

01;02

Минимумы дифференциальных сечений упругого рассеяния электронов атомами криптона в области энергий 0–500 eV

© В.И. Келемен

Институт электронной физики НАН Украины,
88000 Ужгород, Украина
e-mail: kelemen@ief.uzhgorod.ua

(Поступило в Редакцию 17 июня 2003 г. В окончательной редакции 29 октября 2003 г.)

В рамках модели феноменологического вещественного потенциала с учетом спин-орбитального взаимодействия исследовано упругое рассеяние электронов атомами криптона в области энергий 0–500 eV. Рассчитаны и сравнены с экспериментальными данными энергетические зависимости угловых положений минимумов дифференциальных сечений (ДС). Определены энергии и углы семи критических точек, где ДС достигают своих наименьших значений. Полученные результаты хорошо согласуются с имеющимися экспериментальными данными.

Введение

В работах [1–3] на примере упругого рассеяния электронов атомами аргона было продемонстрировано, что угловые положения минимумов дифференциальных сечений (ДС) можно считать одним из фундаментальных свойств рассеяния в широкой области энергий. Как оказалось, энергетические зависимости положений низкоугловых (углы $< 90^\circ$) и высокоугловых (углы $> 90^\circ$) минимумов ДС, измеренные либо рассчитанные с помощью различных методов, намного лучше согласуются друг с другом, чем, например, значения сечений в минимумах. В [1] такие зависимости приведены для энергий столкновений от 3 до 100 eV, а в [2,3] — до 500 eV (для низкоугловых минимумов в [3] — до 133 eV).

Для атома криптона проведение аналогичных расчетов тем более актуально. Как было отмечено в [4], для энергий выше 70 eV в ДС начинает медленно приобретать форму третий минимум. Этот минимум присутствует в сечениях в [5,6] в интервале углов от 140 до 150° в области энергий до 200 eV. Большинство экспериментальных методик не позволяет измерять ДС при углах $> 150^\circ$. Следовательно, для экстраполяции экспериментальных сечений в область больших углов, необходима теоретическая информация о таких минимумах. И наконец, если наибольшее значение критической энергии для случая атома аргона равно ~ 130 eV [3,5,7], то для атома криптона это уже ~ 450 eV [5,7]. Таким образом, для поиска критических минимумов в случае атома криптона тем более необходим тщательный расчет минимумов ДС вплоть до 500 eV.

Рассчитанные в статье положения минимумов сравниваются с данными из экспериментальных работ [7–13], где угловое разрешение было не хуже $\pm 3^\circ$. В [7] были определены значения энергий и углов четырех критических минимумов с точностью до десятых eV и сотых долей градуса. В [8] абсолютные значения ДС были измерены в области энергий от 20 до 400 eV для углов из интервала 20 – 150° с угловым разреше-

нием $\pm 1.5^\circ$. Угловые зависимости сечений приведены там в таблице с шагом по углу, равным 10° , а в окрестностях минимумов — с шагом, равным 2° . В [9] были измерены относительные значения ДС при энергиях столкновений от 100 до 3000 eV в области углов 5 – 55° . Положения низкоугловых минимумов для 100, 150 и 200 eV приведены там с точностью до десятых градуса. В [10] были проведены абсолютные измерения ДС с точностью 20% при энергиях от 3 до 100 eV в области углов из интервала 20 – 135° . Приведенные там положения минимумов были получены с точностью $\pm 2^\circ$. В [11] также были проведены абсолютные измерения ДС с точностью 20%, но при энергиях от 5 до 200 eV для углов из интервала 10 – 125° с угловым разрешением $\pm 2^\circ$. И наконец, в [12,13] были измерены относительные значения ДС при энергиях от 20 до 80 eV в области углов 10 – 150° с угловым разрешением, меняющимся от 2° при 12 eV до 0.8° при 80 eV. Для нормировки сечений там были использованы данные из [10], что предопределило погрешность определения абсолютных значений ДС $\sim 24\%$. В [13] приведены положения минимумов с точностью до 1° .

В теоретических работах [4–6,14–18] также достаточно подробно было исследовано упругое рассеяние электронов атомами криптона. Однако лишь в [4] были рассчитаны угловые положения минимумов ДС. Тем не менее для тех работ, где ДС были приведены в таблицах с шагом по углу не больше 5° , мы оценили положения минимумов, используя процедуру сглаживания данных.

Один из наиболее основательных расчетов упругого рассеяния электронов атомами криптона был сделан в [4] с использованием R -матричного метода. В работе приведены фазовые сдвиги для $L = 0 - 4$ для энергий от 0.1 до 15 eV, а ДС и углы минимумов — для энергий от 1 до 120 eV. В [18] в релятивистском приближении с использованием модельного поляризационного потенциала с учетом как дипольной, так и квадрупольной поляризуемостей атома криптона были рассчитаны ДС для энергий от 0.8 до 150 eV. В релятивистском расчете,

без учета поляризационного, а для энергий больше 200 eV и без учета обменного взаимодействия, [5] были определены ДС в широкой области энергий от 2 до 1500 eV, однако приведены лишь на рисунках. В табличном виде там опубликованы значения энергий и углов полной спиновой поляризации рассеянных электронов. Мы использовали эти данные для определения положения критических минимумов и ссылаемся ниже на них как на минимумы из работы [5]. В [6] для расчета ДС в области энергий от 20 до 3000 eV был использован локальный комплексный потенциал. В таблице сечения приведены для десяти значений энергий из интервала 20–500 eV. В [14] в полурелятивистском приближении было исследовано упругое рассеяние электронов атомами криптона в области низких энергий от 0.01 до 30 eV. Используя приведенные в работе для $L = 0-8$ парциально-волновые фазовые сдвиги, а для $L \geq 9$ асимптотические значения фаз (см., например, (8) в [3]), мы рассчитали положения минимумов в ДС. В [15] для энергий от 10 до 50 eV в релятивистском приближении с использованием локального потенциала были рассчитаны ДС, однако они приведены там лишь на рисунках для ограниченной области углов.

