

АТОМНАЯ И ЯДЕРНАЯ ФИЗИКА

УДК 539.186.24.172:546.33

УПРУГОЕ РАССЕЯНИЕ ЭЛЕКТРОНОВ АТОМАМИ НАТРИЯ
В ОПТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ

А. Н. Грум-Гржимайло, О. И. Зайцева

(НИИЯФ)

В одноканальной оптической модели получены дифференциальные и полные сечения упругого рассеяния, а также полные сечения реакции при столкновениях электронов промежуточных энергий с атомами натрия. Анализируется применимость различных приближений для мнимой части оптического потенциала.

Введение. В последнее десятилетие интенсивно исследуется применимость одноканальной оптической модели для описания упругих столкновений электронов промежуточной энергии с атомами. Привлекательна простота расчетов в этой модели, сводящихся к решению одноканальной задачи рассеяния. С этой целью предлагаются новые типы оптических потенциалов, как полуэмпирических, так и получаемых из первых принципов. Особое значение при этом имеют локальные центрально-симметричные потенциалы, как наиболее удобные для практических расчетов.

Большинство работ по применению оптических потенциалов к задаче упругого рассеяния относится к инертным газам, для которых имеется богатый набор экспериментальных данных по полным и дифференциальным сечениям и по сечениям реакции в широкой области энергий. В связи с появлением абсолютных измерений дифференциальных сечений упругого рассеяния электронов атомами щелочных металлов в области промежуточных энергий [1—4] актуальным становится исследование применимости к описанию этого процесса различных вариантов одноканальной оптической модели. В работе [5] были рассчитаны дифференциальные сечения упругого рассеяния электронов атомами лития при энергиях 54,4 и 60 эВ, а в работе [1] — атомами натрия в интервале 54,4 — 150 эВ. В обоих случаях было достигнуто неплохое согласие с имевшимися к тому времени экспериментальными данными. В качестве оптического потенциала в этих работах использовался локальный потенциал вида

$$V_{\text{opt}}(E, r) = V_{\text{st}}(r) + V_{\text{ex}}(E, r) + V_{\text{pol}}(E, r) + iV_{\text{abs}}(E, r), \quad (1)$$

где V_{st} — электростатический потенциал атома в основном состоянии; V_{ex} — эффективный потенциал, учитывающий обмен налетающего электрона с электронами атома; V_{pol} — поляризационный потенциал; V_{abs} — потенциал поглощения, учитывающий переходы в открытые неупругие каналы; E — энергия электрона. Потенциал поглощения в работах [1, 5] строился на основе эйкональной модели рассеяния. Нахождение такого потенциала является достаточно трудоемкой задачей. С другой стороны, при анализе упругого рассеяния атомами инертных газов хорошо зарекомендовали себя простые и удобные для вычислений локальные сферически-симметричные потенциалы V_{abs} , предложенные в работах [6—9], и их последующие модификации. Вопрос о применимости этих потенциалов к описанию упругого рассеяния атомами ще-

лочных металлов изучен недостаточно. Лишь в работе [1] был сделан вывод о том, что использование потенциала V_{abs} Маккарти с сотр. [10] не дает согласия с экспериментальными данными по упругому рассеянию электронов атомами натрия. Цель настоящей работы — подробнее проанализировать применимость простых потенциалов поглощения для описания упругого рассеяния и полного сечения реакции на натрии в области энергий 54,4—150 эВ.

Теоретические модели. В расчетах мы использовали потенциал вида (1). Действительная часть потенциала строилась так же, как и в работах [1, 5] при анализе упругого рассеяния электронов атомами натрия и лития: в качестве V_{ex} использовался эффективный обменный потенциал, предложенный Фёрнессом и Маккарти [6], а в качестве V_{pot} — потенциал, полученный Байроном и Йохайном [11]. Волновые функции связанных состояний и электростатический потенциал основного состояния V_{st} вычислялись в модели Хартри—Фока.

Для потенциала поглощения V_{abs} мы опробовали несколько вариантов.

