

01; 02

²P-РЕЗОНАНС В СЕЧЕНИИ УПРУГОГО РАССЕЯНИЯ ЭЛЕКТРОНОВ НА АТОМЕ КАЛЬЦИЯ

М. Я. Амусья, В. А. Соснивер

Приведены результаты расчета полного сечения упругого рассеяния электронов на атомах кальция. Показано, что поправки к точно учитываемому поляризационному потенциалу, обусловленные взаимодействием налетающего электрона и вакансии в промежуточном состоянии, приводят к перемещению P -волнового резонанса в область очень малых энергий. Проводится сравнение полученного сечения с результатами других расчетов и с экспериментом.

В настоящей работе показано, что сравнительно небольшое изменение поляризационного потенциала атома Са приводит к значительному увеличению мощности резонанса в сечении упругого рассеяния электрона и перемещению его в область очень малых энергий. Выполненный нами ранее расчет этого сечения поляризационный потенциал учитывал точно [1]. Однако, как будет видно из дальнейшего, поправки к самому поляризационному потенциалу, вычисля-

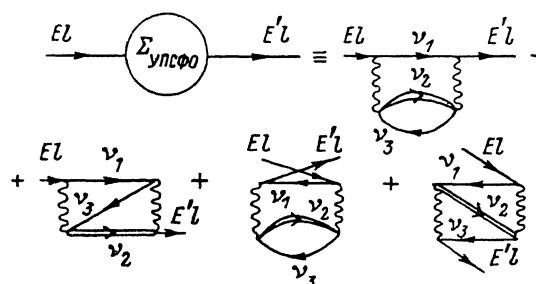


Рис. 1.

пешую в [1] по теории возмущений с помощью методов теории многих тел, приводят к значительному изменению в сечении рассеяния в области очень малых энергий электронов.

Поляризационный потенциал в [1] определяется в рамках упрощенного приближения случайных фаз с обменом (УПСФО), где он задается четырьмя диаграммами теории многих тел 2 (рис. 1).

На рис. 1 сплошные линии обозначают распространение электрона, если стрелка направлена вправо, и вакансии, если стрелка направлена влево. Волнистые линии изображают кулоновское взаимодействие, которое в явном виде учитывается в $\Sigma_{\text{упсфо}}$ во втором порядке. Индекс ν обозначает совокупность квантовых чисел — энергию (или главное квантовое число) и угловой момент. Двойная линия обозначает, что возбужденный атомный электрон ν_2 движется в поле вакансии ν_3 .

В [1] считалось, что электрон в промежуточном состоянии ν_1 , как в начальном El и конечном $E'l$, движется в поле нейтрального атома. В действительности в состоянии ν_1 , как и ν_2 , электрон испытывает действие поля вакансии, что и учитывается в настоящей работе. На языке диаграмм это описывается последовательностью, представленной на рис. 2.

Поскольку разные состояния вакансий хорошо отделены по энергии друг от друга, то на рис. 2 пренебрегается процессами взаимодействия с изменением состояния вакансии — переходами $\nu_3 \rightarrow \nu_3' \neq \nu_3$. Мал и вклад взаимодействия электронов в возбужденных состояниях ν_1 и ν_2 .

Последовательность диаграмм рис. 2 выходит за рамки и УПСФО, и ПСФО. Она может быть просуммирована выбором волновой функции электрона, если считать его движущимся не в поле нейтрального атома, а иона с вакансией ν_3 .

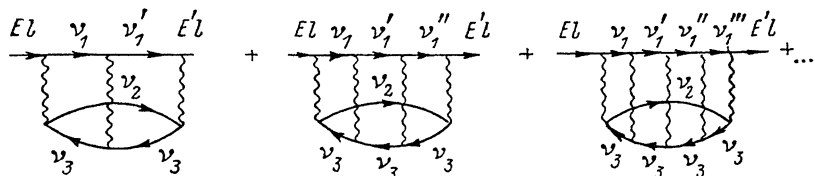


Рис. 2.

