

01; 02

© 1991 г.

РАССЕЯНИЕ ЭЛЕКТРОНОВ АТОМАМИ КАЛЬЦИЯ ПРИ НИЗКИХ И СРЕДНИХ ЭНЕРГИЯХ В ОПТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ

В. И. Келемен, Е. Ю. Ремета, Е. П. Сабад

В модели феноменологического комплексного оптического потенциала исследовано рассеяние электронов на атомах Са в области энергий 0—50 эВ. Значение подгоночного параметра, входящего в поляризационный потенциал, выбирается исходя из факта существования стабильного иона Са⁻. Показано, что экспериментально обнаруженный пик в сечении вблизи порога упругого рассеяния обусловлен ²D-резонансом формы при энергии 0.9 эВ с шириной 0.68 эВ. Полученная энергетическая зависимость полного сечения рассеяния хорошо согласуется с экспериментом.

Введение

Недавно в экспериментальной [1] и теоретической [2] работах было установлено существование стабильного отрицательного иона кальция в $4s^2 4p^2 P$ -состоянии. Этот замечательный результат позволил по-новому взглянуть на теоретическое описание низкоэнергетического e^- Са рассеяния.

Экспериментальное исследование указанного процесса в работе [3] выявило в интегральном сечении упругого рассеяния ярко выраженный максимум при энергии налетающего электрона 0.7 ± 0.1 эВ, который был там интерпретирован как ²P-резонанс формы.

В теоретических работах [4-6] упругое рассеяние электронов атомами кальция исследовалось с использованием модельного оптического потенциала, а в работе [7] — с использованием оптического потенциала, рассчитанного в рамках приближения случайных фаз с обменом с учетом монополюсных, дипольных и квадрупольных возмущений $3p$ - и $4s$ -оболочек. В каждой из этих работ также были получены ²P-резонансы формы при 0.08, 0.3 и 0.05 эВ соответственно. Таким образом, используемые в этих расчетах эффективные потенциалы оказались недостаточно «сильными» для образования стабильного ²P-состояния отрицательного иона кальция и приводили лишь к захвату электрона в квазисвязанное ²P-состояние. Расчеты же методом сильной связи $4^1S-4^1P-3^4D$ -каналов [8] вообще не привели к каким-либо резонансам вблизи упругого порога.

В недавней работе [9] с помощью уравнения Дайсона для волновой функции добавочного электрона была вычислена энергия сродства атома кальция к электрону. Полученная там p -волновая фаза отрицает возможность существования низкоэнергетического ²P-резонанса.

В настоящей работе, как и в [5, 6], e^- Са рассеяние при низких и средних энергиях исследуется в рамках модели феноменологического комплексного оптического потенциала, в котором, однако, значение подгоночного параметра, входящего в поляризационный потенциал, выбирается с учетом факта существования стабильного иона Са⁻. Показано, что экспериментальный пик в сечении вблизи порога упругого рассеяния обусловлен ²D-резонансом формы. Рассчитанное здесь полное сечение рассеяния при средних энергиях налетающего электрона удовлетворительно описывает эксперимент.

В качестве оптического потенциала мы используем модельный комплексный потенциал вида

$$V(r, E) = V_s(r) + V_e(r, E) + V_p(r) + iV_a(r, E), \quad (1)$$

где E — энергия налетающего электрона; V_s — статический потенциал, выражающийся известным образом через электронную плотность $\rho(r)$ атома кальция в основном состоянии; V_e — локальный обменный потенциал в приближении свободного электронного газа (см., например, [10]); V_p — поляризационный потенциал; V_a — потенциал поглощения, описывающий вклад неупругих процессов в полное сечение.

Для V_a использовано выражение, полученное в приближении квазисвободного рассеяния налетающего электрона на электронах мишени с Паулиевской блокировкой [11].

В данной работе получены результаты с использованием поляризационного потенциала вида

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

где r_c — подгочный параметр, который был выбран так, чтобы в этом потенциале осуществилось связанное p -состояние; $\alpha (a_0^3)$ — дипольная статическая поляризуемость атома кальция.

Электронная плотность ρ , дипольная поляризуемость и потенциал ионизации атома кальция, через которые выражаются перечисленные потенциалы, были вычислены в рамках локального приближения в теории функционала плотности (ЛТФП) (см., например, [12]) с учетом скалярно-релятивистских эффектов и с исключением энергии самодействия электронов [13]. В отличие от метода Хартри—Фока (ХФ) в ЛТФП частично учитываются межэлектронные корреляции, однако для обменного взаимодействия используется локальное приближение.

