

УДК 533.922

ПОЛУЭМПИРИЧЕСКИЙ МЕТОД ОПИСАНИЯ СЕЧЕНИЯ УПРУГОГО РАССЕЙНИЯ ЭЛЕКТРОНОВ НИЗКИХ ЭНЕРГИЙ НА АТОМЕ

© 2021 г. А. П. Яловец

*Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия**E-mail: yalovets.alex@rambler.ru*

Поступила в редакцию 26.11.2019 г.

После доработки 01.02.2021 г.

Принята к публикации 19.05.2021 г.

Предложен полуклассический метод описания сечений упругого рассеяния электронов с энергией более 1 эВ на атоме. Идея метода заключается в расчете длины экранирования с учетом влияния на нее распределения электронной плотности в атоме и его поляризации полем налетающей частицы с учетом запаздывания вектора индуцированного дипольного момента относительно вектора напряженности поля. Получены аналитические выражения для расчета длины экранирования, которые содержат эмпирические константы. Описан алгоритм нахождения констант. В области энергий электронов 0.1–1 эВ применялась сшивка сечений, полученных из фазовой теории и предлагаемым в работе методом. Представлены сравнения полученных данным методом сечений с экспериментальными и теоретическими результатами различных авторов.

DOI: 10.31857/S0040364421040232

ВВЕДЕНИЕ

Описание процессов переноса в газе с участием электронов требует определения сечения упругого рассеяния электронов на атомах, поскольку непосредственно от него зависят коэффициенты диффузии, электропроводности, электронной теплопроводности.

В настоящее время для нахождения сечений упругого рассеяния электронов на атомах применяется фазовая теория рассеяния, поскольку в рамках данной теории возможно описание электрон-атомных столкновений с многочастичным потенциалом взаимодействия. Описания различных вариантов реализации фазовой теории приводятся, например, в работах [1–6]. В области энергий электронов, меньше 1 эВ, получены аналитические выражения сечений упругого рассеяния электронов на атомах [2–4]. Данные аналитические выражения полного и транспортного сечений выражаются через поляризуемость атома α_0 и длину рассеяния электрона на атоме L . В более широком энергетическом интервале (более 1 эВ) нахождение сечений возможно только численно [5, 6]. Следует заметить, что численное решение квантово-механической задачи с многочастичным потенциалом взаимодействия сопряжено с большим объемом вычислений, и нахождение сечения рассеяния электрона на атоме определенного сорта становится предметом отдельной публикации [5, 6].

Как отмечалось выше, сечения упругого рассеяния электронов на атомах необходимы для нахождения транспортных коэффициентов, потребность в которых возникает при решении самых различных задач физики плазмы. Очевидно, что для практических целей найденные численно сечения можно применять только в виде таблиц. В случае, когда возникает потребность в дифференциальных сечениях, их табличное описание становится весьма громоздким и неудобным.

Применение экспериментальных сечений при решении различного рода практических задач также сопряжено с трудностями, основной из которых является сшивка полученных различными авторами экспериментальных данных, представленных, как правило, в различных не перекрывающихся энергетических интервалах. Кроме того, экспериментальные данные получены в основном для полных или транспортных сечений, откуда очень сложно извлечь данные для построения дифференциальных сечений.

Удобным для проведения практических расчетов способом описания сечений является построение простых полуэмпирических теорий рассеяния, содержащих некоторое количество констант, определение которых базируется на результатах как экспериментальных, так и теоретических исследований различных авторов. Такой подход, во-первых, позволяет без каких-либо трудностей использовать имеющиеся экспериментальные и теоретические данные, во-вторых, избавляет от необходимости использования в

практических расчетах числовых массивов данных. Вариант такой теории, основанной на полуклассическом описании рассеяния, предлагается в данной работе.

ПОЛУЭМПИРИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ СЕЧЕНИЙ

Применение в квантовой теории рассеяния экранированного кулоновского потенциала $U(r) = -Ze^2 \exp(-r/a)/(4\pi\epsilon_0 r)$ позволяет записать известные выражения для полного σ и транспортного сечений σ_t в виде [7]

$$\sigma = 2\pi r_0^2 \frac{Z(Z+1)}{\beta^2 \bar{\epsilon}_e (\bar{\epsilon}_e + 2)} \frac{1}{2\eta(\eta+1)}, \quad (1)$$

$$\sigma_t = 2\pi r_0^2 \frac{Z(Z+1)}{\beta^2 \bar{\epsilon}_e (\bar{\epsilon}_e + 2)} \left[\ln\left(1 + \frac{1}{\eta}\right) - \frac{1}{\eta+1} \right],$$

где r_0 – классический радиус электрона; Z – заряд ядра; $\beta, \bar{\epsilon}_e$ – соответственно скорость электрона в единицах скорости света и его кинетическая энергия в единицах энергии покоя $m_e c^2$; $\eta = (\lambda/2a)^2$ – параметр экранирования, λ – длина волны де Бройля, $a = a_0 Z^{-1/3}$ – длина экранирования, a_0 – борковский радиус.

