

ОСОБЕННОСТИ УПРУГОГО РАССЕЯНИЯ ЭЛЕКТРОНОВ ПРОМЕЖУТОЧНЫХ ЭНЕРГИЙ, СВЯЗАННЫЕ С ИХ ЗАХВАТОМ НА КВАЗИСТАЦИОНАРНЫЕ УРОВНИ АТОМА В НЕПРЕРЫВНОМ СПЕКТРЕ

*Б. Н. Либенсон**

*Санкт-Петербургский государственный политехнический университет
195251, Санкт-Петербург, Россия*

Поступила в редакцию 28 октября 2013 г.

Для исследования особенностей процесса упругого рассеяния электронов промежуточных энергий построена теоретическая модель рассеивателя электронов атомом. В основу модели положен комбинированный потенциал Менсинг с двумя сферами атомных электронов, позволяющий найти аналитическое решение радиального уравнения Шредингера. Определена процедура согласования параметров такого рассеивателя с приближенным электростатическим потенциалом атома, представленным в форме экранированного кулоновского потенциала. Радиус экранирования последнего рассчитан исходя из свойств, вытекающих из метода Томаса – Ферми. Модель рассеивателя, определенная в результате указанной выше процедуры, может быть использована для расчета энергетической зависимости сечения упругого рассеяния электронов на ряде атомов с *s*-, *p*-, *d*-оболочками, расположенных по соседству с цирконием. Основным результатом работы состоит в доказательстве причины появления максимумов на кривых зависимости сечения упругого рассеяния электронов от их энергии. Образование максимумов связано с резонансным захватом налетающих электронов квазистационарными атомными уровнями непрерывного спектра.

DOI: 10.7868/S0044451014050036

1. ВВЕДЕНИЕ

Прошло более сорока лет с момента публикации работы об особенностях упругого рассеяния электронов средних энергий в обратную полусферу телесных углов [1]. В ней была сделана попытка интерпретации экспериментально обнаруженных фактов существования максимумов в сечении упругого рассеяния электронов для ряда элементов таблицы Менделеева. Максимумы наблюдались в экспериментах «на отражение» электронов средних энергий, т. е. таких энергий, при которых *s*-рассеяние является уже слишком слабым, а с другой стороны, использование борновского приближения для описания упругого электронного рассеяния еще неправомерно. Ю. А. Морозов, один из соавторов работы [1], являвшийся первооткрывателем данного явления в экспериментах [2, 3], обнаружил максимумы на кривых зависимости коэффициента упругого от-

ражения *R* от энергии налетающих электронов *E* для целого ряда элементов из таблицы Менделеева.

Эксперименты показывали, что с ростом порядкового номера *Z* максимумы становятся шире и располагаются при больших энергиях. Кроме того, для некоторых элементов наблюдались сразу два широких максимума в сечении упругого рассеяния.

На сегодняшний момент можно констатировать, что основным результатом тех давних экспериментов состоит в самом факте существования максимумов в сечении упругого электронного рассеяния в обратную полусферу телесных углов. Следует отметить, что максимумы в коэффициенте отражения *R(E)* при энергиях не превышающих 100 эВ, не обязательно связаны с упругим рассеянием электронов на отдельных атомах, а немонотонность зависимости *R(E)* может быть связана как с твердотельными, так и с поверхностными эффектами [4]. По этой причине только экспериментальные данные для атомов, у которых максимумы сечения упругого рассеяния располагаются при энергиях, больших 100 эВ, заслуживают первостепенного внимания и теоретического анализа.

*E-mail: libenson-b@yandex.ru; b.n.libenson@gmail.com

К сожалению, расчеты, выполненные 40 лет назад, не обладали достаточной точностью и надежностью. В связи с этим, а также из-за трудностей с анализом полученных формул, в работе [1] не удалось объяснить физическую суть происхождения максимумов в сечении упругого электронного рассеяния.

Из анализа результатов настоящей работы следует, что максимумы сечения связаны с захватом электронов на квазистационарные состояния атомов в непрерывном спектре с определенными, отличными от нуля, орбитальными моментами.

Важным звеном настоящей работы является исследование аналитических свойств амплитуды рассеяния. Это исследование имеет своей целью доказательство того, что уравнения для полюсов в дискретном спектре отрицательных энергий трансформируются в уравнения для определения комплексных значений энергии квазистационарных состояний в непрерывном спектре. Мнимые части этих энергий определяют время распада таких состояний.

Атом представляет собой многоэлектронную систему, поэтому волновая функция такой системы должна быть многоэлектронной. Для построения такой волновой функции ранее использовался метод Хартри–Фока [5, 6]. Однако этот метод содержит принципиально неразрешимые противоречия, применительно к атомам с большим числом электронов. Для разрешения этих противоречий Коном и Шемом [7] был предложен метод построения потенциала атома с использованием функционала электронной плотности, в котором уравнение Шредингера сводится к нахождению одноэлектронной волновой функции, вместо многоэлектронной. Построение такого теоретического потенциала атома представляет собой итерационную процедуру численного решения уравнения Шредингера. Теоретический потенциал атома содержит сумму потенциала притяжения электрона к ядру, самосогласованного потенциала кулоновского взаимодействия всех остальных электронов атома с данным электроном и потенциала, учитывающего обменные эффекты и корреляционные поправки, связанные с взаимодействием всех остальных электронов между собой. Последние два потенциала содержат в своем выражении электронную плотность. Простейшим потенциалом атома, построенным по методу функционала электронной плотности, является потенциал Томаса–Ферми. При этом, даже функция Томаса–Ферми, описывающая этот потенциал, не имеет аналитического представления. Для решения задачи, указанной в заглавии этой статьи, численные методы решения для

построения потенциала атома не годятся в принципе.

Теоретический анализ в данной работе построен на использовании двухпараметрической модели Менсинг для описания электростатического потенциала атома. Электронная плотность в такой модели атома представляет из себя сумму двух дельта-функций:

$$n(r) = \frac{Z_1}{4\pi R_1^2} \delta(R - R_1) + \frac{Z_0}{4\pi R_0^2} \delta(R - R_0), \quad (1)$$

$$Z_1 + Z_0 = Z,$$

R_1 и R_0 — радиусы внутренней и внешней сфер, на которых находятся соответственно по Z_1 и Z_0 электронов.

Потенциал находится путем подстановки этой плотности в выражение

$$V_2(r) = -\frac{Z}{r} + \int d\mathbf{r}_1 \frac{n(r_1)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_1|}, \quad (2)$$

в котором первое слагаемое — потенциал притяжения данного электрона к ядру, а второе слагаемое — самосогласованное поле, обусловленное остальными электронами с плотностью $n(r)$.

Такая модель потенциала допускает аналитическое решение уравнения Шредингера для радиальной части волновой функции электрона внутри атома. Использование двухпараметрического потенциала Менсинг с двумя сферами атомных электронов позволяет вести более согласованное с внутренней структурой атома описание процесса упругого рассеяния электронов, чем использованная в работе [1] модель однопараметрического потенциала Менсинг с металлическим радиусом элемента в качестве параметра. Конечно, даже «двухсферический» потенциал Менсинг является достаточно грубым приближением к реальности. Однако он вполне пригоден для доказательства физической природы появления максимумов в сечении упругого электрон-атомного рассеяния как в обратную полусферу телесных углов, так и в полный телесный угол.

В части данного исследования, касающейся метода построения комбинированного потенциала Менсинг, будет дана оценка применимости использования этого потенциала для атомов с s -, p -, d -оболочками. Рассмотрены результаты расчета характеристик упругого электронного рассеяния на атоме циркония как наиболее приемлемом варианте использования двухпараметрического потенциала Менсинг для доказательства положения, фигурирующего в заглавии настоящей работы.

В связи с недостаточной полнотой двухпараметрического представления потенциала атома в модели Менсинг настоящее исследование особенностей упругого рассеяния электронов на атомах с s -, p -, d -оболочками не преследует своей целью получения количественного согласия теоретических значений энергий максимумов сечения с их значениями, известными из экспериментов по упругому отражению электронов.

2. ЭФФЕКТИВНАЯ ПОТЕНЦИАЛЬНАЯ ЭНЕРГИЯ ЦЕНТРАЛЬНО-СИММЕТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ АТОМА

Радиальная часть волновой функции налетающего на атом электрона имеет вид $R_L(r) = \chi_L(r)/r$, где функция $\chi_L(r)$ удовлетворяет уравнению [8]

$$\frac{d^2\chi}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar^2}[E - U_L(r)]\chi = 0. \quad (3)$$

Функция

$$U_L(r) = V(r) + \frac{\hbar^2 L(L+1)}{2mr^2}$$

представляет собой эффективную потенциальную энергию центрально-симметрического поля, причем функция $V(r)$ соответствует электростатическому потенциалу атома, а второе слагаемое представляет собой центробежную энергию электронов атома, обладающих орбитальным моментом L .

