S$, используя уравнение (55), в котором были отброшены все члены, содержащие F_0 . Он находит, что в этом случае имеет место сильная связь, так как для начальной энергии электронов $< 2\text{ эВ}$ метод искаженных волн приводит к сечениям деактивации s -электронами, существенно превышающим максимально возможное значение π/k_1^2 . Поэтому Марриот провел весьма трудоемкое численное решение системы интегродифференциальных уравнений для F_1 и F_3 . Результаты, которые он получил, будут обсуждены в разделе 10.3.

9. 7. Столкновения с другими атомами

Для атомов со многими электронами эффекты искажения очень сложны. Следует ожидать, что сечения возбуждения их на различные уровни зависят от энергии вблизи порога весьма нерегулярным образом. На это указывают недавно выполненные Ионжерусом и Смитом²³ эксперименты по возбуждению атомов ртути. На рис. 4 показаны некоторые из полученных ими результатов. Как указывалось выше, при возбуждении низших уровней водорода и гелия фазы, которые определяют степень искажения, не могут сколько-нибудь значительно превышать π , и то лишь для s -волны. В случае многоэлектронных атомов фазы даже для p - и d -волн могут быть значительно больше π .

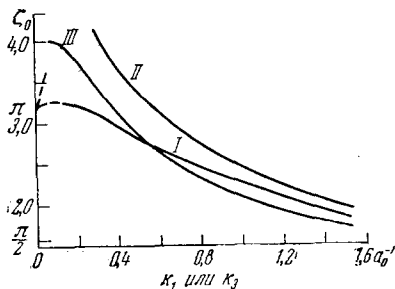


Рис. 3. Фазы нулевого порядка для движения электрона в поле возбужденного атома гелия, вычисленные вариационным методом. I — без учета обмена (атом в $2S$ -состоянии). II, III — с учетом обмена Хатом в 2^1S - и 2^3S -состояниях. Пунктиром обозначено поведение фазы вблизи порога.

*) Учет сильной связи между состояниями 2^1S и 2^3S может, однако, привести к условиям, близким к резонансу и для 2^1S -уровня.

В соответствии с этим матричные элементы в формуле (32) должны быстро изменяться с волновым числом рассеянного электрона.

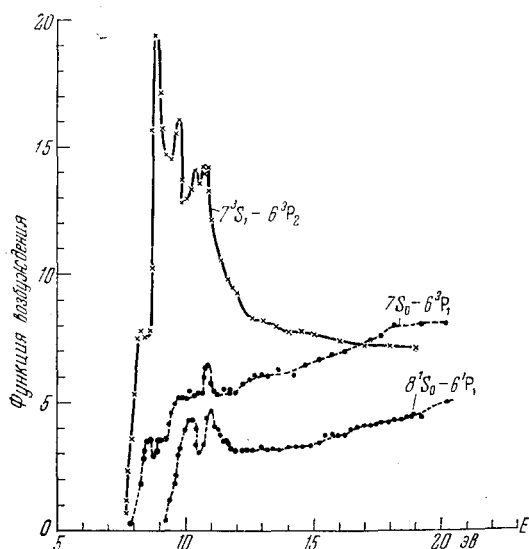


Рис. 4. Сечение возбуждения электронным ударом некоторых линий ртути согласно экспериментам Ионгернуса и Смита.

На эффекты искажения при неупругих столкновениях электронов с многоэлектронными атомами указывают также сложные колебания в угловом распределении электронов²⁴, рассеянных на большие углы при возбуждении резонансных уровней таких атомов, как аргон и ртуть. Детальными вычислениями, проделанными несколько лет назад для неона и аргона²⁵, показано, что подобная картина углового распределения действительно получается в приближении искаженных волн.

Детальные расчеты, выполненные методом искаженных волн, относятся главным образом к переходам между термами нижней конфигурации ионов O^{++} , O^+ и атома O . Поскольку в этих случаях при

возбуждении p -электронами имеет место сильная связь, мы отложим их рассмотрение до следующего раздела.

