

О НАДЕЖНОСТИ ТЕОРЕТИЧЕСКОГО ПРОГНОЗА В МОДЕЛЬНОМ ОПИСАНИИ УПРУГОГО РАССЕЯНИЯ НИЗКОЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ЭЛЕКТРОНОВ НА АТОМЕ УРАНА

Д. П. Гречухин¹, А. В. Ломоносов*

*Российский научный центр «Курчатовский институт»
123182, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 5 сентября 1996 г.

Метод фазовых функций решения радиального релятивистского уравнения Дирака и нерелятивистского уравнения Шредингера применен к описанию упругого рассеяния медленных электронов на атоме урана. Получены численные значения полного сечения и фаз упругого рассеяния. С целью контроля правильности результатов, найденных методом фазовых функций, во всех случаях было проведено также непосредственное интегрирование уравнений Дирака и Шредингера. Использовались несколько вариантов поляризационного и обменного потенциалов для моделирования процесса рассеяния. Сильная зависимость сечения упругого рассеяния электрона на уране от формы эффективного потенциала при малых кинетических энергиях ($E_k < 5$ эВ) не позволяет надежно прогнозировать наличие или отсутствие эффекта Рамзауэра.

1. ВВЕДЕНИЕ

Эффект Рамзауэра (наличие глубокого минимума в сечении упругого рассеяния медленных электронов на атомах) экспериментально обнаружен для атомов некоторых инертных газов, например для аргона. В работе Кудрина и Дроздова [1] наличие этого эффекта связывается с возможностью создания МГД-генератора на неравновесной двухтемпературной урановой плазме при условии формирования спектра электронов с кинетической энергией E_k в области минимума сечения с целью получить высокую электропроводность среды. В работе [1] проведен расчет сечения упругого рассеяния медленных электронов для диапазона кинетических энергий $0 < E_k < 40$ эВ на атоме урана в рамках нерелятивистского варианта метода фазовых функций [2, 3]. Взаимодействие электрона с атомом урана в [1] описывалось с помощью модели Томаса–Ферми [4] с включением поляризационного потенциала $V_p(r)$ [5], обусловленного электрическим дипольным моментом, индуцированным медленным электроном. Эксперименты по определению сечения упругого рассеяния на уране для кинетических энергий менее 10 эВ являются сложной задачей, и авторам в настоящее время неизвестно об их проведении. В этой области энергий E_k теоретический расчет сечения рассеяния практически реализуем в рамках одночастичной схемы, в которой взаимодействие рассеиваемого электрона с многоэлектронной системой (тяжелым атомом) аппроксимируется сферически-симметричным потенциалом $V(r)$, убывающим при $r \rightarrow \infty$ быстрее, чем r^{-1} :

$$V(r) = V_a(r) + V_p(r) + V_{ex}(r), \quad (1)$$

*E-mail: x1064@kiae.su

$V_a(r)$ — средний атомный потенциал, определяемый плотностью распределения электронов в атоме $\rho(r)$, $V_p(r)$ — поляризационный потенциал, $V_{ex}(r)$ — обменный потенциал.

Все эти компоненты взаимодействия в свою очередь моделируются различными радиальными зависимостями, параметры которых подбираются по некоторым атомным характеристикам. В такой ситуации возникает вопрос о надежности теоретического прогноза поведения полного сечения упругого рассеяния (особенно в интересующем нас диапазоне кинетических энергий $E_k < 10$ эВ, где в полное сечение дают вклад парциальные s , p , d -волны и возможен эффект Рамзауэра) и об устойчивости полученных величин сечений к допустимым вариациям формы потенциалов $V_a(r)$, $V_p(r)$, $V_{ex}(r)$.

Существует возможность описания упругого рассеяния на атоме медленного электрона как релятивистского (уравнение Дирака), так и нерелятивистского (уравнение Шредингера). В наших предыдущих работах [6, 7] на примере низкоэнергетического упругого рассеяния электрона на атомах инертных газов Ag, Kr, Xe показана важность релятивистского подхода к рассеянию медленных электронов. Различие между величинами полного сечения для релятивистского и нерелятивистского случаев при электронной энергии менее 1 эВ возрастает с ростом атомного номера Z . Выявлена существенная чувствительность энергетического хода сечения к модели потенциала взаимодействия атом-электрон.

В данной работе мы продолжаем анализ ситуации и в рамках одночастичной схемы акта рассеяния проводим расчеты величины сечения упругого рассеяния электронов на атоме урана с различными, принятыми в литературе, вариантами взаимодействия электрона с атомом. В рамках метода фазовых функций [2, 3] 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, во всех случаях проводилось также непосредственное интегрирование радиальных уравнений Дирака и Шредингера с последующей сшивкой с асимптотическими решениями.

2. РЕШЕНИЕ РАДИАЛЬНОГО УРАВНЕНИЯ ДИРАКА МЕТОДОМ ФАЗОВЫХ ФУНКЦИЙ

Решение уравнения Дирака в центрально-симметричном поле представляется в виде биспинора [8]:

$$\Psi_{jlm}(\mathbf{r}) = \begin{cases} g(r)\Omega_{jlm}(\mathbf{r}/r), \\ if(r)\Omega_{j'l'm}(\mathbf{r}/r), \end{cases} \quad (2)$$

где $\Omega_{jlm}(\mathbf{r}/r)$ — шаровой спинор, $l' = 2j - l$, j — квантовое число, отвечающее определенному значению оператора полного момента $\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}}$ ($\hat{\mathbf{S}}$ — оператор спина электрона), $g(r)$ и $f(r)$ — радиальные функции, удовлетворяющие системе дифференциальных уравнений

$$\frac{d}{dr} [rg(r)] + \frac{\kappa}{r} [rg(r)] - \frac{1}{\hbar c} [E + mc^2 - V(r)] rf(r) = 0, \quad (3)$$

$$\frac{d}{dr} [rf(r)] - \frac{\kappa}{r} [rf(r)] - \frac{1}{\hbar c} [E - mc^2 - V(r)] rg(r) = 0, \quad (4)$$

где $\kappa = -j(j+1) + l(l+1) - 1/4$, E — полная энергия электрона, m — масса электрона, c — скорость света в вакууме.