2.1. Достоинства и недостатки различных моделей электростатического потенциала атома $V(r)$

2.1.1. Потенциал Томаса – Ферми

Запишем потенциал Томаса – Ферми:

$$V_{TF}(r) = -\frac{Ze^2}{r} F \left(x = \frac{rZ^{1/3}}{0.5(0.75\pi)^{2/3}a_B} \right). \quad (4)$$

Здесь функция $F(x)$ является решением уравнения Томаса – Ферми $\sqrt{x}d^2F/dx^2 = F^{3/2}$. Это нелинейное дифференциальное уравнение не имеет аналитического решения с граничным условием $F(x=0) = 1$, что не позволяет использовать потенциал Томаса – Ферми при нахождении радиальной части волновой функции $R_L(r)$. Кроме того, потенциал Томаса – Ферми стремится к нулю только на бесконечном удалении от атома, так что размер атома не имеет определенного значения, хотя характерная длина

монотонного убывания потенциала обратно пропорциональна $\sqrt[3]{Z}$.

Тем не менее метод Томаса – Ферми позволяет определить минимальное значение порядкового номера элемента $Z(L)$, при котором в атоме элемента впервые появляются электроны с данным L . Новая оболочка появляется в атоме, когда дно кривой эффективной потенциальной энергии с данным L касается нулевого уровня энергии. Формула, определяющая это минимальное значение, приведенная в работе [8], имеет вид

$$Z(L) = 0.17(2L+1)^3. \quad (5)$$

2.1.2. Экранированный кулоновский потенциал

Рассмотрим эффективную потенциальную энергию с экранированным кулоновским потенциалом и центробежным потенциалом в квазиклассическом приближении:

$$U_{scr}(x, L) = -\frac{Z}{x} \exp\left(-\frac{x}{x_t}\right) + \frac{(L+0.5)^2}{2x^2}. \quad (6)$$

Здесь расстояние выражено в боровских радиусах, а энергия в единицах боровской энергии, Z – порядковый номер атома, x_t – радиус экранирования заряда ядра. Из теории Томаса – Ферми следует, что $x_t = a/\sqrt[3]{Z}$, где константа a может быть определена с использованием закономерности появления новых оболочек с $L = 0, 1, 2, 3$ у рассматриваемых атомов. Это условие для экранированного кулоновского потенциала имеет вид

$$Z(L) = \frac{\exp(1)(L+0.5)^2}{2x_t}.$$

Аналогичное условие в теории Томаса – Ферми было приведено в формуле (5), так что константа a теперь легко находится из сопоставления $a = \exp(1)/8 \cdot 0.17^{2/3}$.

Экранированный кулоновский потенциал при таком согласовании его параметров с потенциалом Томаса – Ферми будем рассматривать как приближенный теоретический потенциал атома, который дает верную картину пространственного распределения эффективной потенциальной энергии. Однако экранированный кулоновский потенциал так же, как и потенциал Томаса – Ферми, при его подстановке в уравнение (3) не допускает решения этого уравнения в аналитической форме. Поэтому единственной возможностью нахождения аналитического решения уравнения (3) является использование потенциала Менсинг. Тем не менее потенциал

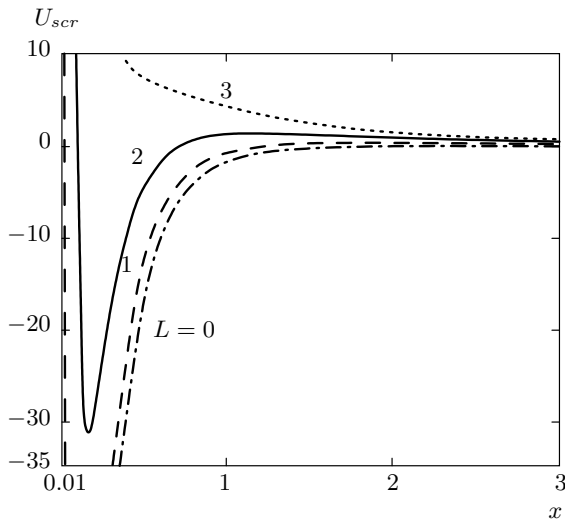


Рис. 1. Кривые эффективной потенциальной энергии с экранированным кулоновским потенциалом атома циркония. Штрихпунктирная кривая соответствует $L = 0$, т. е. s -оболочке. Штриховая кривая определяет радиальное распределение центрально-симметрического поля p -электронов. Сплошная кривая соответствует распределению поля d -оболочки. Точка пересечения этой кривой с нулевым уровнем удалена от ядра на расстояние $r_d = 0.718a_B$

$$V_{scr}(r) = -\frac{Ze}{r} \exp\left[-\frac{8 \cdot 0.17^{2/3} \sqrt[3]{Z}}{\exp(1)} \frac{r}{a_B}\right], \quad (7)$$

может быть использован в различных приложениях как приближенный теоретический потенциал атома, например, для расчета сечения упругого электрон-атомного рассеяния при высоких энергиях E , когда справедливо борновское приближение. Тогда получим следующее выражение для полного сечения упругого рассеяния:

$$\sigma_{el} = \frac{\pi \exp^2(1)}{32 \cdot 0.17^{4/3}} a_B^2 Z^{4/3} \frac{E_B}{E}, \quad (8)$$

в котором в явном виде фигурирует числовой множитель, уточняющий формулу (137.10) учебника Ландау и Лифшица [8].

Положение дна потенциальной ямы эффективной потенциальной энергии (6) для $L = 0, 1, 2$ находим из решения трансцендентного уравнения

$$x_{min}(L) = \frac{(L + 0.5)^2 \exp[x_{min}(L)/x_t]}{Z [1 + x_{min}(L)/x_t]}. \quad (9)$$

Отсюда следует, что, например, для циркония ($Z = 40$) $x_{min}(L = 0) = 0.00625$, $x_{min}(L = 1) =$

$= 0.057$, $x_{min}(L = 2) = 0.174$; $U_{scr,min}(L = 0) = -3078E_B$, $U_{scr,min}(L = 1) = -242.2E_B$, $U_{scr,min}(L = 2) = -31.1E_B$. Дно потенциальной ямы у s -электронов располагается ближе всего к ядру, затем далее от ядра располагается дно потенциальной ямы p -электронов и дальше всех от ядра располагается дно ямы d -электронов. Кажется бы, что и сами электроны этих оболочек должны располагаться в таком же порядке, но на самом деле все — наоборот. На рис. 1 представлены кривые эффективной потенциальной энергии для экранированного кулоновского потенциала Zr. Для s -, p -электронов эти кривые идут в своей возрастающей части очень близко друг к другу и гораздо правее кривой для d -электронов. Яма у d -электронов узкая и ограниченная стенками этой ямы классически доступная область располагается ближе к ядру, чем область расположения электронов в s -, p -состояниях. Максимальному удалению от ядра d -электронов соответствует пересечение возрастающей части кривой эффективной потенциальной энергии с $L = 2$ с нулевым уровнем энергии. Координата такого пересечения является корнем трансцендентного уравнения $U_{scr}(x_r, L = 2) = 0$. Для Zr эта координата $x_r = 0.718$. Этот радиус очень важен в построении модели потенциала Менсинг, так как по нему рассчитывается радиус внешней оболочки, т. е. радиус атома. Ближайшему расположению к ядру d -электронов атома соответствует пересечение ниспадающей части кривой эффективной потенциальной энергии с $L = 2$ с нулевым уровнем энергии. Координата этого близко расположенного от ядра пересечения также является корнем трансцендентного уравнения $U_{scr}(x_l, L = 2) = 0$. Такие корни появляются, начиная с атома скандия, у которого впервые появляется оболочка с $L = 2$. Для атома Zr координата этого пересечения $x_l = 0.1096$. Это значение координаты необходимо иметь в виду при расчете радиуса внутренней оболочки d -электронов в модельном потенциале Менсинг. Ширина потенциальной ямы d -электронов на уровне нулевой энергии составляет, следовательно, $\Delta x_{L=2} = x_r - x_l = 0.608$, тогда как ширина потенциальной ямы для p -электронов $\Delta x_{L=1} = 1.19$.

