

01;02

## Упругое рассеяние электрона на отрицательном ионе лития

© В.В. Семенихина, В.К. Иванов, К.В. Лапкин

Санкт-Петербургский государственный политехнический университет,  
195251 Санкт-Петербург, Россия  
e-mail: ivanov@tuexph.stu.neva.ru

(Поступило в Редакцию 20 мая 2004 г. В окончательной редакции 31 августа 2004 г.)

В рамках теории многих тел получены дифференциальное и полное сечения упругого рассеяния медленных электронов на отрицательном ионе лития  $\text{Li}^-$ . Вычисления проводились как в одночастичном приближении Хартри–Фока, так и с учетом многоэлектронных корреляций, учитывающих динамическую поляризацию остова. Обнаружены особенности в поведении фаз и сечений для  $p$ - и  $d$ -парциальных волн, обусловленных резонансным рассеянием электронных волн. Учет динамической поляризации остова, налетающим электроном, усиливает дифракционные особенности в рассеянии. Проводится сравнение этого реального процесса с рассеянием частиц на модельных объектах с отталкивающим потенциалом.

### Введение

В последнее время наблюдается большой интерес к исследованиям процессов фотопоглощения отрицательными ионами (ОИ) (см. [1,2] и ссылки в них), что связано как с большой ролью многоэлектронных корреляций в этих процессах, так и с обнаружением в них ряда особенностей по сравнению с фотопоглощением в нейтральных атомах. И хотя в целом ОИ изучены существенно меньше, чем атомы и положительные ионы, что связано с трудностью получения ионных пучков достаточной плотности, в последнее время возросли экспериментальные возможности для более широкого использования мощных источников излучения, в частности синхротронного излучения. Однако процессы рассеяния электронов на отрицательных ионах изучены еще в меньшей степени, чем процессы фотоотрыва, и практически не рассматривались в литературе, хотя они представляют также большой интерес по тем же причинам, что и фотопоглощение. В особенности это касается влияния различных поляризационных эффектов на рассеяние, поскольку отрицательный ион представляет собой достаточно „рыхлую“ систему с большой степенью поляризуемости. Несмотря на преобладание отталкивающего кулоновского взаимодействия между налетающим электроном и ионом, поляризация иона, как оказывается, приводит к существенным изменениям в поведении парциальных фаз и дифференциального сечения рассеяния.

Работа посвящена теоретическому изучению процессов упругого столкновения электронов с отрицательными ионами. В качестве объекта исследований выбран ион лития  $\text{Li}^-$ , который в последнее время интенсивно исследуется в процессах фотоотрыва [2]. Для определения таких характеристик рассеяния, как фаза, амплитуда, парциальные и полные сечения рассеяния, используются методы теории многих тел, успешно применяемые в нейтральных атомах. В качестве нулевого приближения используется одночастичное приближение Хартри–Фока [3]. Эффекты поляризации остова налета-

ющим электроном, которые весьма существенно влияют на процесс столкновения, учитываются в рамках метода, основанного на применении уравнения Дайсона [4].

Ион  $\text{Li}^-$  имеет замкнутую наружную оболочку и обладает сферической симметрией. Это обстоятельство позволяет также провести вычисления в рамках простых моделей, сравнение результатов которых с результатами расчетов из первых принципов позволяет глубже понять особенности упругого рассеяния электронов на этом ионе.

В работе используется атомная система единиц  $m = e = h/2\pi = 1$ , энергия в Ридбергах.

### Расчеты в рамках одночастичных приближений

Волновые функции основного состояния отрицательного иона рассчитываются в приближении Хартри–Фока (ХФ). Метод самосогласованного поля ХФ исходит из того, что электроны в атоме движутся независимо друг от друга в некотором среднем поле, и учитывает только часть электрон-электронного взаимодействия [3]. Однако именно метод ХФ, совместимый с представлением о независимом движении отдельных электронов в среднем поле иона, является обычно нулевым приближением для дальнейшего учета многоэлектронных корреляций [5].