10. ВЫЧИСЛЕНИЯ С УЧЕТОМ СИЛЬНОЙ СВЯЗИ

10.1 Схематическая модель

С помощью схематической модели, которую Морзе и Аллис²⁶ использовали для изучения роли обмена при упругих столкновениях, можно получить некоторые сведения о влиянии сильной связи обменного типа. Мессе и Мор²⁷ рассматривали модель, описываемую уравнениями:

$$\left. \begin{aligned} f_0'' + (k_0^2 - U_{00}) f_0 &= \int K(r, r') f_1(r') dr', \\ f_1'' + (k_1^2 - U_{11}) f_1 &= \int K(r, r') f_0(r') dr', \end{aligned} \right\} \quad (58)$$

где

$$U_{00} = \begin{cases} -C_0 & r < r_0, \\ 0 & r > r_0, \end{cases} \quad U_{11} = \begin{cases} -C_1 & r < r_1, \\ 0 & r > r_1, \end{cases} \quad (59)$$

$$K = \frac{6me^2}{\hbar^2} \frac{Arr'}{(r_0^3 r_1^3)^{\frac{1}{2}}} \quad \text{при } r < r_0, \quad r' < r_1, \quad (60)$$

$$K = 0 \quad \text{при } r > r_0 \quad \text{или } r' > r_1.$$

Эти уравнения решаются аналитически. В результате может быть получена вероятность неупругого столкновения как функция константы связи A при любых k_0 .

Вероятность определяется как отношение сечения к максимально возможному π/k_0^2 . Приближение искаженных волн, очевидно, дает вероятность, пропорциональную A^2 . На рис. 5 показано, как ведет себя точная вероятность в тех случаях, когда метод искаженных

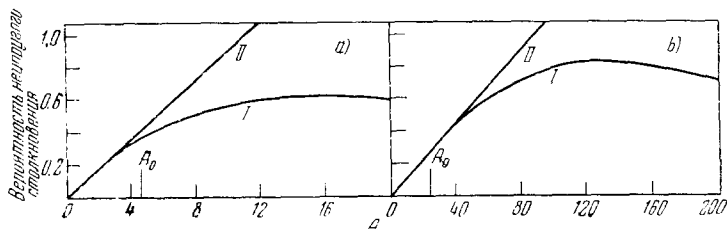


Рис. 5. Вероятность возбуждения как функция $A=9A^2(r_0r_1)^{-3}$ (схематическая модель). I—точный расчет, II—приближение EPDE. Искажения близки к искажениям: а) на водороде, б) на гелии.

волн приводит к завышенным результатам. При этом истинное сечение остается весьма близким к максимальному даже при наличии очень сильной связи. Это является полезным указанием, которое, однако, не может быть положено в основу во всех случаях.

10.2. Методы, используемые при наличии сильной связи

Имеющиеся в настоящее время методы можно разбить на три группы: а) прямое численное решение системы интегродифференциальных уравнений; б) вариационные методы; в) приближение, основанное на предположении точного резонанса.

О первом методе можно сказать немного. Ввиду громоздкости расчета возможности практического использования этого метода возникли лишь с появлением электронно-счетных машин.

Вариационные методы решения системы уравнений являются естественным обобщением методов, используемых при рассмотрении упругого рассеяния. Запишем систему уравнений в виде

$$L_{00}f_0 = L_{01}f_1, \quad (61)$$

$$L_{11}f_1 = L_{10}f_0, \quad (62)$$

где

$$L_{00}f_0 = f_0'' + (k_0^2 - U_{00})f_0 + \int K_{00}(r', r)f_0(r')dr', \quad (63)$$

$$L_{11}f_1 = f_1'' + (k_1^2 - U_{11})f_1 + \int K_{11}(r', r)f_1(r')dr',$$

$$L_{01}f_1 = U_{01}f_1 + \int K_{01}(r', r)f_1(r')dr'.$$

В общем случае $U_{01} = U_{10}^*$, $K_{01} = K_{10}^*$, но в дальнейшем мы будем предполагать, что все операторы взаимодействия действительны. Искомое решение должно иметь асимптотическую форму

$$\left. \begin{aligned} f &\sim \sin k_0 r + \alpha e^{ik_0 r}, \\ f_1 &\sim \beta e^{ik_1 r}, \end{aligned} \right\} \quad (64)$$

