

01;02

## Логарифмически точные полные сечения рассеяния быстрых электронов на атомах

© Б.А. Зон, В.Б. Зон

Воронежский государственный университет,  
394006 Россия, Воронеж  
e-mail: zon@niif.vsu.ru

(Поступило в Редакцию 29 марта 2006 г.)

Получена простая аналитическая формула для полного интегрального сечения рассеяния быстрых электронов на атомах. Эта формула имеет логарифмическую точность и получена на основе приближенного правила сумм, не учитывающего обменных эффектов в атомной волновой функции (приближение Хартри). Анализ показывает, что пренебрежение обменными эффектами допустимо в той же области рассеиваемых электронов, что и первое борновское приближение. Проведенные расчеты для He, Ne, Ag хорошо согласуются с экспериментальными данными.

PACS: 03.65.Nk

С помощью правила сумм для обобщенных сил осцилляторов Бете получил простую аналитическую формулу для энергетических потерь быстрой частицы, проходящей через вещество, имеющей логарифмическую точность [1]. Напомним, что логарифмически точными обычно называют формулы, содержащие эмпирическую величину порядка 1, входящую множителем под знак логарифма, где второй множитель много больше 1. В теории Бете такой эмпирической величиной являлась средняя энергия возбуждения атома (в атомных единицах) при рассеянии на нем быстрого электрона, а большой величиной — борновский параметр, определяемый отношением энергии быстрого электрона к атомной единице энергии.

На основе идей Бете в работе [2] полное сечение неупругого рассеяния быстрого электрона на атоме было выражено через сумму сил осцилляторов дипольных переходов в этом атоме. Таким образом были получены полные сечения рассеяния электронов на 2-электронных системах (He [2], H<sup>-</sup> [3], Li<sup>+</sup> [4], метастабильный He [5], а также Ne [6]). Обзор подобного развития теории Бете для неупругого рассеяния электронов на атомах дан в [7]. Позже этот метод применялся и для других атомов [8–10].

В данной работе используется приближенное правило сумм, справедливое в приближении Хартри, т.е. в пренебрежении обменными эффектами в атомной волновой функции. Как хорошо известно, именно обменные эффекты отличают приближение Хартри–Фока от приближения Хартри. В данной работе в приближении Хартри сечение полного неупругого рассеяния выражается через атомный формфактор, определяющий сечение упругого рассеяния. Таким образом, расчеты полного интегрального сечения оказываются не более сложными, чем расчеты упругого сечения, хотя имеют практически ту же точность, что и расчеты с помощью сил осцилляторов. Подобное упрощение теории, когда для расчетов полного сечения требуется знание волно-

вой функции лишь основного состояния системы, может оказаться полезным для анализа рассеяния электронов на молекулах. Хорошо известно, что современные алгоритмы не позволяют рассчитывать волновые функции возбужденных состояний молекул с высокой точностью.

В борновском приближении сечение рассеяния электрона с импульсом  $\mathbf{p}$ , соответствующее переходу атома из начального состояния  $i$  в конечное  $f$ , имеет вид [11,12]:

$$\frac{d\sigma_f}{d\Omega_{\mathbf{p}'}} = \frac{4m^2 e^4 p'}{\hbar^4 p q^4} \left| \left\langle f \left| Z - \sum_{j=1}^Z \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}_j) \right| i \right\rangle \right|^2,$$

$$\mathbf{q} = (\mathbf{p}' - \mathbf{p})/\hbar, \quad p' = \sqrt{p^2 - 2m\Delta}, \quad \Delta = E_f - E_i.$$

Здесь  $Z$  — заряд атомного ядра,  $\mathbf{r}_j$  — координаты атомных электронов,  $\mathbf{q}$  — передаваемый импульс,  $\Delta$  — энергия возбуждения атома.