Матричный элемент $\langle El | \Sigma(\omega) | E'l \rangle$ определяется аналитическим выражением [2]

$$\langle El | \Sigma(\omega) | E'l \rangle = \sum_{l_\nu} \frac{1}{(2l_\nu + 1)} \left(\sum_{\substack{\nu_1, \nu_2 > F \\ \nu_3 < F}} - \sum_{\substack{\nu_1, \nu_2 \leq F \\ \nu_3 > F}} \right) \times \\ \times \frac{\langle El, \nu_3 \| U_{l_\nu} \| \nu_1 \nu_2 \rangle \langle \nu_2 \nu_1 \| U_{l_\nu} \| E'l, \nu_3 \rangle}{\omega - E_{\nu_1} - E_{\nu_2} + E_{\nu_3} + i\delta (1 - 2n_{\nu_1})}, \quad (1)$$

где ν_i обозначает совокупность квантовых чисел $n_i l_i$; знак подразумевает суммирование по дискретным и интегрирование по непрерывным электронным уровням; δ — бесконечно малая величина, задающая правило обхода полюса при интегрировании; $\delta \rightarrow +0$; n_i — так называемая ступенька Ферми.

Считается, что уровни до фермиевского F заняты, а выше свободны. Приведенные кулоновские матрицы $\langle \nu_1 \nu_3 \| V_l \| \nu_2 \nu_4 \rangle$ и $\langle \nu_1 \nu_3 \| U_l \| \nu_2 \nu_4 \rangle$ определяются соотношениями

$$\langle \nu_1 \nu_3 \| U_l \| \nu_2 \nu_4 \rangle = 2 \langle \nu_1 \nu_3 \| V_l \| \nu_2 \nu_4 \rangle - \\ - (2l + 1) \sum_{l'} (-1)^{l+l'} \begin{Bmatrix} l_1 & l & l_2 \\ l_3 & l' & l_4 \end{Bmatrix} \langle \nu_1 \nu_3 \| V_{l'} \| \nu_4 \nu_2 \rangle, \quad (2)$$

$$\langle \nu_1 \nu_3 \| V_l \| \nu_2 \nu_4 \rangle = \sqrt{(2l_1 + 1)(2l_2 + 1)(2l_3 + 1)(2l_4 + 1)} \begin{pmatrix} l_1 & l & l_2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_3 & l & l_4 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \times \\ \times \int_0^\infty dr_2 \left\{ \int_0^{r_2} dr_1 P_{\nu_1}(r_1) P_{\nu_2}(r_1) \frac{r_1^l}{r_2^{l+1}} P_{\nu_3}(r_2) P_{\nu_4}(r_2) + \right. \\ \left. + \int_{r_2}^\infty dr_1 P_{\nu_1}(r_1) P_{\nu_2}(r_1) \frac{r_1^l}{r_1^{l+1}} P_{\nu_3}(r_2) P_{\nu_4}(r_2) \right\}. \quad (3)$$

В качестве одноэлектронных радиальных функций $P_\nu(r)$ использовались хартри-фоковские. Для налетающего и рассеянного электрона они вычисляются в поле нейтрального атома и обозначаются $P_\nu^{N+1}(r)$, где верхний индекс указывает на полное число электронов в системе мишень плюс налетающая частица. Для электрона в промежуточном состоянии ν_1 эти функции рассчиты-

ваются в поле иона с вакансией v_3 и обозначаются $P_{(v_3)(v_1)}^N(LS)(r)$, где LS — терм системы.

Вычисление матрицы (1) определяет поляризационный потенциал. Точный учет его влияния осуществляется решением интегрального уравнения.

$$\langle El | \bar{\Sigma}(\omega) | E'l \rangle = \langle El | \Sigma(\omega) | E'l \rangle + P \sum \langle El | \Sigma(\omega) | E''l \rangle \langle E''l | \bar{\Sigma}(\omega) | E'l \rangle \frac{dE''}{\omega - E''}, \quad (4)$$

где P — символ главного значения, которое осуществлялось численными методами [3].