1. Потенциал Грина, использовавшийся в расчетах упругого рассеяния атомами инертных газов [7, 12, 13]:

$$V_{\text{abs}}^{(1)}(E, r) = \frac{W^{(1)}(E)}{r} (e^{-r/d} - e^{-r/s}), \quad (2)$$

где $W^{(1)}(E)$, d и s — подгоночные параметры. Для инертных газов [7] энергетическая зависимость коэффициента $W^{(1)}$ аппроксимировалась формулой

$$W^{(1)}(E) = \omega \frac{\Delta}{E} \ln \left[\alpha \left(\frac{E}{\Delta} - 1 \right)^{\nu} + 1 \right],$$

где Δ — порог возбуждения мишени, а не зависящие от энергии параметры d , s , ω , α , ν выбирались таким образом, чтобы воспроизвести экспериментальные данные по полному сечению реакции σ_{abs} в широком интервале энергий. Для атома натрия, как и вообще для щелочных элементов, в настоящее время сечение реакции измерено лишь в узком интервале энергий и с относительно невысокой точностью [2]. Поэтому в своих расчетах подгонку параметров d и s мы проводили так, чтобы при соответствующем выборе $W^{(1)}$ как можно точнее воспроизвести дифференциальное сечение упругого рассеяния при энергии 75 эВ. При этом мы получили: $s=0,076$ а. е., $d=4$ а. е., $W^{(1)}=-0,5$. Затем значения s и d оставались фиксированными, а коэффициент $W^{(1)}$ подгонялся заново для каждого значения энергии.

2. Потенциал, введенный в работах [8, 9] на основе приближения квазисвободного рассеяния с учетом паулевской блокировки:

$$V_{\text{abs}}^{(2)}(E, r) = \frac{1}{2} \rho(r) \bar{\sigma}_B(E, r) v_{\text{loc}}(E, r), \quad (3)$$

где $\bar{\sigma}_B$ — усредненное сечение бинарных электрон-электронных столкновений, допускаемых принципом Паули; $\rho(r)$ — плотность основного состояния мишени; $v_{\text{loc}}(E, r) = \sqrt{2(E - V_{\text{st}}(r) - V_{\text{ex}}(E, r))}$ — локальная скорость падающих электронов. Потенциал (3) использовался для случая инертных газов, где существует конечная энергетическая щель $\Delta \neq 0$ между занятыми и свободными электронными состояниями. Поскольку у щелочных металлов есть вакансии во внешней оболочке, то $\Delta=0$ и величина $\bar{\sigma}_B$ обращается в бесконечность [9]. Логично по-

этому использовать Δ как параметр модели. В данной работе в качестве иллюстрации мы провели расчеты с величиной Δ , равной энергии возбуждения низшего состояния натрия ($\Delta=2,1$ эВ).

3. Потенциал Фёрнесса и Маккарти [6]:

$$V_{\text{abs}}^{(3)}(E, r) = \frac{E}{E - V_{\text{st}}(r)} \sum_j W_j^{(3)}(E) R_j^2(r). \quad (4)$$

4. Модификация потенциала Фёрнесса и Маккарти [10]:

$$V_{\text{abs}}^{(4)}(E, r) = W^{(4)}(E) \frac{E}{E - V_{\text{st}}(r) - V_{\text{pol}}(E, r)} \sum_j N_j P_j^2(r), \quad (5)$$

где $P_j(r) = rR_j(r)$ — радиальная функция электрона j -й подоболочки; N_j — число электронов на j -й подоболочке; $W_j^{(3)}$ и $W^{(4)}$ — подгоночные параметры. Суммирование производится по подоболочкам, вносящим существенный вклад в неупругие процессы при данной энергии. В своих расчетах мы учитывали вклад только $3s$ -орбитали.

Помимо перечисленных четырех вариантов расчеты проводились для случаев $V_{\text{abs}}=0$; $V_{\text{abs}}=V_{\text{pol}}=0$ (приближение 1-го порядка); $V_{\text{opt}}=0$ (плосковолновое борновское приближение).

Расчет угловых распределений $d\sigma/d\Omega$, полных сечений упругого рассеяния σ_{el} и сечений реакции σ_{abs} проводился стандартным методом разложения по парциальным волнам и с использованием оптической теоремы. Соответствующие соотношения приведены, например, в [12].

На рис. 1 приводятся для сравнения радиальные зависимости различных слагаемых оптического потенциала при энергии электрона 75 эВ.