В сферически-симметричном потенциале $V(r)$, который убывает на бесконечности быстрее чем r^{-1} , для электрона непрерывного спектра ($E > mc^2$) большая, $g(r)$, и малая, $f(r)$, компоненты имеют следующие асимптотики при $r \rightarrow \infty$:

$$g(r) = \sqrt{\frac{E + mc^2}{2E}} \frac{\sin(pr - \pi l/2 + \delta_{jl})}{pr}, \tag{5}$$

$$f(r) = i^{l-l'+1} \sqrt{\frac{E - mc^2}{2E}} \frac{\sin(pr - \pi l'/2 + \delta_{jl'})}{pr}, \tag{6}$$

где $p = \sqrt{E^2/c^2 - m^2c^2}/\hbar$ — волновой вектор, δ_{jl} — фаза упругого рассеяния.

Следуя методу фазовых функций, заменим радиальные функции $g(r)$ и $f(r)$ на фазовую $\delta_{jl}(r)$ и амплитудную $A_{jl}(r)$ функции [3] имеем

$$g(r) = \sqrt{\frac{E + mc^2}{2E}} A_{jl}(r) [\cos \delta_{jl}(r) j_l(pr) - \sin \delta_{jl}(r) \eta_l(pr)], \tag{7}$$

$$f(r) = i^{l-l'+1} \sqrt{\frac{E - mc^2}{2E}} A_{jl'}(r) [\cos \delta_{jl'}(r) j_{l'}(pr) - \sin \delta_{jl'}(r) \eta_{l'}(pr)], \tag{8}$$

где $j_l(pr)$ и $\eta_l(pr)$ определены в [9].

Подставляя (7) и (8) в (3) и (4), получаем непосредственно уравнения для фазовой и амплитудной функций с граничными условиями $\delta_{jl}(0) = 0$, $A_{jl}(\infty) = 1$ [2]:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dr} \delta_{jl}(r) = \frac{V(r)(pr)^2}{\hbar c} \left\{ \sqrt{\frac{E + mc^2}{E - mc^2}} [\cos \delta_{jl}(r) j_l(pr) - \sin \delta_{jl}(r) \eta_l(pr)]^2 + \right. \\ \left. + \sqrt{\frac{E - mc^2}{E + mc^2}} [\cos \delta_{jl}(r) j_{l'}(pr) - \sin \delta_{jl}(r) \eta_{l'}(pr)]^2 \right\}, \tag{9} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dr} A_{jl}(r) = -\frac{A_{jl}(r)V(r)(pr)^2}{\hbar c} \times \\ \times \left\{ \sqrt{\frac{E + mc^2}{E - mc^2}} [\cos \delta_{jl}(r) j_l(pr) - \sin \delta_{jl}(r) \eta_l(pr)] \times \right. \\ \times [\cos \delta_{jl}(r) \eta_l(pr) - \sin \delta_{jl}(r) j_l(pr)] + \\ + \sqrt{\frac{E - mc^2}{E + mc^2}} [\cos \delta_{jl}(r) j_{l'}(pr) - \sin \delta_{jl}(r) \eta_{l'}(pr)] \times \\ \left. \times [\cos \delta_{jl}(r) \eta_{l'}(pr) + \sin \delta_{jl}(r) j_{l'}(pr)] \right\}. \tag{10} \end{aligned}$$

Перейдем к нерелятивистскому пределу в уравнениях (9) и (10). При этом $\sqrt{(E + mc^2)/(E - mc^2)} \rightarrow 2mc/\hbar k$, $\sqrt{(E - mc^2)/(E + mc^2)} \rightarrow 0$, $p \rightarrow k$ (нерелятивистское выражение для кинетической энергии $E_k = (\hbar k)^2/2m$), и мы получим уравнения для фазовой и амплитудной функций¹⁾ [3] с граничными условиями $\delta_l(0) = 0$, $A_l(\infty) = 1$:

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

$$\frac{d}{dr} \delta_l(r) = \frac{2m}{\hbar^2} V(r) k r^2 [\cos \delta_{jl}(r) j_l(kr) - \sin \delta_{jl}(r) \eta_l(kr)]^2, \quad (11)$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dr} A_l(r) = & -\frac{2m}{\hbar^2} A_l(r) V(r) k r^2 [\cos \delta_l(r) j_l(kr) - \sin \delta_l(r) \eta_l(kr)] \times \\ & \times [\cos \delta_l(r) \eta_l(kr) - \sin \delta_l(r) j_l(kr)]. \end{aligned} \quad (12)$$

При рассеивании нерелятивистской частицы на потенциале, характерная глубина которого порядка mc^2 , необходимо учитывать релятивистские поправки. Из уравнения (9) видно, что для таких потенциалов мы не можем пренебречь вторым слагаемым и просто перейти к уравнению (11).

В заключение приведем формулы, выражающие связь сечения упругого рассеяния σ с фазами упругого рассеяния δ_{lj} в релятивистском случае [8]. Сечение рассеяния выражается через сумму парциальных сечений:

$$\sigma = \sum_{lj} \sigma_{lj} = \frac{4\pi}{p^2} \sum_{lj} |\kappa| \sin^2 \delta_{lj}. \quad (13)$$

В случае низкоэнергетического рассеяния $\delta_{l,l+1/2} \approx \delta_{l,l-1/2} \approx \delta_l$ и формула (13) переходит в нерелятивистское выражение

$$\sigma = \sum_{l=0}^{\infty} \sigma_l = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l. \quad (14)$$

3. МОДЕЛЬНЫЙ ПОТЕНЦИАЛ ДЛЯ РАССЕЯНИЯ ЭЛЕКТРОНА НА АТОМЕ УРАНА

Состояние электронной оболочки атома урана описываем в рамках релятивистского метода Хартри–Фока–Слэтера. Для определения устойчивости наших результатов к изменениям среднего атомного потенциала $V_a(r)$ варьируем центрально-симметричный слэтеровский потенциал $V_{Slit}(r)$, в котором ищутся электронные атомные волновые функции, необходимые для получения электронной плотности $\rho(r)$. Эти вариации были проведены двумя способами:

1. изменением начальной электронной конфигурации атома урана. Для этого кроме основной электронной конфигурации урана $5f_{5/2}^3 6d_{3/2}^1 7s_{1/2}^2$ мы использовали следующие возможные конфигурации: $5f_{5/2}^4 6d_{3/2}^0 7s_{1/2}^2$, $5f_{5/2}^2 6d_{3/2}^2 7s_{1/2}^2$, $5f_{5/2}^1 6d_{3/2}^3 7s_{1/2}^2$, $5f_{5/2}^0 6d_{3/2}^4 7s_{1/2}^2$. Выбор указанной последовательности конфигураций атома урана $5f_{5/2}^n 6d_{3/2}^{4-n} 7s_{1/2}^2$, где $n = 1, 2, 3, 4$, мотивируется тем, что изменение заселенности пространственно-компактной орбиты $5f_{5/2}$ вследствие перехода электронов с пространственно-протяженной орбиты $6d_{3/2}$ может дать значительное изменение потенциала $V_{Slit}(r)$. Это утверждение проиллюстрируем вычислениями среднего квадрата радиуса орбиты для выбранной последовательности конфигураций $5f_{5/2}^n 6d_{3/2}^{4-n} 7s_{1/2}^2$:

$$\langle 5f_{5/2} | \left(\frac{r}{a_0} \right)^2 | 5f_{5/2} \rangle = \begin{cases} 1.73, & n = 0, \\ 2.79, & n = 4, \end{cases}$$

$$\langle 6d_{3/2} | \left(\frac{r}{a_0} \right)^2 | 6d_{3/2} \rangle = \begin{cases} 8.24, & n = 0, \\ 19.48, & n = 4, \end{cases}$$

где a_0 — радиус Бора, значение которого принимается равным $a_0 = \hbar^2 / me^2 = 0.5291772 \cdot 10^{-10}$ м);

2. изменением формы корреляционно-обменного потенциала, используемого в итерационной процедуре получения $V_{Slit}(r)$. Были использованы следующие виды корреляционно-обменного взаимодействия:

- а) стандартная форма Слэтера [10] с двумя наборами параметров, $\alpha_{Slit} = 2/3$ и $\alpha_{Slit} = 1$;
- б) форма из [11];
- в) форма из [12];
- г) форма из [13].

Кроме того, нами проведен расчет атомного потенциала в рамках нерелятивистской модели Томаса–Ферми–Дирака [4] с последующим интегрированием релятивистского уравнения Дирака.

Поляризационный потенциал использован в форме [14]

$$V_p(r) = \begin{cases} V_p^{SR}(r), & r \leq r_c, \\ V_p^{LR}(r), & r > r_c, \end{cases} \quad (15)$$

$$V_p^{SR}(r) = \begin{cases} 0.0622 \ln r_s - 0.096 + 0.018 r_s \ln r_s - 0.02 r_s, & r_s \leq 0.7 \\ -0.1231 + 0.03796 \ln r_s, & 0.7 < r_s < 10, \\ -0.876 r_s^{-1} + 2.65 r_s^{-3/2} - 2.8 r_s^{-2} - 0.8 r_s^{-5/2}, & r_s \geq 10, \end{cases} \quad (16)$$

$$V_p^{LR}(r) = -e^2 \alpha_U / 2r^4, \quad (17)$$

где $r_s = \{3/4\pi\rho(r)\}^{1/3}$, e — заряд электрона, α_U — дипольная поляризуемость урана, r_c — точка пересечения $V_p^{SR}(r)$ и $V_p^{LR}(r)$.

Данный потенциал применялся как в наших предыдущих работах [6, 7] для расчетов упругого рассеяния в инертных газах, так и в [14] для описания упругого рассеяния на атомах щелочных металлов. В настоящее время авторам неизвестно экспериментальное значение дипольной поляризуемости урана α_U . В работе [1] в рамках модели Томаса–Ферми–Дирака [4] получено следующее значение поляризуемости урана в атомных единицах: $\alpha_U/a_0^3 = 29.36$, что несколько больше экспериментально известной поляризуемости более компактного атома ксенона $\alpha_{Xe}/a_0^3 = 27$. Фактически значение дипольной поляризуемости является варьируемым параметром, значение которого мы выбрали $\alpha_U/a_0^3 = 30$, для этого значения был вычислен параметр $r_c = 3.7575268$.

Для изучения вопроса устойчивости полученных результатов к форме поляризационного потенциала, использовался также поляризационный потенциал в виде [5]

$$V_p(r) = -\frac{e^2 \alpha_U}{2(r^2 + r_s^2)^2}, \quad (18)$$

где r_s — подгоночный параметр модели, определяемый из согласия численных расчетов с экспериментальными данными и обычно достаточно хорошо описываемый формулой

$r_v = (\alpha/2)^{1/3}$. При нашем значении поляризуемости урана α_U мы выбрали r_v равным $r_v/a_0 = 2.45$.

В качестве модельного обменного потенциала мы использовали предложенный в работе [15]:

$$V_{ex}(r) = -\frac{2}{\pi} K_F F(\eta), \quad F(\eta) = \frac{1}{2} + \frac{1-\eta^2}{4\eta} \ln \left| \frac{1+\eta}{1-\eta} \right|. \quad (19)$$

где

$$K_F = [3\pi^2 \rho(r)]^{1/3}, \quad \eta = \frac{K}{K_F}.$$

С учетом релятивистских поправок

$$K = \sqrt{\frac{(I + E + \sqrt{c^2 K_F^2 + m^2 c^4})^2}{c^2} - m^2 c^2}, \quad (20)$$

а без их учета

$$K = \sqrt{K_F^2 + k^2 + 2I}, \quad (21)$$

где I — ионизационный потенциал атома.

Для изучения вопроса устойчивости результатов к вариациям формы модельного обменного взаимодействия мы использовали [16]

$$V_{ex}(r) = \frac{1}{2} \{E_k - V_a(r) - V_p(r)\} - \frac{1}{2} \sqrt{(E_k - V_a(r) - V_p(r))^2 - 4\pi\rho(r) \frac{e^2 \hbar^2}{m}}. \quad (22)$$

4. ЧИСЛЕННЫЕ РАСЧЕТЫ

Численное решение систем дифференциальных уравнений (9), (10) и (11), (12) проводилось методом предиктора-корректора Адамса [17]. Кроме того, значение фаз находилось непосредственным интегрированием радиальных уравнений Дирака (3) и (4) с последующей шивкой с асимптотическими решениями (7) и (8), а также интегрированием уравнения Шредингера без учета релятивистских поправок.

Здесь мы приводим результаты численных расчетов, на основании которых можно сделать следующие выводы.

1. В соответствии с утверждениями наших предыдущих работ [6, 7] при низких кинетических энергиях электрона имеется существенное различие значений сечения упругого рассеяния для релятивистского и нерелятивистского случаев.

2. Полученные для урана величины сечений при $E_k < 5$ эВ чувствительны к вариациям формы всех трех слагаемых полного потенциала взаимодействия электрона с атомом, а именно, потенциала невозмущенного атома $V_a(r)$, поляризационного потенциала $V_p(r)$ и обменного потенциала $V_{ex}(r)$.

