

ОСИЛЛЯЦИОННАЯ ПОПРАВКА К АТОМНОМУ ФОРМФАКТОРУ

Г. В. Шатаковская

УДК 539.182

Вычисляется поправка к атомному формфактору в статистической модели (за счет оболочечных осцилляций плотности), которая существенно улучшает результаты статистического метода. Используется ранее полученное выражение для осцилляционной поправки к статистической плотности.

В настоящей работе определяется влияние пространственных осцилляций электронной плотности в атоме на атомный формфактор $F(\vec{q})$ для рассеяния быстрых частиц на атомах

$$F(\vec{q}) = \int d\vec{r} \rho(\vec{r}) \exp \left\{ - \frac{1}{\hbar} \vec{q} \vec{r} \right\}. \quad (I)$$

Здесь \vec{q} - переданный импульс, $|\vec{q}| = 4\lambda \sin \theta / \lambda$, 2θ - угол рассеяния, $\rho(\vec{r})$ - электронная плотность в атоме. Получено в квазиклассическом приближении аналитическое выражение для осцилляционной поправки к статистическому формфактору.

Как известно, вычисление плотности и атомного формфактора методом Хартри-Фока /1/ (ХФ) приводит к удовлетворительному согласию с экспериментом /2/, однако соответствующие расчеты сложны, особенно в случае многоэлектронных атомов. Статистический метод Томаса-Ферми-Дирака (ТФД) существенно упрощает расчеты, но позволяет описать электронную плотность и соответственно атомный формфактор /3/ лишь усредненно, не передавая осцилляций, связанных с оболочечными эффектами.

В работе /4/ было показано, что приближенное описание осцилляций плотности возможно в рамках квазиклассического приближения

$\xi = \hbar/p_F L \ll 1$ *), и что осцилляционная поправка к статистической электронной плотности в атоме при равной нулю температуре выражается через характеристики классического движения электрона с энергией Ферми (см. формулу (76) в работе /4/).

Подставляя указанное выражение (76) /4/ в формулу (I) и интегрируя по r методом стационарной фазы, что возможно в силу условия квазиклассичности, получаем в нижшем по ξ приближении

$$F_{\text{осц}}(\bar{q}) = \frac{\varphi(r_0)}{r_0 q^2} \sqrt{\left| \pi \hbar \left| \frac{dp_F}{dr} \right| \right|_{r_0}} \cos \left[\frac{1}{\hbar} \left(2 \int_0^r p_F dr - q r \right) - \frac{\pi}{4} \right], \quad (2)$$

где

$$\varphi(r) = \frac{\text{coses}(\pi \delta / \Delta) - \text{coses}(\pi \tau / T)}{T \delta - \tau \Delta},$$

$$\tau = \int_r^R dr/p_F, \quad T = \int_0^R dr/p_F, \quad \delta(r) = \int_0^r dr/r^2 p_F, \quad \Delta = \int_0^R dr/r^2 p_F,$$

R - точка поворота, перечеркнутый интеграл \int означает конечную часть соответствующего выражения /4/ (расходящаяся на нижнем пределе вычитается); $r_0 = r_0(q)$ - действительное решение уравнения $p_F(r) = q/2$.

Формула (2) справедлива для ионов и атомов с конечным граничным радиусом. Если же атом простирается до бесконечности, как это имеет место в модели Томаса-Ферми (ТФ) для нейтрального атома, то удобно для осцилляционной поправки к электронной плотности использовать вместо (76) /4/ следующую формулу:

$$F_{\text{осц}}(\bar{r}) = \frac{1}{4\pi^2 r^2 \hbar} \int_0^{p_F^2 r^2} \frac{d\lambda^2}{p_F} \left[\cos \frac{2}{\hbar} \left(\int_{R_\lambda}^r p_{F\lambda} dr' + \pi \lambda \right) \right] \left/ \int_{R_\lambda}^r dr' / p_{F\lambda} \right].$$

*) Здесь $p_F = \sqrt{2m(\epsilon_F - U(\bar{x}))}$ - граничный импульс, m - масса электрона, ϵ_F - энергия Ферми, L - характерная длина, на которой $p_F(\bar{x})$ и $U(\bar{x})$ меняются заметным образом. Внутри атома $p_F \sim Z^{2/3} \hbar/a_0$, $L \sim a_0 Z^{-1/3}$, $\xi \sim Z^{-1/3}$, где a_0 - боровский радиус, Z - число электронов в атоме.

Здесь $p_{F\lambda} = \sqrt{p_F^2(r) - \lambda^2/r^2}$ - радиальный импульс, $\lambda = \hbar(1 + 1/2)$, l - орбитальное квантовое число, R_λ - точка поворота ($p_{F\lambda}(R_\lambda) = 0$). (Эта формула в работе /4/ является промежуточной.) Подставляем это выражение в (1), меняем порядок интегрирования по r и по λ^2 и вычисляя интегралы методом стационарной фазы, получаем в низшем по ξ приближении

$$F_{\text{осц}}(\bar{q}) = \frac{\sqrt{2}}{r_0 q^2} \times$$

$$\times \frac{\sin \left[\frac{1}{\hbar} \Phi_-(r_0, \lambda_0) + \frac{\pi}{4} \left(\text{sign} \frac{dp_{F\lambda}}{dr} \Big|_{r_0, \lambda_0} + \text{sign} \frac{d^2 \Phi_-}{d(\lambda^2)^2} \Big|_{r_0, \lambda_0} \right) \right]}{\sqrt{\left| \frac{dp_{F\lambda}}{dr} \right| \left| \frac{d^2 \Phi_-}{d(\lambda^2)^2} \right|_{r_0, \lambda_0} \int_{R_\lambda}^{r_0} dr/p_{F\lambda_0}}, \quad (3)$$

$$\Phi_-(r, \lambda) = qr - 2 \int_{R_\lambda}^r p_{F\lambda} dr' - 2\pi\lambda,$$

