

С. Н. Федоткин*

Институт ядерных исследований НАН Украины, Киев, Украина

*Ответственный автор: snfedotkin@gmail.com

ПОПРАВКИ К ВОЛНОВЫМ ФУНКЦИЯМ АТОМНЫХ ЭЛЕКТРОНОВ В ПОТЕНЦИАЛЕ ТОМАСА - ФЕРМИ

В рамках теории возмущений вычислены поправки к волновым функциям атомных электронов в водородо-подобном атоме посредством использования потенциала Томаса - Ферми. В этом подходе приближенно учитывается взаимодействие электронов в атоме. Поправки к волновым функциям важны для описания различных процессов с участием электронов в многоэлектронных атомах. В предложенном подходе рассчитано сечение фотоэффекта на L-оболочке атома с учетом примеси состояний K-оболочки.

Ключевые слова: фотоэффект, потенциал Томаса - Ферми, атомная оболочка.

1. Введение

Потенциал статистической модели Томаса - Ферми успешно применялся для решения различных задач атомной и ядерной физики с участием многих частиц [1 - 4]. Использование этого потенциала позволяет в некотором приближении учесть взаимодействия электронов атомной оболочки между собой. Из-за чрезвычайной сложности этих задач обычно они решаются только численно, например с помощью самосогласованного метода Хартри - Фока [5]. Кроме того, для решения многоэлектронной задачи применялись методы R-матрицы [6] и приближение сильной связи [7]. В работах [8] потенциал Томаса - Ферми применялся для расчета энергий атомных уровней и вычисления полного сечения фотоэффекта для всех электронов атомной оболочки. Предложенный нами подход позволяет значительно упростить расчеты в случаях, когда необходимо учитывать межэлектронное взаимодействие. Кроме того, в этом подходе удастся представить результаты в аналитическом виде.

В настоящей работе, используя потенциал модели атома Томаса - Ферми, в рамках теории возмущений вычисляются поправки к волновым функциям атомных электронов, связанные с учетом их взаимодействия между собой. Вычисления выполнены в приближении Тейтца [9] для среднего потенциала, в котором движутся атомные электроны. В этом подходе удастся получить простые выражения для коэффициентов ряда теории возмущений, что является определенным преимуществом по сравнению с использованием более точных, но в то же время и более громоздких численных расчетов типа Хартри - Фока. Полученные поправки могут быть важны для описания различных процессов, происходя-

щих в электронной оболочке в атомах с достаточно большим числом электронов. В частности, для описания вероятностей электромагнитного излучения или внутренней конверсии.

Ниже предложенный подход был использован для расчета поправок к сечению фотоэффекта на L-оболочке атома.

2. Поправки к волновым функциям в потенциале Томаса - Ферми

Определим поправки к волновым функциям электронов в кулоновском поле ядра за счет возмущения $\Delta V(r)$, обусловленного использованием потенциала Томаса - Ферми. Волновая функция $\Psi_{n0}^{(1)}(r)$ с учетом поправок первого порядка из-за возмущения имеет вид [10]

$$\Psi_{n0}^{(1)}(r) = \Psi_{n0}(r) + \sum_{k \neq n} a_{kn} \Psi_{k0}(r), \quad (1)$$

где коэффициенты a_{kn} определяются как

$$a_{kn} = \frac{\langle k | \Delta V(r) | n \rangle}{(E_n - E_k)}, \quad (2)$$

а $\Psi_{k0}(r)$ и E_k - волновые функции и энергии невозмущенных состояний электронов в кулоновском поле ядра. В дальнейшем будут рассматриваться волновые функции s-состояний, поскольку нас будут интересовать поправки к состоянию $\Psi_{20}(r)$, а возмущение $\Delta V(r)$ является сферически симметричным. Однако рассмотренный подход легко обобщить на случай произвольной функции. Волновая функция $\Psi_{n0}(r)$ в этом случае имеет вид ($\hbar = c = 1$)

$$\Psi_{n0}(r) = -\frac{\eta_n^{3/2}}{\sqrt{\pi}} \frac{e^{-\eta_n r}}{nn!} L_n^1(2\eta_n r), \quad (3)$$

где

$$\eta_n = \eta/n \quad \eta = Zm\alpha, \quad (4)$$

а $L_n^1(2\eta_n r)$ - присоединенный полином Лагерра, Z - заряд ядра, m - масса электрона, α - постоянная тонкой структуры [11].