Сечение упругого рассеяния электронов энергии  $E$  с импульсом  $k = \sqrt{E}$  выражается через фазы рассеяния  $\delta_l(E)$  парциальных волн  $l$  с помощью следующей формулы [6]:

$$\begin{aligned} \sigma(E) &= \sum_{l=0}^{\infty} \sigma_l(E) \\ &= \frac{\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) |1 - \exp(2i\delta_l(k))|^2, \end{aligned} \quad (1)$$

где  $\delta_l(k)$  есть фаза упругого рассеяния парциальной волны  $l$ .

Она определяется асимптотикой волновой функции рассеивающейся частицы [6]

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{i}{2kr} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos \theta) [(-1)^l \exp(-ikr) - \exp(2i\delta_l(k) + ikr)]. \quad (2)$$

Имея выражение для волновой функции при  $r \rightarrow \infty$ , можно определить фазы парциальных волн и сечение упругого рассеяния.

В работе фазы рассеяния находятся двумя способами: а) из решения уравнения ХФ для налетающего электрона в поле замороженного остова (т.е. отрицательного иона, полученного в приближении ХФ) и б) из решения интегрального уравнения, учитывающего поляризационный потенциал остова. Фаза парциальной  $l$ -волны упругого рассеяния электрона, налетающего с импульсом  $k$ , находится по стандартной формуле [5]

$$\delta_l = \arcsin \left( -\sqrt{\frac{\pi}{k}} \int_0^{\infty} J_l(kr) V(r) P_{N+1}(r) dr \right), \quad (3)$$

где  $J_l(kr)$  — функция Бесселя; рассеивающий потенциал  $V(r)$  определяется через комбинации интегралов от радиальных волновых функций  $P_j(r) = rR_j(r)$  [5], где индекс  $j$  пробегает значения от 1 до  $S$  ( $S$  — число оболочек в основном состоянии иона)

$$V(r) = \frac{2}{r} [Z - Y(r)], \quad (4)$$

$$Y_i(r) = \sum_{j=1}^S N_j Y_{jj}^0(r) - \sum_{j=1}^S \frac{2}{N_{j+1}} \sum_{\mu>0} \gamma_{\mu}(S+1, j) Y_{jj}^{\mu}(r), \quad (5)$$

$$Y_{ij}^{\mu}(r) = r \int_0^{\infty} \frac{r'_{<}}{r'_{>+1}} P_i(r') P_j(r') dr'. \quad (6)$$

Здесь  $Z$  — заряд ядра отрицательного иона,  $\gamma_{\mu}(S+1, j)$  — угловые коэффициенты прямого взаимодействия налетающего электронами  $j$ -оболочки,  $N_j$  — число электронов на  $j$  уровне.

## Метод фазовых функций

Для объяснения некоторых особенностей в поведении ХФ фазы были использованы модели, упрощенно представляющие структуру отрицательного иона. В работе решены две модельные задачи: рассеяние электрона на равномерно заряженном шаре и на равномерно заряженной сфере. Радиусы шара и сферы взяты равными среднему радиусу отрицательно заряженного иона  $\text{Li}^-$ , т.е.  $R = 1.89$  а.е., а заряды — равными  $Z = -1$ . Так называемая короткодействующая часть потенциала равномерно заряженного шара имеет простой вид

$U(r) = (3R^2 - r^2)/3R^3$ ,  $r \leq R$ . За пределами равномерно заряженного шара потенциал равен кулоновскому  $V(r) = 1/r$ ,  $r > R$ .

Метод фазовых функций заключается в переходе от уравнения Шредингера к уравнению непосредственно для искомой величины, фазы рассеяния [7]. Для этого в рассмотрение вводят две новые функции:  $\delta_l(r)$  и  $A(r)$ , которые имеют физический смысл фаз рассеяния и асимптотических амплитуд волновых функций при рассеянии на последовательности „обрезанных“ потенциалов различного радиуса действия. Асимптотическое значение функции  $\delta_l(r)$  при  $r \rightarrow \infty$  равно искомой фазе рассеяния на всем потенциале  $\delta_l(\infty) = \delta_l$ . Более того, уравнение для фазовой функции не зависит от амплитудной функции  $A(r)$ , это значительно упрощает решение задачи

$$\frac{d}{dr} \delta_l(r) = -\frac{1}{k} U(r) [\cos \delta_l(r) F_l(kr, \eta) + \sin \delta_l(r) G_l(kr, \eta)]^2, \quad \delta_l(0) = 0. \quad (7)$$