где r_0 и λ_0 определяются из условий

$$p_{F\lambda}(r) = q/2, \quad \int_{R_\lambda}^{r_0} dr/r^2 p_{F\lambda} = 0.$$

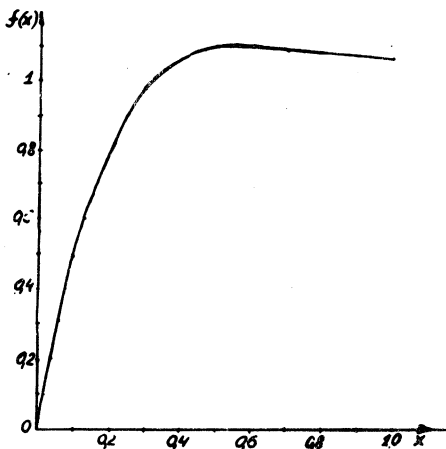
Конкретные расчеты проводились для нейтрального атома в модели ТФ, причем в качестве атомного потенциала использовался потенциал Титца /5/. Вычисления по формуле (3) с этим потенциалом дают (в атомных единицах)

$$F_{\text{осц}}(q) = - \frac{\cos 1,82Z^{1/3}(\pi - x)}{f(x)},$$

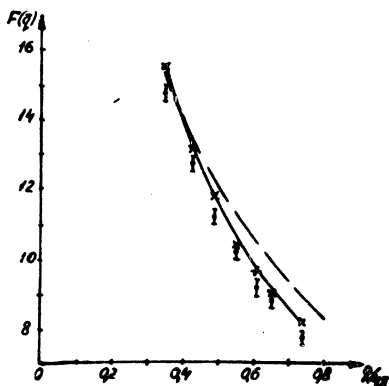
где $x = q/1,12Z^{2/3}$, а универсальная функция $f(x)$ выражается через элементарные функции

$$f(x) = \frac{12\pi}{(1-x^2)^2} \left[\sqrt{1-x^2} \left(\frac{1}{1-x^2} - \frac{2}{3} \right) \arccos - 1 \right]. \quad (4)$$

График $f(x)$ изображен на рис. 1. Область применимости выражения (4) по q и по x определяется неравенствами



Р и с. 1. График функции $f(x)$

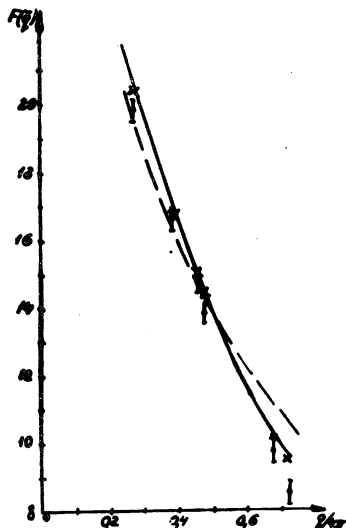


Р и с. 2. Атомный формфактор $F(q)$ для железа ($Z = 26$), вычисленный методами: Хартри-Фока - сплошная линия, Томаса-Ферми - пунктирная линия, Томаса-Ферми с обменной поправкой - крестики. Экспериментальные данные - кружки.

$$1,2Z^{1/3} < q < 1,1Z^{2/3},$$

$$1,1Z^{-1/3} < z < 1$$

Результаты расчетов по формуле (4) для железа и меди даны на рис. 2 и 3 (кривая В) вместе с экспериментальными данными /2/.



Р и с. 3. Атомный формфактор $F(q)$ для меди ($Z = 29$), вычисленный методами: Хартри-Фока - сплошная линия, Томаса-Ферми - пунктирная линия, Томаса-Ферми с обменной поправкой - крестики. Экспериментальные данные - кружки.

расчетами по методу ТФ /3/ и по методу ХФ /1/. Видно, что обменная поправка заметно улучшает результаты метода ТФ.

Автор выражает благодарность Д. А. Киранцу за руководство и постоянный интерес к работе, а также Л. А. Вайнштейну, И. И. Собельману и участникам руководимого ими семинара за обсужденные работы.

Поступила в редакцию
5 февраля 1973 г.

Л и т е р а т у р а

1. International Tables for X-ray Crystallography, v.111, Kynoch Press, Erlang, 1962.
2. B. W. Batterman, D. R. Chipman. Phys. Rev., 122, 68 (1961).
R. I. Weiss: X-Ray determination of electron distributions, Amsterdam, 1966.
3. L. H. Thomas, K. Umeda. J. Chem. Phys., 26, 293 (1957).
4. Д. А. Куржниц, Г. В. Шпатаковская. ИЭТФ, 62, 2082 (1972).
5. T. Tietz. J. Chem. Phys., 22, 2094 (1954).