

РЕЗОНАНСЫ В РАССЕЯНИИ УЛЬТРАМЕДЛЕННЫХ ЭЛЕКТРОНОВ  
НА ЩЕЛОЧНЫХ АТОМАХ

И. И. Фабрикант

Построена теория эффективного радиуса для рассеяния на сильно поляризующихся атомах, позволяющая экстраполировать результаты расчетов фаз рассеяния для энергий  $E \geq 0.1$  эВ в область более низких энергий. Предлагаемая теория в отличие от использовавшейся ранее не ставит требование малости  $\alpha E$ , где  $\alpha$  — поляризуемость атома, и поэтому справедлива в более широкой области. Теория используется для параметризации  $^3P$ -резонансов в рассеянии электронов на щелочных атомах и для нахождения энергий сродства. Показано, что экстраполяция известных до сих пор фаз рассеяния электронов на атомах Cs приводит к существованию связанного  $^3P$ -состояния Cs вместо  $^3P$ -резонанса. Одна из возможных причин такого результата заключается в использовании атомных волновых функций, которые переоценивают поляризуемость атома Cs.

Проведенные до настоящего времени расчеты рассеяния медленных электронов на атомах Li, Na, K [1-4] и Rb [5] указывают на наличие  $^3P$ -резонанса в рассеянии, который приводит к очень большим сечениям рассеяния в области энергий 0.01—0.1 эВ. Причина появления этих резонансов в сильной дипольной связи между основным  $^2S$  и резонансным  $^2P$  уровнями щелочного атома. Если бы эти уровни были вырождены, то ниже порога, при наличии открытых каналов наблюдалась бы серия Фешбаховских резонансов [6]. Снятие вырождения приводит к тому, что резонансы Фешбаха переходят в резонансы формы выше порога  $^2S$  [7].

В [4] с помощью решения уравнений Бете—Голдстоуна вариационным методом нашли положения и ширины резонансов для Li, Na и K. Эта процедура, а также численное интегрирование уравнений сильной связи в данном случае являются очень трудоемкими, так как задачу рассеяния нужно решать при очень малых энергиях, а для этого необходимо интегрировать уравнения с очень больших расстояний от ядра.

В настоящей работе предлагается процедура, которая позволяет проэкстраполировать данные по фазам рассеяния при не слишком малых энергиях ( $\sim 0.1$  эВ) в область очень малых энергий и параметризовать получающиеся в этой области резонансы.

Наиболее естественной теоретической основой такой экстраполяции является теория эффективного радиуса (ТЭР). Так как щелочные атомы обладают большой поляризуемостью, то для них следует применять модифицированную ТЭР, учитывающую действие поляризационного потенциала. Однако в существующем варианте этой теории [8] фактически производится дополнительное разложение по параметру  $\alpha k^2$ , где  $\alpha$  — поляризуемость,  $\hbar^2/2m = E$  — энергия электрона (в статье используются атомные единицы). Поэтому при больших  $\alpha$  и малых угловых моментах электрона  $l$  теория справедлива в очень узком интервале энергий вблизи 0. Модификация ТЭР для больших  $\alpha$ , предложенная в [9], является недостаточно удобной, так как в теорию в явном виде входит радиус короткодействия.

Вариант ТЭР, предлагаемый в настоящей статье, аналогичен применявшемуся ранее для рассеяния на полярных молекулах [10] и атомах He [11].

Будем считать, что взаимодействие электрона с атомом описывается потенциалом  $-\alpha/2r^4$  при  $r > r_0$  и имеет произвольный вид при  $r < r_0$ . Фазу рассеяния можно найти из

$$\operatorname{tg} \delta = - \left. \frac{\left( R \frac{d}{dr} - 1 \right) \varphi}{\left( R \frac{d}{dr} - 1 \right) \psi} \right|_{r=r_0}, \quad (1)$$

где  $\varphi$  и  $\psi$  — решения уравнения Шредингера с потенциалом  $-\alpha/2r^4$ , заданные асимптотикой  $\varphi \sim \sin \theta$ ,  $\psi \sim \cos \theta$ ,  $\theta = kr - l\pi/2$ ;  $R$  — функция Вигнера [12], не имеющая никаких особенностей по  $E$ , кроме простых полюсов.  $\varphi$ ,  $\psi$  можно представить в виде

$$\psi(r, E) = f(r, E) a(E) + g(r, E) b(E), \quad \varphi(r, E) = f(r, E) c(E) + g(r, E) d(E), \quad (2)$$