Здесь  $U(r)$  отвечает короткодействующей части потенциала. Подчеркнем, что данная фаза зависит также от параметра кулоновского взаимодействия ввиду интерференции с короткодействующим потенциалом. В данном уравнении используются кулоновские функции [8]  $F_l(kr, \eta)$ ,  $G_l(kr, \eta)$ , являющиеся регулярным и нерегулярным в точке  $r = 0$  решениями уравнения Шредингера с кулоновским потенциалом,  $\eta = 1/k$  — кулоновский параметр данной задачи. Уравнение (7) обладает быстрой сходимостью решений к искомому значению  $\delta_l(\infty)$ .

## Динамический поляризационный потенциал

Приближение ХФ и рассмотренные выше модели не учитывают многоэлектронные эффекты, в частности поляризацию остова налетающим электроном, хотя хорошо известно, что отрицательные ионы обладают большой поляризуемостью в силу достаточно малой энергии связи наружных электронов. Поэтому для адекватного описания и определения фаз, амплитуд и сечения упругого рассеяния необходимо выйти за рамки одночастичного приближения. В работе динамическая поляризация отрицательного иона налетающим электроном учитывалась в рамках метода, основанного на применении уравнения Дайсона [4,9]. Уравнение Дайсона для определения приводимой собственно энергетической части одночастичной функции Грина  $\tilde{\Sigma}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', E)$  в матричном виде записывается [4,9]

$$\langle E_1 l | \tilde{\Sigma}(E) | E_2 l \rangle = \langle E_1 l | \Sigma(E) | E_2 l \rangle + v p \int \langle E_2 l | \Sigma(E) | E' l \rangle \langle E' l | \tilde{\Sigma}(E) | E_2 l \rangle \frac{dE'}{E - E'}, \quad (8)$$

где  $|El\rangle$  — одночастичные волновые функции электрона,  $\langle \Sigma(E) \rangle$  — неприводимая собственно энергетическая

часть функции Грина, а интеграл берется в смысле главного значения.

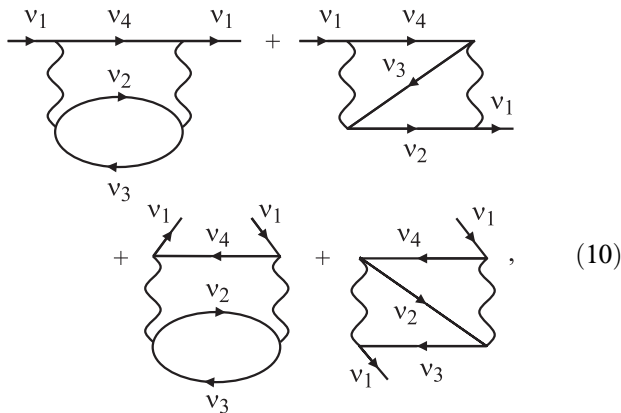
Неприводимая собственно энергетическая часть  $\Sigma(E)$  имеет смысл нелокального, зависящего от энергии  $E$  электрона, поляризационного потенциала, полностью включающего в себя корреляционное взаимодействие электрона с остовом.

Неприводимую собственно энергетическую часть  $\Sigma(E)$  одночастичной функции Грина удобно разбить на две части: хартри-фоковскую и определяемую корреляционным взаимодействием [4]

$$\Sigma(E) = \Sigma^{\text{HF}}(E) + \Sigma^{\text{cor}}(E). \quad (9)$$

Собственно энергетическая часть в приближении ХФ  $\Sigma^{\text{HF}}$  есть самосогласованное среднее поле, которым атом (ион) действует на рассеиваемый электрон, при этом она определяется, как и фаза рассеяния электрона  $\delta_l^{\text{HF}}$ , при вычислении волновых функций из системы уравнений ХФ.