Таблица 1

Численные расчеты полного сечения упругого рассеяния σ (в ат. ед.) в зависимости от кинетической энергии электрона E_k для атома U с невозмущенным потенциалом $V_a(r)$, полученным с корреляционно-обменным членом [11] с третьим набором параметров, с поляризационным потенциалом $V_p(r)$ [14] и обменным потенциалом $V_{ex}(r)$ [15]

E_k , эВ	σ/a_0^2				E_k , эВ	σ/a_0^2			
	1	2	3	4		1	2	3	4
10 ⁻⁸	104.0	461.9	106.9	462.0	4.410	114.2	67.4	112.7	65.4
0.010	144.9	511.0	145.1	511.2	4.840	100.8	61.8	99.8	60.8
0.040	217.4	545.4	219.2	545.6	5.290	91.4	60.2	89.9	58.7
0.090	359.0	579.1	359.3	579.2	5.760	84.4	60.4	82.8	58.8
0.165	665.6	659.4	665.4	659.2	6.250	80.2	62.7	77.9	60.4
0.250	1022.4	784.9	1022.0	784.6	7.840	74.8	72.7	72.8	70.8
0.365	1122.4	911.4	1122.1	911.0	9.000	76.0	81.1	74.4	79.7
0.490	993.0	921.3	992.8	920.8	10.240	78.9	89.1	77.8	88.1
0.640	838.2	830.7	838.0	830.5	11.560	82.9	96.5	82.2	95.7
0.810	710.7	702.8	710.5	702.7	12.960	87.4	102.7	86.9	102.2
1.000	607.5	577.4	607.3	577.4	14.440	91.8	107.8	91.5	107.5
1.440	448.6	376.6	448.4	376.8	16.000	96.1	111.8	95.8	111.6
2.250	282.3	193.2	282.1	193.1	20.250	104.2	116.9	104.1	116.8
2.560	241.0	155.2	240.7	154.8	25.000	108.1	116.3	108.0	116.3
2.890	205.7	125.6	205.2	125.0	30.250	107.9	111.8	107.9	111.8
3.240	175.7	102.9	175.1	102.2	36.000	104.7	105.1	104.7	105.1
3.610	150.9	86.3	149.9	85.3	42.250	99.5	97.3	99.5	97.3
4.000	130.9	75.1	129.3	73.4					

Примечание. Колонка 1 — полное сечение с учетом релятивистских поправок по формулам (13), (9) и (10); 2 — полное сечение без учета релятивистских поправок по формулам (14), (11) и (12); 3 — полное сечение (релятивистский случай), полученное непосредственным решением уравнения Дирака; 4 — полное сечение (нерелятивистский случай), полученное непосредственным решением уравнения Шредингера.

3. Такая зависимость от формы потенциалов проявляется в наличии или отсутствии эффекта Рамзауэра, а также в положении минимума в зависимости сечения упругого рассеяния от кинетической энергии электрона.

Далее мы проиллюстрируем наши утверждения на конкретных примерах.

В табл. 1 приведены результаты нашего расчета полного сечения упругого рассеяния электрона на атоме урана с невозмущенным потенциалом $V_a(r)$, полученным с корреляционно-обменным членом из [11] с третьим набором параметров, с поляризационным потенциалом $V_p(r)$ из [14] и обменным потенциалом $V_{ex}(r)$ [15]. В табл. 1 представлены результаты в зависимости от кинетической энергии электрона E_k : первая колонка — полное сечение с учетом релятивистских поправок по формулам (13), (9) и (10); вторая — полное сечение без учета релятивистских поправок по формулам (14), (11) и (12); третья — полное сечение (релятивистский случай), полученное непосредствен-

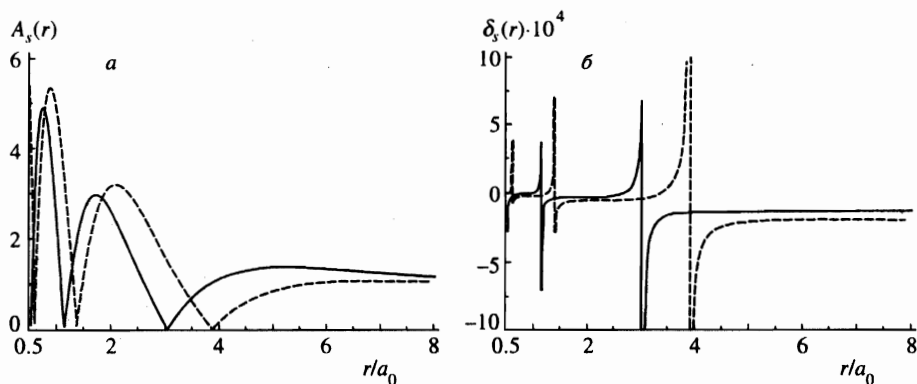


Рис. 1. Зависимости амплитудной (а) и фазовой (б) функций от расстояния до центра ядра (в ат. ед.) для s -волны при кинетической энергии электрона $E_k = 10^{-8}$ эВ с невозмущенным потенциалом $V_a(r)$, полученным с корреляционно-обменным членом из [11] с третьим набором параметров, с поляризационным потенциалом $V_p(r)$ [14] и обменным потенциалом $V_{ex}(r)$ [15]. Сплошные кривые — релятивистский расчет, штриховые — нерелятивистский

ным интегрированием уравнения Дирака; четвертая — полное сечение (нерелятивистский случай), полученное непосредственным интегрированием уравнения Шредингера. Сравнение колонок один и два (три и четыре) позволяет оценить величину релятивистского эффекта в акте рассеяния электрона.

Решение уравнений Дирака и Шредингера методом фазовых функций позволяет рассмотреть радиальную зависимость как фазовых функций $\delta_{jl}(r)$ и $\delta_l(r)$, так и амплитудных функций $A_{jl}(r)$ и $A_l(r)$. Если глубина эффективного потенциала $V(r)$ (1) имеет порядок mc^2 , то в уравнениях (9) и (10) вторые слагаемые, которыми мы пренебрегли при переходе к нерелятивистскому пределу к уравнениям (11) и (12), вносят вклад в значения фазовой и амплитудной функций. Знание радиальной зависимости этих функций позволяет определить, при каких значениях радиуса-вектора r релятивистские поправки играют значительную роль, как происходит набор фазы $\delta_{jl}(r)$ и тем самым оценить влияние формы эффективного потенциала. На рис. 1 даны графики поведения фазовой и амплитудной функций в зависимости от расстояния до центра ядра для s -волны при кинетической энергии электрона $E_k = 10^{-8}$ эВ и с указанным выше выбором невозмущенного $V_a(r)$, поляризационного $V_p(r)$ и обменного $V_{ex}(r)$ потенциалов. Сплошная линия — результат расчета для релятивистского случая, а штриховая линия — для нерелятивистского. Разрывы фазовой функции ($-\pi \leq \delta_s \leq \pi$) и соответствующие им нули амплитудной функции отвечают нулям радиальных волновых функций $g(r)$ [7] и $f(r)$ [8]. Из рис. 1 хорошо видно, что эти точки для нерелятивистского и релятивистского случаев сдвинуты по радиальной шкале. Таким образом, релятивистские поправки для атома урана следует учитывать как для фазовой, так и для амплитудной функций.