2.1.3. Потенциал Менсинг

В отличие от потенциала атома по Томасу–Ферми и экранированного кулоновского потенциала атома, однопараметрический потенциал Менсинг с единственным радиусом обрезания r_0 :

$$V_1(r) = -Ze^2 \left(\frac{1}{r} - \frac{1}{r_0} \right) \theta(r_0 - r), \quad (10)$$

$$\theta(r_0 - r) = \begin{cases} 1, & r_0 > r \\ 0, & r_0 < r \end{cases}$$

мало пригоден для описания явления упругого электронного рассеяния на атомах с *s*-, *p*-, *d*-оболочками. Такой потенциал можно использовать для описания упругого рассеяния на атомах, содержащих только *s*-, *p*-оболочки. Для общего рассмотрения необходимо усовершенствовать потенциал Менсинг, добавив еще одну внутреннюю сферу, на которой располагались бы только электроны *d*-оболочки, в то время как на внешней сфере будут располагаться только электроны *s*-, *p*-состояний. Комбинированный потенциал Менсинг с двумя сферами расположения атомных электронов имеет уникальное преимущество перед гладкими потенциалами, он позволяет получить точное решение уравнения Шредингера во внутренней области атома, в то время как упомянутые выше гладкие потенциалы не позволяют получить решение уравнения Шредингера в аналитическом виде.

Как уже упоминалось ранее, экранированный кулоновский потенциал при согласовании его параметров с потенциалом Томаса – Ферми (7) дает правильную картину пространственного распределения эффективной потенциальной энергии, поэтому, имея в распоряжении эту правильную картину, следует воспользоваться ею для согласования параметров кривых эффективной потенциальной энергии атома в модели Менсинг с двумя сферами атомных электронов.

Будем рассматривать атомы, для которых $Z(L = 2) < Z < Z(L = 3)$.

2.2. Комбинированный двухпараметрический потенциал Менсинг

Из формул (1) и (2) следует, что комбинированный потенциал Менсинг имеет следующий вид:

$$V_2(x) = -\theta(x_1 - x)Z \left(\frac{1}{x} - \frac{\alpha}{x_0} \right) - \theta(x - x_1)\theta(x_0 - x)(Z - Z_d) \left(\frac{1}{x} - \frac{1}{x_0} \right);$$

$$\alpha = 1 + \left(\frac{x_0}{x_1} - 1 \right) \frac{Z_d}{Z}. \quad (11)$$

Здесь $x = r/a_B$, $a_B = 0.529 \text{ \AA}$, $E_B = 27.21 \text{ эВ}$, Z_d — число электронов на *d*-оболочке.

Для определения координат радиусов x_1 и x_0 запишем эффективную потенциальную энергию $u(x, L)$, в которой центробежный потенциал

взят так же, как и в (6), в квазиклассическом приближении:

$$u(x, L) = V_2(x) + \frac{(L + 0.5)^2}{2x^2}. \quad (12)$$

Для нахождения радиуса внешней сферы оболочек *s*-, *p*-электронов x_0 нам потребуются результаты построения эффективной потенциальной энергии для экранированного кулоновского потенциала. Важно совместить положение возрастающей части кривой эффективного потенциала *d*-электронов в обеих моделях эффективной потенциальной энергии. Для этого должны совпадать точки пересечения кривых эффективного потенциала *d*-электронов с уровнем нулевой энергии для $U_{scr}(x = x_r, L = 2) = 0$ и $u(x = x_r, L = 2) = 0$. Из этих уравнений следует, что

$$x_0 = \frac{x_r}{1 - 2.5^2/2x_r(Z - Z_d)}. \quad (13)$$

Отсюда находим, что радиус сферы *p*-, *s*-электронов для $Z = 40$ равен $x_0 = 0.8501$.

Радиус сферы *d*-электронов x_1 равен

$$x_1 = 2.5^2/Z. \quad (14)$$

Такая формула для радиуса орбиты *d*-электронов получается путем приравнивания центробежной силы mv^2/r к силе притяжения электрона к ядру Ze^2/r^2 . В квазиклассическом приближении орбитальный момент *d*-электрона $mvr = 2.5\hbar$. Для циркуляции по этой формуле получим $x_1 = 0.156$.

В соответствии с изложенной выше процедурой согласования формы кривых эффективной потенциальной энергии с орбитальным моментом $L = 2$ оба параметра комбинированного потенциала Менсинг теперь определены.

На рис. 2 представлены кривые эффективной потенциальной энергии с потенциалом Менсинг. Разница между моделями эффективной потенциальной энергии для потенциала Менсинг и экранированного кулоновского потенциала состоит в том, что во втором случае электроны трех оболочек не являются жестко привязанными к определенным двум сферам, а могут находиться внутри потенциальных ям, соответствующих данному L . У всех атомов из рассматриваемой группы *d*-электроны расположены ближе к ядру, чем *s*-, *p*-электроны. Действительно, как будет показано ниже, дискретный энергетический уровень *d*-электронов Zr расположен ниже уровня вакуума на $12.0E_B$, так что классически доступная область внутри потенциальной ямы с $L = 2$

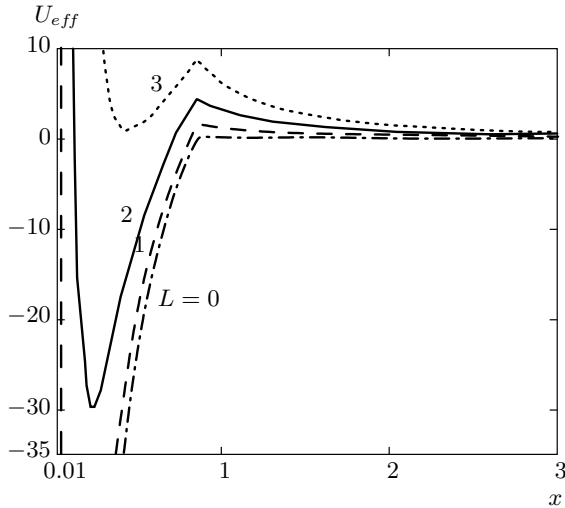


Рис. 2. Кривые эффективной потенциальной энергии с комбинированным потенциалом Менсинг для атома циркония. Идентификация кривых соответствует кривым на рис. 1

заклучена между сферами с $0.128a_B < r < 0.477a_B$. Причем все d -электроны расположены у левой стенки эффективного потенциала, в то время как s - и p -электроны расположены у правой стенки своих потенциальных ям. Поэтому, за основу для построения потенциала Менсинг берется кривая эффективной потенциальной энергии d -электронов экранированного кулоновского потенциала.

Не для всех атомов, у которых имеются s - и d -оболочки, справедлива изложенная выше процедура согласования параметров кривых эффективной потенциальной энергии электронной d -оболочки. Для атомов с порядковыми номерами $21 \leq Z \leq 30$ энергетический уровень электронной d -оболочки выходит за пределы дискретного спектра, так что корректно описать энергетическую структуру оболочек атома в рамках двухпараметрического потенциала Менсинг для них не удастся. С другой стороны, для большинства оставшихся атомов с номерами $21 \leq Z \leq 57$ отсутствует согласование между кривыми эффективной потенциальной энергии электронной d -оболочки по положению энергии дна потенциальной ямы $y \neq 0$, где

$$y = \frac{|U_{scr}(x_{min}, L = 2) - u_{min}(x = \frac{2.5^2}{Z - Z_d}, L = 2)|}{|U_{scr}(x_{min}, L = 2)|}. \quad (15)$$

Такое рассогласование кривых эффективного потенциала для электронной d -оболочки делает некорректной процедуру замены экранированного кулоновского потенциала двухпараметрическим потенциалом Менсинг для многих атомов из указанного диапазона Z . Это является следствием зависимости энергии дна потенциальной ямы электронной d -оболочки от координаты пересечения кривой эффективного потенциала с нулевой энергией x_r , поскольку в двухпараметрической модели Менсинг

$$u_{min}\left(x = \frac{2.5^2}{Z - Z_d}, L = 2\right) = -\frac{1}{2} \left(\frac{Z - Z_d}{2.5} - \frac{2.5}{x_r}\right)^2. \quad (16)$$

Из этой формулы следует вывод о том, что при согласовании энергий дна потенциальных ям электронных d -оболочек (при переходе от имеющего место y к условию $y = 0$), получается рассогласование в определении радиуса x_0 . Величина такого рассогласования Δx_0 имеет вид

$$\Delta x_0 = \frac{yx_0^2}{2.5} \left(1 - \frac{x_r}{x_0}\right) \sqrt{-2U_{scr}(x_{min}, L = 2)}. \quad (17)$$

Подстановка значения $x_0 + \Delta x_0$ вместо x_0 в двухпараметрический потенциал Менсинг приведет к иному значению комплексной энергии уровня резонансного захвата электрона в непрерывном спектре. Вместо значения $\epsilon_{\ell=3}^* + i\gamma_{\ell=3}$ будет $\epsilon_{\ell=3}^* + \Delta\epsilon_{\ell=3}^* + i[\gamma_{\ell=3} + \Delta\gamma_{\ell=3}]^1$. Диапазон применимости процедуры замены экранированного кулоновского потенциала комбинированным потенциалом Менсинг ограничим 10-процентной погрешностью отношения $|\Delta\epsilon_{\ell=3}^*|/\epsilon_{\ell=3}^* < 0.1$.