Электронная плотность $\rho(a_0^{-3})$ атома кальция, рассчитанная в приближениях ЛТФП и ХФ

$r (a_0)$	ЛТФП	ХФ [14]	$r (a_0)$	ЛТФП	ХФ [14]
0.1	144.77	144.78	4	2.683 (−3)	2.032 (−3)
0.2	44.86	44.49	5	1.062 (−3)	1.060 (−3)
0.3	20.61	20.52	6	3.801 (−1)	5.172 (−1)
0.5	2.913	2.784	7	1.277 (−1)	2.443 (−4)
0.8	8.464 (−1)	8.486 (−1)	8	4.116 (−5)	1.097 (−4)
1.0	6.131 (−1)	6.008 (−1)	9	1.285 (−5)	4.906 (−5)
1.5	1.620 (−1)	1.671 (−1)	10	3.928 (−6)	2.172 (−5)
2.0	3.627 (−2)	3.830 (−2)	15	8.548 (−9)	3.419 (−7)
2.5	1.175 (−2)	1.045 (−2)	20	1.576 (−11)	5.109 (−9)
3	6.271 (−3)	4.485 (−3)			

Полученная нами электронная плотность сравнивается в таблице с плотностью, рассчитанной [14] в приближении ХФ. Для дипольной поляризуемости α и потенциала ионизации I получены [5, 15] значения $148.86 a_0^3$ и 6.02 эВ (эксперимент дает [16] $\alpha = 170 \pm 17 a_0^3$, $I = 6.113$ эВ, ХФ расчет [17] — $\alpha = 230 a_0^3$).

Необходимые для расчета сечений сдвиги фаз δ_i находились нами как пределы фазовых функций $\delta_i(r)$ при $r \rightarrow \infty$ [18], а количество учтенных нами парциальных волн изменялось от трех при $E = 0.005$ эВ до двенадцати при $E = 50$ эВ с таким расчетом, чтобы вклад неучтенных парциальных сечений не превышал 2%. Отметим, что ниже первого порога возбуждения ($E = 1.8794$ эВ [18]) потенциал $V_a = 0$ и δ_i вещественны, тогда как выше порога они комплексны [19].

Напомним, что одним из важных преимуществ метода фазовых функций по сравнению с прямым решением уравнения Шредингера является возможность по поведению фазовой функции судить о количестве возможных связанных состояний в данном потенциале, а именно при малых энергиях для $\delta_l(r)$ характерно ступенчатое поведение [18]. Если N_l — число ступенек функции $\delta_l(r)$, то в данном потенциале возможно N_l связанных состояний, точнее, уровней, каждый из которых $2(2l+1)$ -кратно вырожден и характеризуется главным квантовым числом n и орбитальным моментом l . Каждому связанному состоянию соответствует ступенька высотой π или в случае связанного s -состояния с нулевой энергией — высотой $\pi/2$. Конечно, в силу принципа Паули добавочный электрон может связаться с атомом лишь в оболочку nl , которая незаполнена либо частично заполнена.

Обсуждение результатов

В сообщениях [5, 6] для расчета сечения e^-Ca рассеяния был использован оптический потенциал (1), в котором в качестве поляризационного потенциала был использован потенциал

$$V_p^{(2)}(r) = \begin{cases} -\frac{a}{2r^4}, & r > r_0, \\ -\frac{ar}{2r_0^5}, & r \leq r_0, \end{cases} \quad (3)$$

где параметр $r_0 = [\alpha/l(l+1)]^{1/2}$ был выбран равным расстоянию, на котором поляризационный потенциал компенсирует вклад центробежного члена (для $l=0$ r_0 берется таким же, как и для $l=1$).

