

В. П. ЖДАНОВ, М. И. ЧИБИСОВ

ОТРИЦАТЕЛЬНЫЕ ИОНЫ АТОМОВ ЩЕЛОЧНЫХ МЕТАЛЛОВ

(Представлено академиком М. А. Леонтовичем 20 X 1975)

1. В атомах щелочных металлов внешний электрон слабо влияет на электроны остова, поэтому взаимодействие внешнего электрона с электронами остова можно заменить модельным потенциалом. Параметры потенциала естественно выбрать из условия равенства энергий связи основного и первого возбужденного состояний с экспериментальными значениями энергий связи. Полученный таким способом модельный потенциал можно использовать для других задач. Например, в работе ⁽¹⁾ с помощью модельного потенциала рассчитаны энергии связи электрона в отрицательных ионах щелочных металлов; в работе ⁽²⁾ рассчитаны термы молекулярных ионов щелочных металлов. Целью данной работы является исследование зависимости энергии связи отрицательных ионов щелочных металлов от выбора модельного потенциала и использование полученных вариационных функций для расчета сечений резонансной перезарядки отрицательных ионов на своих атомах.

2. Для расчета энергий срoдства используем следующие потенциалы:

$$U_1(r) = \left(-\frac{1}{r}\right) \frac{A}{r} e^{-2kr}, \quad U_2(r) = \left(-\frac{1}{r}\right) \frac{B}{r^2}.$$

Первый потенциал был использован в работах ^(1, 2). Точные решения в первом потенциале не известны, поэтому константы A и k обычно ⁽¹⁾ определяются из условия совпадения энергий связи основного и первого возбужденного состояний, полученных с использованием вариационных водородоподобных функций с экспериментальными значениями.

Константу B во втором потенциале можно выбрать из условия, аналогичного условию работы ⁽¹⁾, т. е. чтобы вариационная функция давала экспериментальное значение энергии связи основного состояния. В этом случае

$$B_1 = (1 - 2E)/8E. \quad (1)$$

Здесь и далее используется система атомных единиц. Во втором потенциале известны точные решения ⁽³⁾, поэтому константу B более естественно выбрать из условия равенства энергии связи основного состояния при точном решении с экспериментальным значением энергии связи. Тогда

$$B_2 = 1/8 \left\{ \left[\left(\frac{2}{E} \right)^{1/2} - 1 \right]^2 - 1 \right\}. \quad (2)$$

Энергия связи отрицательных ионов определяется вариационным способом с использованием гамильтониана

$$H = -1/2 \Delta_1 - 1/2 \Delta_2 + U(r_1) + U(r_2) + 1/r_{12} \quad (3)$$

и вариационной функции вида

$$\psi \sim (1 + cr_{12}) (e^{-\alpha r_1 - \beta r_2} + e^{-\alpha r_2 - \beta r_1}). \quad (4)$$

Здесь α , β , c — варьируемые параметры.

Функция вида (4) дает (4) энергию связи электрона отрицательного иона водорода 0,704 эв, близкую к точному значению 0,754 эв.

В результате расчета оказывается, что экстремум достигается при $\alpha \approx \beta$, поэтому для первого потенциала использование функции (4) дает результаты, аналогичные работе (1), где сразу бралась двухпараметрическая функция вида (4). Для второго потенциала с выбором константы B_1

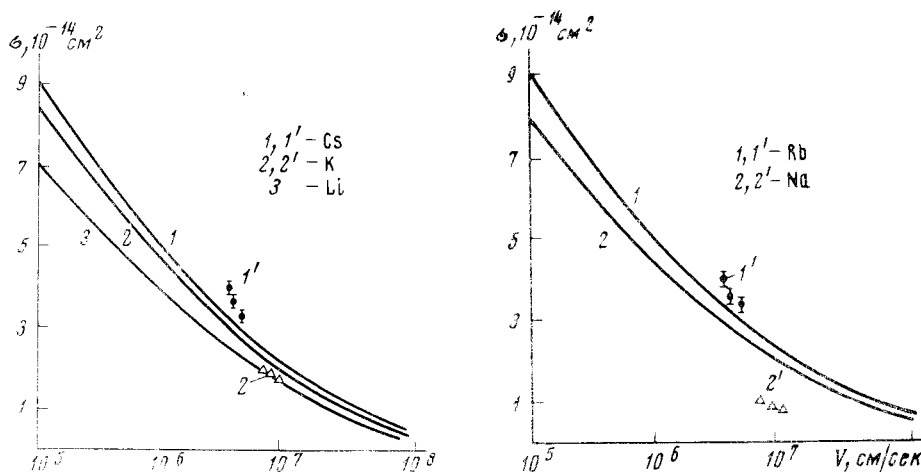


Рис. 1. Сечения резонансной перезарядки отрицательных ионов цезия. 1, 2, 3 — теория; 1', 2' — эксперимент (8)

из условия (1) энергия связи несколько меньше, чем для первого потенциала (см. табл. 1), так как второй потенциал содержит всего один параметр. Если же использовать условие (2) для второго потенциала, то связь в данной модели вообще отсутствует. Можно ожидать, что если в первой модели выбрать A и k не с использованием вариационных водородоподобных функций, а с использованием точных решений, то согласие вычисленных энергий связи с экспериментальными (5) значительно ухудшится. Поэтому следует сделать вывод, что метод модельного потенциала не применим для определения энергии связи электрона в отрицательных ионах щелочных металлов, так как неточность при вычислении полной энергии двух электронов, связанная с применением модельного потенциала, имеет ту же величину, что и энергия связи электрона в отрицательном ионе.