где  $f$  и  $g$  — линейно независимые решения уравнения Шредингера с потенциалом  $-\alpha/2r^4$ , заданные граничным условием при  $r=0$ , не зависящим от энергии, и являющиеся поэтому целыми функциями  $E$ . Например, можно положить при  $r \rightarrow 0$

$$f \sim (-1)^l \frac{r}{\alpha^{1/4}} \cos \zeta, \quad g \sim \frac{r}{\alpha^{1/4}} \sin \zeta, \quad \zeta = \frac{\alpha^{1/2}}{r} - \frac{\pi l}{2}.$$

Выбранная нами нормировка решений обеспечивает выполнение условия

$$bc - ad = 1, \quad (3)$$

которое используется для контроля точности расчетов. Подстановка (2) в (1) приводит к

$$\operatorname{tg} \delta = - \frac{Mc - d}{Ma - b}, \quad (4)$$

где  $M = - \left( R \frac{d}{dr} - 1 \right) f \left( R \frac{d}{dr} - 1 \right) g \Big|_{r=r_0}$  — функция энергии, обладающая теми же аналитическими свойствами, что и  $R$ -функция. При малых энергиях положим

$$M = \beta + \gamma E, \quad (5)$$

что является приближением ТЭР. Если вблизи  $E=0$   $M$  имеет полюс, то разложение следует писать для  $M^{-1}$

$$M^{-1} = \beta + \gamma E. \quad (6)$$

Поэтому при известных  $\beta$  и  $\gamma$  для нахождения фазы рассеяния достаточно численно решить простое уравнение с поляризационным потенциалом, чтобы найти коэффициенты  $a$ ,  $b$ ,  $c$  и  $d$ .

В применявшихся ранее вариантах теории [10, 11] вычисления сводились к нахождению аналогичных коэффициентов, связывающих различные решения уравнений сильной связи с недиагональным потенциалом  $a/r^2$ . В данном случае мы использовали то обстоятельство, что при очень малых энергиях недиагональный потенциал  $a/r^2$  эквивалентен диагональному поляризационному потенциалу, что позволило упростить расчеты.

Формулы (4)–(6) использовались в настоящей работе для параметризации  $^3P$ -резонансов при рассеянии электронов на щелочных атомах. Необходимые данные по фазам при четырех значениях энергии (0.1, 0.2, 0.4 и 0.6 эВ) брались из расчетов [1, 5]. Соответствующие значения функции  $M_i$  ( $i=1, \dots, 4$ ) находились из (4). Далее проверялось выполнение критерия

$$\max_{i=1, \dots, 4} M_i < \max_{i=1, \dots, 4} M_i^{-1}.$$

Если он выполнялся (случай А), то коэффициенты  $\beta$  и  $\gamma$  определялись методом наименьших квадратов из формулы (5). В противном случае (случай В) они определялись тем же методом из формулы (6). При расчете  $^3P$ -фаз оказалось, что для всех атомов реализуется случай В. Результаты для коэффициентов  $\beta$

и  $\gamma$ , энергий  $E_r$  и ширины  $\Gamma_r$  приведены в табл. 1, где дано также сравнение с вариационными расчетами Синфайлама и Несбета [4]. Видно, что чем меньше энергия резонанса, тем более чувствительны  $E_r$  и  $\Gamma_r$  к методу расчета.

Таблица 1

Коэффициенты разложения (6), положения и ширины (в эВ)  $^3P$ -резонансов для рассеяния электронов на щелочных атомах

Атомы	$\beta$	$\gamma$ , эВ <sup>-1</sup>	$E_r$	$\Gamma_r$	Расчет [4]	
					$E_r$	$\Gamma_r$
Li	-0.2191	0.2128	0.059	0.077	0.060	0.058
Na	-0.4172	0.2440	0.083	0.188	0.083	0.085
K	-0.1078	0.1957	0.019	0.016	0.0024	0.00058
Rb	-0.1516	0.1671	0.023	0.025	—	—
Cs	0.1199	0.1548		не существует	—	—

Фазы рассеяния на Cs, вычисленные Каруле [1], не приводят к  $^3P$ -резонансу, в то время как обработка экспериментальных данных по измерению проводимости и подвижности электронов в парах Cs [13], а также данные по уширению и сдвигу уровней высоковозбужденных атомов в парах Cs [14] указывают на существование такого резонанса. Экспериментальные данные по уширению и сдвигу были проинтерпретированы в работах [15, 16] исходя из предположения, что  $^3P$ -резонанс имеет параметры  $E_r = 7.5 \cdot 10^{-4}$  эВ,  $\Gamma_r = 3 \cdot 10^{-4}$  эВ. Прямые измерения сечений в пучках [17] проводились для энергий электрона начиная с  $E = 0.3$  эВ, поэтому эти результаты не позволяют сделать вывод о наличии резонанса при очень малых энергиях. Однако результаты [17] находятся в противоречии с косвенными экспериментальными данными [13].