Таким образом, задача состоит в вычислении корреляционной части потенциала. Поскольку первый порядок теории возмущений по кулоновскому взаимодействию учтен в рамках ХФ приближения, то матричный элемент  $\Sigma^{\text{cor}}(E)$  в низшем порядке теории возмущений может быть представлен следующим графическим рядом [4]:



где линия со стрелкой направо соответствует налетающему электрону ( $v_1 = (E, l)$ ) и возбужденным электронам иона ( $v_2$ ), а со стрелкой налево — образовавшейся вакансии (дырке), волнистая линия соответствует кулоновскому взаимодействию. Как показывают результаты предыдущих вычислений [4,5], вклад диаграмм третьего порядка в собственно энергетическую часть обычно составляет менее 10% по сравнению с вкладом второго порядка. Поэтому в данной работе вычисление корреляционного поляризационного потенциала ограничивается диаграммами (10).

Поправка к ХФ фазе рассеяния определяется через матричный элемент приводимой собственно энергетической части (8), при вычислении которой в неприводимую собственно энергетическую часть включено уже только корреляционное взаимодействие

$$\Delta\delta_l(E) = \arctg(-\pi \langle E | \tilde{\Sigma}(E) | E \rangle). \quad (11)$$

В работе при вычислении поправки (11) использовались модифицированные вычислительные программы, ранее используемые в атомных расчетах [5]. Вначале вычислялись волновые функции основного состояния ОИ лития в приближении ХФ. Затем определялись ХФ волновые функции и фазы рассеяния налетающего электрона в „замороженном“ ХФ поле ОИ лития. Известно, что эти волновые функции образуют полный ортонормированный базис для определения многоэлектронных корреляций [5]. ХФ волновые функции вычислялись в настоящей работе с относительной точностью  $\sim 10^{-7}$ , а соответствующая ХФ фаза находилась с точностью  $\leq 5\%$ . Используя эти волновые функции, рассчитывается матричный элемент  $\Sigma^{\text{cor}}(E)$  во втором порядке теории возмущений (10) с учетом переданных монополюсных, дипольных и квадрупольных моментов ( $\Delta l = 0, 1, 2$ ) по кулоновскому взаимодействию аналогично вычислениям, проведенным в работе [4]. Затем определяется приводимая собственно энергетическая часть функции Грина путем решения интегрального уравнения (8) и находятся поправки к фазе рассеяния.

## Обсуждение результатов

На первом этапе работы фазы и парциальные сечения рассеяния находились в рамках метода ХФ и полученные результаты сравнивались с известным рассеянием на кулоновском поле отталкивания. Фаза рассеяния кулоновским полем в общем случае (с учетом орбитального момента  $l$ ) определяется через гамма-функцию [10]

$$\eta_l = \arg \Gamma \left( l + 1 + i \frac{1}{k} \right). \quad (12)$$

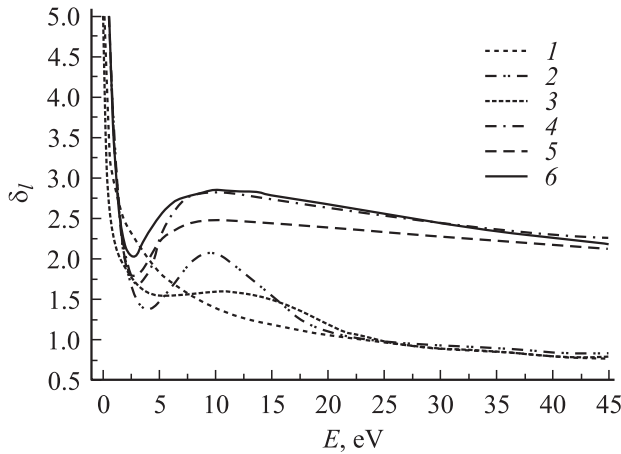
Фазы рассеяния различных парциальных волн на кулоновском поле отталкивания представляют собой гладкие функции энергии налетающего электрона и при стремлении  $k = \sqrt{\varepsilon} \rightarrow 0$  фаза  $\delta_l \rightarrow 0$ . ХФ фаза  $s$ -волны также монотонно убывает с ростом энергии электрона. Однако, в энергетической зависимости ХФ фаз рассеяния  $p$ - и  $d$ -волн было получено поведение отличное от кулоновского: так, для  $p$ -волны появился скачок в фазе порядка  $\pi/4$  при энергии  $\varepsilon \approx 5.4 \text{ eV}$  (рис. 1, 2).