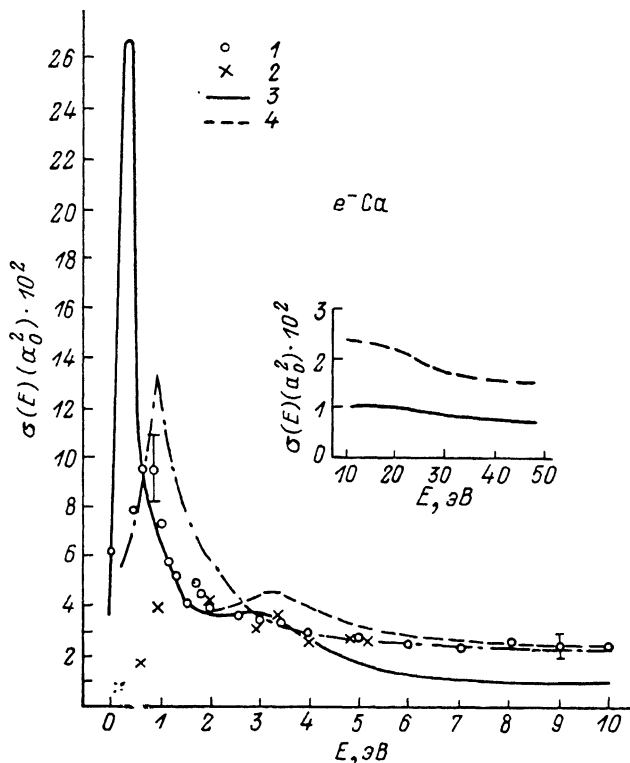
Расчитанные там фазовые функции $\delta_0(r)$ и $\delta_1(r)$ в припороговой области энергий имели четыре и две ступеньки соответственно, а $\delta_l(r)$ для $l \geq 2$ вообще не имели ступенек. Так как в атоме кальция полностью заполнены четыре s -оболочки и две p -оболочки, то мы заключаем, что в упомянутом оптическом потенциале невозможно образование отрицательного иона Ca^- . При этом в сечении упругого рассеяния имеются один P -резонанс ($E=0.3$ эВ, $\Gamma=0.66$ эВ) и один D -резонанс ($E=0.5$ эВ, $\Gamma=0.15$ эВ) формы. Аналогичные расчеты с поляризационным потенциалом $V_p^{(1)}$ показали, что при значениях параметра $r_c > 5a_0$ связанного состояния по-прежнему нет. Однако уже для $r_c = 5a_0$ у функции $\delta_1(r)$ появляется третий скачок на π , что свидетельствует о возможности существования в таком оптическом потенциале добавочного связанного p -электрона. При этом значении параметра r_c резонанс в p -волне исчезает и остается лишь резонанс в d -волне при $E=0.9$ эВ.

Таким образом, при уменьшении r_c до $5a_0$ полюс парциальной амплитуды $f_1(E)$, соответствующий p -резонансу, движется в области $\text{Re } E > 0$, $\text{Im } E < 0$ по направлению к точке $E=0$, соответствующей указанному состоянию. При дальнейшем уменьшении r_c полюс движется вдоль отрицательной вещественной полуоси.

Проведя с потенциалом $V_p^{(1)}$, в котором $r_c = 5a_0$, расчет сечения e^-Ca рассеяния, мы получили (см. рисунок), что низкоэнергетический пик в сечении обусловлен 2D -резонансом формы при $E_R=0.9$ эВ с шириной $\Gamma=0.68$ эВ. На рисунке приведено сравнение с экспериментальным полным сечением [3], расчет по методу сильной связи каналов (МССК) [9] и наши два расчета с $V_p^{(1)}$ и с $V_p^{(2)}$. Так как, начиная с 6 эВ, сечения, рассчитанные с $V_p^{(1)}$ и $V_p^{(2)}$, совпадают, то результаты расчета с потенциалом $V_p^{(1)}$ приведены только до энергии 10 эВ. Видно, что расчет с поляризационным потенциалом $V_p^{(1)}$ лучше описывает эксперимент, чем расчет с помощью МССК. Более того, достаточно хорошее согласие наших теоретических результатов с экспериментом в области малых энергий 6—10 эВ дает основание считать их надежными также и в широкой области средних энергий.

Что касается энергетической зависимости дифференциального сечения e^-Ca рассеяния в резонансной области, то имеется лишь один эксперимент [20],

поставленный при угле рассеяния 90° . Проведенные нами расчеты на основании полученных в данной работе фазовых сдвигов дали минимум Рамзауэра—Таунсенда дифференциального сечения при 0.02 эВ и максимум при 0.8 эВ, обязанный 2D -резонансу, что согласуется с этим экспериментом. В недавней работе [21] с использованием модельного корреляционно-поляризационного потенциала с подгоночным параметром также были воспроизведены упомянутые особенности экспериментального дифференциального сечения. Однако полученные в [21] слишком большие значения энергии и ширины 2D -резонанса ($E_R=1.75$ эВ, $\Gamma=3.2$ эВ), так же как и полные сечения рассеяния, существенно отличаются от данных эксперимента [3].



Зависимость полного сечения и сечения упругого e^-Ca рассеяния $\sigma(E)$ от энергии налетающего электрона E .

1 — экспериментальное полное сечение [3]; 2 — расчет полного сечения по МССК [9]; 3, 4 — наш расчет [5, 6] с $V_p^{(2)}$ соответственно интегрального упругого и полного сечений; штрихпунктир — данный расчет полного сечения с $V_p^{(1)}$ и $r_c=5 a_0$.