Рассмотрим в отдельности упругое ( $f = i$ ) и неупругое ( $f \neq i$ ) рассеяния

$$\frac{d\sigma_i}{d\Omega_{\mathbf{p}'}} = \frac{4m^2 e^4 Z^2}{\hbar^4 q^4} |1 - F(\mathbf{q})|^2, \quad (1)$$

$$F(\mathbf{q}) = \frac{1}{Z} \left\langle i \left| \sum_{j=1}^Z \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}_j) \right| i \right\rangle, \quad F(\mathbf{q} \rightarrow 0) \rightarrow 1, \quad (2)$$

$$\frac{d\sigma_f}{d\Omega_{\mathbf{p}'}} = \frac{4m^2 e^4 p'}{\hbar^4 p q^4} \left| \left\langle f \left| \sum_{j=1}^Z \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}_j) \right| i \right\rangle \right|^2, \quad f \neq i. \quad (3)$$

Определение формфактора  $F(\mathbf{q})$  отличается множителем  $1/Z$  от обычно используемого (см., например, [1,11,12]). Для сферически симметричных систем, в частности для атомов с заполненными оболочками, которыми здесь ограничимся,

$$F(\mathbf{q}) = \frac{1}{Z} \left\langle i \left| \sum_{j=1}^Z \frac{\sin qr_j}{qr_j} \right| i \right\rangle. \quad (4)$$

По аналогии с теорией энергетических потерь при прохождении быстрых частиц через вещество [1] введем среднюю энергию возбуждения  $\bar{\Delta}$ . Эмпирические формулы для  $\bar{\Delta}$  приводятся во многих источниках (см., например, [1], а также ссылки, указанные ниже). Воспользовавшись теперь полнотой функции  $|f\rangle$ , получим

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma_r}{d\Omega_{\mathbf{p}'}} &\equiv \sum_{f \neq i} \frac{d\sigma_f}{d\Omega_{\mathbf{p}'}} = \frac{4m^2 e^4}{\hbar^4 p} \sum_{f \neq i} \frac{p'}{q^4} \left| \left\langle f \left| \sum_{j=1}^Z \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}_j) \right| i \right\rangle \right|^2 \\ &\simeq \frac{4m^2 e^4 p'}{\hbar^4 p \bar{q}^4} \left[ \left\langle i \left| \sum_{j,j'=1}^Z e^{i\bar{\mathbf{q}}(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_{j'})} \right| i \right\rangle \right. \\ &\quad \left. - \left\langle i \left| \sum_{j=1}^Z e^{i\bar{\mathbf{q}}\mathbf{r}_j} \right| i \right\rangle \left\langle i \left| \sum_{j'=1}^Z e^{i\bar{\mathbf{q}}\mathbf{r}_{j'}} \right| i \right\rangle \right], \quad (5) \end{aligned}$$

$$p' = \sqrt{p^2 - 2m\bar{\Delta}}, \quad \bar{\mathbf{q}} = (\mathbf{p}' - \mathbf{p})/\hbar.$$

Легко видеть, что в одночастичном приближении Хартри, когда многоэлектронная функция атома  $|i\rangle$  представляет собой произведение одноэлектронных функций, первое и второе слагаемые в квадратных скобках (5) сокращаются, за исключением членов с  $j = j'$ , так что

$$\frac{d\sigma_r}{d\Omega_{\mathbf{p}'}} = \frac{4m^2 e^4 Z \bar{p}'}{\hbar^4 p \bar{q}^4} (1 - |F(\bar{\mathbf{q}})|^2). \quad (6)$$

Выражение в квадратных скобках в (5) лишь множителем отличается от суммы обобщенных сил осцилляторов  $S(-1, \mathbf{q})$  (см. формулу (3.17) в [7]), так что в приближении Хартри для этой суммы следует

$$S(-1, \mathbf{q}) \simeq (qa_B)^{-2} (1 - |F(\bar{\mathbf{q}})|^2), \quad (7)$$

где  $a_B$  — борновский радиус.

Для малых  $\bar{q}$  из формулы (4) следует

$$F(\mathbf{q}) \simeq 1 - \frac{1}{6} \bar{q}^2 \langle r^2 \rangle, \quad (8)$$

где  $\langle r^2 \rangle$  — среднеквадратичное значение радиуса атома. Поэтому сечение (6), не учитывающее обменных эффектов в атомной волновой функции, расходится при  $\bar{q} \rightarrow 0$ . Иными словами, именно область малых  $\bar{q}$  дает основной вклад в интегральное сечение неупругого рассеяния, причем этот вклад тем больше, чем лучше выполняется условие применимости борновского приближения. В то же время обменные интегралы, входящие в первое слагаемое в квадратных скобках (5), при  $\bar{q} \rightarrow 0$  имеют порядок  $\bar{q}^4$  в силу ортогональности одноэлектронных волновых функций. Следовательно, их вклад в интегральное сечение будет много меньшим. Эти соображения и являются обоснованием использования приближения Хартри в данной задаче.