Для проверки вычислений фазовой $\delta_{jl}(r)$ и амплитудной $A_{jl}(r)$ функций по формулам (7) и (8) вычислялись волновые радиальные функции $g(r)$ и $f(r)$, которые сравнивались с теми же функциями, полученными непосредственным интегрированием радиальных уравнений Дирака (3) и (4) с последующей сшивкой с асимптотическими решениями (5) и (6). Результаты обоих методов полностью совпадают. Аналогичная

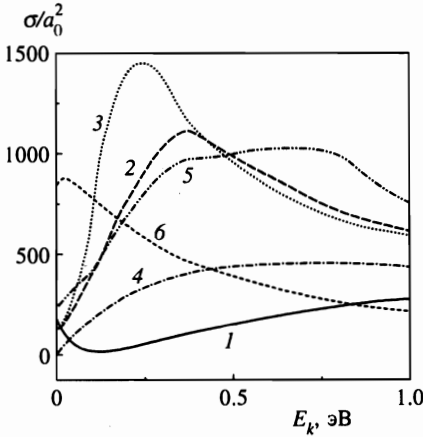


Рис. 2. Зависимость полного сечения упругого рассеяния σ (в ат. ед.) от кинетической энергии электрона E_k для урана с поляризационным потенциалом $V_p(r)$ [14], обменным потенциалом $V_{ex}(r)$ [15] и невозмущенным атомным потенциалом, полученным в рамках релятивистского метода Хартри–Фока–Слэтера с обменно-корреляционными потенциалами из [10], $\alpha_{Slit} = 2/3$ (кривая 1); из [11] с третьим набором параметров (кривая 2); из [12] (кривая 3); из [13] (кривая 4); из [10], $\alpha_{Slit} = 1$ (кривая 5); кривая 6 — расчет по нерелятивистской модели Томаса–Ферми–Дирака [4]

проверка проводилась для фазовой $\delta_l(r)$ и амплитудной $A_l(r)$ функций в нерелятивистском уравнении Шредингера.

При кинетических энергиях менее 1 эВ имеется существенное различие расчетов для релятивистского и нерелятивистского случаев, поскольку электрон имеет внутри атома характерный импульс, в величине которого существенную роль играют релятивистские поправки. Поэтому далее мы приводим результаты только для релятивистского случая.

Некоторое различие результатов примененных нами двух расчетных методов при низких энергиях электрона объясняется сложностями при численном решении системы дифференциальных уравнений фазовым методом, тем не менее точность совпадения фаз, рассчитанных этими двумя методами, составляет $\sim 0.01\%$, что, впрочем, приводит к несколько большему отклонению в полном сечении рассеяния. Далее для определенности мы приводим результаты, полученные с помощью решения релятивистского уравнения Дирака фазовым методом (9) и (10).

Рассмотрим вариации потенциала невозмущенного атома $V_a(r)$. На рис. 2 представлены результаты численных расчетов полного сечения упругого рассеяния электрона σ в зависимости от кинетической энергии электрона E_k для урана с поляризационным потенциалом $V_p(r)$ [14] и обменным потенциалом $V_{ex}(r)$ [15], а невозмущенный атомный потенциал урана был вычислен в рамках релятивистского метода Хартри–Фока–Слэтера с различными обменно-корреляционными потенциалами. Кривая 1 — слэтеровская форма (с параметром $\alpha_{Slit} = 2/3$); 2 — потенциал из [11] с третьим набором параметров; 3 — из [12]; 4 — из [13]; 5 — слэтеровская форма (с параметром $\alpha_{Slit} = 1$); 6 — расчет невозмущенного атомного потенциала в рамках нерелятивистской модели Томаса–Ферми–Дирака [4]. Из этого рисунка хорошо видно, что модельные возмущения среднего атомного поля приводят к различному поведению зависимости σ при кинетических энергиях электрона менее 1 эВ, тогда как при $E_k > 20$ эВ все эти модели дают близкие результаты.

В табл. 2 сведены вычисления, в которых невозмущенный атомный потенциал $V_a(r)$ варьировался путем изменения начальной электронной конфигурации атома урана, причем $V_a(r)$ получен с корреляционно-обменным членом типа [11] с третьим набором параметров, с поляризационным потенциалом $V_p(r)$ [14] и обменным потенци-

алом $V_{ex}(r)$ [15]. Первая колонка — полное сечение для электронной конфигурации $5f_{5/2}^4 6d_{3/2}^0 7s_{1/2}^2$, вторая — для $5f_{5/2}^3 6d_{3/2}^1 7s_{1/2}^2$, третья — для $5f_{5/2}^2 6d_{3/2}^2 7s_{1/2}^2$, четвертая — для $5f_{5/2}^1 6d_{3/2}^3 7s_{1/2}^2$, пятая — для $5f_{5/2}^0 6d_{3/2}^4 7s_{1/2}^2$. Модельные вариации среднего атомного поля также приводят к различным значениям σ при кинетических энергиях электрона менее 1 эВ. Отметим отсутствие эффекта Рамзауэра во всех вариантах расчетов, приведенных в табл. 2.