Результаты и обсуждение. Полученные нами дифференциальные сечения, их сопоставление с экспериментальными данными [1, 2] и расчетами в эйконоальной оптической модели [1] приведены на рис. 2. В таблице приведены величины полного сечения реакции и полного сечения упругого рассеяния. Экспериментальные данные для σ_{el} и σ_{abs} имеются в области энергий до 54,4 эВ [2]. Чтобы получить нижнюю оценку σ_{abs} для больших энергий, мы провели интерполяцию и просуммировали экспериментальные сечения возбуждения $3s-3p$ перехода

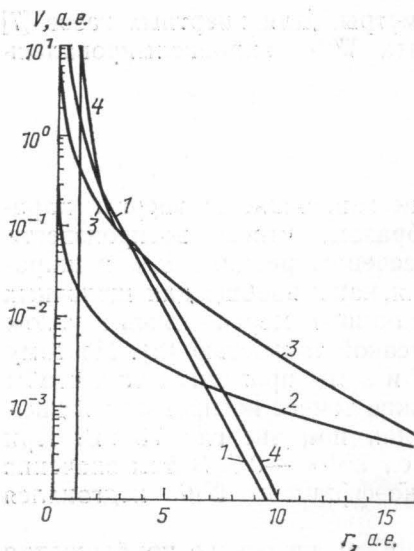


Рис. 1. Радиальные зависимости слагаемых оптического потенциала (для энергии 75 эВ: $V_{\text{st}} + V_{\text{ex}}$ (1); V_{pol} (2); $V_{\text{abs}}^{(1)}$ (3); $V_{\text{abs}}^{(2)}$ (4))

[14] с полными сечениями ионизации натрия [15].

В исследованной области энергий форма дифференциальных сечений, полученных без учета потенциала поглощения, сильно отличается от экспериментальных угловых распределений. Учет потенциала поглощения в формах (3) — (5) не дает согласия теории с экспериментальными данными. Потенциал (3) приводит к сильному подавлению рассеяния в заднюю полусферу и образованию глубокого дополнитель-