Определим поправку к кулоновскому потенциалу ядра $\Delta V(r)$, обусловленную использованием потенциала Томаса - Ферми. Потенциал, определяющий в подходе Томаса - Ферми совместное действие на электрон кулоновского поля ядра с зарядом Z и остальных электронов атомной оболочки, имеет вид [3]

$$V_{TF}(r) = -\frac{\alpha}{r} - \frac{\alpha(Z-1)}{r} \varphi(x), \quad (5)$$

где функция $\varphi(x)$ является решением уравнения Томаса - Ферми [1, 2]

$$\frac{d^2 \varphi(x)}{dx^2} = \frac{\varphi(x)^{3/2}}{\sqrt{x}}, \quad (6)$$

$$x = \frac{r}{a}, \quad a = \left(\frac{9\pi^2}{128(Z-1)} \right)^{1/3} a_B.$$

Здесь a_B - боровский радиус. Уравнение (5) для потенциала $V_{TF}(r)$ можно тождественно преобразовать как

$$V_{TF}(r) = -\frac{\alpha Z}{r} + \frac{\alpha(Z-1)}{r} [1 - \varphi(x)], \quad (7)$$

где первый член описывает кулоновское поле ядра $V_c(r)$, а второй можно рассматривать как поправку, обусловленную учетом взаимодействия электронов в подходе Томаса - Ферми. Этот член обозначим

$$\Delta V(r) = \frac{\alpha(Z-1)}{r} [1 - \varphi(x)]. \quad (8)$$

Воспользуемся достаточно точной аппроксимацией $\varphi_0(x)$ функции $\varphi(x)$, предложенной Тайтцем в работе [9]

$$\varphi(x) \approx \varphi_0(x) = \frac{1}{(1 + 2\gamma \eta r)^2}, \quad (9)$$

где

$$\gamma = 0.30285 \frac{(Z-1)^{1/3}}{Z}. \quad (10)$$

Таким образом, возмущение $\Delta V(r)$, определяющее согласно формулам (1) и (2) поправки к

волновым функциям электронов в кулоновском поле ядра, вычисляется с помощью выражений (8) - (10).

3. Сечение фотоэффекта для s-электрона L-оболочки

Как хорошо известно, сечение фотоэффекта для электронов K-оболочки почти на порядок превышает сечение на L-оболочке. Поэтому представляет интерес вопрос, насколько изменится величина сечения фотоэффекта на L-оболочке, если учесть, что за счет возмущения $\Delta V(r)$ волновая функция электрона в состоянии с $n = 2$ будет содержать вклад волновой функции K-оболочки с $n = 1$.

Дифференциальное сечение фотоэффекта определяется выражением [12]

$$d\sigma_{fi} = 2\pi m |H_{fi}|^2 p d\Omega, \quad (11)$$

где матричный элемент имеет вид

$$H_{fi} = \langle \Psi_f(r) | V_e | \Psi_i(r) \rangle, \quad (12)$$

$$V_e = \frac{ie}{m} \sqrt{\frac{2\pi}{\omega}} (\mathbf{e} \nabla) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}. \quad (13)$$

Здесь \mathbf{k} и \mathbf{e} - волновой вектор и вектор поляризации падающего на атом фотона соответственно, а $\omega = k$ - его энергия.

Рассмотрим случай, когда энергии падающих на атом фотонов находятся в интервале

$$|E_i| \ll \omega \ll m, \quad (14)$$

где $|E_i|$ - энергия связи электрона в состоянии $\Psi_i(r)$. Волновые функции начальных состояний $\Psi_{10}(r)$ и $\Psi_{20}(r)$ согласно определению (3) имеют вид

$$\Psi_{10}(r) = \sqrt{\frac{\eta^3}{\pi}} e^{-\eta r}, \quad \Psi_{20}(r) = \sqrt{\frac{\eta_2^3}{\pi}} e^{-\eta_2 r} (1 - \eta_2 r), \quad (15)$$

а конечное состояние электрона $\Psi_f(r)$ представляется в виде плоской волны

$$\Psi_f(r) = \frac{e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}}}{(2\pi)^{3/2}}, \quad (16)$$

где \mathbf{p} - импульс вылетевшего электрона.

