

ОБ ИССЛЕДОВАНИИ ЭЛЕКТРОННЫХ СОСТОЯНИЙ АТОМОВ,  
МОЛЕКУЛ И ТВЕРДОГО ТЕЛА С ПОМОЩЬЮ КВАЗИУПРУГОГО  
ВЫБИВАНИЯ ЭЛЕКТРОНА БЫСТРЫМ ЭЛЕКТРОНОМ ( $e, 2e$ )

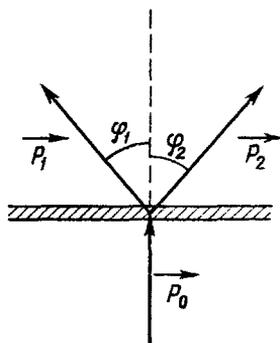
Ю.Ф.Смирнов, В.Г.Неудачин

Продолжая исследования [1,2] аналогов прямых ядерных реакций в атомно-молекулярной области, мы хотим отметить ценность квазиупругого выбивания ( $e, 2e$ ). Отличие от работ по ионизации [3] здесь в том, что надо измерять на совпадения импульсы обоих конечных электронов (рис.1) при фиксированных углах их вылета (о реакции  $(p, 2p)$  см. в [4]). Это, как мы увидим на трех примерах (импульсное приближение), позволяет получить Фурье-образ волновой функции выбиваемого электрона и его энергию связи. В п.п. 1 и 2 положим, что энергии электронов равны ( $E_1 = E_2$ ) и углы  $\varphi_1$  и  $\varphi_2$  тоже равны (компланарный симметричный случай).

1. Молекула  $H_2$ , конечный ион  $H_2^+$  - в состоянии  $I \bar{G}_g$ .

$$\frac{d^2 \sigma}{d\Omega_1 dE_1} \sim \left[ \frac{q^2 a_0^2 + \hbar^2 Z_{эф}^2}{\hbar^2 a_0^2} \right]^{-4} \left[ \frac{x + \sin x}{x} \right] \left( \frac{d\sigma}{d\Omega_1} \right)_{своб} W_n. \quad (1)$$

Сечение свободного e-e - рассеяния  $(d\sigma/d\Omega_1)_{своб}$  огромно,  $\approx 10^{-21}$  см<sup>2</sup>/стер. при  $E_0 \approx 5$  кэВ ( $\varphi_1 = 45^\circ$ ), так что мишени должны быть необычайно тонкими (пленки 100 Å или эквивалентные струи газа).



Далее,  $Z_{эф} \approx 1,2$  (функция Гайтлера-Лондона),  $x = qR/\hbar$ ,  $a_0$  - радиус Бора,  $R$  - расстояние между ядрами в  $H_2$ ,  $\vec{q} = \vec{p}_1 + \vec{p}_2 - \vec{p}_0$ ,  $W_n$  - вероятность образования  $H_2^+$  в  $n$ -м колебательном состоянии.  $W_n = 0,06; 0,2; 0,3$  для  $n=0; 1; 2$ . В общем случае соотношение высот максимумов в спектре энергий  $E_1 + E_2$  определяет спектр

генеалогической связи [5] основного состояния мишени с разными дырочными состояниями конечного иона.

2. Свободные электроны в металле (плоские волны).

$$\frac{d^2 \sigma}{d\Omega_1 dE_1} \sim n \left( \begin{matrix} p_x = p_y = 0, & p_z = p = 2p_{1x} - p_0 \\ \mathcal{E} = 2E_1 - E_0 \end{matrix} \right) E_1 \left( \frac{d\sigma}{d\Omega_1} \right)_{своб}. \quad (2)$$

Здесь  $n(\vec{p}) = 2$ , если одно из занятых состояний имеет квазиимпульс  $\vec{p}$  и энергию  $\mathcal{E}$ ,  $n = 0$  в других случаях. Если заданы  $p$  и  $\mathcal{E}$  ( $|p| \ll p_0$ ), то совпадения будут регистрироваться при  $\varphi = \frac{\mathcal{E}}{q} - \frac{p}{p_0}$ ,  $E_1 = \frac{1}{2}(E_0 + \mathcal{E})$ . Некомпланарный несимметричный случай дает связь  $\mathcal{E}$  и  $\vec{p}$  уже для любого направления  $\vec{p}$  в монокристалле.

3. Сильная связь с решеткой (суммы Блоха).

$$\frac{d^4 \sigma}{d\Omega_1 d\Omega_2 dE_1 dE_2} \sim n \left( \begin{matrix} \vec{p} = \vec{p}_1 + \vec{p}_2 + \vec{a}_i - \vec{p}_0 \\ \mathcal{E} = E_1 + E_2 - E_0 \end{matrix} \right) \delta_{\vec{p} + \vec{k}, \vec{a}_i} / g_{ат} \left( \vec{k} = \vec{p}_0 - \vec{p}_1 - \vec{p}_2 \right)^2 \times \sqrt{E_1 E_2} \left( \frac{d\sigma}{d\Omega_1} \right)_{своб}. \quad (3)$$

Здесь  $a_i$  - один из векторов обратной решетки,  $\rho_{a_i}(\vec{k}) = \int e^{i\vec{k}\vec{z}} \varphi(\vec{z}) d\vec{z}$ ,  $\varphi(\vec{z})$  - волновая функция электрона в атоме.

Итак, при энергии  $E_1 + E_2$ , соответствующей дну зоны ( $\vec{p}=0$ ), имеем ряд точечных пятен, соответствующих  $\vec{k} = \vec{a}_1, \vec{a}_2 \dots$  (Лауэ). При уходе от дна зоны каждое из пятен  $\vec{k} = \vec{a}_i$  переходит в (неправильную) сферу с угловым радиусом  $\approx \rho/\rho_0$ .

Резкое различие формул (2) и (3), по-видимому, позволит исследовать приближение ОПВ в металлах, молекулярные орбиты в молекулярных кристаллах, локализацию "ферромагнитных"  $d$ -электронов в металлах группы  $f_e$  и ферритах. Доступны все занятые зоны в металлах, сплавах, ионных кристаллах и т.д. Нужна точность измерения  $E_0, E_1$  и  $E_2 \approx 0,1 - 0,2$  эВ [6]. Учет искажения волн и ухода с энергетической поверхности, использование более реалистических волновых функций многоэлектронной задачи мы обсудим позднее в подробной статье.

Авторы благодарят К.П.Белова, В.Л.Бонч-Бруевича, С.В.Вонсовского, Ю.П.Гайдукова, В.И.Гольданского, А.Ф.Тулинова, С.В.Тябликова за советы и стимулирующие обсуждения.

Научно-исследовательский институт  
ядерной физики Московского  
государственного университета  
им. М.В.Ломоносова

Поступило в редакцию  
21 февраля 1966 г.

#### Литература

- [1] З.Маттхиз, В.Г.Неудачин, ЖЭТФ, 45, 131, 1963.
- [2] М.Гмитро. Чехосл. физ.ж., 14, 817, 1964.
- [3] R.Axerib, S.Borowitz. Phys.Rev., 122, 1177, 1961; V.B.Robinson. Phys.Rev., 140A, 764, 1965.
- [4] M.Riou. Revs.Mod.Phys., 37, 381, 1965.
- [5] В.В.Балашов, А.Н.Бояркина, Nucl.Phys., 38, 629, 1962.

[6] H.Fellenzer, Z.Phys., 165, 419, 1961; M.Horstmann, G.Meyer, Z.Phys.,  
164, 21, 1961; L.B.Leder, L.Marton. Phys.Rev., 112, 341, 1958.