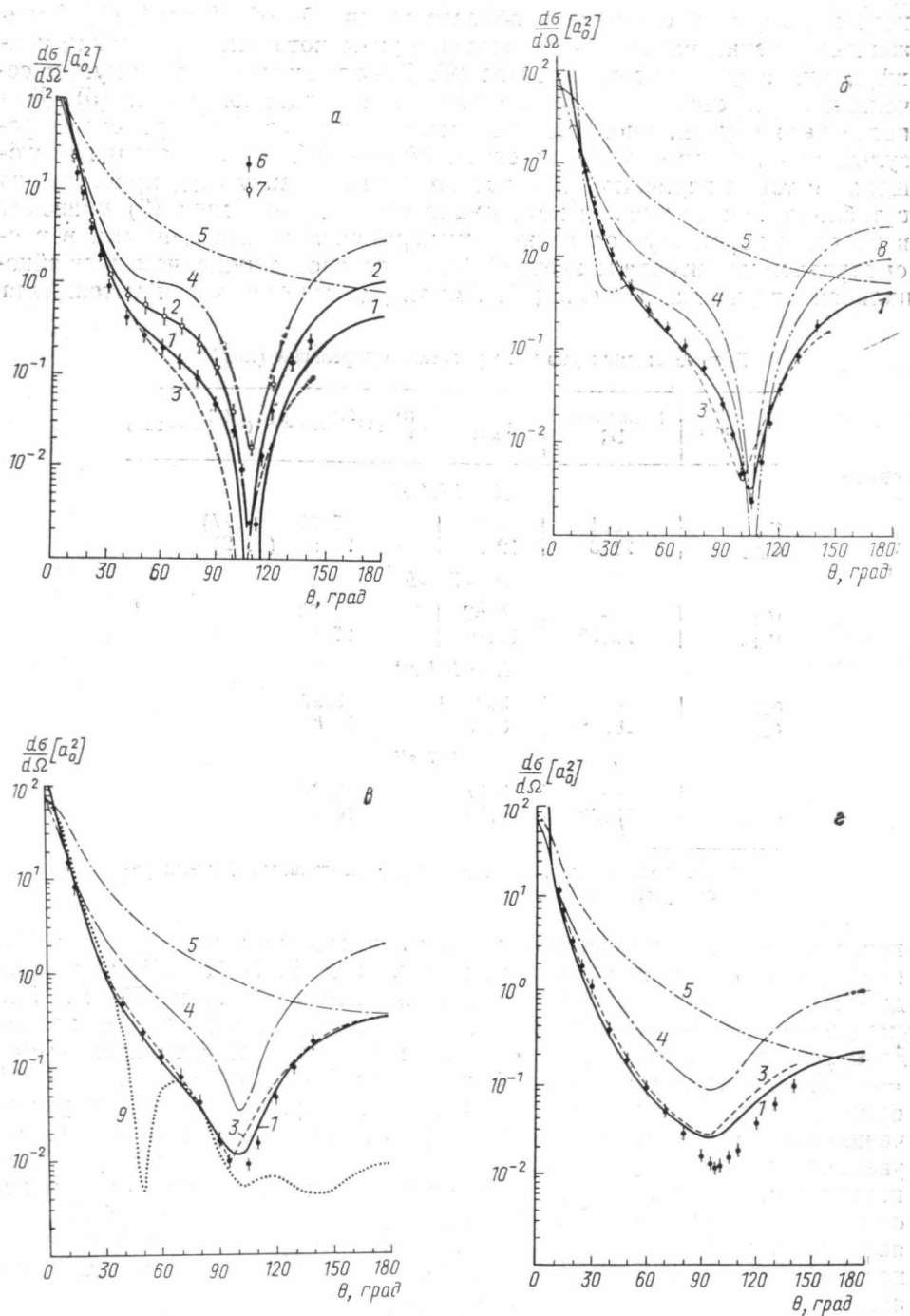


Рис. 2. Дифференциальные сечения упругого рассеяния электронов на натрии при энергии 54,4 (а), 75 (б), 100 (в) и 150 эВ (г). Расчет с $V_{\text{abs}}^{(1)} = -0,5$ (1) и $-0,25$ (2); с $V_{\text{abs}}^{(4)}$ при $W^{(4)} = -0,5$ (8); с $V_{\text{abs}}^{(2)}$ (9) и с $V_{\text{abs}} = 0$ (4). Эйконоальная оптическая модель [1] (3); плосковолновое борновское приближение (5). Экспериментальные данные из [1] (6) и [2] (7)

ного минимума в сечениях в области углов 40—60° (рис. 2, в). Заниженные сечения рассеяния на большие углы потенциал (3) давал также и для случая инертных газов [9]. Дополнительный минимум в сечениях образуется и при использовании потенциалов (4) и (5). Для последнего случая, проиллюстрированного на рис. 2, б, приведены результаты расчетов с коэффициентом $W^{(4)} = -0,5$. Расчет сечения поглощения с такой величиной $W^{(4)}$ воспроизводит оценку σ_{abs} , приведенную в таблице. Использование потенциала поглощения Грина (2) приводит в целом к хорошему согласию с экспериментальными данными в рассматриваемом интервале энергий. Это согласие не хуже, чем дает эйко-нальная оптическая модель [1]. Амплитуда мнимой части потенциала

Полные сечения упругого рассеяния и реакции (μa_0^2)

Сечения	Эксперимент [2]	$V_{abs}^{(2)}$	$V_{abs}^{(1)}; W^{(1)} = -0,5$ ($W^{(1)} = -0,25$)
$E = 54,4$ эВ			
σ_{el}	6,4	4,62	5,71 (5,27)
σ_{abs}	28,3	12,2	25,8 (19,2)
$E = 75$ эВ			
σ_{el}	—	3,68	4,70
σ_{abs}	22,3*	10,0	22,5
$E = 100$ эВ			
σ_{el}	—	3,05	3,97
σ_{abs}	18,3*	8,40	19,8
$E = 150$ эВ			
σ_{el}	—	2,37	3,07
σ_{abs}	13,9*	6,55	16,1

* Нижняя оценка на основе экспериментальных данных работ [14, 15].

поглощения, подогнанная под экспериментальные данные работы [1], медленно изменяется с энергией в интервале 54,4—150 эВ, имея тенденцию к уменьшению при увеличении энергии от 75 к 150 эВ. Это уменьшение очень незначительно, поэтому на рис. 2 и в таблице приведены результаты, полученные с одним и тем же коэффициентом $W^{(1)} = -0,5$. Увеличение абсолютной величины $W^{(1)}$ в области $W^{(1)} = -0,5$ приводит к уменьшению сечения в интервале углов $\theta \geq 15^\circ$ и к увеличению сечения рассеяния на малые углы. Аналогичное «аномальное» увеличение сечения упругого рассеяния на малые углы при усилении потенциала поглощения (на больших расстояниях от ядра) было ранее обнаружено в работе [13]. В нашем случае, однако, этот эффект проявляется намного более выразительно и может приводить к увеличению полного сечения упругого рассеяния одновременно с увеличением сечения реакции (см. таблицу, $E = 54,4$ эВ).