Для определения роли обменного взаимодействия в поведении фаз и, в частности, обнаруженной особенности в  $p$ - и  $d$ -волне был проведен расчет фаз рассеяния электронов в приближении Хартри (без учета обменного взаимодействия). Сравнение результатов расчетов в рамках ХФ и Хартри показало, что пренебрежение обменным взаимодействием практически не влияет на величину скачка в  $p$ - и  $d$ -фазе, однако смещает эту особенность на  $3.4 \text{ eV}$  в область больших энергий налетающего электрона (кривая 3 на рис. 2). Аналогичное смещение получают кривые фаз рассеяния  $s$ -волны, что можно объяснить притягивающим характером обменного потенциала в уравнениях ХФ. Однако отметим, что при энергиях налетающего электрона свыше  $13 \text{ eV}$  имеется существенное различие в величине фазовых сдвигов

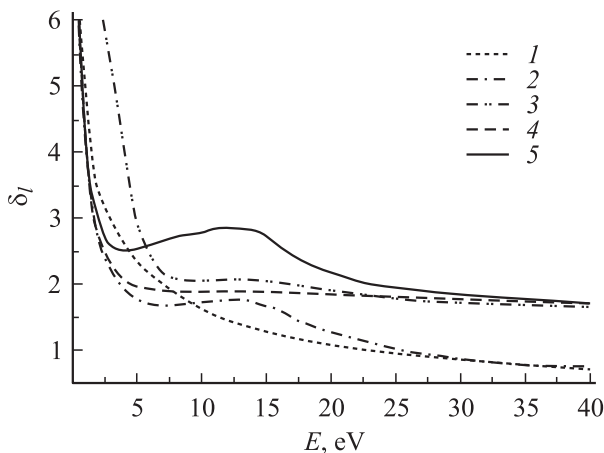
между результатами модельных и ХФ расчетов, что, очевидно, связано с различным поведением кулоновского и ХФ потенциалов на малых расстояниях. Чтобы в этом убедиться, в работе рассчитывалась поправка к  $p$ -фазе по теории возмущений [10]

$$\Delta\delta_l = - \int_0^\infty \Delta U(r) [J_{l+1/2}(kr)]^2 r dr, \quad (13)$$

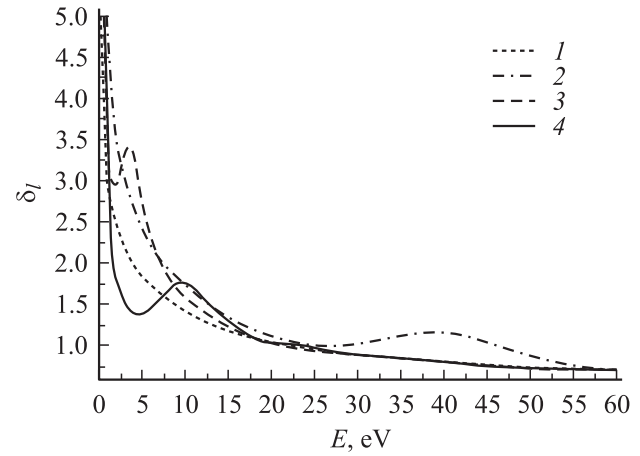
где  $\Delta U(r)$  — разность между кулоновским и хартриевским потенциалами,  $J_{l+1/2}(kr)$  — функция Бесселя.



**Рис. 1.** Зависимость фазы рассеяния от энергии для частичной  $p$ -волны в различных приближениях. Модельные расчеты: 1 — кулоновское поле отталкивания, 2 — равномерно заряженный шар, 3 — равномерно заряженная сфера. Расчеты рассеяния на ОИ  $\text{Li}^-$ : 4 — локальный параметрический потенциал, учитывающий поляризацию остова налетающим электроном ( $\alpha = 162$  а.е.,  $r_0 = 5.2$  а.е.); 5 — приближение Хартри–Фока; 6 — метод уравнения Дайсона.



**Рис. 2.** Зависимости фазы рассеяния от энергии для частичной  $d$ -волны в различных приближениях. Модельные расчеты: 1 — кулоновское поле отталкивания, 2 — равномерно заряженный шар. Расчеты рассеяния на ОИ  $\text{Li}^-$ : 3 — приближение Хартри, 4 — приближение Хартри–Фока, 5 — метод уравнения Дайсона.