Применимость выражений (1) ограничена условием – длина волны λ должна быть меньше характерных размеров области, в которой рассеивающее поле существенно меняется. В данной работе для описания упругого рассеяния электронов с энергией ϵ_e на атоме применяется полуклассический подход, основанный на статистическом рассмотрении рассеяния, согласно которому прицельный параметр b есть случайная величина, равномерно распределенная в интервале значений $0-\lambda$. Такой подход позволяет учесть неоднородность рассеивающего поля на масштабе λ и тем самым применять выражения (1) в области малых энергий электронов, когда $\lambda > a$. Единственным параметром, отвечающим за распределение потенциала взаимодействия на масштабе длины волны, является параметр экранирования. Предлагаемый полуклассический подход описания рассеяния электронов низких энергий (1–1000 эВ) на атоме позволяет учесть влияние различных факторов на величину параметра экранирования.

Важно заметить, что распределение заряда в атоме, которому соответствует распределение экранированного кулоновского потенциала, имеет вид $\rho = -\epsilon_0 \nabla^2 \varphi = Ze\delta(r) + \rho_e(r)$, где электронное распределение заряда описывается выражением

$$\rho_e(r) = \epsilon_0 \varphi(r)/a^2. \quad (2)$$

В случае изотропного распределения заряда в атоме потенциал только вне атома должен обра-

щаться в нуль, в то время, как следует из (2), поведение потенциала определяется лишь константой $a < a_0$, которая не связана с распределением электронного заряда. Чтобы устранить это противоречие, следует длину экранирования приравнять нулю там, где электронная плотность равна нулю. Таким образом, далее полагается, что длина экранирования в атоме определяется электронной плотностью и меняется от нуля до максимального значения $a = a_0 Z^{-1/3}$. В этом случае параметр экранирования находится по выражению

$$\eta = \frac{1}{4} \left(\frac{\lambda}{\langle a \rangle} \right)^2, \quad (3)$$

где $\langle a \rangle = \frac{a}{\lambda} \int_0^\lambda F(b) db = a \langle F \rangle$ – осредненная по всем прицельным параметрам длина экранирования; $F(b)$ – функция, описывающая зависимость длины экранирования от прицельного параметра. Учитывая, что на больших расстояниях от ядра уменьшение электронной плотности описывается обычно экспоненциальной зависимостью, в качестве интерполяционной формулы принимается

$$F(b) = 1, \text{ если } b \leq a, \quad (4)$$

$$F(b) = \exp(-(b-a)/\Lambda), \text{ если } b > a,$$

где $\Lambda = \Lambda_0 Z^{-1/3}$, Λ_0 – эмпирический параметр, зависящий от сорта атома.

Значение параметра Λ_0 находится из сравнений экспериментальных сечений с рассчитанными по формулам (1), (3) и (4) в области энергий электронов, где поляризационные эффекты отсутствуют. Для атомов гелия и аргона поляризация атома налетающим электроном существенна при его энергии менее 1 эВ, поэтому для этих газов параметр Λ_0 может быть найден по экспериментальным или теоретическим сечениям в области энергий более 10 эВ.

В переходной области энергий электрона (0.1–1 эВ) аналитические выражения для сечений [2–4] и полуэмпирическая модель (1), (3) и (4) не работают, поэтому для описания сечений рассеяния в этой области применялась сшивка сечений. В данной работе сшивка сечений реализована с помощью аппроксимации кривизны кубическим сплайном с коэффициентами, найденными по значениям функции и ее производных на границах области сшивки.

На рис. 1–3 приводятся сравнения рассчитанных по описанному алгоритму транспортных и полных сечений с экспериментальными и теоретическими данными различных авторов. Продемонстрировано хорошее согласие с данными других авторов в широком энергетическом интервале.