Такому условию удовлетворяют всего два атома: иттрий и цирконий.

Если расширить погрешность отношения до 25-процентной величины $|\Delta\epsilon_{\ell=3}^*|/\epsilon_{\ell=3}^* < 0.25$, то такому условию будут удовлетворять уже 6 элементов с $37 \leq Z \leq 42$.

3. РЕШЕНИЕ УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА ДЛЯ ВЫСТРОГО ЭЛЕКТРОНА В ТРЕХ ОБЛАСТЯХ

3.1. Волновая функция вне атома

В области $r > r_0$ ($x > x_0$) волновые функции падающей и рассеянной частицы, а также амплитуда

¹⁾ Определение величины ϵ см. после формулы (35).

рассеяния $f(\vartheta, k)$ имеют известный вид:

$$\begin{aligned} \Psi(r) &= \sum_{\ell=0}^{\infty} i^{\ell} (2\ell + 1) P_{\ell}(\cos \vartheta) R_{\ell}(kr), \\ R_{\ell}(kr) &= j_{\ell}(kr) + C_{\ell}(k) h_{\ell}^1(kr), \\ f(\vartheta, k) &= \frac{1}{ik} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) P_{\ell}(\cos \vartheta) C_{\ell}(k). \end{aligned} \quad (18)$$

Здесь $j_{\ell}(x)$ — сферическая функция Бесселя первого рода, $h_{\ell}^1(x) = j_{\ell}(x) + iy_{\ell}(x)$ — сферическая функция Ганкеля первого рода, $y_{\ell}(x)$ — сферическая функция Бесселя второго рода, $P_{\ell}(\cos \vartheta)$ — полином Лежандра, $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ — волновой вектор быстрого электрона, $C_{\ell}(k)$ — искомый коэффициент, определяющий амплитуду рассеянной сферической волны²⁾. В формуле (18) первое слагаемое радиальной части $R_{\ell}(kr)$ представляет собой разложение падающей плоской волны $\exp(-ikz)$ по орбитальным моментам ℓ , а второе слагаемое дает волновую функцию расходящейся сферической волны после рассеяния электрона на атоме. В дальнейшем, основной безразмерной координатой будет не kr , а $k_0 r = \rho$, $k_0 = \sqrt{2(Z - Z_d)/a_B r_0 - k^2}$. Тогда сшивка волновой функции и ее производной на внешней границе $\rho_0 = k_0 r_0$ будет определяться производной от логарифма радиальной части решения (18):

$$\begin{aligned} \frac{d \ln R_{\ell}(\rho)}{d\rho} &= \frac{d}{d\rho} \times \\ &\times \left\{ \ln \left[j_{\ell} \left(\frac{k}{k_0} \rho \right) + C_{\ell} h_{\ell}^1 \left(\frac{k}{k_0} \rho \right) \right] \right\} \Big|_{\rho=\rho_0}. \end{aligned} \quad (19)$$

3.2. Волновая функция в области между внешней s - p - и внутренней d -оболочками ($r_1 < r < r_0$)

В области $0 < r < r_0$ внутри атома волновая функция быстрого электрона может быть представлена в виде разложения по орбитальным моментам

$$\Psi(r) = \sum_{\ell=0}^{\infty} i^{\ell} (2\ell + 1) P_{\ell}(\cos \vartheta) \frac{\chi_{\ell}(r)}{kr}. \quad (20)$$

Рассмотрим решение для случая, когда энергия налетающего электрона меньше потенциальной

²⁾ Вместо коэффициента $C_{\ell}(k)$ часто используют фазы рассеяния $C_{\ell}(k) = [\exp(2i\delta_{\ell}(k)) - 1]/2$, однако в данной работе использование фаз рассеяния не способствует лучшему пониманию результатов.

энергии электронов внешней оболочки атома, т. е. когда $k^2 < 2(Z - Z_d)/a_B r_0$.

Тогда уравнение для радиальной части волновой функции будет иметь вид

$$\frac{d^2 \chi_{\ell}(\rho)}{d\rho^2} - \chi_{\ell}(\rho) \left[1 - \frac{2\eta_0}{\rho} + \frac{\ell(\ell + 1)}{\rho^2} \right] = 0. \quad (21)$$

Здесь $\eta_0 = (Z - Z_d)/a_B k_0$. Решение этого уравнения имеет вид

$$\begin{aligned} \chi_{\ell}(\rho)/\rho &= \rho^{\ell} \exp(-\rho) [A_{\ell} M(\ell + 1 - \eta_0, 2\ell + 2, 2\rho) + \\ &+ B_{\ell} U(\ell + 1 - \eta_0, 2\ell + 2, 2\rho)]. \end{aligned} \quad (22)$$

Здесь $M(a, b, z)$ и $U(a, b, z)$ — вырожденные гипергеометрические функции соответственно первого и второго рода.

Приравнивая логарифмические производные слева и справа от границы $\rho = \rho_0$, можно связать величину коэффициента амплитуды расходящейся сферической волны $C_{\ell}(k)$ с отношением коэффициентов B_{ℓ}/A_{ℓ} , которое будет определено при сшивке решений на границе $r = r_1$. Это условие имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\rho} \ln \left\{ \rho^{\ell} \exp(-\rho) \left[M(\ell + 1 - \eta_0, 2\ell + 2, 2\rho) + \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{B_{\ell}}{A_{\ell}} U(\ell + 1 - \eta_0, 2\ell + 2, 2\rho) \right] \right\} / \\ / \left[j_{\ell} \left(\frac{k}{k_0} \rho \right) + C_{\ell} h_{\ell}^1 \left(\frac{k}{k_0} \rho \right) \right] \Big|_{\rho=\rho_0} = 0. \end{aligned} \quad (23)$$

Отсюда просто выразить коэффициент амплитуды расходящейся сферической волны $C_{\ell}(k)$ на границе атома r_0 :

$$\begin{aligned} C_{\ell}(k) &= \\ &= - \left\{ 1 + i \frac{k_0 y_{\ell}(kr_0)(1 - \Delta_{\ell}) - k y_{\ell+1}(kr_0)}{k_0 j_{\ell}(kr_0)(1 - \Delta_{\ell}) - k j_{\ell+1}(kr_0)} \right\}^{-1}. \end{aligned} \quad (24)$$

Здесь

$$\begin{aligned} \Delta_{\ell} &= (\ell + 1 - \eta_0) \left\{ M(\ell + 2 - \eta_0, 2\ell + 3, 2\rho_0)/(\ell + 1) - \right. \\ &- 2 \frac{B_{\ell}}{A_{\ell}} U(\ell + 2 - \eta_0, 2\ell + 3, 2\rho_0) \left. \right\} / \\ &/ \left\{ M(\ell + 1 - \eta_0, 2\ell + 2, 2\rho_0) + \right. \\ &+ \left. \frac{B_{\ell}}{A_{\ell}} U(\ell + 1 - \eta_0, 2\ell + 2, 2\rho_0) \right\}. \end{aligned} \quad (25)$$

Последнюю формулу (25) можно представить проще, а именно,

$$\Delta_\ell(k) = \frac{d}{d\rho} \ln \left\{ M[\ell + 1 - \eta_0(k), 2\ell + 2, 2\rho] + \frac{B_\ell(k)}{A_\ell(k)} U[\ell + 1 - \eta_0(k), 2\ell + 2, 2\rho] \right\} \Big|_{\rho=\rho_0(k)}. \quad (26)$$

3.3. Волновая функция в области между ядром и d -оболочкой ($0 < r < r_1$)

Теперь определим решение задачи об упругом рассеянии в диапазоне энергий $E < E_B(Z - Z_d)/x_0$ в области $0 < r < r_1$.