Полное дифференциальное сечение

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega_{\mathbf{p}'}} &\equiv \frac{d\sigma_i}{d\Omega_{\mathbf{p}'}} + \frac{d\sigma_r}{d\Omega_{\mathbf{p}'}} \\ &= \frac{4m^2 e^4}{\hbar^4} \left[ \frac{Z^2}{q^4} |1 - F(\mathbf{q})|^2 + \frac{Z \bar{p}'}{p \bar{q}^4} (1 - |F(\bar{\mathbf{q}})|^2) \right]. \quad (9) \end{aligned}$$

То обстоятельство, что сечение упругого рассеяния  $\propto Z^2$  (первое слагаемое в (9)), а неупругого  $\propto Z$  (второе слагаемое в (9)), связано с когерентностью упругого и некогерентностью неупругого рассеяния.

Зависимость полного дифференциального сечения (9) от выбора  $\bar{\Delta}$  является достаточно сильной, поэтому полезность формулы (9) ограничена. Однако полное интегральное сечение будет зависеть от  $\bar{\Delta}$  слабо, а именно через множитель в большом аргументе логарифмической функции (см. ниже). Поэтому формулы для интегрального сечения, следующие из (9), имеют логарифмическую точность.

Простейшая аналитическая модель для формфактора

$$F(\mathbf{q}) = (1 + a^2 q^2)^{-2} \quad (10)$$

соответствует экспоненциальному распределению электронной плотности

$$\rho(r) = (Z/8\pi a^3) \exp(-r/a). \quad (11)$$

Функция (11) моделирует, в частности, распределение заряда в атоме He в простейшей вариационной модели [12]. При этом  $a = (8/27)a_B$ . Подставив (10) в (9), получим

$$\begin{aligned} \sigma &= \frac{8\pi m^2 e^4}{\hbar^4} \int_0^\pi \left\{ \frac{Z^2}{q^4} \left[ 1 - \frac{1}{(1 + a^2 q^2)^2} \right]^2 \right. \\ &\quad \left. + \frac{Z \bar{p}'}{p \bar{q}^4} \left[ 1 - \frac{1}{(1 + a^2 \bar{q}^2)^4} \right] \right\} \sin \theta d\theta. \quad (12) \end{aligned}$$

Перейдем от интегрирования по  $\theta$  к интегрированию по  $q^2$  в первом слагаемом под интегралом (12) и по  $\bar{q}^2$  во втором слагаемом:  $dq^2 = (2pp'/\hbar^2) \sin \theta d\theta$ ,  $d\bar{q}^2 = (2p\bar{p}'/\hbar^2) \sin \theta d\theta$ . Поскольку для быстрых электронов  $pa/\hbar \gg 1$ , верхний предел в интегралах по  $dq^2$  и  $d\bar{q}^2$  можно положить бесконечно большим. Нижний предел по  $q^2$  равен нулю. Считая  $\bar{\Delta} \ll E = p^2/2m$ , можно во втором интеграле по  $\bar{q}^2$  пренебречь отличием  $p'$  от  $\bar{p}'$  всюду, кроме нижнего предела, который следует положить равным

$$\bar{q}_{\min}^2 = \left( \frac{m\bar{\Delta}}{\hbar p} \right)^2. \quad (13)$$