**Рис. 3.** Модельные вычисления фазы рассеяния для  $p$ -волны. 1 — кулоновское поле отталкивания. Зависимость фазы от радиуса равномерно заряженного шара ( $R = 1.89$  а.е.): 2 — рассеяние на шаре радиуса  $R/2$ , 3 — радиуса  $2R$ , 4 — радиуса  $R$ .

Учет данной поправки к хартриевской фазе, не изменяя общего характера ее поведения, дает при больших энергиях более быстрый выход на кулоновскую фазу.

Вполне также очевидно, что особенности в поведении  $p$ - и  $d$ -фаз происходят из-за дифракции электронных волн на пространственной структуре ОИ. Для того чтобы глубже понять физическую причину появления скачков в фазах рассеяния, были решены простейшие модельные задачи: рассеяние на равномерно заряженном шаре и сфере. Расчеты показали, что в  $p$ - и  $d$ -волнах также наблюдается немонотонное поведение фаз со скачками порядка  $\pi/4$  и  $\pi/6$  соответственно (рис. 1, 2). Рассматривая поведение этих фаз в зависимости от радиуса равномерно заряженного шара и сферы, можно получить зависимость положения этой особенности от радиуса рассеивающего поля (рис. 3). Причем при увеличении радиуса эта особенность смещается в сторону больших энергий, а при уменьшении радиуса модельного потенциала — смещается в сторону меньших энергий. При стремлении радиуса поля  $R$  к нулю фаза рассеяния переходит в кулоновскую. Таким образом, результаты модельных расчетов подтверждают дифракционный характер особенности в поведении фаз рассеяния.

Кроме того, в работе были получены фазы упругого рассеяния с использованием следующего локального параметрического потенциала, учитывающего поляризацию остова налетающим электроном:

$$V_{\text{pol}} = - \frac{\alpha}{(r^2 + r_0^2)^2}, \quad (14)$$

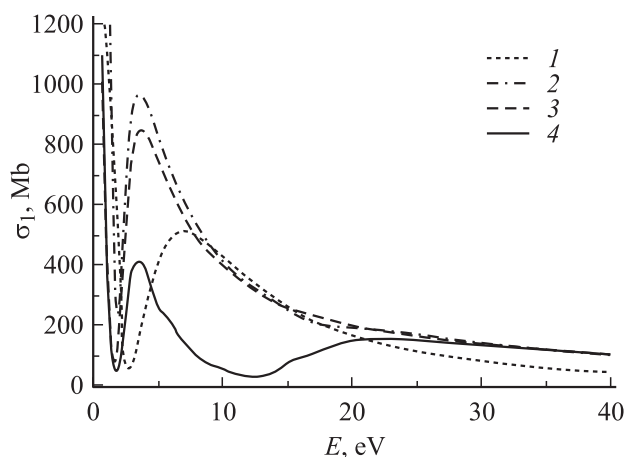
где  $\alpha$  — дипольная поляризуемость,  $r_0$  — радиус действия потенциала.

Параметры подбирались таким образом, чтобы поведение  $p$ -фазы наилучшим образом совпадало с поведением фазы в динамическом потенциале. При этом дипольная поляризуемость в вычислениях оказалась близкой к дипольной поляризуемости атома  $\text{Li}$   $\alpha = 162$  а.е.,

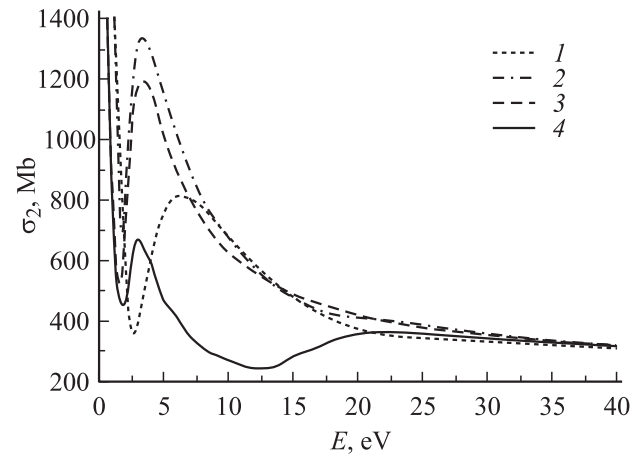
а параметр  $r_0 = 5.2$  а.е. Результаты вычисления фазы с использованием параметрического потенциала (14) представлены на рис. 1 (кривая 4).