В заключение отметим, что в связи с теоретическим предсказанием [22] стабильных 2P -состояний Sr^- и Ba^- представляет интерес применить вышеописанный метод для описания рассеяния электронов атомами стронция и бария. Проведенные нами расчеты показали, что дополнительные связанные P -состояния в потенциале $V_p^{(1)}$ появляются при уменьшении параметра r_c до $5.4a_0$ и $6.18a_0$ в случае Sr и Ba соответственно. Оказывается, что при этих значениях параметра r_c в e^-Sr рассеянии имеется 2D -резонанс ($E_R=0.7$ эВ, $\Gamma=0.66$ эВ), а в e^-Ba рассеянии — 2D -резонанс ($E_R=0.4$ эВ, $\Gamma=0.26$ эВ) и весьма узкий 2F -резонанс ($E=0.0085$ эВ, $\Gamma \leq 6 \cdot 10^{-4}$ эВ). Дальнейшее уменьшение r_c до $5.66a_0$ переводит 2F -резонанс в связанное состояние, а 2D -резонанс смещается в область меньших энергий ($E_R=0.23$ эВ, $\Gamma=0.044$ эВ), что практически совпадает с положением максимума сечения в эксперименте [3] (0.2 эВ).

Таким образом, экспериментальные пики [3] в сечениях упругого рассеяния электронов атомами Sr и Ba обусловлены, по-видимому, только D -резонансами формы.

Список литературы

- [1] Pegg D. J., Thompson J. S., Compton R. N., Alton G. D. // Phys. Rev. Lett. 1987. Vol. 59. N 20. P. 2267—2270.
- [2] Froese Fischer C., Lagowski J. B., Vosko S. H. // Phys. Rev. Lett. 1987. Vol. 59. N 20. P. 2263—2266.
- [3] Романюк И. И., Шпеник О. Б., Запесочный И. П. // Письма в ЖЭТФ. 1980. Т. 32. Вып. 7. С. 472—476.
- [4] Kurtz H. A., Jordan K. D. // J. Phys. B. 1981. Vol. 14. P. 4361—4376.
- [5] Келемен В. И., Ремета Е. Ю., Сабад Е. П. // Тез. докл. X Всесоюз. конф. по физике электронных и атомных столкновений. Ужгород, 1988. Ч. 1. С. 16.
- [6] Kelemen V. I., Remeta E. Yu., Sabad E. P. // Proc. XVI Int. conf. on phys. electronic and atomic collisions. New York, 1989. P. 868.
- [7] Амусья М. Я., Сосниевкер В. А. // ЖТФ. 1989. Т. 59. Вып. 3. С. 28—32.
- [8] Фабрикант И. И. // Атомные процессы. Рига, 1975. С. 80—123.
- [9] Gribakin G. F., Gulisev B. V., Ivanov V. K., Kuchiev M. Yu. // Proc. XVI Int. conf. on phys. electronic and atomic collisions. New York, 1989. P. 851.
- [10] Келемен В. И., Сабад Е. П., Довганич М. М. // УФЖ. 1989. Т. 34. № 3. С. 345—349.
- [11] Staszewska G., Schwenke D. W., Thirumalai D., Truhlar D. G. // Phys. Rev. A. 1983. Vol. 28. P. 2740—2751.
- [12] Кон В., Вашишита П. // Теория неоднородного электронного газа. М., 1987. С. 86—150.
- [13] Perdew J. P., Zunger A. // Phys. Rev. B. 1981. Vol. 23. P. 5048—5079.
- [14] Strand T. G., Bonham R. A. // J. Chem. Phys. 1964. Vol. 40. P. 1686—1691.
- [15] German M. M., Remeta E. Yu., Farberovich O. V. // Proc. XVI Int. conf. on phys. electronic and atomic collisions. New York, 1989. P. 872.
- [16] Радциг А. А., Смирнов Б. М. Параметры атомов и атомных ионов. Справочник. М., 1986. 344 с.
- [17] Teachout R. R., Pack R. T. // Atom. Data. 1971. Vol. 3. P. 195—211.
- [18] Калоджеро Ф. Метод фазовых функций в теории потенциального рассеяния. М., 1972. 292 с.
- [19] Довганич М. М., Келемен В. И., Ремета Е. Ю. // Тез. докл. X Всесоюз. конф. по физике электронных и атомных столкновений. Ужгород, 1988. Ч. 2. С. 172.
- [20] Казаков С. М., Христофоров О. В. // ЖЭТФ. 1982. Т. 84. Вып. 5. С. 1772—1775.
- [21] Yuan J., Zhang Z. // J. Phys. B. 1989. Vol. 22. N 17. P. 2751—2757.
- [22] Froese Fischer C. // Phys. Rev. A. 1989. Vol. 39. N 3. P. 963—970.

Институт ядерных исследований АН УССР
Ужгородское отделение

Поступило в Редакцию
6 марта 1990 г.