причем парциальное сечение возбуждения равно

$$\frac{4\pi k_1}{k_0} |\beta|^2 \frac{1}{|1 - i\alpha|^2}.$$

В своем вариационном методе Моисеевич²⁸ исходит из интеграла

$$I = \int_0^{\infty} [f_1^* (L_{00}f_0 - L_{01}f_1) + f_0^* (L_{11}f_1 - L_{10}f_0)] dr. \quad (65)$$

Вводятся пробные функции f_0' и f_1' , которые обращаются в нуль при $r=0$ и имеют асимптотическую форму (64), где, однако α_t и β_t , вообще говоря, не равны правильным значениям α и β . Эти функции содержат, кроме того, n варьируемых параметров c_1, \dots, c_n . Оптимальные значения для $\alpha_t, \beta_t, c_1, \dots, c_n$ определяются уравнениями:

$$I' = 0; \quad \frac{\partial I'}{\partial \beta_t} + 2i\beta_t^* \frac{k_1}{k_0} \frac{\partial I'}{\partial \alpha_t} = 0; \quad \frac{\partial I'}{\partial c_r} = 0 \quad (r=1, \dots, n). \quad (66)$$

Лучшие, чем α_t и β_t , приближения к α и β можно получить введением дополнительного условия, которое выполняется тождественно в случае точных функций f_0 и f_1 . Моисеевич использовал для этой цели интеграл

$$I' = \int_0^{\infty} [f_1 (L_{00}f_0 - L_{01}f_1) + f_0 (L_{11}f_1 - L_{10}f_0)] dr, \quad (67)$$

из которого определялось более точное значение

$$\beta_t' = \beta_t - \frac{I'}{k_0}. \quad (68)$$

При таком определении β_t' обеспечивается экстремальное условие $\delta\beta_t' = 0$. Указанный метод имеет то преимущество, что автоматически выполняется условие

$$\text{Im } \alpha = |\beta|^2 \frac{k_1}{k_0}, \quad (69)$$

являющееся следствием закона сохранения числа частиц.

Практическое использование этой процедуры затруднено тем, что приходится иметь дело с комплексными выражениями. Можно, однако, разработать методы, где используются одни лишь действительные числа. При этом используется тот факт, что асимптотическое поведение обращающихся в нуль в начале координат решений уравнений (61) и (62) можно задать с помощью двух фаз η и ζ и параметра λ :

$$\left. \begin{aligned} f_0 &\sim A \sin(k_0 r + \eta) + B \sin(k_0 r + \zeta), \\ f_1 &\sim \frac{k_0}{k_1} \left\{ A \lambda \sin(k_1 r + \eta) - \frac{B}{\lambda} \sin(k_1 r + \zeta) \right\}. \end{aligned} \right\} \quad (70)$$

При этом парциальное сечение возбуждения дается выражением

$$4\pi \frac{k_1}{k_0} \left(\frac{\lambda}{k_1 + k_0 \lambda} \right)^2 \sin^2(\eta - \zeta). \quad (71)$$

Вариационный принцип для определения η, ζ и λ был сформулирован Рубиновым²⁹, а также Блэттом и Биденхарном³⁰. Хотя эти методы и не используют комплексные числа, они все же слишком сложны. Кон предложил несколько более простой принцип для определения фаз η и ζ , однако его метод не дает возможности сформулировать соответствующий принцип для определения λ .

Можно воспользоваться также вариационным методом Швингера, но этот метод слишком чувствителен к выбору волновых функций,

и приводит к сложным расчетам. Он наиболее удобен в случае учета промежуточных состояний и будет более подробно рассмотрен в разделе 11.

Третий метод успешно использовался для расчета сечений возбуждения термов основных конфигураций типа p^2 , p^3 и p^4 . Он основан на том факте, что при $k_0^2 = k_1^2$, $U_{00} = U_{11}$ и $K_{00} = K_{11}$ с помощью подстановки $g^\pm = f_0 \pm f_1$ система (61), (62) разбивается на два независимых уравнения

$$(L_{00} \pm L_{01}) g^\pm = 0. \quad (72)$$

Если найдены решения этих уравнений, имеющие асимптотическую форму

$$g^\pm \sim \sin(k_0 r + \eta^\pm), \quad (73)$$

то парциальные сечения для упругого рассеяния q_{00} и возбуждения q_{01} даются выражениями:

$$q_{00} = \frac{\pi}{k_0^2} \left\{ 2 \sin^2 \eta^+ + 2 \sin^2 \eta^- - \sin^2(\eta^+ + \eta^-) \right\}, \quad (74)$$

$$q_{01} = \frac{\pi}{k_0^2} \sin^2(\eta^+ - \eta^-). \quad (75)$$

Сказанное можно обобщить на случай системы, содержащей три и более уравнений. Ситон показал, что если пренебречь некоторыми относительно малыми членами в обменном взаимодействии, то разность между отдельными термами в каждой из указанных выше конфигураций обращается в нуль. При этом система уравнений для функций F_0 , F_1 , F_2 , относящихся к этим термам, распадается на три независимых уравнения. Решение этих уравнений является хорошим первым приближением для точных уравнений (61), (62), а последующие итерации быстро сходятся.

10.3. Рассмотрение некоторых задач в случае сильной связи

Единственный случай численного решения задачи с учетом обменной связи: возбуждение перехода $2^1S - 2^3S$ в гелии — был уже рассмотрен в разделе 9.6. Отличие результатов, полученных Марриотом¹⁹, от экспериментальных данных Фелпса³¹ для электронов с тепловыми скоростями лишь незначительно превосходит ошибки измерения. Экспериментальные данные были получены при изучении спада концентрации метастабильных состояний 2^1S гелия в послесвечении газового разряда. Брансен и Макки¹⁴ решали уравнения для возбуждения перехода $1s - 2s$ водорода при пренебрежении обменной связью. Их результаты проведены в таблице III и обсуждались в разделе 9.2. Вычисления с учетом обменной связи выполняются в настоящее время.

Очень мало расчетов было проделано с помощью вариационного метода. Месси и Моисеевич³² использовали метод Моисеевича³³ для расчета возбуждения $1s - 2s$ в водороде. Ввиду громоздкости выкладок они использовали весьма простые пробные функции

$$\left. \begin{aligned} f_0' &= \sin k_0 r + \left(\alpha + b e^{-\frac{r}{a_0}} \right) (1 - e^{-\frac{r}{a_0}}) \cos k_0 r, \\ f_1' &= (1 - e^{-\frac{r}{a_0}}) \beta e^{ik_1 r}. \end{aligned} \right\} \quad (76)$$

Такие функции недостаточно удовлетворительны, так как не содержат смешанных (по падающей и рассеянной волнам) членов. Этот недостаток может оказаться существенным при наличии сильной связи. Полученные результаты значительно отличаются от результатов метода EPDE, но, быть может, являются недостаточно надежными по указанной выше причине. Последнее подтверждается тем фактом, что при пренебрежении обменом точные численные решения Брансдена и Макки лучше согласуются с методом искаженных волн, чем с вариационным методом. Для того чтобы выяснить, какой вариационный метод дает наилучшие результаты, а также оптимальный вид пробных функций, необходимо воспользоваться упрощенными уравнениями, допускающими точные решения.

Третий метод, основанный на уравнениях точного резонанса, применялся Ситоном, который выполнил подробное исследование сечений, необходимых для геофизических и астрофизических приложений.

Для возбуждения уровней основной конфигурации, когда возбуждающий электрон испытывает $p-p$ -переход имеет место очень сильная связь. Так, например, расчеты³⁴, выполненные методом PDE для переходов $^3P-^1S$ и $^3P-^1D$ в атомарном кислороде, привели к результатам, которые превышают максимально возможные сечения в 66 и 89 раз соответственно! При переходе к O^+ и O^{++} вычисленные сечения быстро убывают, но даже в последнем случае превышают максимум в 2 раза^{35, 36}. Ситон вычислял сечение возбуждения p -электроном, используя для атомов и ионов волновые функции Хартри—Фока. Волновые функции возбуждающего электрона описывались уравнениями, представляющими собой распространение уравнений Хартри—Фока на случай непрерывного спектра. Проверкой качества используемых им волновых функций может служить соотношение между фазовым сдвигом для медленных электронов и предельным значениям квантового эффекта для соответствующих спектральных серий связанных состояний. Хотя этот контроль является весьма неполным и был выполнен лишь в случае O^{++} , он все же показывает, что использованные волновые функции непрерывного спектра близки к истинным.