Радиальная волновая функция в этом случае находится из решения уравнения

$$\frac{d^2 \chi_\ell(\rho)}{d\rho^2} - \left[\mu^2 - \frac{2\eta_{10}}{\rho} + \frac{\ell(\ell + 1)}{\rho^2} \right] \chi_\ell(\rho) = 0. \quad (27)$$

Здесь

$$\eta_{10} = \frac{Z}{a_B k_0}, \quad k_1 = \sqrt{\frac{2Z_d}{a_B r_1} + k_0^2}, \quad \mu = \frac{k_1}{k_0}.$$

Решением этого уравнения является функция

$$\frac{\chi_\ell(\rho)}{\rho} = \rho^\ell \exp(-\mu\rho) M(\ell + 1 - \eta_1, 2\ell + 2, 2\mu\rho), \quad (28)$$

где $\eta_1 = Z/a_B k_1$.

В результате сшивки логарифмических производных решений (28) и (22) на границе $r = r_1$ находим, что

$$\frac{d}{d\rho} \ln \left\{ \exp[(\mu - 1)\rho] \times \left[M(\ell + 1 - \eta_0, 2\ell + 2, 2\rho) + \frac{B_\ell}{A_\ell} U(\ell + 1 - \eta_0, 2\ell + 2, 2\rho) \right] \right\} \Big|_{\rho=r_1} = 0. \quad (29)$$

Из этого уравнения можно определить отношение коэффициентов:

$$\frac{B_\ell}{A_\ell} = \left\{ M(\ell + 2 - \eta_0, 2\ell + 3, 2\rho_1) \mathcal{Q}_\ell - \left(1 - \frac{\eta_0}{\ell + 1} \right) M(\ell + 2 - \eta_0, 2\ell + 3, 2\rho_1) \right\} / \left\{ M(\ell + 1 - \eta_0, 2\ell + 2, 2\rho_1) \mathcal{Q}_\ell - 2(\ell + 1 - \eta_0) U(\ell + 2 - \eta_0, 2\ell + 3, 2\rho_1) \right\}, \quad (30)$$

где

$$\mathcal{Q}_\ell = 1 - \mu + \mu \left(1 - \frac{\eta_1}{\ell + 1} \right) \times \frac{M(\ell + 2 - \eta_1, 2\ell + 3, 2\mu\rho_1)}{M(\ell + 1 - \eta_1, 2\ell + 2, 2\mu\rho_1)}. \quad (31)$$

Теперь подставляем выражения (30), (31) в формулу (25), а затем в выражение (24), находим коэффициент $\mathcal{C}_\ell(k)$, а вместе с ним и амплитуду упругого рассеяния. Для атома Zr эти формулы дают наиболее ценную часть решения, поскольку позволяют рассчитать сечение в диапазоне энергий $E < 896$ эВ.

Если в формуле (25) положить $B_\ell = 0$, то такое решение будет справедливо для атома с односферическим потенциалом Менсинг, использованным нами в старой работе.

Рассмотрение ситуации в области между сферами $r_1 < r < r_0$ при энергиях $E > E_B(Z - Z_d)a_B/r_0$ связано с решением уравнения Шредингера в виде волновых функций Кулона. Хотя такое решение формально правильное, физическая суть описываемых им явлений далека от реальности. Так, в сечении упругого рассеяния появляется множество максимумов и минимумов, образующихся в результате интерференции переотраженных сферами x_1 и x_0 электронных волн. Естественно, что реальная структура распределения атомных электронов не укладывается в столь простую схему двух жестко закрепленных оболочек, поэтому при таких больших энергиях E комбинированный потенциал Менсинг не годится для нахождения сечения упругого электронного рассеяния.

4. АНАЛИТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА АМПЛИТУДЫ РАССЕЯНИЯ

Коэффициент амплитуды рассеяния (24) запишем в несколько иной форме, удобной для последующего анализа:

$$\mathcal{C}_\ell(k) = i \left\{ j_\ell(kr_0) [1 - \Delta_\ell(k)] - \frac{k j_{\ell+1}(kr_0)}{k_0(k)} \right\} / \left\{ y_\ell(kr_0) [1 - \Delta_\ell(k)] - \frac{k y_{\ell+1}(kr_0)}{k_0(k)} - i \left\{ j_\ell(kr_0) [1 - \Delta_\ell(k)] - \frac{k j_{\ell+1}(kr_0)}{k_0(k)} \right\} \right\}. \quad (32)$$

Проследим за трансформацией свойств коэффициента амплитуды рассеяния $\mathcal{C}_\ell(k)$ при переходе от положительных энергий непрерывного спектра к отрицательным энергиям дискретного спектра. Будем

считать, что $E = -\hbar^2 \zeta^2 / 2m$. Тогда получим, что $k = i\zeta$, а $k_0(\zeta) = \sqrt{2(Z - Z_d) / a_{Br0} + \zeta^2}$. Подставим эти величины в формулу (32), выполним все преобразования сферических функций Бесселя, и в результате формула (32) примет следующий вид:

$$C_\ell(\zeta) = (-1)^{\ell+1} \pi/2 \left\{ I_{\ell+1/2}(\zeta r_0) [1 - \Delta_\ell(\zeta)] + \frac{\zeta I_{\ell+3/2}(\zeta r_0)}{k_0(\zeta)} \right\} / \left\{ K_{\ell+1/2}(\zeta r_0) [1 - \Delta_\ell(\zeta)] - \frac{\zeta K_{\ell+3/2}(\zeta r_0)}{k_0(\zeta)} \right\}. \quad (33)$$

Не составляет большого труда понять, что собственные значения энергии дискретного спектра $E_\ell = -\hbar^2 \zeta_\ell^2 / 2m$ соответствуют полюсам функции (33). Трансцендентные уравнения для нахождения собственных значений энергий дискретного спектра имеют вид

$$1 - \Delta_\ell(\zeta) = \frac{\zeta K_{\ell+3/2}(\zeta r_0)}{k_0 K_{\ell+1/2}(\zeta r_0)}. \quad (34)$$

Здесь $K_{\ell+1/2}(z)$ — модифицированная сферическая функция Бесселя второго рода (функция Макдональда), а в формуле (33) $I_{\ell+1/2}(z)$ — модифицированная сферическая функция Бесселя первого рода.

Величина $C_\ell(\zeta)$, определенная формулой (33), не является коэффициентом амплитуды электронного рассеяния в непосредственном понимании, поскольку таковой не существует при отрицательных энергиях $E < 0$. Просто математический прием перехода от (32) к (33) позволяет найти дискретный спектр энергий в нашей модели потенциала атома, не решая соответствующих уравнений Шредингера в различных областях внутри и вне атома и не сшивая затем эти решения между собой.

Теперь опять вернемся к формуле (32), предварительно упростив выражение вблизи вещественных положительных корней функции $S_\ell(\epsilon)$:

$$S_\ell(\epsilon) = y_\ell(\sqrt{2\epsilon}x_0) [1 - \Delta_\ell(\epsilon)] - \frac{\sqrt{2\epsilon}y_{\ell+1}(\sqrt{2\epsilon}x_0)}{k_0(\epsilon)} = (\epsilon - \epsilon_\ell^*) \frac{dS_\ell(\epsilon = \epsilon_\ell^*)}{d\epsilon}, \quad (35)$$

где $\epsilon = \hbar^2 k^2 / 2m E_B$.

Трансцендентные уравнения для энергий ϵ_ℓ^* , являющихся корнями функций $S_\ell(\epsilon)$, имеют вид

$$Y_{\ell+1/2}(\sqrt{2\epsilon^*}x_0) [1 - \Delta_\ell(\epsilon^*)] = \frac{\sqrt{2\epsilon^*}Y_{\ell+3/2}(\sqrt{2\epsilon^*}x_0)}{k_0(\epsilon^*)}. \quad (36)$$

Здесь $Y_{\ell+1/2}(z)$ — функция Неймана с полуцелым индексом. Не для всех ℓ эти уравнения имеют решения.

Процедура поиска членов $C_\ell(\epsilon)$ амплитуды рассеяния, у которых функция $S_\ell(\epsilon)$ имеет вещественные корни (или, что то же самое, где $|C_\ell(\epsilon = \epsilon_\ell^*)| = 1$) дает возможность представить амплитуду рассеяния $f(\vartheta, k)$ в виде суммы двух типов слагаемых. У одних слагаемых нет корней на вещественной оси положительных энергий и эти слагаемые амплитуды относятся к так называемому потенциальному рассеянию. Те же слагаемые, у которых имеются нули функции $S_\ell(\epsilon)$ на оси положительных энергий, относятся к резонансному рассеянию.