Усиливающаяся при энергии 150 эВ рассогласование кривых, полученных с потенциалом (2), с экспериментальными данными указывает на то, что с увеличением энергии радиальная зависимость потенциала V_{abs} изменяется. В частности, потенциал поглощения должен при этом усиливаться на малых расстояниях, о чем свидетельствует завышение сечений рассеяния на большие углы [13]. Уменьшением коэффициента $W^{(1)}$ можно добиться лучшего согласия с экспериментом

для рассеяния в переднюю полусферу, при этом, однако, сечение рассеяния на большие углы оказывается еще более завышенным.

Для энергии 54,4 эВ в настоящее время существует два набора данных по дифференциальным сечениям [1, 2]. Результатам работы [2] соответствует коэффициент $W^{(1)} = -0,25$.

Полное сечение реакции, полученное с потенциалом поглощения Грина, хорошо соответствует экспериментальным данным и проведенным на их основе оценкам. Потенциал (3) дает примерно в два раза заниженные значения σ_{abs} . Анализ, проведенный в работе [13], а также результаты наших расчетов дают основание предполагать, что потенциал (3) является, с одной стороны, слишком короткодействующим для того, чтобы обеспечить достаточную величину σ_{abs} , а с другой — слишком сильным на малых расстояниях, что отражается в заниженных сечениях упругого рассеяния на большие углы. Возможно, что частично эти дефекты потенциала (3) удастся преодолеть путем надлежащего переопределения условий паулевской блокировки в величине $\sigma_{\text{в}}$.

Заключение. В работе проанализирована применимость простейших локальных оптических потенциалов поглощения к задаче упругого рассеяния электронов атомами натрия при энергиях 54,4—150 эВ. В этой области энергий лучшие результаты дает использование потенциала Грина. Дифференциальные сечения рассеяния воспроизводятся при этом не хуже, чем при использовании потенциала оптической эйконоальной модели, а значения сечений реакции находятся в соответствии с экспериментальными данными и проведенными на их основе оценками. Другие использованные в работе потенциалы поглощения имеют существенно отличающиеся от потенциала Грина радиальные зависимости и не воспроизводят экспериментальные данные. Для детального изучения формы мнимой части оптического потенциала необходимы надежные экспериментальные данные по угловым распределениям электронов и полным сечениям реакции в широком интервале энергий. Представляет интерес использование потенциала Грина в теоретических расчетах сечений упругого рассеяния атомами других щелочных металлов, а также в расчетах неупругих процессов их возбуждения.

Авторы благодарят проф. В. В. Балашова за ценные обсуждения.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Teubner P. J. O., Buckman S. J., Noble C. J. // *J. Phys. B.* 1978. 11. P. 2345—2354. [2] Srivastava S. K., Vuskovic L. // *J. Phys. B.* 1980. 13. P. 2633—2643. [3] Williams W., Trajmar S., Boziniš D. // *J. Phys. B.* 1976. 9. P. 1527—1529. [4] Vuskovic L., Maleki L., Trajmar S. // *J. Phys. B.* 1984. 17. P. 2519—2525. [5] Vanderpoorten R. // *J. Phys. B.* 1976. 9. P. 535—538. [6] Furness J. B., McCarthy I. E. // *J. Phys. B.* 1973. 6. P. 2280—2291. [7] Green A. E. S., Rio D. E., Ueda T. // *Phys. Rev.* 1981. A24. P. 3010—3018. [8] Staszewska G., Schwenke D. W., Thirumalai D., Truhlar D. G. // *J. Phys. B.* 1983. 16. P. 281—287. [9] Staszewska G., Schwenke D. W., Thirumalai D., Truhlar D. G. // *Phys. Rev.* 1983. A28. P. 2740—2751. [10] McCarthy I. E., Noble C. J., Phillips B. A., Turnbull A. D. // *Phys. Rev.* 1977. A15. P. 2173—2185. [11] Byron F. W. Jr., Joachain C. J. // *Phys. Rev.* 1974. A9. P. 2559—2568. [12] Thirumalai D., Truhlar D. G. // *Phys. Rev.* 1982. A25. P. 3058—3071. [13] Staszewska G., Schwenke D. W., Truhlar D. G. // *Phys. Rev.* 1984. A29. P. 3078—3091. [14] Enemark A. E., Gallagher A. // *Phys. Rev.* 1972. A6. P. 192—205. [15] McFarland R. H., Kinney J. D. // *Phys. Rev.* 1965. 137. P. A1058—A1061.

Поступила в редакцию
25.06.86