Вклад от парциальных волн с моментом, отличным от единицы, может быть рассчитан методом EPDE или просто PDE, поскольку для таких волн связь не является сильной и обменные эффекты относительно слабы³⁷.

Ситон использовал³⁸ полученные результаты для O^+ , O^{++} , N^+ , N^{++} при определении температуры и электронной концентрации в газовых туманностях, а также при обсуждении механизма возбуждения полярного сияния и свечения ночного неба. Персиваль и Ситон³⁹ рассмотрели некоторые характеристики последних, зависящие от сечений возбуждения $2p^33p^5P$ и $2p^33p^3P$ состояний нейтрального кислорода. Для расчета этих сечений можно использовать метод EPDE, учитывая при этом искажение падающей волны, обусловленное наличием сильной связи между термами основной конфигурации. Подобные расчеты были выполнены Персивалем⁴⁰ в приближении точного резонанса. Ошибки, вносимые этим приближением, не превышают ошибок остальной части расчета. Основная трудность, возникающая при этом, состоит в необходимости ортогонализации p -орбиталей для возбужденного и основного термов.

10.4. Сильная связь в случае оптически разрешенных переходов

Рассмотренные выше случаи сильной связи относились к переходам в пределах одной конфигурации, которые являются оптически запрещенными. Вблизи порога соответствующие сечения обычно достаточно велики, однако, при больших энергиях преобладающую роль играют оптически разрешенные переходы. Сравнение экспериментальных данных для этих переходов с результатами, полученными в борновском приближении, показывает, что хотя этот метод и дает несколько завышенные значения для сечений, ошибка остается не слишком большой даже вблизи порога. По-видимому, в большинстве случаев ошибка обусловлена не наличием сильной связи, а влиянием большого числа промежуточных состояний, хотя каждое из них может давать лишь небольшой вклад. Тем не менее Ситон указывает на ряд случаев, когда сильная связь оказывается существенной⁴¹.

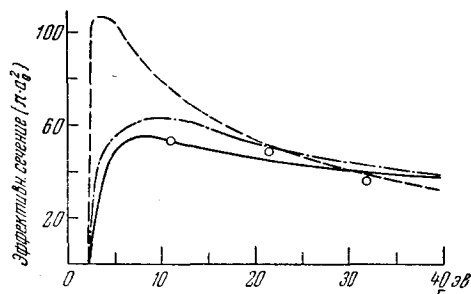


Рис. 6. Сравнение измеренных и вычисленных сечений возбуждения D -линий натрия электронным ударом: — эксперимент W. Christoph. Ann. Phys. 23, 51 (1935); G. Hatt, Zs. f. Phys. 82, 73 (1933); — вычислено в борновском приближении; — — — вычислено Ситоном.

В случае оптически разрешенных переходов взаимодействие атома с падающим электроном происходит главным образом на столь больших расстояниях, что искажение падающей волны оказывается несущественным. Это значит, что суждение о силе связи можно сделать на основе борновского приближения для парциальных сечений. Сильная связь заведомо имеет место в тех случаях, когда полученные таким образом сечения превосходят максимально допустимые. Например, при возбуждении верхнего уровня D -линии Na (потенциал возбуждения 2,10 эв) сильная связь будет при $l \leq 6$ для электронов с энергией 30 эв и при $l \leq 3$ для электронов с энергией 3 эв. Ситон дал грубую поправку к сечению возбуждения, вычисленному в борновском приближении, заменив те парциальные сечения, которые превосходят допустимый максимум, средним значением, равным половине максимального, и сохранив неизменными остальные парциальные сечения. Из рис. 6 видно, что такой прием приводит к существенно лучшему согласию расчетов с экспериментальными данными.

Другим примером наличия сильной связи может служить переход $2s-2p$ в атомарном водороде, хотя ее роль здесь значительно меньше. В случае $1s-2p$ -перехода сильная связь, по-видимому, не играет роли, а основным источником ошибок является пренебрежение промежуточными состояниями.

11. ВЫЧИСЛЕНИЯ С УЧЕТОМ ПРОМЕЖУТОЧНЫХ СОСТОЯНИЙ

Первые расчеты⁴², в которых учитывалась роль промежуточных состояний, были выполнены для упругого рассеяния электронов на атомах водорода и гелия. В этой работе использовалось второе борновское приближение, причем энергия возбуждения состояний, определяющих поляризацию атома, считалась пренебрежимо малой по сравнению

с энергией падающего электрона. Учет второго приближения приводит в согласии с экспериментом к более резкому угловому распределению рассеянных электронов при малых углах. Особенно хорошее согласие получается при энергиях от 200 до 50 эв. При более низких энергиях оказываются существенными сделанные допущения.