Коэффициент амплитуды резонансного рассеяния тогда можно представить как

$$C_\ell(\epsilon) = i \left[\frac{dS_\ell(\epsilon_\ell^*)}{d\epsilon} \right]^{-1} \times \left\{ j_\ell(\sqrt{2\epsilon_\ell^*}x_0) [1 - \Delta_\ell(\epsilon_\ell^*)] - \frac{\sqrt{2\epsilon_\ell^*}j_{\ell+1}(\sqrt{2\epsilon_\ell^*}x_0)}{k_0(\epsilon_\ell^*)} \right\} / \left\{ \epsilon - \epsilon_\ell^* - i \left[\frac{dS_\ell(\epsilon_\ell^*)}{d\epsilon} \right]^{-1} \left\{ j_\ell(\sqrt{2\epsilon_\ell^*}x_0) [1 - \Delta_\ell(\epsilon_\ell^*)] - \frac{\sqrt{2\epsilon_\ell^*}j_{\ell+1}(\sqrt{2\epsilon_\ell^*}x_0)}{k_0(\epsilon_\ell^*)} \right\} \right\}. \quad (37)$$

Теперь видно, что вблизи корней функции $S_\ell(\epsilon = \epsilon_\ell^*) = 0$ амплитуда рассеяния имеет в непрерывном спектре комплексный полюс $\epsilon = \epsilon_\ell^* - i|\gamma_\ell|$, причем мнимая часть энергии этого состояния имеет отрицательное значение и равна

$$\gamma_\ell(\epsilon_\ell^*) = \left[\frac{dS_\ell(\epsilon_\ell^*)}{d\epsilon} \right]^{-1} \left\{ j_\ell(\sqrt{2\epsilon_\ell^*}x_0) [1 - \Delta_\ell(\epsilon_\ell^*)] - \frac{\sqrt{2\epsilon_\ell^*}j_{\ell+1}(\sqrt{2\epsilon_\ell^*}x_0)}{k_0(\epsilon_\ell^*)} \right\}. \quad (38)$$

Учитывая все сказанное выше, амплитуду рассеяния (18) представим следующим образом:

$$f(\vartheta, k) = \frac{1}{ik} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) P_\ell[\cos \vartheta] C_\ell(k) - \sum_{\ell=\ell_R} \frac{|\gamma_{\ell_R}(\epsilon^*)| (2\ell_R+1) P_{\ell_R}[\cos \vartheta]}{k^* [\epsilon - \epsilon_{\ell_R}^* + i|\gamma_{\ell_R}(\epsilon^*)|]}. \quad (39)$$

В первом слагаемом этой формулы собраны все члены, определяющие потенциальное рассеяние, т. е. такие, в которых $|C_\ell(k)| \neq 1$, а во втором слагаемом собраны все члены амплитуды резонансного рассеяния, для которых $|C_\ell(k = k^*)| = 1$.

Следовательно, при переходе от $E < 0$ к $E > 0$ уравнения для вещественных отрицательных значений полюсов дискретного спектра (33) переходят в уравнения (37) для комплексных полюсов непрерывного спектра, вещественная часть которых обращается в нуль для собственных значений энергий квазистационарных состояний.

Квазидискретный спектр собственных значений энергии при $E > 0$, определяемый комплексными полюсами (37), может соответствовать резонансному захвату внешнего электрона в потенциальную яму эффективной потенциальной энергии с одинаковым орбитальным моментом $L = \ell$, как для внешнего электрона, так и для соответствующей электронной оболочки атома. Резонансный захват будет тогда, когда $\epsilon_\ell^* < u(L = \ell, x = x_0)$, т.е. когда квазидискретный уровень внутри атома с двух сторон ограничен стенками эффективного потенциала. При этом, конечно, должно выполняться условие $|\gamma_\ell(\epsilon_\ell^*)| \ll \epsilon_\ell^*$. Кроме того, чтобы резонанс был хорошо определенным, мнимые части энергий двух близлежащих квазидискретных уровней не должны быть одного порядка с энергетическим зазором между этими уровнями. Чем ближе энергия ϵ_ℓ^* к граничной энергии $E_B(Z - Z_d)/x_0$, тем слабее проявляются резонансные свойства такого уровня захвата. Поскольку, во-первых, правая стенка эффективного потенциала будет заканчиваться при гораздо меньшей энергии, и во-вторых, как правило, мнимая часть энергии такого уровня слишком велика и соответствующее парциальное сечение не будет иметь в окрестности этого уровня заметного максимума.

Величиной $|\gamma_\ell(\epsilon_\ell^*)|$ определяется вероятность распада квазистационарного состояния электрона, захваченного в эффективную потенциальную яму L -ой оболочки атома. Время жизни такого состояния равно $\tau = \hbar/E_B|\gamma_\ell(\epsilon_\ell^*)|$.

Интересная особенность квазистационарных состояний состоит в том, что отрицательное значение мнимой части энергии резонанса соответствует экспоненциальному росту для расходящейся сферической волны с удалением от границы атома, что и означает временной распад соответствующего состояния.

5. СЕЧЕНИЕ УПРУГОГО РАССЕЯНИЯ ЭЛЕКТРОНОВ

Полное сечение упругого рассеяния электронов во всю сферу телесных углов проще всего опреде-

лить с помощью «оптической теоремы теории рассеяния» [9] и формулы (18):

$$\begin{aligned} \sigma(\epsilon) &= \frac{4\pi a_B}{\sqrt{2\epsilon}} \operatorname{Im} f(\vartheta = 0, \epsilon) = \\ &= \frac{2\pi a_B^2}{\epsilon} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) |C_\ell(\epsilon)|^2. \end{aligned} \quad (40)$$

Парциальное сечение, проинтегрированное по всем полярным и азимутальным углам, для орбитального момента ℓ для быстрого электрона с вероятностью находиться в атоме определяется формулой

$$\sigma(\ell, \epsilon) = \frac{2\pi a_B^2}{\epsilon} (2\ell + 1) |C_\ell(\epsilon)|^2. \quad (41)$$

Расчет показывает, что моменты с $\ell > 7$ вносят ничтожно малый вклад во всем диапазоне энергий ϵ , принадлежащих к так называемым средним энергиям. Поэтому в сумме по моментам для полного сечения рассеяния можно ограничиться диапазоном $0 \leq \ell \leq 7$. Так что

$$\sigma(\epsilon) = \sum_{\ell=0}^{\ell=7} \sigma(\ell, \epsilon). \quad (42)$$

Сечение упругого электронного рассеяния в обратную полусферу телесных углов рассчитывается по формуле

$$\begin{aligned} \sigma_{bs}(\epsilon) &= \frac{\pi a_B^2}{\epsilon} \sum_{\ell=0}^7 \sum_{m=0}^7 (2\ell + 1)(2m + 1) \times \\ &\quad \times C_\ell(\epsilon) C_m^*(\epsilon) Y_{\ell, m}. \end{aligned} \quad (43)$$

Здесь

$$Y_{\ell, m} = \int_{-1}^0 dx P_\ell(x) P_m(x). \quad (44)$$

Энергоугловая структура сечения упругого электронного рассеяния рассчитывается в следующем виде:

$$\begin{aligned} \sigma(\epsilon, \vartheta) &= \frac{\pi a_B^2}{\epsilon} \sum_{\ell=0}^7 \sum_{m=0}^7 (2\ell + 1)(2m + 1) C_\ell(\epsilon) C_m^*(\epsilon) \times \\ &\quad \times P_\ell[\cos \vartheta] P_m[\cos \vartheta]. \end{aligned} \quad (45)$$

5.1. Упругое рассеяние электронов на атомах циркония

Электронная конфигурация атома Zr имеет вид $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^2 5s^2$. Модельный потенциал Менсинг для атома циркония имеет следующие

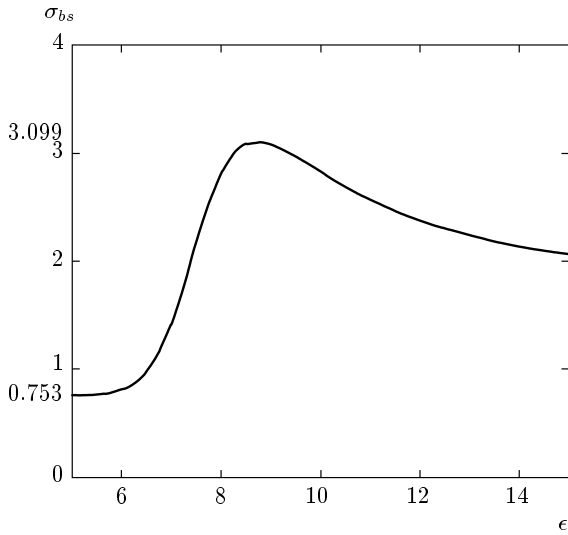


Рис. 3. Кривая зависимости интегрального сечения упругого рассеяния в обратную полусферу телесных углов от энергии электронов, налетающих на атом циркония