Сечения фотоэффекта для s-электронов K- и L-оболочек (15) в рассмотренном приближении (14) имеют следующий вид [12]:

$$\sigma_{10} = \frac{16\sqrt{2}}{3} \pi r_0^2 Z^5 \alpha^4 \left(\frac{m}{\omega}\right)^{7/2}, \quad \sigma_{20} = \frac{1}{8} \sigma_{10}. \quad (17)$$

Поскольку сечение σ_{10} значительно превышает по величине σ_{20} , то представляет интерес следующий вопрос: как изменится величина сечения σ_{20} , если учесть, что волновая функция начального состояния $\Psi_{20}(r)$ содержит примесь волновой функции $\Psi_{10}(r)$ из-за возмущения $\Delta V(r)$? Вклад других, более отличающихся по энергии и квантовому числу n , состояний в сумму (1) будет значительно меньше. В этом случае волновую функцию начального состояния можно приближенно представить в следующем виде:

$$\Psi_{20}^{(1)}(r) \approx \Psi_{20}(r) + a_{12} \Psi_{10}(r). \quad (18)$$

Коэффициент a_{12} определяется в первом порядке теории возмущений выражением

$$a_{12} = \frac{\langle \Psi_{10}(r) | \Delta V(r) | \Psi_{20}(r) \rangle}{(E_2 - E_1)}. \quad (19)$$

Тогда сечение фотоэффекта $\sigma_{20}^{(1)}$ задается выражением (11), где в качестве H_{fi} стоит матричный элемент H'_{f2} , имеющий вид

$$H'_{f2} = \langle \Psi_f(r) | V_e | \Psi_{20}^{(1)}(r) \rangle. \quad (20)$$

С учетом приближений (14) для матричного

$$J_{k2} = \int_0^\infty dy y e^{-y} L_2^1\left(\frac{2ky}{k+2}\right) L_k^1\left(\frac{4y}{k+2}\right) \left[1 - \left(1 + \frac{4\gamma k}{k+2} y\right)^{-2}\right]. \quad (25)$$

В случае $k = 1$, используя соотношения (24) и (25), получаем

$$a_{12} = \frac{8\sqrt{2}}{27} \frac{(Z-1)}{Z} \int_0^\infty dy y e^{-y} L_2^1\left(\frac{2y}{3}\right) L_1^1\left(\frac{4y}{3}\right) \left[1 - \left(1 + \frac{4\gamma}{3} y\right)^{-2}\right]. \quad (26)$$

Интегралы J_{k2} (25) вычисляются аналитически для фиксированного k , однако они имеют громоздкий вид и поэтому здесь не приводятся. Коэффициент a_{12} является малой величиной порядка 10^{-2} для достаточно больших зарядов Z и поэтому, оставляя в выражении для сечения (23) главные члены, получаем окончательное выражение

$$\sigma_{20}^{(1)} \approx \sigma_{20} (1 + \delta), \quad (27)$$

элемента H'_{f2} получено выражение

$$H'_{f2} = H_{f2} + a_{12} H_{f1} = \frac{4e}{m} \frac{\mathbf{e}\mathbf{p}}{\sqrt{\omega\pi\eta^3}} \left[\frac{4\sqrt{2} \eta_2^4 (\eta_2^2 - q^2)}{(\eta_2^2 + q^2)^3} - \frac{a_{12} \eta^4}{(\eta^2 + q^2)^2} \right], \quad (21)$$

где

$$\mathbf{q} = (\mathbf{k} - \mathbf{p}). \quad (22)$$

Введем угол θ между векторами \mathbf{k} и \mathbf{p} , а также угол φ между плоскостями $(\mathbf{k}\mathbf{p})$ и $(\mathbf{k}\mathbf{e})$ и направим ось z вдоль вектора \mathbf{q} . Интегрируя по всем направлениям вылета электронов, получаем для полного сечения фотоэффекта $\sigma_{20}^{(1)}$ выражение

$$\sigma_{20}^{(1)} = \sigma_{20} \left(1 + a_{12} \frac{8}{\sqrt{2}} + 8a_{12}^2 \right), \quad (23)$$