Таблица 2

Численные расчеты полного сечения упругого рассеяния σ (в ат. ед.) в зависимости от кинетической энергии электрона E_k для урана с невозмущенным потенциалом $V_a(r)$, полученным с корреляционно-обменным членом [11] с третьим набором параметров, с поляризационным потенциалом $V_p(r)$ [14] и обменным потенциалом $V_{ex}(r)$ [15]

E_k , эВ	σ/a_0^2					E_k , эВ	σ/a_0^2				
	1	2	3	4	5		1	2	3	4	5
10^{-8}	88.6	104.0	97.5	90.3	84.6	4.410	112.9	114.2	116.1	118.2	120.0
0.010	125.3	144.9	134.2	126.2	121.1	4.840	100.1	100.8	102.1	103.5	104.8
0.040	228.9	217.4	199.9	190.4	191.6	5.290	90.5	91.4	91.8	92.4	92.8
0.090	664.3	359.0	319.1	295.2	288.3	5.760	83.5	84.4	84.2	83.9	83.5
0.165	1691.6	665.6	570.5	493.4	445.2	6.250	78.7	80.2	79.2	78.2	76.8
0.250	1616.5	1022.4	892.7	759.6	658.5	7.840	73.8	74.8	73.1	71.0	68.0
0.365	1213.7	1122.4	1051.7	957.0	861.3	9.000	75.4	76.0	74.1	71.8	68.5
0.490	978.9	993.0	962.6	922.7	875.2	10.240	78.9	78.9	76.9	74.4	71.3
0.640	818.6	838.2	821.0	803.7	784.1	11.560	83.4	82.9	80.8	78.2	75.0
0.810	700.7	710.7	698.7	688.4	678.3	12.960	88.1	87.4	85.0	82.2	79.0
1.000	605.1	607.5	599.1	592.1	585.7	14.440	92.7	91.8	89.4	86.4	83.1
1.440	451.7	448.6	446.5	444.0	441.2	16.000	96.8	96.1	93.6	90.5	87.1
2.250	283.8	282.3	285.8	288.0	289.4	20.250	104.2	104.2	102.4	99.7	96.5
2.560	241.6	241.0	245.2	248.2	250.4	25.000	106.9	108.1	107.6	105.8	103.5
2.890	205.5	205.7	210.0	213.5	216.1	30.250	105.6	107.9	108.8	108.4	107.2
3.240	175.0	175.7	179.8	183.4	186.2	36.000	101.4	104.7	106.7	107.4	107.4
3.610	149.8	150.9	154.4	157.7	160.4	42.250	95.6	99.5	102.2	103.6	104.4
4.000	129.3	130.9	133.6	136.2	138.4						

Примечание. Полные сечения приведены для следующих конфигураций: колонка 1 — $5f_{5/2}^4 6d_{3/2}^0 7s_{1/2}^2$; 2 — $5f_{5/2}^3 6d_{3/2}^1 7s_{1/2}^2$; 3 — $5f_{5/2}^2 6d_{3/2}^2 7s_{1/2}^2$; 4 — $5f_{5/2}^1 6d_{3/2}^3 7s_{1/2}^2$; 5 — $5f_{5/2}^0 6d_{3/2}^4 7s_{1/2}^2$

С целью определения чувствительности результатов к изменению формы поляризационного взаимодействия нами были проведены дополнительные расчеты, в которых были взяты невозмущенный атомный потенциал $V_a(r)$, полученный с использованием обменно-корреляционного потенциала [11] с третьим набором параметров и обменный потенциал $V_{ex}(r)$ [15], а поляризационный потенциал брался из [14] и [5], а также были проведены вычисления в отсутствие поляризационного потенциала. Результаты, полученные с помощью двух моделей поляризационного взаимодействия, представлены на рис. 3. Видно, что они хорошо согласуются друг с другом при энергиях более 1 эВ и сильно различаются при меньших энергиях. Приведенные зависимости сечений не

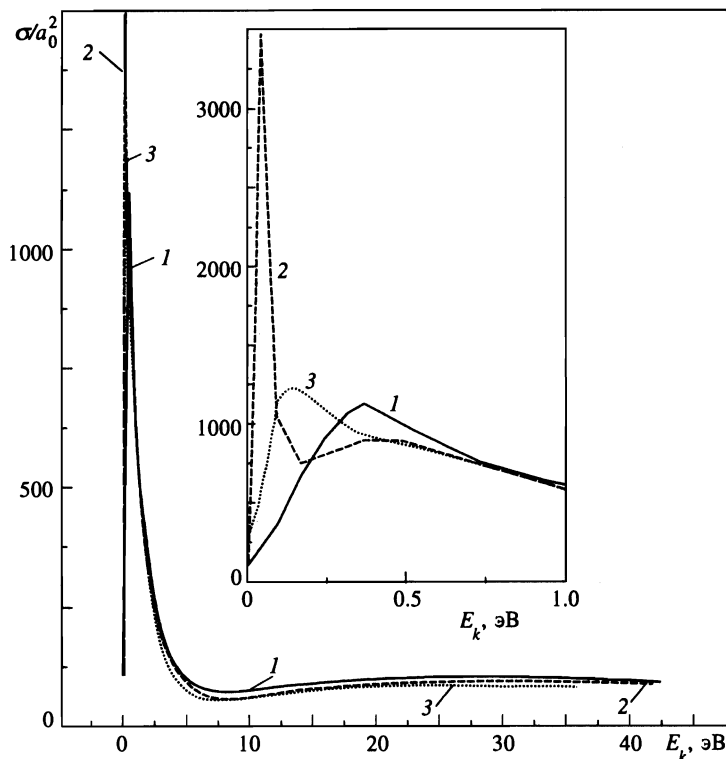


Рис. 3. Зависимость полного сечения упругого рассеяния σ (в ат. ед.) от кинетической энергии электрона E_k для урана с невозмущенным атомным потенциалом $V_a(r)$, полученным с использованием обменно-корреляционного потенциала [11] с третьим набором параметров, обменным потенциалом $V_{ex}(r)$ [15] и поляризационным потенциалом $V_p(r)$ из [14] (кривая 1), [5] (кривая 2) и $V_p(r) \equiv 0$ (кривая 3)

имеют глубокого минимума при малых кинетических энергиях, т. е. эффекта Рамзауэра нет.

Для определения влияния вариаций обменного потенциала нами проведены четыре серии расчетов, в которых применялись невозмущенный атомный потенциал $V_a(r)$, полученный с использованием обменно-корреляционного потенциала [11] с третьим набором параметров и поляризационный потенциал $V_p(r)$ [14], а обменный потенциал $V_{ex}(r)$ варьировался. В первой, уже упомянутой, серии расчетов обменный потенциал брался из [15], во второй проведены расчеты без использования обменного потенциала, в третьей — с потенциалом из [16], в четвертой — с потенциалом Слэтера ($\alpha_{Slit} = 2/3$). Результаты представлены на рис. 4. Все варианты дают совершенно разное поведение сечения при кинетических энергиях менее 5 эВ. Хорошо видно, что сечение крайне чувствительно к форме обменного взаимодействия именно при таких малых кинетических энергиях. Эффект Рамзауэра отсутствует во всех четырех вариантах расчетов.