Тщательное исследование рассматриваемого здесь процесса было проведено в [16] в области низких энергий. Вычисления проведены там с точным учетом обмена и включением только дипольной части поляризационного потенциала. Фазовые сдвиги приведены для $L = 0-6$ для энергий от 0 до 54.4 eV, а ДС — для девяти значений энергий от 3 до 50 eV. В [17] были улучшены вычисления упругого рассеяния электронов атомами инертных газов посредством учета эффектов динамического искажения. Однако в табличном виде там приведены лишь энергетические зависимости интегральных сечений.

Целью данной работы является расчет энергетических зависимостей угловых положений минимумов и определение критических минимумов в ДС упругого рассеяния электронов атомами криптона в области энергий до 500 eV.

Метод расчета и обсуждение результатов

Для расчета сечений рассеяния ниже используется тот же теоретический метод, что и в [3]. В качестве потенциала взаимодействия электронов с атомами криптона взят феноменологический вещественный потенциал $V(r)$ [3, (5)]. Значения параметров для электростатического потенциала $V_s(r)$ и плотности электронов атома криптона $\rho(r)$ взяты из [19], где они были найдены в рамках метода Хартри–Фока: ${}^a\gamma_2 = -0.9534$ и ${}^a\gamma_1 = 1 - {}^a\gamma_2$ — безразмерные; ${}^a\lambda_1 = 6.029$, ${}^a\lambda_2 = 52.84$, ${}^b\lambda_1 = 14.032$, ${}^b\lambda_2 = 38.138$, ${}^b\lambda_3 = 2.174$, ${}^b\gamma_1 = -16.23$, ${}^b\gamma_2 = -28.297$, ${}^b\gamma_3 = 0.7832$ — все в единицах (a_0^{-1}). Здесь и далее a_0 — первый борковский радиус атома

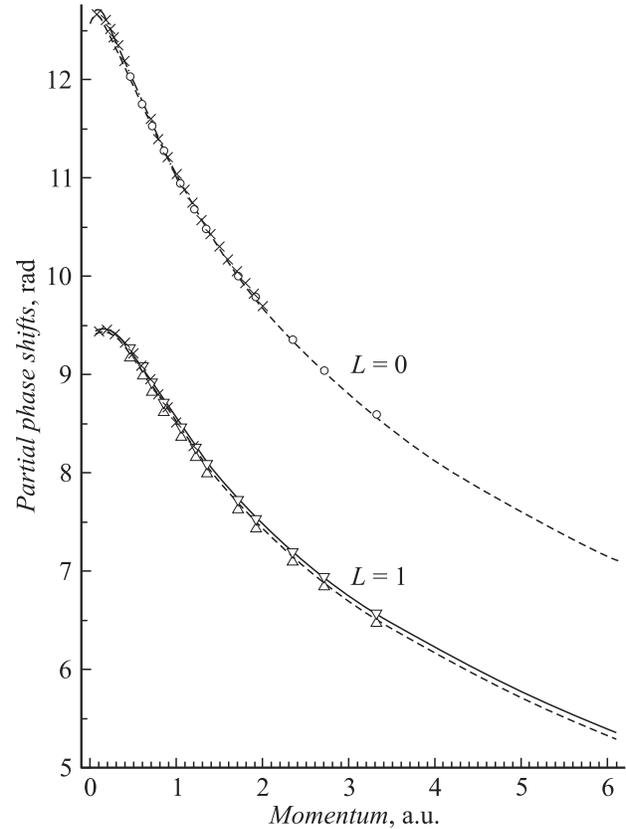


Рис. 1. Зависимость s - и p -волновых фазовых сдвигов от импульса налетающего электрона. Штриховая кривая с двумя точками — [4], \times — [16]; для $L = 0$: пунктир — данный расчет, \circ — [26]; для $L = 1$: сплошная и пунктир — данный расчет δ_1^- и δ_1^+ соответственно, ∇ и \triangle — [26], δ_1^- и δ_1^+ соответственно.

водорода. Плотность электронов и потенциал ионизации атома криптона $I = 13.9997$ eV [20] используются для расчета локального обменного потенциала $V_e(r)$. Дипольная поляризуемость атома криптона $\alpha_d = 16.74 a_0^3$, необходимая для расчета поляризационного потенциала

$$V_p(r) = -\frac{\alpha_d}{2r^4} \left\{ 1 - \exp \left[-\left(\frac{r}{R_c} \right)^6 \right] \right\},$$

взята из [21]. Для определения параметра R_c в $V_p(r)$, так же как и в [3], был использован хорошо известный факт существования минимума Рамзауэра–Таундсена в полном сечении низкоэнергетического рассеяния электронов атомами инертных газов (см., например, [22,23] и ссылки там). Для нескольких значений параметра с использованием метода фазовых функций [24,25] был сделан расчет энергетической зависимости s -волнового фазового сдвига δ_0 при низких энергиях. Было показано, что для случая $R_c = 3.2 a_0$ (рис. 1) значение фазового сдвига δ_0 с увеличением энергии налетающих электронов увеличивалось от 12.59 rad при $E = 0.001$ eV до 12.64 rad при $E = 0.07$ eV, а затем уменьшалось, приобретая при $E = 0.41$ eV значение