Результаты вычислений фазы рассеяния  $p$ - и  $d$ -волн в рамках уравнения Дайсона, т.е. с учетом динамической поляризации остова налетающим электроном, также представлены на рис. 1, 2. Видно, что учет поляризационного потенциала существенно изменяет поведение парциальных фаз рассеяния. Если для  $p$ -волны (рис. 1) его учет просто усиливает скачок фазы до величины порядка  $\pi/2$ , то для парциальной  $d$ -волны (рис. 2) скачок фазы, достигающий величины  $\pi/3$  при энергии порядка 13.6 eV, получен практически только за счет влияния многоэлектронных эффектов. Однако для парциальных волн рассеяния высшей мультипольности влияние поляризационного потенциала быстро ослабевает с ростом  $l$ .

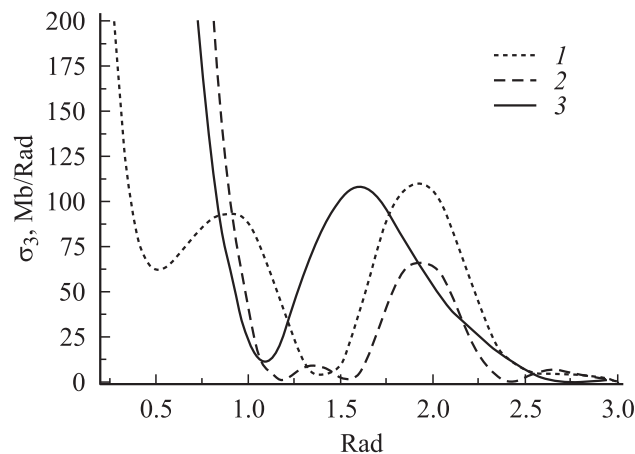
Вычисление парциальных и полного сечений проводились по формуле (1). Скачки фазы в  $p$ -волне практически не сказываются на парциальном сечении рассеяния, однако меньший скачок фазы в  $d$ -волне заметно изменяет свое парциальное сечение рассеяния выше энергии 2.7 eV. На рис. 4 для сравнения показано парциальное сечение рассеяния  $d$ -волны, полученное в различных приближениях. Видно, что сечение, полученное с учетом многоэлектронных эффектов, имеет дополнительный интерференционный минимум при энергии  $\sim 2.7$  eV, при которой фаза  $d$ -волны приближается к значению  $\pi$ . Аналогичная интерференционная структура проявляется и в полном сечении упругого рассеяния электронов на ОИ лития (рис. 5). Наибольшее отличие сечения, полученного по методу уравнения Дайсона, от хартри-фоковского наблюдается как раз при энергиях налетающих электронов  $\sim 2.7$ –20 eV. Такое поведение свидетельствует о том, что при этих энергиях налетающего электрона существенными становятся эффекты, связанные с динамической поляризацией остова [11].



**Рис. 4.** Зависимость парциального сечения рассеяния от энергии для  $d$ -волны в различных приближениях. Модельные расчеты: 1 — кулоновское поле отталкивания, 2 — равномерно заряженный шар. Расчеты рассеяния на ОИ  $\text{Li}^-$ : 3 — приближение Хартри–Фока, 4 — учет поляризации в рамках метода уравнения Дайсона.



**Рис. 5.** Зависимость полного сечения упругого рассеяния электронов на ОИ лития от энергии: 1 — кулоновское поле отталкивания, 2 — равномерно заряженный шар, 3 — приближение Хартри–Фока, 4 — учет поляризации в рамках метода уравнения Дайсона.



**Рис. 6.** Дифференциальное сечение упругого рассеяния электронов на ОИ при энергии электронов  $E = 5$  (1), 15.5 (2), 36 eV (3).