В нашей работе [18] приведены данные по численным расчетам зависимости парциальных фаз рассеяния от кинетической энергии электрона E_k в эВ для урана с использованием релятивистского метода фазовых функций для всех выбранных нами вариантов

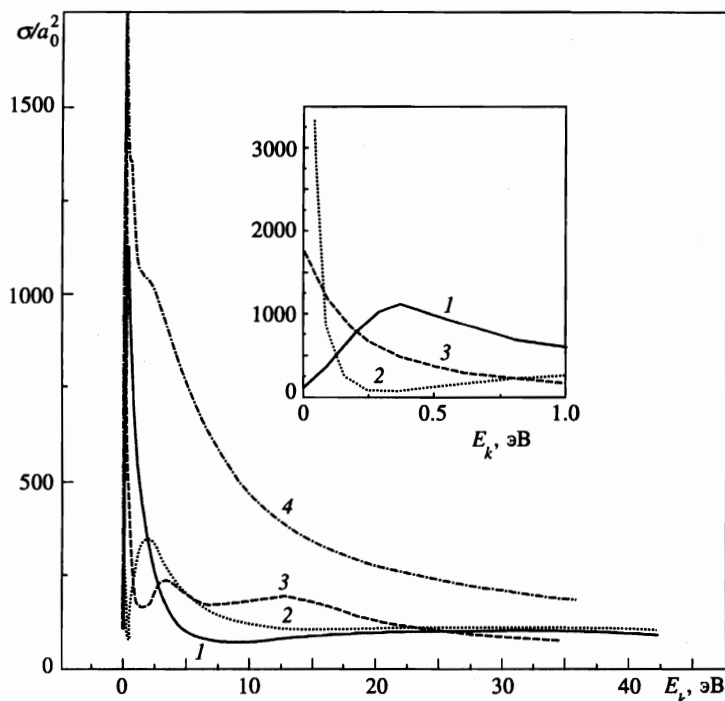


Рис. 4. Зависимость полного сечения упругого рассеяния σ (в ат. ед.) от кинетической энергии электрона E_k для урана с невозмущенным атомным потенциалом $V_a(r)$, полученным с использованием обменно-корреляционного потенциала [11] с третьим набором параметров, поляризационным потенциалом $V_p(r)$ [14] и обменным потенциалом $V_{ex}(r)$ из [15] (кривая 1); [16] (кривая 2); $V_{ex} \equiv 0$ (кривая 3) и потенциалом Слэтера [10], $\alpha_{Sl} = 2/3$ (кривая 4)

потенциала взаимодействия электрон-атом.

В данной работе нами проведены расчеты, определяющие степень ортогональности волновых функций рассеиваемого и атомного (связанного) электронов. Рассмотрим ортогональность радиальных волновых функций с одинаковыми квантовыми числами j и l . Степень ортогональности радиальных волновых функций определяется интегралом перекрытия

$$I_b = \left| \frac{\int_0^{r_{njl}} [g_{Ejl}(r)g_{nlj}(r) + f_{Ejl}(r)f_{nlj}(r)] dr}{\sqrt{\int_0^{r_{njl}} [g_{Ejl}^2(r) + f_{Ejl}^2(r)] dr \int_0^{r_{njl}} [g_{njl}^2(r) + f_{njl}^2(r)] dr}} \right|, \quad (23)$$

где r_{njl} — радиус нормировки волновой функции связанного электрона, $g_{Ejl}(r)$ и $f_{Ejl}(r)$ — большая и малая компоненты волновой функции непрерывного спектра рассеиваемого электрона, $g_{njl}(r)$ и $f_{njl}(r)$ — большая и малая компоненты волновой функции связанного атомного электрона (6). Радиус нормировки r_{njl} выбирался из условия

$$\int_0^{r_{njl}} [g_{njl}^2(r) + f_{njl}^2(r)] dr = 1 - \epsilon, \tag{24}$$

где $\epsilon = 10^{-7}$. Вычисления показывают, что значение I_b превышает 1 % для электронов с внешних оболочек атома, энергия связи которых минимальна. В табл. 3 приводится зависимость интеграла перекрытия I_b от кинетической энергии электрона E_k для урана с невозмущенным потенциалом $V_a(r)$, полученным с корреляционно-обменным членом из [11] с третьим набором параметров, с поляризационным потенциалом $V_p(r)$ [14] и обменным потенциалом $V_{ex}(r)$ [15]. Первая колонка — для волны $s_{1/2}$ и атомного электрона $7s_{1/2}$ с энергией связи $E_b = 4.743$ эВ; вторая — соответственно для $p_{1/2}$, $6p_{1/2}$, $E_b = 29.526$ эВ; третья — для $p_{3/2}$, $6p_{3/2}$, $E_b = 20.627$ эВ; четвертая — для $d_{3/2}$, $6d_{3/2}$, $E_b = 2.776$ эВ; пятая — для $d_{5/2}$, $5d_{5/2}$, $E_b = 94.462$ эВ; шестая — для $f_{5/2}$, $5f_{1/2}$, $E_b = 3.225$ эВ; седьмая — для $f_{7/2}$, $4f_{7/2}$, $E_b = 365.490$ эВ. Другие варианты среднего атомного, поляризационного и обменного потенциалов дают примерно такие же максимальные значения I_b , но с некоторым сдвигом по E_k .

Таблица 3

Интегралы перекрытия I_b радиальных волновых функций рассеиваемого и атомного электронов на n -оболочке в зависимости от кинетической энергии электрона E_k для урана с невозмущенным потенциалом $V_a(r)$, полученным с корреляционно-обменным членом из [11] с третьим набором параметров, с поляризационным потенциалом $V_p(r)$ [14] и обменным потенциалом $V_{ex}(r)$ [15]