Если  $\bar{q}_{\min} a \ll 1$ , в результате простых вычислений получим

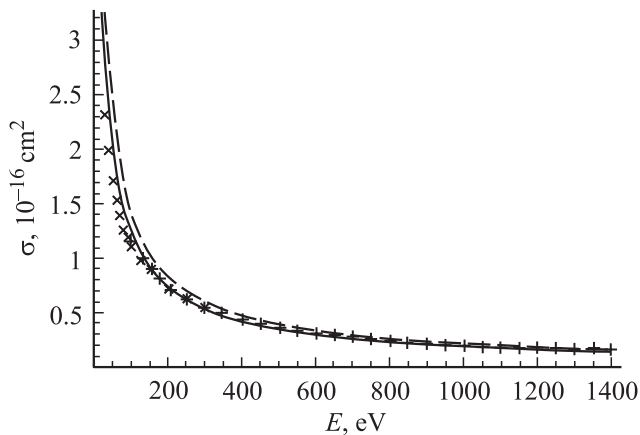
$$\begin{aligned} \sigma &= \frac{4\pi m^2 e^4}{\hbar^2 p^2} \left\{ Z^2 \int_0^\infty \frac{dq^2}{q^4} \left[ 1 - \frac{1}{(1 + a^2 q^2)^2} \right]^2 \right. \\ &\quad \left. + Z \int_{\bar{q}_{\min}^2}^\infty \frac{d\bar{q}^2}{\bar{q}^4} \left[ 1 - \frac{1}{(1 + a^2 \bar{q}^2)^4} \right] \right\} \\ &= \frac{4\pi m^2 e^4 a^2}{3\hbar^2 p^2} \left\{ 7Z^2 - 13Z - 24Z \log(a\bar{q}_{\min}) \right\} \\ &= \frac{4\pi a^2}{3(E/Ry)} \left\{ 7Z^2 - 13Z \right. \\ &\quad \left. + 12Z \log \left[ \frac{4(E/Ry)}{(a/a_B)^2 (\bar{\Delta}/Ry)^2} \right] \right\}. \quad (14) \end{aligned}$$

Это выражение можно сравнить с аппроксимационной формулой (26) работы [2], полученной, как уже говорилось, в результате достаточно громоздкого суммирования сил осцилляторов для атома He:

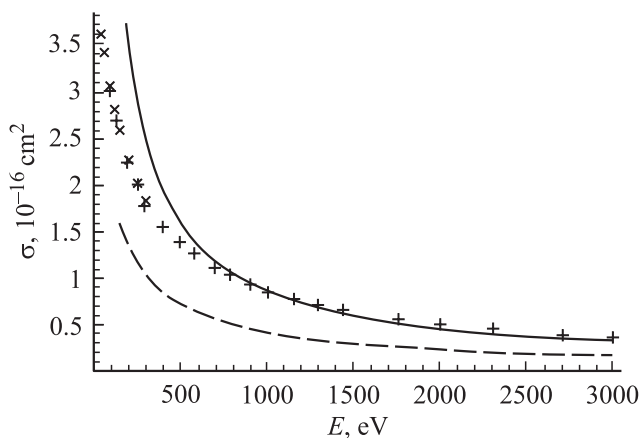
$$\sigma = (E/Ry)^{-1} [3.603 \log(E/Ry) - 6.229] \cdot 10^{-15} \text{ cm}^2.$$

Полагая в (14)  $Z = 2$ ,  $a = (8/27)$  а.е.,  $\bar{\Delta} \simeq 1.5$  а.е. (см. ниже), вместо 3.603 получим из (14) 3.359, а вместо 6.229 число 6.958. Отличие лежит в пределах 10%.

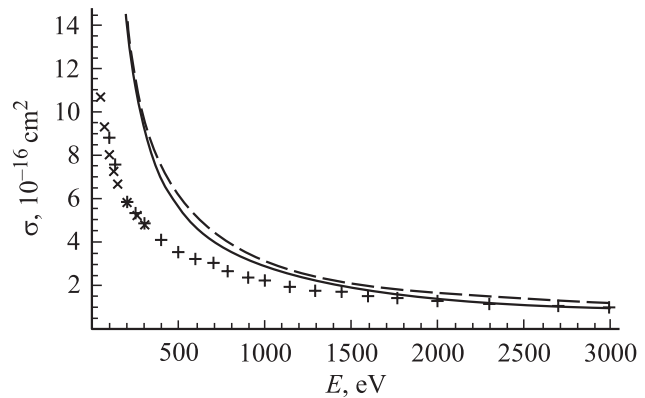
Сравнение вычислений по формуле (14) с экспериментальными данными [13,14] для атома He приведено на рис. 1. При расчетах выбрано  $\bar{\Delta} = 1.5$  а.е.  $\simeq 40.8$  eV. Это значение в точности совпадает с данными [15,16] и близко к 38.82 eV, полученному в [8]. Как видно, теория прекрасно согласуется с экспериментальными результатами. Отметим, что для атома He обменные эффекты в атомной волновой функции не сказываются на точности формулы (9). В этом легко убедиться непосредственно,



**Рис. 1.** Энергетическая зависимость полного интегрального сечения рассеяния электронов на атоме He. Экспериментальные данные из работ [13] (+) и [14] (x). Сплошная кривая — расчет по формуле (14), штриховая — согласно [2].