Из теоретических работ, помимо расчета Каруле [1], имеется расчет Кроуна и Рассека [18], выполненный методом поляризованных орбит и расчет Барка и Митчелла [19], выполненный методом сильной связи. Известно, что метод поляризованных орбит малоприменим для расчета рассеяния на атомах с очень большой поляризуемостью. Поэтому неудивительно, что при  $E \leq 2$  эВ расчет Кроуна и Рассека сильно расходится с экспериментальными данными [17] и расчетами [1, 19]. Последние гораздо лучше согласуются с экспериментом в пучках [17], однако они не указывают на резонанс при малых энергиях.

Возникшую неопределенную ситуацию может прояснить анализ изменения  $E_r$  с ростом атомного номера. При этом увеличивается дипольная связь между уровнями  $^2S$  и  $^2P$ , а расстояние между уровнями, как правило, уменьшается (исключение представляет переход от Li к Na). Согласно общей теории [11] это должно приводить к тому, что резонансная энергия движется к порогу  $^2S$ . (Это правило не является строгим, так как короткодействие может вызвать некоторые отклонения от него). Анализ табл. 1 приводит к заключению, что в случае Cs резонанс «выталкивается» ниже порога  $^2S$  в дискретный спектр, а фаза  $^3P$  приобретает лишнее слагаемое  $\pi$  и медленно изменяется при  $E > 0$ .

Для проверки этого утверждения изложенная процедура экстраполяции использовалась также для определения энергий сродства электрона к щелочному атому. Для этого вместо введенных в формуле (1) функций  $\varphi$  и  $\psi$  следует при  $E < 0$  использовать функцию с асимптотикой

$$\chi \sim e^{-\kappa r}, \quad E = -\kappa^2/2.$$

Аналогично (2) имеем

$$\chi = fa' + gb'.$$

Сшивание этой функции с внутренней с помощью  $R$ -функции Вигнера приводит к уравнению

$$M(E) a'(E) + b'(E) = 0, \quad (7)$$

которое в приближении (5) или (6) можно решать относительно  $E$ .  $a'(E)$  и  $b'(E)$  находятся, как и при  $E > 0$  численным интегрированием. Такая процедура

является обратной методу квантового дефекта, в котором по экспериментальным значениям энергий связанных состояний ищутся фазы рассеяния.

Расчет функции  $M$  показал, что для  $1S$ -фаз для всех атомов реализуется случай  $A$ . Полученные экстраполяцией  $1S$ -фаз и решением уравнения (7) энергии связи валентного электрона в отрицательных ионах в состояниях  $1S$  приведены в табл. 2. Сравнение с экспериментальными данными и другими расчетами ука-

Т а б л и ц а 2  
Коэффициенты разложения (5) для  $1S$ -фаз  
и энергии сродства  $s$ -электрона к щелочным атомам

АТОМЫ	$\beta$	$\gamma$ , эВ <sup>-1</sup>	Энергии сродства, эВ			
			1	2	3	4
Li	0.2850	-0.0742	0.49	0.58	0.62	0.62
Na	0.3396	-0.0766	0.46	0.78	0.54	0.55
K	0.0319	-0.1436	0.44	0.90	0.50	0.50
Rb	0.1116	-0.0342	0.38	—	+	0.49
Cs	-0.1841	-0.1996	0.43	—	+	0.47

Примечание. 1 — наш расчет; 2 — расчеты Клементи с соавторами с приближенным учетом корреляций; 3 — точные расчеты Вайса; 4 — экспериментальные результаты. Все данные взяты из книги Смирнова [20].

зывают на неплохую точность метода. В принципе проводя более тщательные расчеты методом сильной связи и увеличив число членов разложения в формулах (5), (6), можно получать энергию сродства с гораздо лучшей точностью.