Сдвиг фазы упругого рассеяния $\Delta\delta_i(E)$ по сравнению с ее хартри-фокским значением, возникающий при учете поляризационного потенциала $\Sigma(\omega)$, выражается через амплитуду упругого рассеяния $\langle El | \Sigma(E) | El \rangle$ соотношением [3]

$$\text{tg } \Delta\delta_i(E) = -\pi \langle El | \bar{\Sigma}(E) | El \rangle. \quad (5)$$

Добавив рассчитанные таким образом поляризационные поправки к хартри-фоксовским фазам, при значениях импульса налетающей частицы $K = 0 - 0.6$ а. е. мы вычислили s -, p - и d -фазы упругого рассеяния электронов на атомах кальция. Отличие от результатов, полученных в [1], заметно только для p - и d -фаз в областях их резкого возрастания. Для p -фазы эта область расположена при $K \approx 0.02 - 0.20$ а. е., а для d -фазы — при $K \approx 0.25 - 0.41$ а. е. С целью экономии машинного времени фазы рассеяния высших парциальных волн мы не рассчитывали, а использовали вычисленные в [1], что оказалось возможным благодаря их относительно небольшой величине и медленному изменению.

Сечение упругого рассеяния вычислено с учетом шести фаз (рис. 3, кривая 1). На ней четко проявляются два максимума, к образованию которых привело весьма существенное увеличение фазовых сдвигов $\Delta\delta_1(E)$ и $\Delta\delta_2(E)$. Первый максимум является 2P -резонансом, поскольку образуется в p -волне за счет одночастичного и главным образом поляризационного потенциала поля основного состояния атома. Он расположен при энергии $E \approx 0.05$ эВ, имеет ширину $\Gamma \approx 0.15$ эВ и приводит к аномально большому значению сечения ($\sigma_{\text{max}} = 5000a_0^2$) вблизи порога упругого рассеяния. Второй максимум на кривой 1 расположен при энергии $E \approx 1.45$ эВ и обладает шириной $\Gamma \approx 0.82$ эВ. Формируется он d -волной.

Величина сечения в окрестности d -волнового максимума, а также в области больших импульсов хорошо совпадает с результатами расчета, выполненного в [1] (рис. 3, кривая 2). Однако при очень малых значениях импульса отличие весьма велико. На кривой 2 p -волновой максимум шириной $\Gamma \approx 0.7$ эВ имеет высоту $\sigma_{\text{max}} = 1970a_0^2$ и расположен при энергии $E \approx 0.27$ эВ. Отличие рассчитанного здесь и ранее [1] сечения определяется вкладом в амплитуду упругого рассеяния графиков на рис. 2. Величина этого вклада полностью зависит от разности волновых функций $P_{v_1}^{N+1}(r)$ и $P_{(v_3)(v_1)}^N(LS)(r)$ электрона в промежуточном состоянии v_1 , которая тем больше, чем меньше его энергия. Поскольку в сумме по v_1 в матричных элементах [1] наиболее важен вклад тех состояний, для которых значения E , E_{v_1} , E' близки, то вклад от графиков (рис. 2) тем больше, чем меньше энергия налетающего электрона.

На рис. 3 кривой 3 показано сечение, рассчитанное в приближении феноменологического потенциала (ФП) [4]. Оно неплохо согласуется с нашим результатом в области расположения p -волнового максимума. Параметры 2P -резонанса, рассчитанные в [4] ($E \approx 0.06$ эВ, $\Gamma \approx 0.1$ эВ), также близки к нашим. Это объясняется удачным выбором ФП, в котором правильно учитывается вклад не только больших, но и порядка радиуса атома расстояний. Однако с ростом энергии расхождение между кривыми 1 и 3 увеличивается, поскольку становится значительным влияние промежуточных и малых расстояний, где отличие ФП от $\Sigma(\omega)$ растет.

На рис. 3 кривой 4 показано сечение, которое рассчитано в [5] по методу сильной связи $4^1S - 4^1P - 3^1D^m$ -каналов, где индекс у 1D означает, что в данном

приближении отброшены все обменные члены, связанные с 1D -уровнем. Объяснить разницу между сечениями, вычисленными нами и в работе [5], можно тем, что в [5] были использованы полуэмпирические волновые функции, которые для валентных электронов давали очень грубое приближение.