Очевидно, что особенности в поведении фаз рассеянных волн должны проявиться сильнее для дифференциального сечения упругого рассеяния [6]

$$d\sigma = 2\pi \sin\theta |f(\theta)|^2 d\theta, \quad (15)$$

где амплитуда рассеяния электронов на угол  $\theta$  записывается обычным образом

$$f(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) (\exp(2i\delta_l) - 1) P_l(\cos\theta). \quad (16)$$

Амплитуда рассеяния электронов максимальна при  $\theta = 0$  и спадает с увеличением  $\theta$ , меняя при этом знак, так что в дифференциальном сечении проявляются дифракционные максимумы и минимумы.

Результаты расчетов дифференциального сечения упругого рассеяния с учетом многоэлектронных эффектов представлены на рис. 6. Основные особенности в ди-

фракционной картине проявляются при тех же энергиях (на рис. 6 при 3.5 и 15.5 eV), при которых наблюдается немонотонность в поведении в  $p$ - и  $d$ -волн. Интенсивность дифракционных максимумов второго порядка оказывается больше интенсивности первого максимума при этих энергиях электронов. Расчеты показывают [12], что учет динамической поляризации усиливает разницу в интенсивности максимумов первого и второго порядка. При малых энергиях ( $E < 2.7$  eV) и энергиях выше 34 eV интенсивности максимума второго и последующих порядков всегда меньше интенсивности первого максимума.

## Заключение

Упругое рассеяние электронов на отрицательных ионах является еще малоизученной областью физики столкновений. Однако результаты исследований фотоотрыва электронов от отрицательных ионов и результаты по рассеянию электронов, полученные в настоящей работе, обнаруживают интересные эффекты. В частности, они показывают, что структурные особенности отрицательного иона приводят к немонотонности в поведении фаз  $p$ - и  $d$ -парциальных волн, которые являются следствием дифракции электронных волн на объеме конечного радиуса. Эти особенности не проявляются в рассеянии сферически симметричной  $s$ -волны. Расчеты показывают важность учета многоэлектронных корреляций в описании упругого рассеяния медленных электронов, в частности динамической поляризации электронов остова налетающей частицей. Возникновение дифракции электронов при рассеянии на отрицательно заряженных ионах приводит к существенным качественным изменениям в характеристиках рассеяния. Полученные результаты могут быть применены для изучения процессов рассеяния на других отрицательных ионах и различных отрицательно заряженных кластерах, в том числе и фуллеренов.

Эта работа выполнялась при поддержке гранта Министерства образования и науки (грант № E02-3.2-267), Швейцарского национального научного фонда (грант SNSF 71P 062585) и INTAS (грант № 03-51-6170).

Авторы благодарны Р.Г. Полозкову, А.Н. Ипатову, Б.Д. Агапьеву и А.В. Королю за постоянные консультации при выполнении численных расчетов и полезные обсуждения.

## Список литературы

- [1] *Buckman S. Clark C.W.* // Rev. Mod. Phys. 1994. Vol. 66 (2), P. 539–655.
- [2] *Ivanov V.K.* // Rad. Phys. and Chem. 2004. Vol. 70 (1–3), P. 345–370.
- [3] *Хартри Д.* Расчеты атомных структур. М.: ИЛ, 1960. 165 с.
- [4] *Gribakin G.F., Gul'tsev B.V., Ivanov V.K., Kuchiev M.Yu.* // J. Phys. B. 1990. Vol. 23 (24). P. 4505–4519.

- [5] *Амусья М.Я., Чернышева Л.В.* Автоматизированная система исследования структуры атомов. Л.: Наука, 1983. 182 с.
- [6] *Mott N.F., Massey H.S.W.* The Theory of Atomic Collisions. Oxford, 1965. 759 p.
- [7] *Бабилов В.В.* Фазовые уравнения в квантовой механике. М.: Наука, 1967. 256 с.
- [8] *Друкарев Г.Ф.* Столкновение электронов с атомами и молекулами. М.: Наука, 1978. 255 с.
- [9] *Цюлике Л.* Квантовая химия. М.: Мир, 1976. 860 с.
- [10] *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Квантовая механика. Нерелятивистская теория. М.: Наука, 1974. 754 с.
- [11] *Semenikhina V.V., Ivanov V.K., Ipatov A.N., Lapkin C.V.* // Proc. SPIE. 2003. Vol. 5127. P. 41–43.
- [12] *Semenikhina V.V., Ivanov V.K., Lapkin C.V.* // Proc. PSIE. 2004. Vol. 5400. P. 46–50.