Аналогичные расчеты были недавно выполнены Розенштейном⁴³ для возбуждения $2p$ -уровня водорода и 2^1P -уровня гелия. Как и выше, получено лучшее согласие с экспериментом. Сечение становится меньше, причем поправка возрастает с уменьшением энергии электронов и имеет правильную величину в той области энергий, где справедливы сделанные допущения.

Уточнение результатов, даваемых вторым борновским приближением, можно получить с помощью вариационного метода Швингера. Если f_{B_1} и f_{B_2} — амплитуды рассеяния, вычисленные в первом и втором приближениях Борна, то согласно методу Швингера лучшее приближение дается выражением

$$f = \frac{f_{B_1}^2}{f_{B_1} - f_{B_2}}$$

(при пренебрежении обменными эффектами). Для упругого рассеяния электрона с волновым числом k на атоме водорода

$$\begin{aligned} f_{B_1} &= -\frac{2me^2}{\hbar^2} \iint |\psi_0(r_2)|^2 \left(\frac{1}{r_{12}} - \frac{1}{r_1} \right) e^{ik(n_0 - n)r} d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2, \\ f_{B_2} &= \frac{16m^2e^4}{\hbar^4} \iiint e^{ikn_0r_1} \psi_0(r_2) \left(\frac{1}{r_{12}} - \frac{1}{r_1} \right) \times \\ &\quad \times \left(\sum_n + \int \right) \left\{ \frac{e^{ikn|r_1 - r'_1|}}{|r_1 - r'_1|} \psi_n(r_2) \psi_n^*(r'_2) \right\} \left(\frac{1}{r'_2} - \frac{1}{r'_1} \right) \times \\ &\quad \times e^{ikn_0r'_1} \psi_0(r'_2) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 d\mathbf{r}'_1 d\mathbf{r}'_2, \end{aligned}$$

где \mathbf{n}_0 и \mathbf{n} — единичные векторы, дающие направление падающего и рассеянного электрона, ψ_0 и ψ_n — волновые функции начального и n -го возбужденного состояний. Расчеты с учетом обмена выполняются аналогично. Ньюстейн⁴⁴ применил такой метод для расчета упругого рассеяния электронов с энергиями менее 10 эв на атоме водорода. Он получил угловое распределение, существенно отличное от изотропного даже при энергии 3 эв. Однако полное сечение мало меняется при учете поляризации.

Другой путь решения задачи дают несколько видоизмененные методы Хюльтена и Кона. Одна из возможностей, предложенная Хуангом¹², состоит во введении явной зависимости пробных функций от межэлектронных расстояний. Так, для рассмотрения столкновений медленных электронов с атомами водорода пробная функция (50) преобразуется к виду

$$f_0^t = \sin k_0 r_1 + \{a + (b + cr_{12}) e^{-\frac{r_1}{a_0}}\} (1 - e^{-\frac{r_1}{a_0}}) \cos k_0 r_1,$$

содержащему координату r_{12} .

Детальные расчеты с использованием такой функции выполнены Мессии и Моисеевичем⁴⁵, результаты которых приведены на рис. 7 и в таблице IV. Из рис. 7 видно, что член с r_{12} мало влияет на антисимметричную фазу η_0^- . Этого следовало ожидать, поскольку антисимметрия волновой функции уменьшает роль отталкивания электронов.