где второй и третий слагаемые в скобках определяют, согласно формуле (18), вклад примеси состояния $\Psi_{10}(r)$. Рассчитаем коэффициенты теории возмущений a_{kn} (2) для произвольного k и $n = 2$, используя в качестве возмущения величину $\Delta V(r)$ (8). В этом случае для a_{k2} получено выражение

$$a_{k2} = -8\sqrt{2} \frac{(Z-1)}{Z} \frac{1}{\sqrt{k} k!(k+2)^3 (k-2)} J_{k2}, \quad (24)$$

где

$$\delta = a_{12} \frac{8}{\sqrt{2}}. \quad (28)$$

Приведем значения δ для различных зарядов Z .

Z	20	25	30	35	40	50	60
δ	0,097	0,078	0,064	0,054	0,047	0,037	0,030

Из расчетов видно, что учет примеси состояний К-оболочки несколько увеличивает сечение фотоэффекта, однако это увеличение с ростом заряда ядра постепенно становится меньше.

Вклад примеси состояния $\Psi_{10}(r)$ при расчете сечения фотоэффекта оказался незначительным.

4. Выводы

Таким образом, используя потенциал статистической модели атома Томаса - Ферми, в рамках теории возмущений вычислены поправки к волновым функциям атомных электронов, связанные с учетом их взаимодействия между собой. При этом возмущающим потенциалом служит разность между потенциалом Томаса - Ферми и кулоновским потенциалом ядра. Вычисления выполнены в приближении Тейтца для среднего потенциала, в котором движутся атомные электроны. В этом подходе получены простые выражения для коэффициентов ряда теории возмущений, которые могут быть вычислены аналитически, что является определенным преимуществом по сравнению с использованием более

точных, но в то же время и более громоздких самосогласованных численных расчетов. Полученные поправки могут быть использованы для более корректного описания различных процессов, происходящих в электронных оболочках атомов с достаточно большим зарядом. В частности, для описания вероятностей электромагнитных переходов или внутренней конверсии.

Предложенный подход был использован для расчета поправок к сечению фотоэффекта на L-оболочке атома. Учет примеси состояний K-оболочки в рассмотренном приближении увеличивает сечение процесса не более, чем на 10%. Однако при рассмотрении некоторых других процессов, например внутренней конверсии, наличие сильного запрета при переходах между некоторыми состояниями может значительно повысить роль состояний, примешивающихся к исходному.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. L.H. Thomas. The calculation of atomic fields. *Math. Proc. Camb. Phil. Soc.* 23(5) (1927) 542.
2. E. Fermi. Statistical method to determine some properties of atoms. *C. Acc. Lincei* 6 (1927) 602; Eine statistische Methode zur Bestimmung einiger Eigenschaften des Atoms und ihre Anwendung auf die Theorie des periodischen Systems der Elemente. *Z. Phys.* 48(1-2) (1928) 73.
3. P. Gombas. *Die Statistische Theorie des Atoms und ihre Anwendungen* (Wien: Springer-Verlag, 1949) 399 p.
4. R.J. Latter. Atomic Energy Levels for the Thomas-Fermi and Thomas-Fermi-Dirac Potential. *Phys. Rev.* 99(2) (1955) 510.
5. C.F. Fischer. *The Hartree - Fock Method for Atoms* (N.Y., London: John Wiley & Sons, 1977).
6. *Electronic and Atomic Collision*. Ed. by G. Watel, P.G. Burke (North-Holland, Amsterdam, 1978) 201 p.
7. K. Smith, R.J.W. Henry, P.G. Burke. Scattering of Electrons by Atomic Systems with Configurations $2p^q$ and $3p^q$. *Phys. Rev.* 147 (1966) 21.
8. С.Н. Федоткин Сечение фотоэффекта, усредненное по всем атомным электронам, *Ядерна фізика та енергетика* 17(3) (2016) 226; Расчет энергий состояний атомов в приближении Томаса - Ферми. *Ядерна фізика та енергетика* 18(3) (2017) 215.
9. T. Tietz. Simple Analytical Eigenfunctions of Electrons in Thomas - Fermi Atoms. *Zs. Naturforsch.* 23a (1968) 191.
10. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. *Квантовая механика* (М.: Наука, 1974).
11. H.A. Bethe, E.E. Salpeter. *Quantum Mechanics of One- and Two-Electron Atoms* (Berlin-Göttingen-Heidelberg: Springer-Verlag, 1957) 562 p.
12. W. Heitler. *Quantum Theory of Radiation* (London: Oxford University Press, 1954) 453 p.