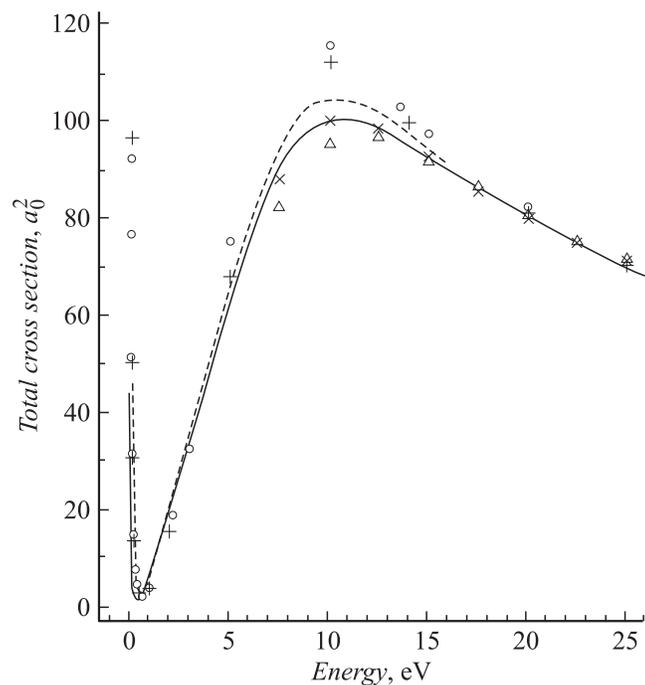


Рис. 2. Энергетическая зависимость полного сечения рассеяния электронов атомами криптона. Эксперимент: \times — [27], \triangle — [28]; теория: сплошная кривая — данный расчет, штриховая — [4], $+$ — [14], \circ — [17].

$12.57 \text{ rad} \approx 4\pi$. В результате мы получили в s -волновом парциальном сечении при этой энергии глубокий минимум, обусловивший в полном сечении минимум Рамзауэра–Таундсена при 0.42 eV (рис. 2). Экспериментальное сечение из [23] имеет минимальное значение $(1.7 \pm 0.5)a_0^2$ при $E = 0.66 \pm 0.29 \text{ eV}$. Наш расчет ($1.3 a_0^2$ при 0.42 eV) находится в пределах экспериментальной ошибки как по энергии, так и по величине сечения.

На рис. 1 видно, что, начиная с $k = 0.38 \text{ a.u.}$ (в статье используется атомная система единиц (a.u.), $e = m_e = \hbar = 1$), рассчитанные нами энергетические зависимости фазовых сдвигов δ_0 и δ_1 хорошо согласуются с расчетами [4,16] и с релятивистским расчетом [26]. Также вполне удовлетворительное согласие с результатами этих работ было получено нами и для орбитальных моментов $L = 3, 4$ (рис.3). Для d -волнового фазового сдвига мы получили хорошее согласие с данными из работы [26] (рис. 3). Как указано в [16], наибольшие различия между значениями фазовых сдвигов, полученных различными методами, существуют именно для $L = 2$ в интервале энергий 6–50 eV. Резонансного типа крутой подъем d -волнового фазового сдвига в интервале энергий от 1 до 20 eV привел к появлению в полном сечении максимума при 10 eV. Как видно на рис. 2, наш расчет хорошо согласуется с экспериментом [27]. То, что в [16,17] максимум сечения при 10 eV выше экспериментального более чем на 20%, означает, что, по-видимому, d -волновой фазовый сдвиг в этом энерге-

тическом интервале имеет менее крутой подъем, чем был получен в [16,17]. Сечение рассеяния из [4] в максимуме выше эксперимента всего на 5%. Как видно на рис. 3, рассчитанная в [4] d -фаза также имеет менее крутой подъем, чем в [16,17].

В табл. 1 мы сравнили наш расчет парциально-волновых фазовых сдвигов для $L = 0-3$ с нерелятивистским R -матричным [4], с полурелятивистским [14] и с релятивистским [26] расчетами. В [14,26] для описания атома были использованы релятивистские хартри-фокковские волновые функции. Во всех трех работах обмен был учтен точно. Для учета поляризационного взаимодействия в [4] и [14] была использована дипольная поляризуемость, а в [26] — модельный поляризационный потенциал с учетом дипольной и квадрупольной поляризуемостей. Как видно в таблице s -фазы, рассчитанные в [4,14,26], практически совпадают. Следовательно, различия между нерелятивистским и релятивистским описанием атома криптона несущественны.

Для сравнения с [4] мы привели в таблице также значения наших фазовых сдвигов, рассчитанных без учета спин-орбитального взаимодействия. Как видно, наш расчет δ_0 отличается от [4] не более чем на 0.09%, δ_1 — на 0.5% и δ_2 — на 0.03% при 5 eV и 1.3% при 10 eV. Следовательно, использованные в данной работе параметризованные $V_s(r)$ и $\rho(r)$, а также локальный $V_e(r)$ вполне удовлетворительно описывают стат-обменное $(V_s + V_e)$ взаимодействие налетающего электрона с атомом криптона.