E_k , эВ	I_b , %							E_k , эВ	I_b , %						
	$7s_{1/2}$	$6p_{1/2}$	$6p_{3/2}$	$6d_{3/2}$	$5d_{5/2}$	$5f_{5/2}$	$4f_{7/2}$		$7s_{1/2}$	$6p_{1/2}$	$6p_{3/2}$	$6d_{3/2}$	$5d_{5/2}$	$5f_{5/2}$	$4f_{7/2}$
10^{-8}	1.4	0.0	0.3	0.1	0.0	0.0	0.0	4.410	13.3	0.6	1.0	11.6	0.1	5.9	0.0
0.010	1.7	0.0	0.3	0.2	0.0	0.0	0.0	4.840	12.4	0.6	1.0	10.4	0.1	5.9	0.0
0.040	3.4	0.0	0.4	0.3	0.0	0.0	0.0	5.290	11.5	0.6	1.0	9.5	0.1	5.9	0.0
0.090	4.7	0.1	0.5	0.7	0.0	0.0	0.0	5.760	7.5	0.6	1.5	8.4	0.1	4.6	0.0
0.165	6.2	0.1	0.6	1.7	0.0	0.0	0.0	6.250	7.0	0.8	1.5	7.3	0.1	4.4	0.0
0.250	7.1	0.2	0.7	2.7	0.0	0.1	0.0	7.840	5.3	0.8	1.3	5.0	0.1	3.9	0.0
0.365	8.0	0.2	0.7	4.5	0.0	0.1	0.0	9.000	4.4	0.8	1.2	3.9	0.2	3.4	0.0
0.490	8.6	0.2	0.7	6.0	0.0	0.2	0.0	10.240	3.6	0.8	1.1	3.4	0.2	3.0	0.0
0.640	9.1	0.3	0.7	8.1	0.0	0.3	0.0	11.560	2.9	0.7	1.1	2.3	0.2	2.5	0.0
0.810	9.4	0.3	0.7	9.6	0.0	0.4	0.0	12.960	2.4	0.7	1.0	1.7	0.2	2.2	0.0
1.000	9.5	0.3	0.7	11.4	0.0	0.6	0.0	14.440	1.9	0.7	0.9	1.3	0.2	1.8	0.0
1.440	23.8	0.5	1.1	17.5	0.0	2.3	0.0	16.000	1.5	0.6	0.9	0.9	0.2	1.6	0.0
2.250	20.9	0.6	1.1	18.0	0.1	3.4	0.0	20.250	0.8	0.6	0.7	0.4	0.2	1.2	0.0
2.560	19.2	0.6	1.1	17.7	0.1	4.0	0.0	25.000	0.4	0.6	0.7	0.2	0.2	0.8	0.0
2.890	17.6	0.6	1.1	16.8	0.1	4.6	0.0	30.250	0.1	0.6	0.6	0.1	0.2	0.7	0.0
3.240	16.2	0.6	1.1	15.3	0.1	5.2	0.0	36.000	0.0	0.5	0.5	0.1	0.2	0.6	0.0
3.610	15.1	0.6	1.1	14.2	0.1	5.7	0.0	42.250	0.0	0.4	0.4	0.1	0.2	0.5	0.0
4.000	14.1	0.6	1.1	13.1	0.1	5.8	0.0								

Взятые нами модели упругого и обменного потенциалов, хорошо описывающие упругое рассеяние электронов на атомах инертных газов и некоторых щелочных металлов, возможно не применимы для описания рассеяния на уране. Однако мы можем утверждать, что расчетный энергетический ход полного сечения упругого рассеяния

электрона на уране сильно зависит в области малых энергий от модели потенциала взаимодействия. Отметим необходимость использования релятивистской модели процесса рассеяния электрона на тяжелом атоме. Релятивистские эффекты особенно сильно проявляются при $E_k < 5$ эВ для s - и p -волн. Эти обстоятельства не позволяют надежно прогнозировать наличие или отсутствие эффекта Рамзауэра в модели среднего потенциала в акте рассеяния.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Для того чтобы сделать достаточно надежное утверждение о форме и величине зависимости сечения упругого рассеяния медленного электрона на атоме урана и наличии или отсутствии эффекта Рамзауэра, необходим эксперимент, который позволит определить теоретическую концепцию для описания процесса упругого рассеяния. Имеется ряд простых модельных потенциалов, которые дают довольно хорошее согласие друг с другом лишь при энергиях несколько десятков эВ. Более последовательные теоретические расчеты должны были бы проводиться в рамках релятивистского метода мультиконфигурационного метода Хартри–Фока для всей системы атом плюс электрон в непрерывном спектре, но они требуют очень больших вычислительных мощностей. Нам известен подобный расчет, проведенный Саха [19] для атомов некоторых инертных газов в нерелятивистском приближении, который требует десятков часов машинного времени супер-ЭВМ типа CRAY. В нашей статье [7] из сравнения вычислений [19] сечения упругого рассеяния на атомах аргона с релятивистскими и нерелятивистскими расчетами, полученными в рамках одночастичной схемы с эффективным сферически-симметричным потенциалом, делается вывод о необходимости учета релятивистских поправок в описании рассеяния при кинетической энергии электрона менее 5 эВ.

Авторы благодарят В. Ю. Добрецова за предоставление программ, без которых проведение численных расчетов было бы затруднительным. Частичное финансирование данной работы осуществлялось по гранту Российского научного центра «Курчатовский институт».

Литература

1. Л. П. Кудрин, А. А. Дроздов, *Атомная энергия* **27**, 39 (1969).
2. Ф. Калоджеро, *Метод фазовых функций в теории потенциального рассеяния*, Мир, Москва (1972).
3. В. В. Бабиков, *Метод фазовых функций в квантовой механике*, Наука, Москва (1988).
4. П. Гомбаш, *Проблема многих частиц в квантовой механике*, ИИЛ, Москва (1952).
5. Д. Хартри, *Расчеты атомных структур*, ИИЛ, Москва (1960).
6. Д. П. Гречухин, А. В. Ломоносов, *Препринт ИАЭ 5789/12* (1994).
7. Д. П. Гречухин, А. В. Ломоносов, *Письма в ЖЭТФ* **60**, 770 (1994).
8. А. И. Ахиезер, В. Б. Берестецкий, *Квантовая электродинамика*, Наука, Москва (1969).
9. *Справочник по специальным функциям*, под ред. М. Абрамовица и И. Стиган, Наука, Москва (1979).
10. Дж. Слэтер, *Методы самосогласованного поля для молекул и твердых тел*, Мир, Москва (1978).

11. U. von Barth and L. Hedin, *J. Phys. C* **4**, 2064 (1971).
12. J. P. Perdew and A. Zunger, *Phys. Rev. B* **23**, 5048 (1981).
13. S. H. Vosko, L. Wilk, and M. Nusair, *Can. J. Phys.* **58**, 1200 (1980).
14. J. K. O'Connell and N. F. Lane, *Phys. Rev. A* **27**, 1893 (1983).
15. J. Hara, *Phys. Soc. Jap.* **22**, 710 (1967).
16. M. E. Riley and D. G. Truhlar, *J. Chem. Phys.* **63**, 2182 (1975).
17. Г. Корн и Т. Корн, *Справочник по математике для научных работников и инженеров*, Наука, Москва (1973).
18. Д. П. Гречухин, А. В. Ломоносов, Препринт ИАЭ 5992/12 (1996).
19. H. P. Saha, *Phys. Rev. A* **43**, 4712 (1991).