

РЕЛЯТИВИСТСКИЙ ЭФФЕКТ ПРИ НИЗКОЭНЕРГЕТИЧЕСКОМ УПРУГОМ РАССЕЯНИИ ЭЛЕКТРОНА НА АТОМАХ ИНЕРТНЫХ ГАЗОВ

Д.П.Гречухин, А.В.Ломоносов

*Российский научный центр "Курчатовский институт"
123182 Москва, Россия*

Поступила в редакцию 2 ноября 1994 г.

В работе показана необходимость учета релятивистских поправок при описании упругого рассеяния медленных электронов на атомах неона, аргона, криптона и ксенона. Взаимодействие электрона с атомом моделировалось несколькими видами сферически-симметричных потенциалов. В численных расчетах использованы как метод фазовых функций, так и непосредственное интегрирование радиального релятивистского уравнения Дирака и нерелятивистского уравнения Шредингера. Показано, что различие между величинами полного сечения для релятивистского и нерелятивистского случаев при энергиях менее 1 эВ возрастает с ростом атомного номера Z .

Расчет сечения упругого низкоэнергетического рассеяния электрона на атоме аргона впервые был проведен Хольцмарком [1] путем решения радиального уравнения Шредингера в потенциале Хартри плюс поляризационные силы. Нерелятивистские расчеты полного сечения упругого рассеяния электрона на атомах инертных газов с различными видами поляризационного и обменного потенциалов проведены в работах [2–5]. В 1991 г. Саха [6] представил результаты вычислений, изначально включив рассеиваемый электрон в схему мульти-конфигурационного нерелятивистского метода Хартри–Фока. Экспериментальные значения полного и парциальных сечений упругого рассеяния электрона на аргоне получены в [7–12].

В данной работе в рамках метода фазовых функций [13, 14] решается радиальное релятивистское уравнение Дирака и нерелятивистское уравнение Шредингера для задачи упругого рассеяния на сферически-симметричном потенциале $V(r)$, который убывает на бесконечности быстрее, чем r^{-1} . С целью проверки результатов, полученных фазовым методом, проводилось также непосредственное интегрирование радиальных уравнений Дирака и Шредингера с последующей сшивкой с асимптотическими решениями.

Нормированные решения радиального уравнения Дирака [15] для большой, $g(r)$, и малой, $f(r)$ компонент имеют вид

$$g(r) = \sqrt{\frac{E + mc^2}{2E}} A_{jl}(r) (\cos \delta_{jl}(r) j_l(pr) - \sin \delta_{jl}(r) \eta_l(pr)), \quad (1)$$

$$f(r) = i^{l-l'+1} \sqrt{\frac{E - mc^2}{2E}} A_{jl}(r) (\cos \delta_{jl}(r) j_{l'}(pr) - \sin \delta_{jl}(r) \eta_{l'}(pr)), \quad (2)$$

где j – полный угловой момент, l – орбитальный угловой момент, $l' = 2j - l$, E – полная энергия электрона, m – масса электрона, \hbar – постоянная Планка, c – скорость света в вакууме, $p = \sqrt{E^2/c^2 - m^2c^2/\hbar^2}$ – волновой вектор, $j_l(pr)$ и $\eta_l(pr)$ – сферические функции Бесселя и Неймана, определенные

в [16]. Фазовая¹⁾, $\delta_{jl}(r)$, и амплитудная, $A_{jl}(r)$, функции [14] удовлетворяют системе уравнений [13]²⁾ с граничными условиями $\delta_{jl}(0) = 0$, $A_{jl}(\infty) = 1$:

$$\frac{d}{dr}\delta_{jl}(r) = \frac{V(r)(pr)^2}{\hbar c} \left\{ \sqrt{\frac{E+mc^2}{E-mc^2}} (\cos \delta_{jl}(r) j_l(pr) - \sin \delta_{jl}(r) \eta_l(pr))^2 + \right. \\ \left. + \sqrt{\frac{E-mc^2}{E+mc^2}} (\cos \delta_{jl}(r) j_{l'}(pr) - \sin \delta_{jl}(r) \eta_{l'}(pr))^2 \right\}, \quad (3)$$