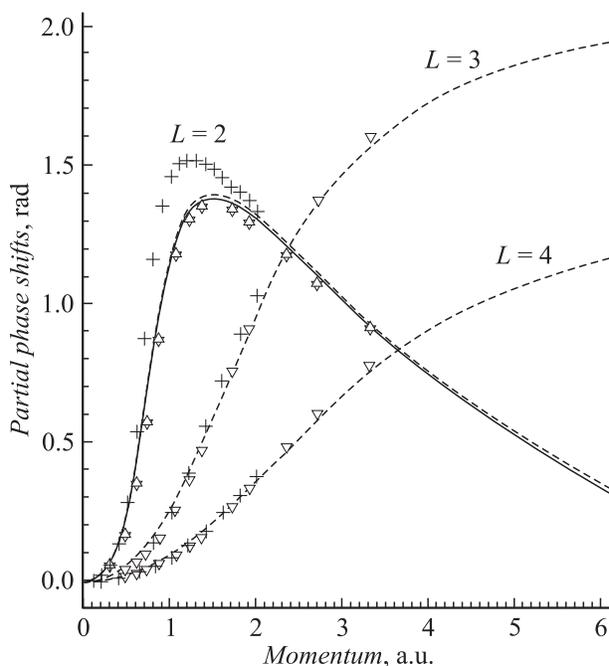


Рис. 3. Зависимость d -, f - и g -волновых фазовых сдвигов от импульса налетающего электрона (d -фазы приведены как $\delta_2 - \pi$). Для всех L штриховая кривая — данный расчет δ_L^- , ∇ — δ_L^- [26], штриховая с двумя точками — [4], $+$ — [16]; для $L = 2$: сплошная — данный расчет δ_2^+ , \triangle — δ_2^+ [26].

Таблица 1. Парциально волновые фазовые сдвиги δ_L (в rad) для упругого рассеяния электронов атомами криптона

δ_L	$E = 5 \text{ eV}$				$E = 10 \text{ eV}$				$E = 100 \text{ eV}$		$E = 150 \text{ eV}$	
	[4]	[14]	[26]	наш расчет	[4]	[14]	[26]	наш расчет	[26]	наш расчет	[26]	наш расчет
δ_0	11.77	11.797	11.76	11.78	11.28	11.312	11.284	11.29	9.0420	9.011	8.5868	8.551
δ_1	9.013	—	—	9.043	8.661	—	—	8.701	—	6.902	—	6.523
δ_1^-	—	9.097	9.062	9.072	—	8.736	8.703	8.734	6.9126	6.935	6.537	6.556
δ_1^+	—	9.066	9.029	9.028	—	8.697	8.662	8.685	6.8638	6.886	6.488	6.507
$\Delta\delta_1$	—	0.031	0.033	0.044	—	0.039	0.041	0.049	0.0488	0.049	0.049	0.049
δ_2	3.564	—	—	3.565	4.155	—	—	4.104	—	4.237	—	4.064
δ_2^-	—	3.629	3.492	3.566	—	4.290	4.016	4.108	4.2110	4.244	4.053	4.071
δ_2^+	—	3.635	3.494	3.564	—	4.289	4.013	4.100	4.1988	4.232	4.040	4.059
$\Delta\delta_2$	—	-0.006	-0.002	0.002	—	0.001	0.003	0.008	0.0122	0.012	0.013	0.012
δ_3	0.07373	0.0692	—	0.07469	0.1371	0.1594	—	0.1801	—	1.349	—	1.559
δ_3^-	—	—	0.0657	0.07469	—	—	0.1532	0.1801	1.3633	1.350	1.5936	1.560
δ_3^+	—	—	0.0660	0.07469	—	—	0.1522	0.1801	1.3629	1.349	1.5936	1.559
$\Delta\delta_3$	—	—	-0.0003	0	—	—	0.001	0	0.004	0.001	0	0.001

П р и м е ч а н и е. Спин-орбитальное расщепление фазовых сдвигов: $\Delta\delta_L = \delta_L^- - \delta_L^+$, где $\delta_L^\pm \equiv \delta_L^{L\pm 1/2}$.

Сравнивая наш расчет δ_0 с релятивистским расчетом [26], отметим, что при малых энергиях отличие составило не более 0.09%, а при больших энергиях — не более 0.42%. Для p -, d - и f -волн отличие наших расчетов от [26] при 10 eV составило 0.35, 2.2 и 15.5% соответственно, а при 150 eV — всего лишь 0.29, 0.47 и 2.2% соответственно. Таким образом, можно сделать вывод, что отличие нашего расчета от [26] происходит не вследствие неполного учета релятивистских эффектов, а из-за использования различных модельных поляризационных потенциалов.

Как видно из табл. 1, в целом наш расчет хорошо согласуется с расчетом [14]. Отличие в d -фазе при 10 eV составило 4.4%. Как видно на рис. 2, рассчитанное в [14] полное сечение упругого рассеяния в максимуме при 10 eV на 10% больше экспериментального [27]. Как уже обсуждалось выше, это обусловлено более быстрым ростом d -фазы при этих энергиях, чем, например, в [4,26] и у нас.

Из выражения для амплитуды рассеяния „с переворотом спина“ $g(\theta)$ (см., например, (3) в [3]) следует, что величина этой амплитуды зависит от величины спин-орбитального расщепления фазовых сдвигов $\Delta\delta_L$. Из табл. 1 видно, что основной вклад в эту амплитуду дают p - и d -волны и для 100 и 150 eV $\Delta\delta_{1,2}$, полученные в данной работе, такие же, как и в [26].