На рис. 3 приведены также результаты эксперимента [6] (треугольники), подтверждающие наличие на сечении двух максимумов. Они расположены при энергиях 0.7 и 1.7 эВ. Первый максимум приписывается образованию 2D -резонанса формы, а второй — резонанса Фешбаха, состояние которого не было идентифицировано. В отличие от результатов расчета p -волновой максимум не был обнаружен.

В [7] нами было высказано предположение о том, что второй максимум представляет собой особенность Вигнера—База. На это появилось также указание в экспериментальной работе [8]. В этом случае ошибочной является калибровка энергетической шкалы. Если сдвинуть ее на значение 0.2 эВ, равное величине ошибки, то положения экспериментального и предсказанного нами d -волнового максимума будут находиться в хорошем согласии.

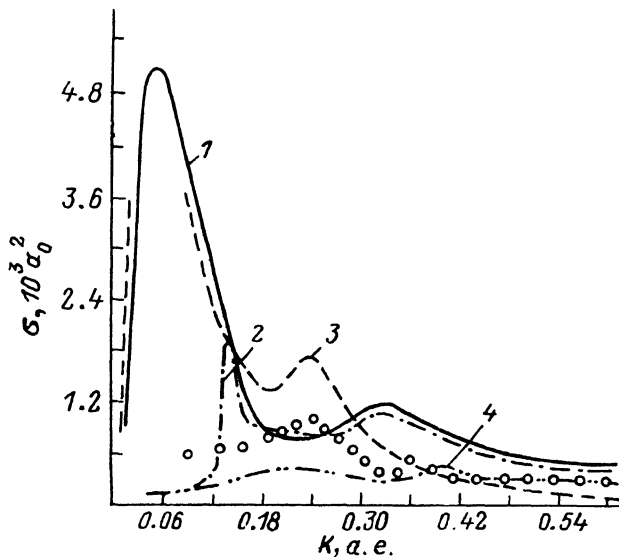


Рис. 3.

Существование околопорогового 2P -резонанса кажется весьма достоверным, хотя он и отсутствует на эксперименте. Во-первых, наличие низкоэнергетических p -волновых резонансов в рассеянии электронов на щелочноземельных атомах доказывается теоретически в рамках модели Томаса—Ферми в работе [9]. И хотя это приближение является достаточно грубым, оно дает реалистическое указание на положение резонансов [9]. Во-вторых, аналогичное околопороговое поведение сечения характерно и для упругого рассеяния электронов на щелочных атомах, большая поляризуемость которых приводит к возникновению 3P -резонансов формы в области энергий 0.01—0.1 эВ [10, 11]. При этом наблюдается хорошо проверенная тенденция уменьшения энергии P -резонанса с ростом поляризуемости α щелочного атома. Вызвана эта закономерность тем, что с ростом величины α уменьшается дальнедействующая часть поляризационного потенциала (увеличивается по абсолютной величине). Поляризуемость кальция $\alpha_{Ca} \approx 169$ а. е. [12] находится между величинами поляризуемостей атомов Li, Na ($\alpha_{Li} \approx \alpha_{Na} \approx 162$ а. е. [12]) и атома K ($\alpha_K \approx 287$ а. е. [12]). Предсказанное нами положение p -волнового резонанса хорошо подчиняется сформулированной закономерности $E_K \approx 0.019$ [11] $E_{Ca} \approx 0.05$, $E_{Li} \approx 0.059$, $E_{Na} \approx 0.083$ эВ [11].

Вычисленные значения параметров P -резонансов в упругом рассеянии на ряде щелочей подтверждаются в серии экспериментов, большая часть из которых косвенные, посвященные измерениям проводимости электронов в парах щелочей.

Выше указанная тенденция наблюдается и для предсказанных в работе [4] положений 2P -резонансов в рассеянии на щелочноземельных атомах Ca и Mg ($E_{Ca} \approx 0.06$, $E_{Mg} \approx 0.19$ эВ; $\alpha_{Mg} \approx 72$ а. е. [12]). При этом параметры резонанса в рассеянии e -Mg хорошо согласуются с результатами экспериментов [13, 14]. Отметим, что в [14] были обнаружены p -волновые резонансы в упругом рассеянии на атомах второй группы Zn, Cd и Hg, поляризуемости которых, как и в случае Mg, значительно меньше величины α_{Ca} . Энергии этих резонансов, расположенные в соответствии со сформулированной закономерностью, находятся значительно дальше от порога упругого рассеяния. В то же время для атомов Sr и Ba, поляризуемость которых больше значения α_{Ca} , околопороговый резонанс не был обнаружен [6].