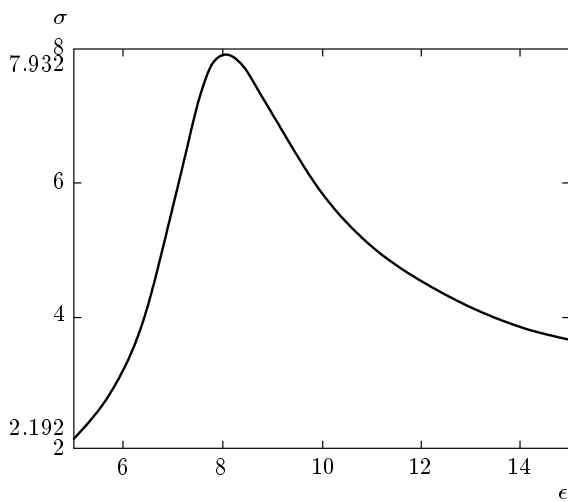


Рис. 4. Кривая зависимости интегрального сечения упругого рассеяния $\sigma(\epsilon)$ в полный телесный угол для атома циркония

параметры: $Z = 40$, $Z_d = 12$, $x_1 = 0.156$, $x_0 = 0.8501$. Эффективная потенциальная энергия для d -электронов пересекает нулевой уровень энергии правой стенкой потенциальной ямы с $L = 2$ на расстоянии $x_d = 0.718$ от ядра. Потенциальная энергия атомных электронов, находящихся на внешней сфере $x = x_0$, составляет 896 эВ.

На рис. 3 представлена форма линии сечения упругого электронного рассеяния в обратную по-

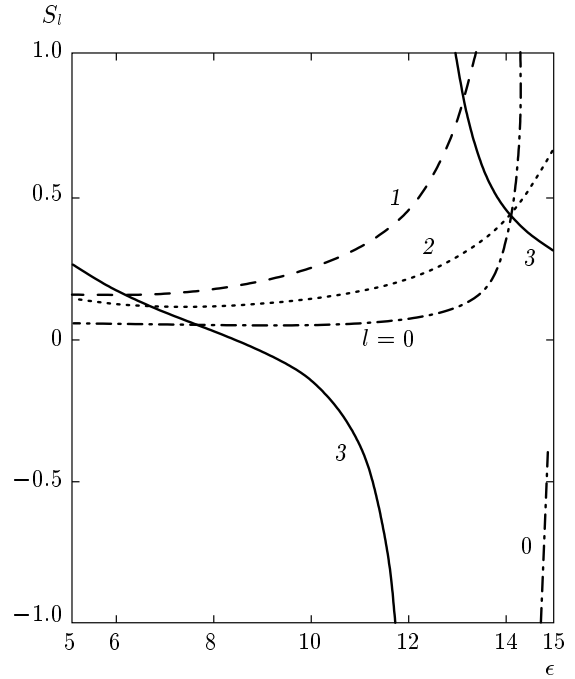


Рис. 5. Графическое решение трансцендентных уравнений (35) для корней функций $S_\ell(\epsilon)$, определяющих энергии квазидискретных уровней резонансного захвата электронов атомом циркония. Корни функций $S_\ell(\epsilon)$ представляют собой точки пересечения кривых с нулевым уровнем, который дается функцией $O(\epsilon) = 0$

лу сфере телесных углов, рассчитанная по формуле (43). По оси абсцисс отложена энергия в диапазоне $5 < \epsilon < 15$, достаточном для анализа. В свою очередь, на рис. 4 представлена форма линии сечения упругого электронного рассеяния на все углы, рассчитанная по формуле (42). Максимумы на обеих кривых по энергии близки к значению $\epsilon^* = 8.29 = 226$ эВ. На рис. 5 хорошо видно, что положение энергии максимума совпадает с корнем уравнения (35) $S_{\ell=3}(\epsilon) = 0$:

$$1 - \Delta_{\ell=3}(k^*) = \frac{k^* Y_{9/2}(k^* r_0)}{k_0(k^*) Y_{7/2}(k^* r_0)}. \quad (46)$$

Это та энергия $\epsilon^* = \hbar^2(k^*)^2/2mE_B$, при которой модуль амплитуды рассеяния $|C_{\ell=3}(\epsilon = \epsilon^*)| = 1$. Следовательно, из решения трансцендентного уравнения (46) определяется положение квазистационарного энергетического уровня резонансного захвата электрона с орбитальным моментом $\ell = 3$ потенциальной ямой f -электронов атома. Потенциальный барьер у правой стенки ямы при энергии $E = E_B \epsilon^*$ уже отсутствует, так что время жизни захваченно-

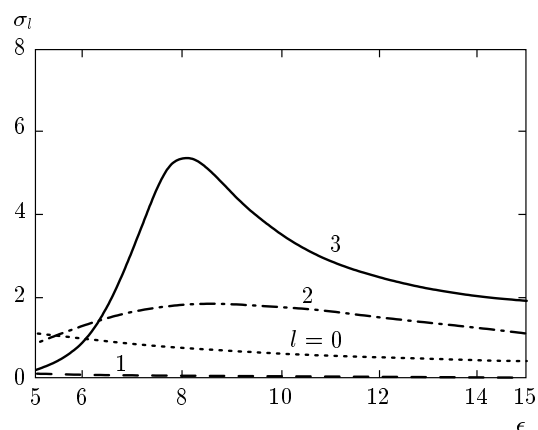


Рис. 6. Кривые четырех первых парциальных сечений упругого рассеяния в полный телесный угол

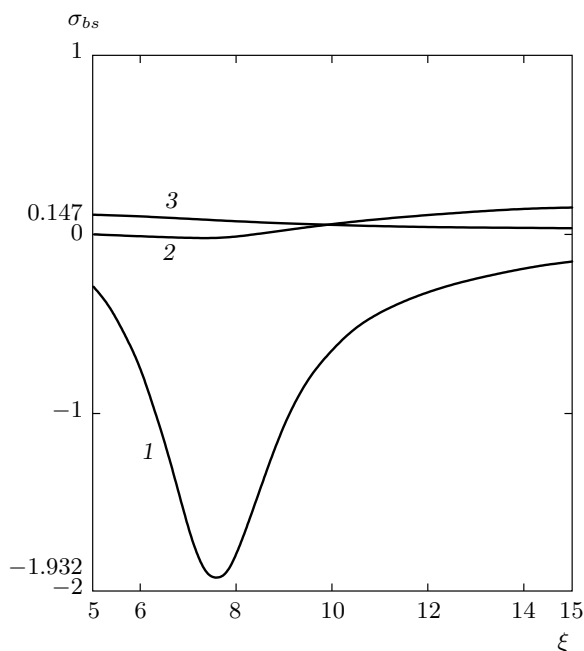


Рис. 7. Энергетические зависимости ряда недиагональных элементов матрицы парциальных сечений упругого рассеяния электрона в обратную полусферу телесных углов. Кривыми изображены интерференционные сечения с единичной разницей в орбитальных моментах у коэффициентов амплитуд рассеяния, входящих в качестве множителей в такие сечения: кривая 1 — $\sigma_{bs}(3, 4, \xi) + \sigma_{bs}(4, 3, \xi)$; 2 — $\sigma_{bs}(2, 3, \xi) + \sigma_{bs}(3, 2, \xi)$; 3 — $\sigma_{bs}(1, 2, \xi) + \sigma_{bs}(2, 1, \xi)$

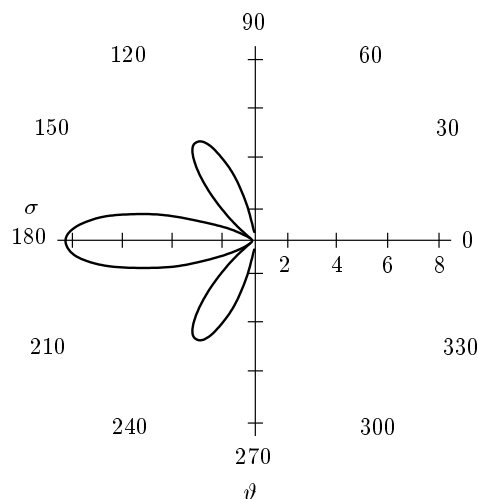


Рис. 8. Полярная диаграмма углового распределения сечения упругого рассеяния σ электрона на углы $\vartheta \geq \pi/2$ с энергией, соответствующей положению квазистационарного состояния $\epsilon_{\ell=3} = 8.29$ в атоме циркония

го электрона на этом уровне не может быть велико $\gamma(\epsilon^*) = -2.054$, $\tau = \hbar/E_B |\gamma(\epsilon^*)| = 1.2 \cdot 10^{-17}$ с. О нем можно также судить по ширине энергетического максимума сечения. На рис. 6 представлены первые четыре парциальных сечения полного упругого рассеяния (т.е. на все углы). Сечение $\sigma_{\ell=3}(\epsilon)$ имеет максимум при $\epsilon = 8.079$. Полуширина этого максимума на половине высоты пика составляет $\Delta_{1/2, \ell=3}(\epsilon^*) = 2.246 = 61.1$ эВ. Передний фронт электронной волны, движущийся со скоростью $8.96 \cdot 10^8$ см/с, находясь на квазидискретном уровне, продвинется в атоме на расстояние 1.05 \AA , составляющее только 65 % от размера металлического радиуса атома Zr ($r_{Zr} = 1.6 \text{ \AA}$), прежде чем электрон покинет атом.