Наиболее интересным для нашего рассмотрения обстоятельством является то, что решение уравнения (7) дает для Cs связанное состояние  $3P$  с энергией сродства  $p$ -электрона, равной 0.027 эВ. Предположение о том, что в случае Cs экстраполяция фаз приводит к выталкиванию резонанса в дискретный спектр, подтверждается. Одна из возможных причин состоит в том, что используемые в [1] атомные волновые функции Cs дают слишком большое значение поляризуемости. Оно составляет 449 а. е., в то время как наилучшее экспериментальное значение равно 385 [21]. Поэтому для описания низкоэнергетического резонанса в рассеянии электронов на Cs необходим новый расчет  $3P$ -фаз с использованием атомных функций (или псевдофункций  $2P$ -состояния), которые давали бы значение  $\alpha$ , близкое к экспериментальному.

Подчеркнем далее, что, хотя получающееся связанное состояние  $3P$  оказывает влияние на поведение фазы при  $E > 0$ , оно не приводит к резонансу. Совершенно аналогичное явление наблюдается при рассеянии на короткодействующем потенциале [22]. Фаза рассеяния при  $l=1$  в приближении ТЭР имеет вид

$$\operatorname{tg} \delta_1 = -\frac{sE^{3/2}}{E - \epsilon},$$

где  $s$  — положительная постоянная,  $\epsilon$  — энергия связанного или квазисвязанного состояния. Если  $\epsilon > 0$  (в непрерывном спектре имеется квазидискретный уровень), то фаза резко возрастает вблизи  $E=0$  и проходит через  $\pi/2$  при  $E=\epsilon$ . Если же  $\epsilon < 0$  (т. е. имеется связанное состояние), то фаза медленно убывает при  $E > 0$  и резонанса нет даже если  $\epsilon$  мало. В этом состоит характерное отличие случая  $l \geq 1$  от случая  $l=0$ . Из результатов, полученных в настоящей работе, видно, что этот вывод не меняется и при учете поляризационного потенциала.

В заключение автор выражает благодарность Б. П. Каулакису за обсуждения, стимулировавшие появление данной работы, и Э. М. Каруле за полезные замечания.

## Литература

- [1] Э. М. Каруле. В сб.: Эффективные сечения столкновений электронов с атомами, 33. Рига, 1965.
- [2] D. W. Norcross. *J. Phys.*, B, 4, 1458, 1971.
- [3] D. L. Moores, D. W. Norcross. *J. Phys.*, B, 5, 1482, 1972.
- [4] A.-L. Sinfailam, R. K. Nesbet. *Phys. Rev.*, A, 7, 1987, 1973.
- [5] I. I. Fabrikant. *Phys. Lett.*, A, 58, 21, 1976.
- [6] M. Gailitis, R. Damburg. *Proc. Phys. Soc.*, 82, 192, 1963.
- [7] P. G. Burke, A. J. Taylor. *J. Phys.*, B, 2, 869, 1969.
- [8] T. F. O'Malley, L. Spruch, L. Rosenberg. *J. Math. Phys.*, 2, 491, 1961.
- [9] R. O. Berger, H. B. Snodgrass, L. Spruch. *Phys. Rev.*, 185, 113, 1969.
- [10] I. I. Fabrikant. *J. Phys.*, B, 11, 3624, 1978.
- [11] И. И. Фабрикант. *Опт. и спектр.*, 48, 218, 1980.
- [12] E. P. Wigner, L. Eisenbud. *Phys. Rev.*, 72, 29, 1947.
- [13] B. Stefanov. *Phys. Rev.*, A, 22, 427, 1980.
- [14] М. А. Мазинг, П. Д. Серапинас. *ЖЭТФ*, 60, 541, 1971.
- [15] Б. П. Каулакис, Л. П. Пресняков, П. Д. Серапинас. *Письма ЖЭТФ*, 30, 60, 1979.
- [16] Б. П. Каулакис. *Опт. и спектр.*, 48, 1047, 1980.
- [17] P. J. Visconti, J. A. Slevin, K. Rubin. *Phys. Rev.*, A, 3, 1310, 1971.
- [18] J. C. Crown, A. Russek. *Phys. Rev.*, 138, A669, 1965.
- [19] P. G. Burke, J. F. V. Mitchell. *J. Phys.*, B, 6, L161, 1973.
- [20] Б. М. Смирнов. *Отрицательные ионы*. М., 1978.
- [21] А. А. Радциг, Б. М. Смирнов. *Справочник по атомной и молекулярной физике*. М., 1980.
- [22] Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. *Квантовая механика (нерелятивистская теория)*. ФМЛ, М., 1963.

Поступило в Редакцию 15 января 1981 г.