$$\frac{d}{dr}A_{jl}(r) = -\frac{A_{jl}(r)V(r)(pr)^2}{\hbar c} \times \\ \times \left\{ \sqrt{\frac{E+mc^2}{E-mc^2}} (\cos \delta_{jl}(r) j_l(pr) - \sin \delta_{jl}(r) \eta_l(pr)) \times \right. \\ \times (\cos \delta_{jl}(r) \eta_l(pr) - \sin \delta_{jl}(r) j_l(pr)) + \\ \left. + \sqrt{\frac{E-mc^2}{E+mc^2}} (\cos \delta_{jl}(r) j_{l'}(pr) - \sin \delta_{jl}(r) \eta_{l'}(pr)) \times \right. \\ \left. \times (\cos \delta_{jl}(r) \eta_{l'}(pr) + \sin \delta_{jl}(r) j_{l'}(pr)) \right\}. \quad (4)$$

Перейдем к нерелятивистскому пределу в уравнениях (3) и (4). При этом

$$\sqrt{(E+mc^2)/(E-mc^2)} \rightarrow 2mc/\hbar k, \quad \sqrt{(E-mc^2)/(E+mc^2)} \rightarrow 0, p \rightarrow k$$

(нерелятивистское выражение для кинетической энергии $E_k = (\hbar k)^2/2m$) и мы получим уравнения для фазовой и амплитудной функций³⁾ [14] с граничными условиями $\delta_l(0) = 0$, $A_l(\infty) = 1$:

$$\frac{d}{dr}\delta_l(r) = \frac{2m}{\hbar^2} V(r) kr^2 \{ (\cos \delta_{jl}(r) j_l(kr) - \sin \delta_{jl}(r) \eta_l(kr))^2 \}, \quad (5)$$

$$\frac{d}{dr}A_l(r) = -\frac{2m}{\hbar^2} A_l(r) V(r) kr^2 \{ (\cos \delta_l(r) j_l(kr) - \sin \delta_l(r) \eta_l(kr)) \times \\ \times (\cos \delta_l(r) \eta_l(kr) - \sin \delta_l(r) j_l(kr)) \}. \quad (6)$$

При рассеянии нерелятивистской частицы на потенциале, характерная глубина которого порядка mc^2 , необходимо учитывать релятивистские поправки, поэтому в уравнение (3) нельзя пренебречь вторым слагаемым и просто перейти к уравнению (5).

Применим полученные уравнения к задаче рассеяния медленного электрона на атоме инертного газа. Потенциал рассеяния запишем в форме

$$V(r) = V_a(r) + V_p(r) + V_{er}(r), \quad (7)$$

где $V_a(r)$ — потенциал невозмущенного атома, являющийся суммой кулоновского потенциала взаимодействия ядра с равномерным распределением заряда и потенциала взаимодействия с электронной плотностью $\rho(r)$, получаемой в

¹⁾ $\delta_{jl}(\infty) = \delta_{jl}$ — фаза упругого рассеяния.

²⁾ Подробный вывод смотри в [17].

³⁾ Фазовая, $\delta_l(r)$, и амплитудная, $A_l(r)$, функции уравнения Шредингера зависят лишь от орбитального числа l и при нерелятивистских энергиях $\delta_l \approx \delta_{l+1/2,l} \approx \delta_{l-1/2,l}$, $p \approx k$.

рамках модели единого атомного поля Хартри–Фока–Слейтера в релятивистском приближении, $V_p(r)$ — поляризационный потенциал, $V_{ex}(r)$ — обменный потенциал.