Влияние на симметричную фазу η_0^+ значительно больше. Данные таблицы IV показывают, что учет поляризации слабо влияет на эффек-

Таблица IV

Сравнение вычисленных различными методами сечений упругого рассеяния электронов атомами водорода

| Сечения в единицах a_0^2 | | | | |
|---|--|--|--|------------------------------|
| Волновое число электрона (в единицах a_0^{-1}) | Пренебрежение обменом и по- ляризацией | Пренебрежение обменом и учет поляризации | Учет обмена и пренебрежение поляризацией | Учет обмена и поляризации |
| 0,1 | 548 | 592 | 193 | 168 |
| 0,15 | 334 | 396 | 160 | 138 |
| 0,2 | 214 | 268 | 121 | 112 |
| 0,3 | 106 | 137 | 75,9 | 77,6 |
| 0,4 | 59,6 | 78,5 | 53,0 | 55,0 |
| 0,5 | 37,6 | 49,0 | 38,9 | 41,3 |
| 0,6 | 25,4 | 32,5 | 29,1 | 30,2 |
| 0,8 | 13,2 | 16,3 | 17,0 | 17,5 |
| 1,0 | 7,76 | 9,20 | 10,3 | 10,5 |
| 1,2 | 4,93 | 5,67 | 6,42 | 6,55 |
| 1,5 | 2,78 | 3,10 | 3,44 | 3,54 |
| 2,0 | 1,29 | 1,39 | 1,48 | 1,55 |

тивные сечения при энергиях электронов выше 2 эв. Это согласуется с результатами Ньюстейна. К сожалению, имеется очень мало экспериментальных данных по упругому рассеянию совсем медленных электронов. Мы располагаем лишь результатами косвенных методов, основанных на изучении дугового разряда в водороде⁴⁶. Измеренные сечения в 2–3 раза превосходят вычисленные с учетом обмена и поляризации. Однако надежность этого результата пока под вопросом.

До настоящего времени отсутствуют расчеты вариационным методом с учетом поляризации для неупругих столкновений, также как расчеты упругого рассеяния на каких-либо атомах, кроме водорода. Следовательно, для получения достаточно определенного суждения о роли поляризационных эффектов необходима еще большая работа.

12. ЗАКЛЮЧИТЕЛЬНЫЕ ЗАМЕЧАНИЯ

Хотя данных для формулирования твердых правил пока недостаточно, можно, по-видимому, сказать, что приближение двух состояний со слабой связью во многих случаях вполне удовлетворительно описывает столкновения атомов с электронами. При этом однако необходимо учитывать искажение падающей и

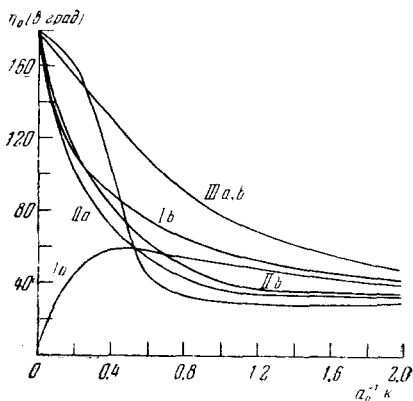


Рис. 7. Фазы нулевого порядка для упругого рассеяния электрона атомом водорода, вычисленные вариационным методом Хьюлтена. Ia—без учета обмена и поляризации, IIa и IIb—с учетом обмена (симметричный и антисимметричный случаи), IIb и IIb—с учетом обмена и поляризации (симметричный и антисимметричный случаи).

рассеянной волн не только обычным полем атома, но и обменным взаимодействием. В противном случае результаты могут оказаться совершенно неправильными.

В ряде задач приближение слабой связи оказывается непригодным. В частности, это имеет место для переходов между энергетически близкими состояниями, например, между термами одной конфигурации. При этом нужно учитывать связь между всеми энергетически близкими уровнями, даже если их число больше двух.

Роль промежуточных состояний пока остается неясной. По-видимому, они играют роль главным образом для упругого рассеяния на малые углы и для неупругих столкновений, приводящих к оптически разрешенным переходам. В последнем случае, впрочем, эффект, вероятно, не особенно велик — существенно меньше роли обменных искажений при медленных столкновениях.

Таким образом, остается широкий простор для дальнейших исследований области применимости различных приближений. Можно надеяться, что с помощью современной техники расчетов в ближайшем будущем в этом направлении будет достигнут существенный прогресс.