С. М. Федоткін*

Інститут ядерних досліджень НАН України, Київ, Україна

*Відповідальний автор: snfedotkin@gmail.com

ПОПРАВКИ ДО ХВИЛЬОВИХ ФУНКЦІЙ АТОМНИХ ЕЛЕКТРОНІВ У ПОТЕНЦІАЛІ ТОМАСА - ФЕРМІ

У рамках теорії збурень обчислено поправки до хвильових функцій атомних електронів у водневоподібному атомі за допомогою використання потенціалу Томаса - Фермі. У цьому підході наближено враховується взаємодія електронів в атомі. Поправки до хвильових функцій електронів важливі для опису різних процесів за участю електронів у багатоелектронних атомах. У запропонованому підході розраховано переріз фотоэффекту на L-оболонці атома з урахуванням домішки станів K-оболонки.

Ключові слова: фотоэффект, модель Томаса - Фермі, атомна оболонка.

CORRECTIONS TO THE WAVE FUNCTIONS OF ATOMIC ELECTRONS IN THE POTENTIAL OF THOMAS - FERMI

Corrections to the wave functions of atomic electrons in hydrogen-like atom are calculated by using the Thomas - Fermi potential in the framework of perturbation theory. In this approach the interaction of electrons in atom is approximately taken into account. Corrections to wave functions are important for describing various processes involving electrons in multielectronic atoms. Cross sections of the photoelectric effect on the L-shell of the atom are calculated in the proposed approach with impurity for the admixture of K-shell states.

Keywords: photoeffect, Thomas - Fermi model, atomic shell.

REFERENCES

1. L.H. Thomas. The calculation of atomic fields. *Math. Proc. Camb. Phil. Soc.* 23(5) (1927) 542.
2. E. Fermi. Statistical method to determine some properties of atoms. *C. Acc. Lincei* 6 (1927) 602; Eine statistische Methode zur Bestimmung einiger Eigenschaften des Atoms und ihre Anwendung auf die Theorie des periodischen Systems der Elemente. *Z. Phys.* 48(1-2) (1928) 73.
3. P. Gombas. *Die Statistische Theorie des Atoms und ihre Anwendungen* (Wien: Springer-Verlag, 1949) 399 p.
4. R.J. Latter. Atomic Energy Levels for the Thomas-Fermi and Thomas-Fermi-Dirac Potential. *Phys. Rev.* 99(2) (1955) 510.
5. C.F. Fischer. *The Hartree - Fock Method for Atoms* (N.Y., London: John Wiley & Sons, 1977).
6. *Electronic and Atomic Collision*. Ed. by G. Watel, P.G. Burke (North-Holland, Amsterdam, 1978) 201 p.
7. K. Smith, R.J.W. Henry, P.G. Burke. Scattering of Electrons by Atomic Systems with Configurations $2p^q$ and $3p^q$. *Phys. Rev.* 147 (1966) 21.
8. S.N. Fedotkin. Cross-section of the photoeffect averaged over the atomic electrons, *Yaderna Fizyka ta Energetyka (Nucl. Phys. At. Energy)* 17(3) (2016) 226. (Rus); Calculation of the atomic states energies in the Thomas - Fermi approximation. *Yaderna Fizyka ta Energetyka (Nucl. Phys. At. Energy)* 18(3) (2017) 215. (Rus)
9. T. Tietz. Simple Analytical Eigenfunctions of Electrons in Thomas - Fermi Atoms. *Zs. Naturforsch.* 23a (1968) 191.
10. L.D. Landau, E.M. Lifshits. *Quantum Mechanics* (Moskva: Nauka, 1974). (Rus)
11. H.A. Bethe, E.E. Salpeter. *Quantum Mechanics of One- and Two-Electron Atoms* (Berlin-Gottingen-Heidelberg: Springer-Verlag, 1957) 562 p.
12. W. Heitler. *Quantum Theory of Radiation* (London: Oxford University Press, 1954) 453 p.

Надійшла 13.07.2018

Received 13.07.2018