Для определения влияния модельного вида поляризационного и обменного потенциалов на значение полного сечения упругого рассеяния электрона на атоме аргона были сделаны три серии численных расчетов со следующими типами поляризационного, $V_p(r)$, и обменного, $V_{ex}(r)$, потенциалов ⁴⁾:

- 1) с поляризационным потенциалом [2] и обменным потенциалом [18];
- 2) с поляризационным потенциалом [19] и обменным потенциалом [18];
- 3) с поляризационным потенциалом [2] и обменным потенциалом [20].

На рис.1 приведены релятивистские результаты ⁵⁾ для первой модели потенциалов в сравнении с расчетами Саха [6] и экспериментальными данными [7–9]. Сечение упругого рассеяния электрона с кинетической энергией $E_k = 10^{-8}$ эВ при учете релятивистских поправок $\sigma_{rel} = 51$ в атомных единицах, а без их учета — $\sigma_{nrel} = 44$. Это различие определяется достаточно глубоким потенциалом невозмущенного атома $V_a(r)$, в котором электрон имеет уже релятивистский характерный импульс, что подтверждает дополнительная серия вычислений, в которой поляризационный $V_p(r)$ и обменный $V_{ex}(r)$ потенциалы не учитывались.

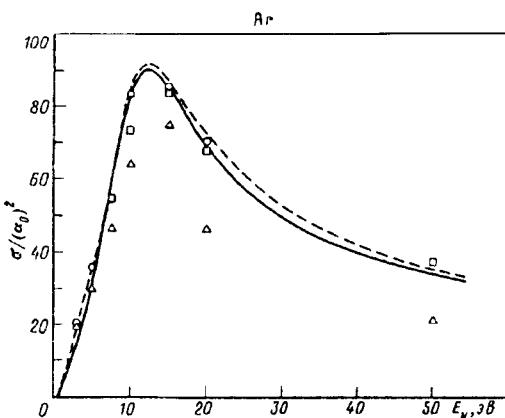


Рис.1

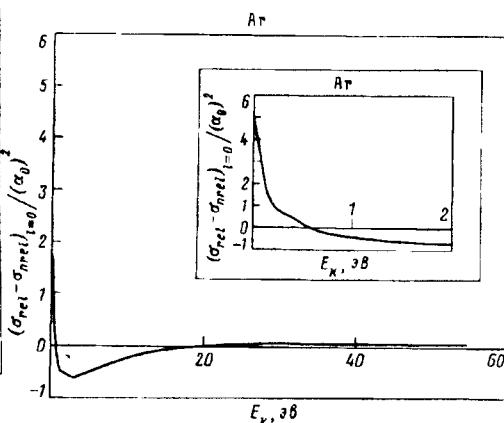


Рис.2

Рис.1. Зависимость полного сечения рассеяния σ в атомных единицах от кинетической энергии E_k в эВ для Ar: сплошная кривая — результаты релятивистского расчета; штриховая — результаты [6], точки — эксперимент: о — [7]; Δ — [8]; \square — [9]

Рис.2. Зависимость разности парциальных упругих сечений рассеяния электрона для π -волны в релятивистском и нерелятивистском случаях в атомных единицах для атома Ar от кинетической энергии электрона E_k в эВ

Во второй серии расчетов, в которой менялся вид поляризационного потенциала $V_p(r)$, полное сечение упругого рассеяния на всем интервале энергий меняется незначительно (порядка 2%), а в третьей серии, в которой менялся вид обменного потенциала $V_{ex}(r)$, для диапазона кинетических энергий

⁴⁾Параметры и точный вид этих потенциалов можно найти в [17].

⁵⁾Нерелятивистские результаты не изображены из-за мелкого масштаба рисунка.