Таким образом, с использованием локального потенциала $V(r)$ с параметром R_c , найденным из упомянутого выше требования к низкоэнергетическому поведению s -волнового фазового сдвига, мы и для других волн получили фазовые сдвиги, хорошо согласующиеся в широкой области энергий с R -матричным расчетом [4] и с расчетами [14,16,26], проведенными в различных приближениях.

Так как в [16,26] для $L \geq 7$ были использованы асимптотические значения фазовых сдвигов, мы сравнили расчет энергетической зависимости δ_7 , выполненный с

использованием как фазового уравнения, так и формулы (8) из [3]. Начиная с 50 eV, уже заметно различие между двумя расчетами. С 120 eV превышение асимптотического значения δ_7 над расчетным с ростом энергии постепенно увеличивается, достигая при 500 eV почти 30%. Очевидно, что для других $L > 7$ при тех или иных энергиях различие между расчетными значениями фазовых сдвигов и асимптотическими также будет существенным.

В зависимости от энергии налетающих электронов количество парциальных волн, рассчитанных с помощью фазового уравнения, было различным и, например, для 1 eV составило 6 волн, а для 500 eV — 32 волны. Следовательно, для 500 eV мы использовали формулу для асимптотических фаз, лишь начиная с $L = 32$. А, например, для 150 eV — начиная с $L = 20$. Всего при расчете ДС нами учитывалось 300 парциальных фазовых сдвигов.

Как уже упоминалось во Введении, для случая атома криптона ДС в некотором интервале средних энергий могут иметь три минимума. На рис. 4 это продемонстрировано для энергии 100 eV. Как видно, наилучшим образом согласуются друг с другом угловые положения минимумов, полученные в различных как теоретических, так и экспериментальных работах. Минимумы, расположенные при углах $\leq 80^\circ$, мы будем называть низкоугловыми минимумами (min 1), а остальные минимумы — высокоугловыми (min 2 и min 3). На рис. 5, *a* и *b*, приведены энергетические зависимости угловых положений этих минимумов.

Сравнивая на рис. 5, *a* положения min 1, полученных в экспериментальных [6,8–11,13] и теоретических [4,14,16,18] работах, можно заключить, что наш расчет повторяет общую тенденцию изменения угловых положений минимумов. Исключение составляют энергии от 7.5 до 15 eV, при которых в отличие от [10,11,16] в данном расчете и в [4,14,18] минимумы min 1 выполаживаются. Заметим, что при этих энергиях ДС в интервале

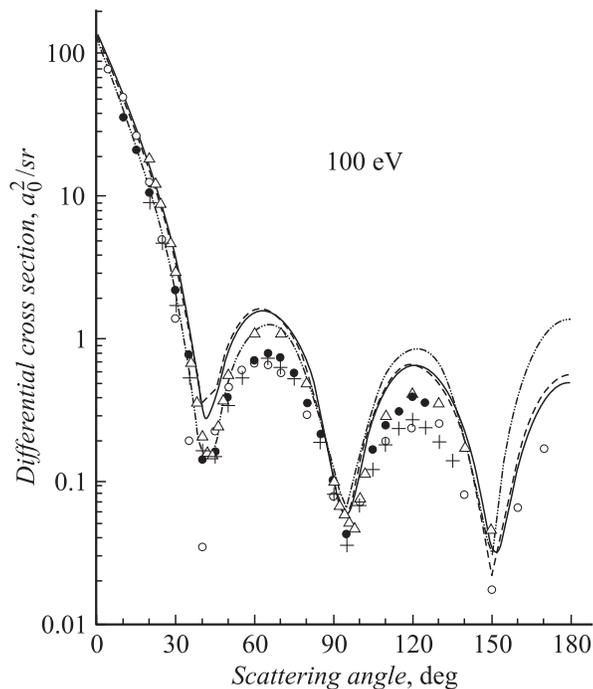


Рис. 4. Угловая зависимость дифференциального сечения упругого рассеяния электронов атомами криптона при 100 eV. Эксперимент: \triangle — [8], $+$ — [10], \bullet — [11]; теория: сплошная кривая — данный расчет, штриховая с двумя точками — [4], штриховая — [18], \circ — [6].

углов 60–80° имеет плавное поведение и отличие нашего расчета от экспериментальных сечений [10,11] находится в пределах экспериментальной ошибки. Начиная с 20 eV, min 1 снова четко проявляется как в экспериментальных, так и в теоретических сечениях, причем различие в положениях минимума составляет всего 4°. Такое малое различие в положениях min 1 сохраняется до 100 eV. На рис. 5, *a* угловые положения минимумов приведены до 200 eV. Для ббльших энергий в эксперименте [8], в расчетах [5,6] и у нас (начиная с 194 eV) низкоугловой минимум выполаживается и исчезает.

Как видно на рис. 5, *b*, угловые положения высокоугловых минимумов min 2 (кривая 1) с увеличением энергии изменяются от 148.8° при 1 eV до 112.8° при 15 eV. Затем значение угла минимума увеличивается до 153.5° при 30 eV и снова уменьшается до 73.1° при 500 eV.