**Рис. 2.** Энергетическая зависимость полного интегрального сечения рассеяния электронов на атоме He. Экспериментальные данные из работ [18] (+) и [14] (x). Сплошная кривая — расчет по формулам данной работы, штриховая — расчет [6].



**Рис. 3.** Энергетическая зависимость полного интегрального сечения рассеяния электронов на атоме Ag. Экспериментальные данные из работ [18] (+) и [14] (x). Сплошная кривая — расчет по формулам данной работы при  $\bar{\Delta} = 10$ , штриховая — при 3 а.е.

поскольку два электрона в He имеют противоположные спины, а операторы в матричных элементах (5) от спина не зависят.

Полные интегральные сечения для He, рассчитанные по формуле (9), приведены на рис. 2. Расчеты атомного формфактора проводились с помощью многоэлектронных волновых функций, аналитическая аппроксимация которых дана в работе [17]. Для  $\bar{\Delta}$  было принято значение 4 а.е. Как видно, борновский предел достигается для He при больших энергиях рассеиваемого электрона, чем для Ne, что, конечно, совершенно естественно.

Аналогичные данные для Ag приведены на рис. 3. Для иллюстрации зависимости сечения от выбора параметра  $\bar{\Delta}$  приведены расчеты для  $\bar{\Delta} = 3$  и 10 а.е. Видно, что зависимость сечения от  $\bar{\Delta}$  является слабой. Это полностью согласуется с указанным выше основным принципом логарифмически точных приближений.

Краткое изложение данной работы было представлено на 24-й Международной конференции по физике фотонных, электронных и атомных столкновений (ICPEAC-2005) [19].

Работа выполнена при поддержке программы BRHE US CRDF и Министерства образования и науки РФ, грант VZ-010-0.34.80Др.

## Список литературы

- [1] Бете Г. Квантовая механика. М., 1965. 334 с.
- [2] Inokuti M., Kim Y.-K., Platzman R.L. // Phys. Rev. 1967. Vol. 164. N 1. P. 55–61.
- [3] Inokuti M., Kim Y.-K. // Phys. Rev. 1968. Vol. 165. N 1. P. 39–43.
- [4] Kim Y.-K., Inokuti M. // Phys. Rev. A. 1970. Vol. 1. N 4. P. 1132–1137.
- [5] Briggs J.S., Kim Y.-K. // Phys. Rev. A. 1971. Vol. 3. N 4. P. 1342–1348.
- [6] Saxon R.P. // Phys. Rev. A. 1973. Vol. 8. N 2. P. 839–849.

- [7] *Inokuti M.* // Rev. Mod. Phys. 1971. Vol. 43. N 3. P. 297–347.
- [8] *Dehmer J.L., Inokuti M., Saxon R.P.* // Phys. Rev. A. 1975. Vol. 12. N 1. P. 102–121.
- [9] *Inokuti M., Saxon R.P., Dehmer J.L.* // Int. J. Radiat. Phys. Chem. 1975. Vol. 7. P. 109.
- [10] *Inokuti M., Dehmer J.L., Baer T.* et al. // Phys. Rev. A. 1981. Vol. 23. N 1. P. 96–109.
- [11] *Мотт Н., Мессу Г.* Теория атомных столкновений. М., 1969. 756 с.
- [12] *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Квантовая механика (нерелятивистская теория). М., 1974. 752 с.
- [13] *Dalba G., Fornasini P., Lazzizzera I.* et al. // J. Phys. B: At. Mol. Phys. 1979. Vol. 12. N 22. P. 3787–3795.
- [14] *Nickel J.C., Imre K., Register D.F.* et al. // J. Phys. B: At. Mol. Phys. 1985. Vol. 18. P. 125–133.
- [15] *Fano U.* // Ann. Rev. Nucl. Sci. 1963. Vol. 13.
- [16] *McGuire R.J.* // Phys. Rev. A. 1971. Vol. 3. N 1. P. 267–279.
- [17] *Salvat F., Martinez J.D., Mayol R.* et al. // Phys. Rev. A. 1987. Vol. 36. N 2. P. 467–474.
- [18] *Zecca A., Oss S., Karwasz G.* et al. // J. Phys. B: At. Mol. Phys. 1987. Vol. 20. N 19. P. 5157–5164.
- [19] *Zon B.A., Zon V.B.* Book of Abstracts ICPEAC 2005. Zon-3-3-117-49152120. Rosario, 2005. 88 с.