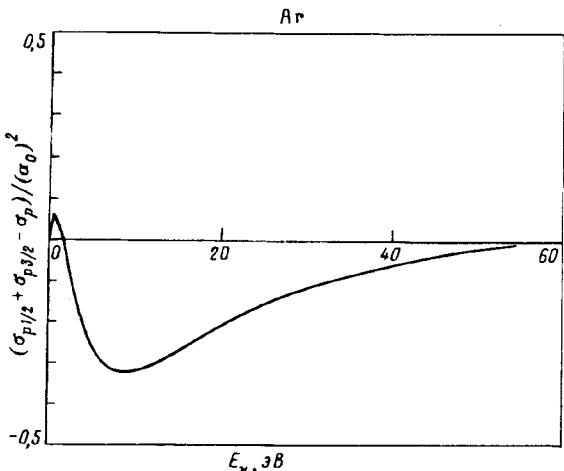


Рис.3. Зависимость разности суммы релятивистских парциальных сечений $p_{1/2}$ и $p_{3/2}$ упругого рассеяния электрона и нерелятивистского парциального сечения для p -волн в атомных единицах для атома Ar от кинетической энергии электрона E_k в эВ

$E_k \sim 1$ эВ имеется существенное отличие от предыдущих результатов. При энергии $E_k = 10^{-8}$ эВ $\sigma_{rel} = 1630$ в атомных единицах. При кинетических энергиях E_k выше 3 эВ все три типа вычислений полного сечения дают значения согласующиеся с экспериментальным. Во всех трех вариантах сечение упругого рассеяния электрона при кинетической энергии $E_k = 10^{-8}$ эВ в случае релятивистских и нерелятивистских расчетов отличаются друг от друга примерно на 15%. При низких энергиях сечение существенно зависит от формы обменного потенциала. Дополнительная серия расчетов, аналогичная третьей, но в которой варьировался вклад обменного потенциала Рилея [20] ($V_{ex}(r) = nV_{ex}(r)$ [20], где $0 \leq n \leq 1$), подтверждает эту зависимость.

Релятивистские эффекты в упругом рассеянии электрона на атоме аргона при низких кинетических энергиях (E_k менее 5 эВ) значительны для s - и p -волн, с ростом кинетической энергии электрона E_k число парциальных волн увеличивается и релятивистский эффект в полном сечении σ падает. На рис.2 изображена разность релятивистского и нерелятивистского парциальных сечений для s -волн, а на рис.3 изображена разность суммы релятивистских парциальных сечений $p_{1/2}$ и $p_{3/2}$ и нерелятивистского парциального сечения для p -волн для случая поляризационного $V_p(r)$ [2], и обменного, $V_{ex}(r)$ [18] потенциалов.

Отличие результатов для s -фаз рассеяния в релятивистском и нерелятивистском методе, не учитывающим спин-орбитальных сил, показывает, что различие полного сечения упругого рассеяния в рамках этих методов, по-видимому, нет возможности объяснить спин-орбитальным взаимодействием.

Применение релятивистского и нерелятивистского фазовых методов позволяет определить, при каких расстояниях начинают играть роль релятивистские эффекты. При достаточно глубоком потенциале $V(r)$ мы уже не имеем права при переходе к нерелятивистскому пределу отбросить второе слагаемое в уравнении (3), так как при интегрировании этого уравнения оно вносит вклад в значение фазовой функции $\delta_{jl}(r)$. Это подтверждается непосредственным численным интегрированием уравнения (3) с учетом и без учета второго слагаемого⁶⁾. Путем изучения зависимости фазовой s -функции ($l = 0$)

⁶⁾Это эквивалентно численному интегрированию уравнения (5) для поляризационного нерелятивистского метода.

от расстояния до центра ядра атома аргона для кинетической энергии электрона $E_k = 10^{-8}$ эВ нами показано, что релятивистские поправки начинают нарастать на расстояниях r порядка 2 атомных единиц.

Отличие релятивистского и нерелятивистского результатов расчетов сечения упругого рассеяния электрона на атоме определяется глубиной невозмущенного атомного потенциала $V_a(r)$, которая зависит от величины заряда ядра атома Z . Были проведены расчеты полного сечения упругого рассеяния электрона на атомах инертных газов неон ($Z = 10$), аргон ($Z = 18$), криpton ($Z = 36$) и ксенон ($Z = 54$) (поляризационный потенциал $V_p(r)$ [2] и обменинный $V_{ex}(r)$ [18]).