Начиная с 69 eV, в угловой зависимости ДС появляется третий минимум (min 3). Угловое положение этого минимума изменяется от 138.2° при 69 eV до 151.6° при 100 eV и затем до 123.9° при 500 eV (кривая 2). Рассчитанные в [4–6,18] ДС для энергий от 70 до 200 eV также имеют три минимума. Экспериментальные сечения в [10] приведены до 135°, а в [8,12,13] — до 150°. Для 75 eV в [10], для 80 eV в [13] и для 100 eV в [8,10,11] после высокоугловых максимумов при

120–130° сечения спадают до 125° в [11], до 135° в [10] и до 150° в [10,13]. С увеличением энергии положение третьего минимума смещается в сторону меньших углов. В [8] для 200 и 400 eV этот минимум уже явно виден при 140 и 130° соответственно. И наконец, на рис. 5, *b* нанесены экспериментальные [7] и теоретические [5] положения критических минимумов. Отметим хорошее согласие нашего расчета min 3 (кривая 2) с положениями этих минимумов. Как видно на рис. 5, *b*, начиная с 50 и до 500 eV как экспериментальные, так и теоретические положения min 2 и min 3 прекрасно согласуются друг с другом.

Расчеты показали, что, начиная с 640 eV, min 2 выполаживается и исчезает. Значения ДС в min 2 в интервале энергий 500–630 eV практически не меняются и равны $\sim 0.11 a_0^2/sr$. Значение угла min 2 при этих энергиях изменяется от 73 до 78°. Что касается min 3, то в своих расчетах мы получили, что значение угла этого минимума в интервале энергий 500–800 eV изменяется

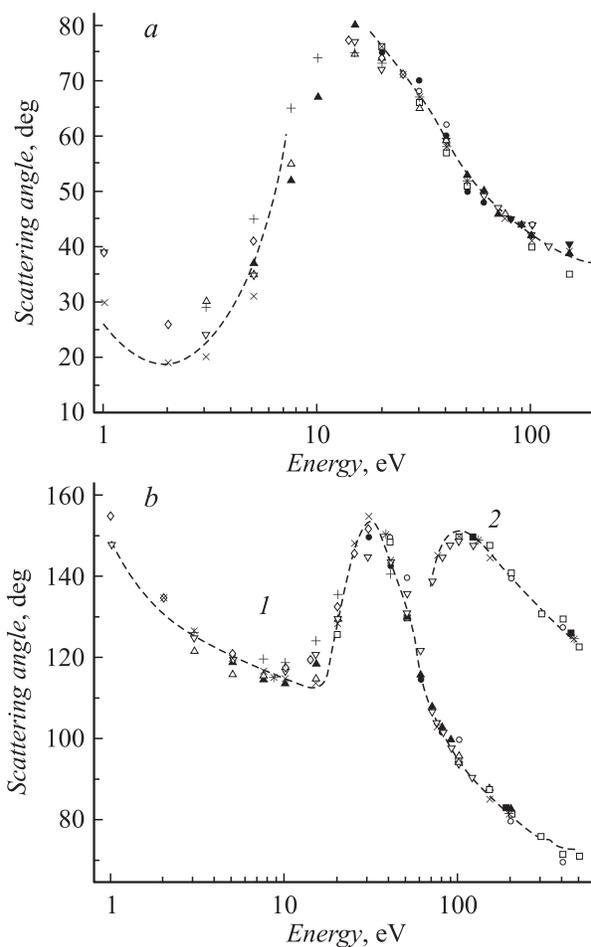


Рис. 5. Энергетическая зависимость угловых положений низкоугловых (*a*) и высокоугловых (*b*) минимумов дифференциальных сечений упругого рассеяния электронов атомами криптона. Эксперимент: \blacksquare — [7], \circ — [8], \blacktriangledown — [9], \triangle — [10], \blacktriangle — [11], \bullet — [13]; теория: ∇ — [4], \times — [18], $*$ — [5], \square — [6], \diamond — [14], $+$ — [16], штриховая кривая — данный расчет.

от 124 до 115° . Значения ДС в $\min 3$ при этих энергиях постепенно увеличились с 0.0026 до $0.03 a_0^2/sr$.

Среди всех минимумов наиболее глубокими оказались высокоугловые (см., например, рис. 4). На рис. 6, *a* и *b* приведена энергетическая зависимость значений ДС в минимумах $\min 2$ и $\min 3$, угловые положения которых приведены соответственно на кривых 1 и 2 на рис. 5, *b*. Семь наименьших таких значений мы определяем как критические минимумы в ДС упругого рассеяния электронов атомами криптона. Полученные здесь критические энергии E_C и углы θ_C сравниваются в табл. 2 с имеющимися в литературе экспериментальными данными [7]. Выше мы упоминали, что в [5] приведены точки полной спиновой поляризации электронов, упруго рассеянных атомами криптона. В этих точках функция