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. Н. Мотт и Г. Мессии, Теория атомных столкновений, 2-е издание, ИЛ, 1951, стр. 143.
2. J. R. Oppenheimer, Phys. Rev. **32**, 361 (1928).
3. Bates, Fundaminsky, Leech, Massey, Phil. Trans. Roy. Soc. A243, 93 (1953).
4. M. J. Seaton, Phil. Trans. Roy. Soc. A245, 469 (1953).
5. J. Schwinger, Неопубликованные лекции (1947).
6. L. Hulthén, Kgl. Fisiograf. Sällskap. Lund. Förh. **14**, 1 (1944).
7. W. Kohn, Rev. Mod. Phys. **26**, 292 (1954).
8. P. M. Morse, W. P. Allis, Phys. Rev. **44**, 269 (1933).
9. M. J. Seaton, Proc. Phys. Soc. (London)—в печати.
10. W. Kohn, Phys. Rev. **74**, 1763 (1948).
11. H. S. W. Massey, B. L. Moiseiwitsch, Proc. Roy. Soc. (London) A205, 483 (1951).
12. S. S. Huang, Phys. Rev. **76**, 1878 (1949).
13. G. A. Erskine, H. S. W. Massey, Proc. Roy. Soc. (London) A212, 521 (1952).
14. B. H. Bransden, A. McKie, Proc. Phys. Soc. (London)—в печати.
15. S. Khashaba, H. S. W. Massey, Proc. Roy. Soc. (London)—в печати.
16. B. H. Bransden, A. Dalgarno, Proc. Phys. Soc. (London)—в печати.
17. B. L. Moiseiwitsch, Proc. Roy. Soc. (London) A219, 102 (1953).
18. H. S. W. Massey, B. L. Moiseiwitsch, Proc. Roy. Soc. (London) A227, 38 (1954).
19. R. Marriott, Proc. Phys. Soc. (London)—в печати.
20. Phelps, Tundingsland, Brown, Phys. Rev. **84**, 559 (1951).
21. R. Dorrestein, Physica **9**, 447 (1942).
22. H. Maier-Leibniz, Zs. Phys. **95**, 499 (1935).
23. H. Jongerius, A. Smit, Physica—в печати.
24. C. B. O. Mohr, E. H. Nicoll, Proc. Roy. Soc. (London) A138, 229, 469 (1932); A142, 360, 647 (1933).
25. H. S. W. Massey, C. B. O. Mohr, Proc. Roy. Soc. (London) A146, 880 (1933).
26. P. M. Morse, W. P. Allis, Phys. Rev. **44**, 269 (1933).
27. H. S. W. Massey, C. B. O. Mohr, Proc. Phys. Soc. (London) A65, 845 (1952).
28. B. L. Moiseiwitsch, Phys. Rev. **82**, 753 (1951).
29. S. I. Rubinow, Phys. Rev. **98**, 183 (1955).
30. J. Blatt, S. Biedenharn, Rev. Mod. Phys. **24**, 258 (1952).
31. A. V. Phelps, Phys. Rev. **99**, 1307 (1955).
32. H. S. W. Massey, B. L. Moiseiwitsch, Proc. Phys. Soc. (London) A66, 406 (1953).

- 33. B. L. Moiseiwitsch, Phys. Rev. 82, 753 (1951).
 - 34. Yamanouchi, Inui, A memiya, Proc. Phys. Math. Soc. Japan 22 847 (1940).
 - 35. L. H. Aller—частное сообщение.
 - 36. M. H. Held, D. H. Menzel, Astrophys. J. 92, 408 (1940).
 - 37. M. J. Seaton, Proc. Roy. Soc. (London) A218, 400 (1953), 231, 37 (1955).
 - 38. M. J. Seaton, Monthly Notices Roy. Astron. Soc. 114, 154 (1954).
 - 39. I. C. Percival, M. J. Seaton, J. Atmos. Terrest. Phys.—в печати.
 - 40. I. C. Percival, Proc. Phys. Soc. (London)—в печати.
 - 41. M. J. Seaton, Proc. Phys. Soc. (London) A68, 457 (1955).
 - 42. H.S.W. Massey, C. B. O. Mohr, Proc. Roy. Soc. (London) A146, 880 (1930).
 - 43. M. Rothenstein, Proc. Phys. Soc. (London) A68, 173 (1955).
 - 44. M. C. Newstein, M. I. T. Technical Report 67, 763 (1954).
 - 45. H.S.W. Massey, B. L. Moiseiwitsch, Proc. Roy. Soc. (London) A205, 483 (1951).
 - 46. Maerler, Peters, Schenk, Zs. Phys. 140, 115 (1955).
-