Полученные результаты [17] показывают, что с ростом заряда ядра атома Z различие релятивистского и нерелятивистского расчетов для малых кинетических энергий электрона существенно увеличивается: при энергии $E_k = 10^{-8}$ эВ для атома Ar релятивистское сечение отличается от нерелятивистского на 15%, а для наиболее тяжелого Xe – на 192%.

В настоящее время точность экспериментальных данных такова, что даже простые модельные потенциалы дают, видимо, хорошее согласие с экспериментом. Наиболее последовательные теоретические нерелятивистские расчеты [6] методом мульти-конфигурационного Хартри–Фока, в схему которого включается электрон в непрерывном спектре, требуют очень мощных вычислительных систем типа CRAY. В нашей работе показано, что учет релятивистских поправок влияет на значение фаз и сечения рассеяния упругого рассеяния. Используемый нами способ решения радиального уравнения Дирака методом фазовых функций может быть применен и для других задач, где требуется знать лишь фазу рассеяния, а не волновую функцию.

Авторы благодарят В.Ю. Добрецова за предоставление программ, без которых проведение численных расчетов было бы затруднительным, и А.Л. Баранова за участие в обсуждении данной работы. Частичное финансирование данной работы осуществлялось по гранту РНЦ "Курчатовский Институт".

-
1. J.Holtsmark, Z. Physik **55**, 437 (1929).
 2. J.K.O'Connel and N.F.Lane, Phys.Rev **A27**, 1893 (1983).
 3. Dasgupta, Atari and A.K.Bhatia, Phys. Rev. **A32**, 3335 (1985).
 4. R.P.McEachran and A.D.Stauffer, J. Phys. **B16**, 4023 (1983).
 5. W.C.Fon, K.A.Berrington, P.G.Burke et al., J. Phys. **B16**, 307 (1983).
 6. H.P.Saha, Phys.Rev **A43**, 4712 (1991).
 7. J.F.Williams, J. Phys. **B12**, 265 (1979).
 8. S.K.Srivastava, H.Tanaka, A.Chutjan et al., Phys. Rev. **A23**, 2156 (1981).
 9. J.C.Nickel, K.Imre, D.F.Register et al., J Phys **B18**, 967 (1985).
 10. D.Andrick and H.P.Saha, Phys.Rev **A43**, 4712 (1991).
 11. S.J.Buckman and B.Lohmann, J. Phys. **B19**, 2547 (1986).
 12. J.Fertch, B.Granitzta, C.Masche et al., J. Phys. **B18**, 967 (1985).
 13. Ф.Калоджеро, Метод фазовых функций в теории потенциального рассеяния. М.: Мир, 1972.
(F.Calogero, Variable phase approach to potential scattering. Academic Press, New York and London, 1967.)
 14. В.В.Бабиков, Метод фазовых функций в квантовой механике. М.: Наука, 1988.
 15. А.И.Ахиезер, В.Б.Берестецкий, Квантовая электродинамика. М.: Наука, 1969.
 16. М.Абрамович, И.Стиган, Справочник по специальным функциям. М.: Наука, 1979.
(M.Abramowitz and I.Stegun, Handbook of mathematical functions, National Bureau of Standards of standards applied mathematics series 55, 1964).
 17. Д.П.Гречухин, А.В.Ломоносов, Препринт ИАЭ 5789/12. М., 1994.
 18. J.Hara, Phys.Soc.Jpn. **22**, 710 (1967).
 19. Д.Хартри, Расчеты атомных структур. М.: ИЛ, 1960. (D.R.Hartree, The calculation of atomic structures, New York: John Wiley, 1957.)
 20. M.E.Riley and D.G.Truhlar, J. Chem. Phys. **63**, 2182 (1975).