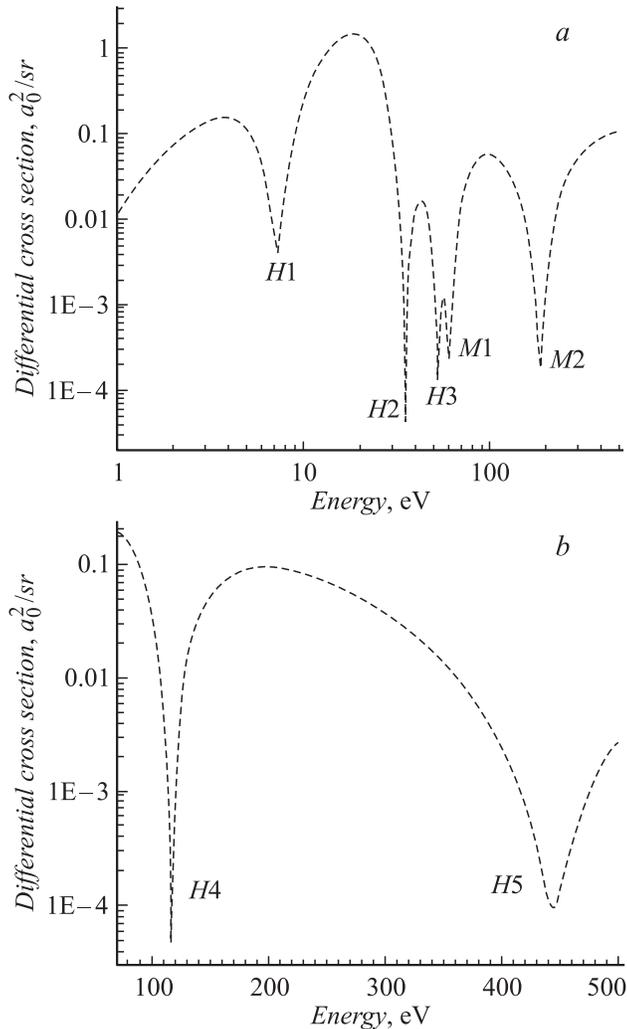


Рис. 6. Энергетическая зависимость высокоугловых минимальных значений дифференциальных сечений упругого рассеяния электронов атомами криптона: *a* — угловые положения минимумов соответствуют кривой 1 и *b* — кривой 2 на рис. 4, *b*. Критические точки: $H1 = (7.4 \text{ eV}, 117.15^\circ)$, $H2 = (35.9 \text{ eV}, 149.70^\circ)$, $H3 = (53.6 \text{ eV}, 128.15^\circ)$, $M1 = (61.4 \text{ eV}, 114.14^\circ)$, $M2 = (187 \text{ eV}, 82.46^\circ)$ и $H4 = (116.5 \text{ eV}, 150.71^\circ)$, $H5 = (444.2 \text{ eV}, 125.86^\circ)$.

Таблица 2. Энергетические E_C и угловые θ_C положения критических минимумов

Критические минимумы	Данный расчет		Другие результаты		
	E_C (eV)	θ_C (deg)	E_C (eV)	θ_C (deg)	Ссылки
$H1$	7.4	117.15	8.6	115.4	[5]
$H2$	35.9	149.70	38.7 ± 0.6 37.9	149.70 ± 0.01 150.7	[7] [5]
$H3$	53.6	128.15	—	—	—
$M1$	61.4	114.14	—	—	—
$H4$	116.5	150.71	121.6 ± 0.8 128.5	149.98 ± 0.05 149.3	[7] [5]
$M2$	187	82.46	188.0 ± 0.9 195	83.2 ± 0.3 81.9	[7] [5]
$H5$	444.2	125.86	444.2 ± 1.4 459	126.6 ± 0.20 125.2	[7] [5]

Шермана $S(E, \theta) = \pm 1$. Поскольку эти точки расположены симметрично относительно критического минимума (ср., например, табл. 1 и 2 в [3]), мы попытались оценить, какие значения E_C и θ_C могли бы быть получены в [5]. Эти оценочные данные и приведены выше в табл. 2, откуда видно, что угловые положения минимумов $H2$ и $H4$, а для $M2$ и $H5$ и энергетические положения хорошо согласуются с экспериментом [7]. Положение минимума $H1$ хорошо согласуется с положением высокоуглового минимума в ДС, полученного для 7.5 eV в экспериментах [10,11] при 116 и 115° соответственно и в теоретических расчетах [18,16] при 117 и 120° соответственно.

Заметим, что значения всех E_C из [5] больше наших. Это можно объяснить тем, что в [5] не было учтено поляризационное взаимодействие.

Авторы эксперимента [9] упоминают частное сообщение Walker (1974 г.), где он провел расчеты с включением поляризационного потенциала такого же вида, что и у нас. В [9] приведены отношения их результатов с результатами Walker, включающими обменное и поляризационное взаимодействия, и в скобках — соотношение их результатов с его расчетами, включающими только обмен. Для дифференциального сечения упругого рассеяния электронов атомами криптона эти отношения равны для 100 eV , при 5° — 0.96 (1.99) и при 10° — 0.89 (1.32). Очевидно, что включение поляризационного взаимодействия существенно приблизило теоретический расчет к эксперименту. Мы сравнили наши расчеты с [9] и получили для 100 eV при 5° они составляют 0.93 и при 10° — 0.84 , т.е. почти то же самое, что и в сообщении Walker. Заметим, что в его расчете значение свободного параметра в поляризационном потенциале $R_c = 3 a_0$, так же, как и у нас, было найдено с использованием энергии минимума Рамзауэра—Таундсена. Так как и у нас и в работе Walker был использован практически один и тот же $V_p(r)$, мы можем заключить, что отсутствие $V_p(r)$

в расчете [5] привело к более медленному, чем у нас (рис. 3), росту фазовых сдвигов для $L \geq 2$ и прежде всего d -фазы, что не могло не сказаться на энергетическом положении критических минимумов в [5]. Заметим, что в данном расчете, например, для $E = 7.4 \text{ eV}$ вклад d -волнового парциального сечения в полное сечение составил 57% (о влиянии учета поляризационного потенциала на энергетическую зависимость фазовых сдвигов см., например, в [29]).