Форма энергетической зависимости сечения упругого электронного рассеяния в обратную полусферу телесных углов $\sigma_{bs}(\epsilon)$ заметно искажена по сравнению с $\sigma(\epsilon)$ за счет влияния интерференции парциальных амплитуд. Тем не менее положения максимумов сечений $\sigma(\epsilon) \rightarrow 8.07$ и $\sigma_{bs}(\epsilon) \rightarrow 8.73$ почти совпадают, но сечение в обратную полусферу отличается заметной асимметрией формы максимума с резким подъемом на левом крыле и медленным спадом на правом крыле от максимума. Это объясняется отрицательным вкладом интерференционных парциальных сечений с единичной разницей в орбитальных моментах, изображенных на рис. 7.

На рис. 8 представлена зависимость сечения упругого рассеяния электрона на большие углы с энергией $\epsilon = 8.29$, при которой он захватывается на квазидискретный уровень с $\ell = 3$. Основной максимум угловой зависимости располагается при угле $\vartheta = \pi$, т.е. для рассеяния назад. Минимумы сечения располагается при углах $\vartheta = 90^\circ$ и $\vartheta = 147.9^\circ$. Вблизи угловых минимумов велико влияние отрицательных интерференционных составляющих парциальных сечений, в то время как вдали от таких углов угловая зависимость близка к $P_3^2[\cos \vartheta]$ с максимумом при угле $\vartheta = 120.7^\circ$.

Энергии уровней дискретного спектра таковы: $E_s(L = 0) = -10.65E_B$, $E_p(L = 1) = -11.74E_B$, $E_d(L = 2) = -12.0E_B$. Энергия квазидискретного уровня резонансного захвата электрона потенциальной ямой f -оболочки равна $E_f(L = 3) = 8.29E_B$. Других энергетических уровней в спектре Zr нет.

6. ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

1. Исходя из анализа свойств потенциала Томаса–Ферми, определяющих появление атомной оболочки с заданным орбитальным моментом, получено выражение для радиуса экранирования экранированного кулоновского потенциала атома. Построенная на основе такого экранированного кулоновского потенциала эффективная потенциальная энергия центрально-симметрического поля дает правильную картину пространственного распределения электронных оболочек для группы атомов Периодической системы Менделеева с $21 \leq Z \leq 57$.

2. Предложена модель комбинированного потенциала Менсинг для атомов с электронными s -, p -, d -оболочками. Такой потенциал атома допускает точное решение уравнения Шредингера. Плотность распределения атомных электронов представляет собой две сферы, на поверхности которых находятся эти электроны. На внутренней сфере находятся электроны d -оболочки, на внешней сфере — электроны s -, p -оболочек. Радиус внутренней оболочки определяется из соотношений баланса сил, действующих на эти электроны в поле заряженного ядра. Радиус внешней оболочки определяется из условия равенства координаты пересечения восходящей части кривых эффективной потенциальной энергии электронной d -оболочки с экранированным кулоновским потенциалом атома и комбинированным потенциалом Менсинг.

3. Получено решение уравнения Шредингера с комбинированным потенциалом Менсинг. Получен-

ное решение справедливо при условии того, что энергия упруго рассеиваемых электронов меньше потенциальной энергии атомных электронов, находящихся на внешней сфере потенциала. Для ряда атомов с $37 \leq Z \leq 42$ выделены слагаемые амплитуды рассеяния, отвечающие за резонансный захват на квазидискретный уровень падающего на атом электрона в состоянии с выделенным орбитальным моментом. Сечение упругого электронного рассеяния в обратную полусферу телесных углов имеет максимум по энергии электронов в окрестности такого квазидискретного уровня. Энергетическая ширина такого максимума зависит от времени жизни данного квазистационарного состояния захваченного атомом электрона. Время жизни такого состояния захваченного электрона определяется из расчета мнимой части энергетического полюса амплитуды рассеяния. Положительное значение вещественной части такого энергетического полюса соответствует энергии квазистационарного состояния непрерывного спектра.

4. Форма линии максимумов сечения упругого электронного рассеяния в полный телесный угол более симметрична по сравнению с формой линии максимумов сечения рассеяния в обратную полусферу углов. Более симметричный вид максимума у полного сечения на все углы обусловлен отсутствием асимметрии влияния интерференционных сечений с разницей в единицу для орбитальных моментов у составляющих эти сечения амплитуд рассеяния.

5. Расчетные значения вещественной $\epsilon_{\ell=3}^*$ и мнимой $\gamma_{\ell=3}$ частей энергий квазидискретных уровней резонансного захвата для ряда элементов, содержащих электронные s -, p -, d -оболочки, а также параметр y , характеризующий рассогласование положения дна потенциальных ям $U_{scr}(x_{min}, L = 2) - u_{min}(x = 2.5^2/(Z - Z_d), L = 2)$, приведены в таблице.

В столбце $\Delta\epsilon_{\ell=3}^*$ приведена погрешность в определении положения энергии квазистационарного уровня резонансного захвата электрона с $\ell = 3$.

Расчетные данные, приведенные в таблице, указывают на наличие квазистационарных уровней захвата у атомов, имеющих оболочки с s -, p -, d -электронами, для которых возможна процедура замены потенциала атома двухпараметрической моделью рассеивателя по Менсинг. Из таблицы следует, что комбинированный потенциал Менсинг наилучшим образом применим к атому циркония. Истинные энергетические положения уровней захвата так же, как и максимумов в сечении упругого электронного рассеяния, могут отличаться от дан-

Таблица

Атом	Z	Z_d	$\epsilon_{\ell=3}^*$	$\Delta\epsilon_{\ell=3}^*$	$\gamma_{\ell=3}$	y
Rb	37	10	9.57	-2.06	-3.13	0.126
Sr	38	10	8.68	-2.18	-2.28	0.142
Y	39	11	8.48	-0.72	-2.16	0.044
Zr	40	12	8.29	-0.66	-2.05	0.041
Nb	41	13	8.74	-2.94	-2.54	0.206
Mo	42	15	8.57	-3.57	-2.44	0.246

ных таблицы вследствие недостаточной полноты модели двухпараметрического потенциала Менсинг. По крайней мере для молибдена разница между расчетным положением максимума сечения упругого электронного рассеяния и известным экспериментальным значением составляет примерно 20%.

Выражаю свою признательность В. Румянцеву за ряд ценных замечаний, способствующих улучшению содержания статьи.

ЛИТЕРАТУРА

1. В. В. Румянцев, Ю. А. Морозов, Б. Н. Либенсон, ЖЭТФ **63**, 1221 (1972).
2. А. Р. Шульман, В. В. Кораблев, Ю. А. Морозов, Изв. АН СССР, серия физ. **35**, 1060 (1971).
3. Ю. А. Морозов, В. В. Румянцев, Доклад на симпозиуме по вторичной и фотоэлектронной эмиссии, посвященном памяти чл.-корр. АН СССР Д. В. Зернова, апрель (1972).
4. И. М. Бронштейн, Б. С. Фрайман, Вторичная электронная эмиссия, Наука, Москва (1969), с. 58.
5. D. R. Hartee, Proc. Cambridge Philos. Soc. **24**, 89 (1928).
6. V. Fock, Z. Phys. **61**, 126 (1930).
7. W. Kohn and L. J. Sham, Phys. Rev. A **140**, 1133 (1965).
8. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, Квантовая механика. Нерелятивистская теория, Физматгиз, Москва (1963), с. 132, 309, 617.
9. А. С. Давыдов, Квантовая механика, Наука, Москва (1973), с. 513.