3. Однако, поскольку функция вида (1) достаточно точно дает полную энергию двух электронов, а параметры α , β , с слабо зависят от модели потенциала, функцию (1) можно использовать для нахождения асимпто-

Таблица 1

Параметр *	Li	Na	K	Rb	Cs
I , эв	5,391	5,139	4,340	4,49	3,894
ΔE_0 , эв	$0,62 \pm 0,07$	$0,543 \pm 0,010$	$0,501 \pm 0,005$	$0,486 \pm 0,015$	$0,472 \pm 0,003$
ΔE_1 , эв	0,43	0,53	0,49	0,43	0,42
ΔE_{21} , эв	0,10	0,17	0,31	0,31	0,31
E_{22} , эв	4,95	4,68	4,20	3,72	3,30
C	0,47	0,45	0,48	0,44	0,44

* I — наблюдаемый потенциал ионизации, ΔE_0 — экспериментальная энергия сродства (6). Вычисленные авторами: ΔE_1 — энергия сродства в первом потенциале, ΔE_{21} — энергии сродства во втором потенциале при условии (1), E_{22} — энергия отрицательного иона при условии (2); C — амплитуда асимптотики волновой функции (5), определенная путем сшивки (5) с (4).

тического поведения волновой функции отрицательного электрона для конфигураций, когда один электрон находится вблизи ядра, а другой далеко от ядра:

$$\psi(r) \simeq \frac{c}{r} \exp(-\gamma r), \quad \gamma = \sqrt{2\Delta E}. \quad (5)$$

Для нахождения коэффициента c можно считать плотности заряда, даваемые функциями (4) и (5), при не очень больших расстояниях $r \simeq 10$. Коэффициент c слабо зависит от γ и для всех атомов щелочных металлов оказывается равным $c \simeq 0,5$.

Используем полученный результат для расчета сечения резонансной перезарядки отрицательных ионов на своих атомах. Сечение перезарядки определяется теорией Фирсова (⁶, ⁷):

$$\sigma = \frac{\pi}{2} R_0^2, \quad \frac{1}{V} \sqrt{\frac{\pi R_0}{2\gamma}} \Delta U(R_0) = \frac{1}{\pi}. \quad (6)$$

Здесь $\gamma = \sqrt{2\Delta E}$, где ΔE — энергия сродства, $\Delta U(R)$ — потенциал обменного взаимодействия. Потенциал обменного взаимодействия вычисляется методом (³) с использованием (5):

$$\Delta U = \frac{4\pi c^2}{R} \exp(-\gamma R). \quad (7)$$

Сечения перезарядки, вычисленные по формулам (6), (7), сравниваются с экспериментом (⁸) на рис. 1. Для К, Rb, Cs наблюдается хорошее согласие с экспериментальными значениями сечений. К сожалению, сечения измерены в очень маленьком диапазоне скоростей. Это не позволило в работе (⁸) достаточно точно определить энергию сродства электронов, которая вычислялась по наклону кривой сечения в зависимости от логарифма скорости. В малом диапазоне скоростей также трудно было учесть изменения наклона кривой сечения, связанные с осцилляциями в сечении перезарядки (⁹), которые могут быть немалыми при экспериментальных энергиях.

Институт атомной энергии
им. И. В. Курчатова
Москва

Поступило
14 X 1975

ЛИТЕРАТУРА

- ¹ L. Szasz, Acta Phys. Hung., v. 6, 307 (1956). ² L. Belomonte et al., J. Chem. Phys., v. 61, № 8, 3225 (1974). ³ Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, Квантовая механика, М., Физматгиз, 1963. ⁴ S. Chandrasekhar, Astrophys. J., v. 100, 176 (1944). ⁵ T. A. Patterson, Phys. Rev. Lett., v. 32, 189 (1974). ⁶ О. Б. Фирсов, ЖЭТФ, т. 21, 1001 (1951). ⁷ Б. М. Смирнов, ЖЭТФ, т. 46, 1017 (1964). ⁸ Ю. Ф. Быдин, ЖЭТФ, т. 46, 1612 (1964). ⁹ Б. М. Смирнов, Асимптотические методы в теории атомных столкновений, М., Атомиздат, 1973.