Мы не привели здесь энергетическую зависимость низкоугловых минимальных значений ДС, так как эти значения для $E \geq 1 \text{ eV}$ больше, чем $0.01 a_0^2/sr$ (ср. с рис. 6). Например, для $E = 1 \text{ eV}$ низкоугловой минимум расположен при 25.7° , где квадрат модуля прямой амплитуды рассеяния $|f|^2 = 1.2 \cdot 10^{-2} a_0^2/sr$, а квадрат модуля обменной амплитуды $|g|^2 = 7.7 \cdot 10^{-4} a_0^2/sr$. Заметим, что в минимуме $H1$, наименее глубоком из высокоугловых минимумов, $|f|^2 = 7.5 \cdot 10^{-6} a_0^2/sr$, а $|g|^2 = 4.2 \cdot 10^{-3} a_0^2/sr$, т.е. $|g|^2$ почти на три порядка больше, чем $|f|^2$. Для всех найденных в данной работе критических минимумов в малых угловых окрестностях критических углов θ_C выполняется условие $|g|^2 \geq |f|^2$, т.е. (см., например, [3]) в энергетических и угловых окрестностях этих минимумов можно обнаружить полную спиновую поляризацию рассеянных электронов.

- [18] *Sienkiewicz J.E., Baylis W.E.* // J. Phys. B. 1992. Vol. 25. P. 2081–2088.
- [19] *Strand T.G., Bonham R.A.* // J. Chem. Phys. 1964. Vol. 40. N 6. P. 1686–1691.
- [20] *Радциг А.А., Смирнов Б.М.* Параметры атомов и атомных ионов. Справочник. М., 1986. 344 с.
- [21] *Miller T.M., Bederson B.* // Advances in Atomic and Molecular Physics / Ed. D.R. Bates, B. Bederson. New York: Academic Press, 1977. Vol. 13. P. 1–55.
- [22] *Frost L.S., Phelps A.V.* // Phys. Rev. 1964. Vol. 136. N 6A. P. A1538–1545.
- [23] *Гуськов Ю.К., Саввов Р.В., Слободянюк В.А.* // ЖТФ. 1978. Т. 48. Вып. 2. С. 277–284.
- [24] *Калоджеро Ф.* Метод фазовых функций в теории потенциального рассеяния. Пер. с англ. М.: Мир, 1972. 292 с.
- [25] *Бабинов В.В.* Метод фазовых функций в квантовой механике. М.: Наука, 1988. 256 с.
- [26] *Sienkiewicz J.E., Baylis W.E.* // J. Phys. B. 1991. Vol. 24. P. 1739–1748.
- [27] *Jost K., Bisling P.G.F., Eschen F.* et al. // Proc. XIII Intern. Conf. on Physics of Electronic and Atomic Collisions. Berlin, 1983. P. 91.
- [28] *Dababneh M.S., Hsieh Y.F., Kauppila W.E.* et al. // Phys. Rev. A. 1982. Vol. 26. P. 1252.
- [29] *Kurtz H.A., Jordan K.D.* // J. Phys. B. 1981. Vol. 14. P. 4361–4376.

Список литературы

- [1] *Panajotović R., Filipović D., Marinković B.* et al. // J. Phys. B. 1997. Vol. 30. P. 5877–5894.
- [2] *Filipović D., Marinković B.* // Proc. XX Intern. Conf. on Phys. Electronic and Atomic Collisions. Vienna, 1997. P. TH005.
- [3] *Келемен В.И.* // ЖТФ. 2002. Т. 72. Вып. 9. С. 13–20.
- [4] *Fon W.C., Berrington K.A., Hibbert A.* // J. Phys. B. 1984. Vol. 17. P. 3279–3294.
- [5] *Walker D.W.* // Adv. Phys. 1971. Vol. 20. P. 257–323.
- [6] *McCarthy I.E., Noble C.J., Phillips B.A., Turnbull A.D.* // Phys. Rev. A. 1977. Vol. 15. N 6. P. 2173–2185.
- [7] *Kessler J., Liedtke J., Lukas C.B.* Physics of Ionized Gases (Dubrovnik) / Ed. B. Navinšek. Ljubljana: J. Stefan Institute, 1976. P. 61.
- [8] *Williams J.F., Crowe A.* // J. Phys. B. 1975. Vol. 8. P. 2233–2248.
- [9] *Jansen R.H.J., de Heer F.J.* // J. Phys. B. 1976. Vol. 9. N 2. P. 213–226.
- [10] *Srivastava S.K., Tanaka H., Chutjian A.* et al. // Phys. Rev. A. 1981. Vol. 23. N 5. P. 2156–2166.
- [11] *Danjo A.* // J. Phys. B. 1988. Vol. 21. P. 3759–3766.
- [12] *Filipović D., Kazakov S., Marinković B.* et al. The Physics of Ionized Gases. Contrib. Papers of SPIG'86. Sibenik, 1986. P. 3–6.
- [13] *Казаков С.М.* Докт. дис. Минск, 1991.
- [14] *Sin Fai Lam L.T.* // J. Phys. B. 1982. Vol. 15. P. 119–142.
- [15] *Kemper F., Awe B., Rosicky F., Feder R.* // J. Phys. B. 1983. Vol. 16. P. 1819–1825.
- [16] *McEachran R.P., Stauffer A.D.* // J. Phys. B. 1984. Vol. 17. P. 2507–2518.
- [17] *Mimnagh D.J.R., McEachran R.P., Stauffer A.D.* // J. Phys. B. 1993. Vol. 26. P. 1727–1741.