Выполненный анализ позволяет, с нашей точки зрения, сделать вывод о том, что 2P -резонанс в упругом рассеянии на атоме Ca (как, по-видимому, Sr и Ba) был пропущен в эксперименте [6], возможно, из-за особых в области очень малых энергий трудностей формирования электронного пучка, связанных с действием объемного заряда, или из-за указанной ранее весьма вероятной ошибки в калибровке энергетической шкалы.

По нашему мнению, для измерения сечения рассеяния электронов на щелочноземельных атомах в области энергий 0.01—0.1 эВ необходимо проведение косвенных экспериментов, подобных тем, какие были выполнены для щелочей.

Отличие рассчитанного нами сечения упругого e -Ca-рассеяния от экспериментального и вычисленного в [5] при значениях импульса больших, чем положение второго максимума, т. е. $K \geq 0.35$ а. е., вероятно, связано с тем, что в нашем расчете не были учтены вклады в поляризационный потенциал от поправок высших порядков ПСФО. В [7] нами была выполнена оценка этих вкладов при значениях импульса $K=0-0.2$ а. е., где доминирует в сечении p -волна. Это позволило сократить число дополнительных диаграмм [1, 7] и сделать вывод о том, что в данной энергетической области значительных изменений в сечении при их учете не происходит. Что касается более высоких энергий, то здесь вопрос остается открытым.

В заключение авторы выражают благодарность Г. Ф. Грибакину за значительную помощь при проведении вычислений, а также И. Й. Фабриканту за обсуждение работы, высказанное в ходе него предположение относительно причины расхождения с его результатами и замечание по поводу допущенной в [1] деформации рассчитанного им сечения вдоль оси импульсов.

Литература

- [1] Амусья М. Я., Соснивер В. А., Черепков Н. А. и др. // ЖТФ. 1985. Т. 55. Вып. 12. С. 2304—2311.
- [2] Amusia M. Ya., Cherepkov N. A. // Case Studies in Atomic Physics. 1974. Vol. 5. N 2. P. 47—179.
- [3] Чернышева Л. В., Амусья М. Я., Давидович Д. и др. Препринт ФТИ. № 504. Л., 1976. 48 с.
- [4] Kurtz H. A., Jordan K. D. // J. Phys. B. 1981. Vol. 14. N 22. P. 4361—4376.
- [5] Фабрикант И. Й. Атомные процессы. Рига: Зинатне, 1974. С. 80—123.
- [6] Романюк Н. И., Шленки О. Б., Запесочный И. П. // Письма в ЖЭТФ. 1980. Т. 32. Вып. 7. С. 472—475.
- [7] Амусья М. Я., Соснивер В. А., Черепков Н. А. и др. Препринт ФТИ. № 863. Л., 1983. 20 с.
- [8] Казаков С. М., Христофоров О. В. // ЖТФ. 1985. Т. 55. Вып. 4. С. 795—797.
- [9] Березина Н. Б., Демков Ю. Н. // ЖЭТФ. 1975. Т. 68. Вып. 3. С. 848—854.
- [10] Каруле Э. М. Эффективные сечения столкновений электронов с атомами. Рига: Зинатне, 1965. С. 33—56.
- [11] Фабрикант И. Й. // Опт. и спектр. 1982. Т. 536. Вып. 2. С. 223—227.
- [12] Радциг А. А., Смирнов Б. М. Справ. по атомной и молекулярной физике. М.: Атомиздат, 1980. 79 с.
- [13] Shpenic O. B., Zapesochnyi I. P., Sovter V. V. et al. // Proc. X Intern. conf. on the Physics of Elektronik and Atomic Collisions. Paris, 1977. P. 302.
- [14] Witrow P. D., Micheida J. A., Comer J. J. // J. Phys. B. 1976. Vol. 9. N 17. P. 3225—3236.