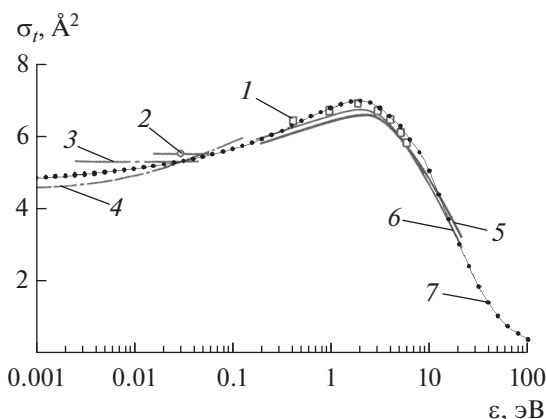


Рис. 1. Транспортное сечение рассеяния электрона на атоме гелия: эксперимент: 1 – [8], 2 – [9], 3 – [10]; теория: 4 – [2], 5 – [11], 6 – [12], 7 – настоящая работа при $\epsilon_e < 0.6$ эВ – фазовая теория рассеяния [3] с $L = 1.16$ и при $\epsilon_e > 7$ эВ – расчет по (1), (3), (4) с $\Lambda_0 = 0.95$ нм; в интервале 0.6–7 эВ – сшивка сечений.

Следует отметить, что эмпирический параметр Λ_0 для аргона, как и ожидалось, дает правильное описание как транспортного, так и полного сечения рассеяния.

Как известно, атомы металлов имеют большую поляризуемость в электрическом поле, что приводит к сильному поляризационному взаимодействию налетающего электрона с атомом. Индуцируемое полем налетающего электрона перераспределение электронной плотности в атоме приводит к увеличению длины экранирования, т.е. к увеличению сечения рассеяния.

Поляризуемость атома определяется главным образом валентными электронами [20], время установления поляризации составляет 10^{-17} – 10^{-16} с [21]. Тем не менее при энергии налетающего электрона 10 эВ и более эффекты запаздывания установления поляризации становятся существенными. Таким образом, поляризационное взаимодействие и конечное время установления поляризации должно быть учтено при вычислении сечения упругого рассеяния электронов.

В рамках классической модели атома установившаяся связь между поляризуемостью атома и собственной частотой валентных электронов. Здесь следует заметить, что обычно в литературе, например в [2, 3, 20], приводятся данные о поляризуемости атомов α_0 в гауссовой системе в единицах a_0^3 (см³). Легко показать, что поляризуемость в системе СИ связана с α_0 выражением $4\pi\alpha$, где $\alpha = \alpha_0 a_0^3$, a_0^3 определено в м³.

Смещение электронной оболочки атома ξ во внешнем однородном постоянном электрическом поле можно найти из уравнения движения

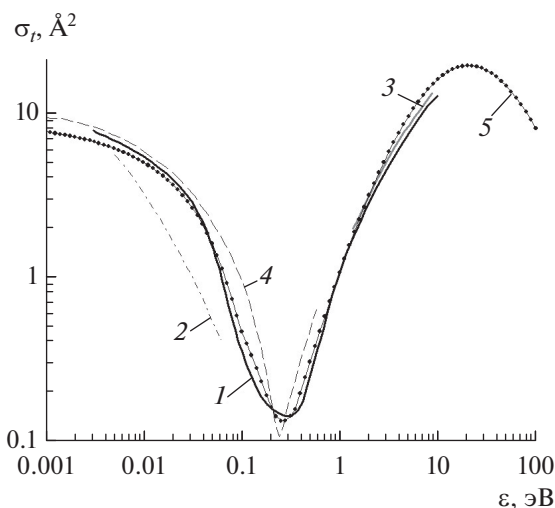


Рис. 2. Транспортное сечение рассеяния электрона на атоме аргона: эксперимент: 1 – [13], 2 – [14], 3 – [15]; теория: 4 – [16], 5 – настоящая работа при $\epsilon_e < 0.11$ эВ – фазовая теория [3] с $L = -1.593$ и $\epsilon_e > 0.35$ эВ – расчет по (1), (3), (4) с $\Lambda_0 = 1.02$ нм; в интервале 0.105–0.35 эВ – сшивка сечений.

$\ddot{\xi} + \omega_0^2 \xi = -eE/m_e$, где ω_0 – частота вращения электрона в атоме. Полагается, что в момент включения поля $\xi(0) = \dot{\xi}(0) = 0$ имеем $\xi(t) = -eE(1 - \cos \omega_0 t)/m_e \omega_0^2$. Осредненный по времени индуцированный дипольный момент атома будет иметь вид $\langle p \rangle = -e \langle \xi \rangle = \epsilon_0 4\pi \alpha E$. Отсюда следует искомое соотношение

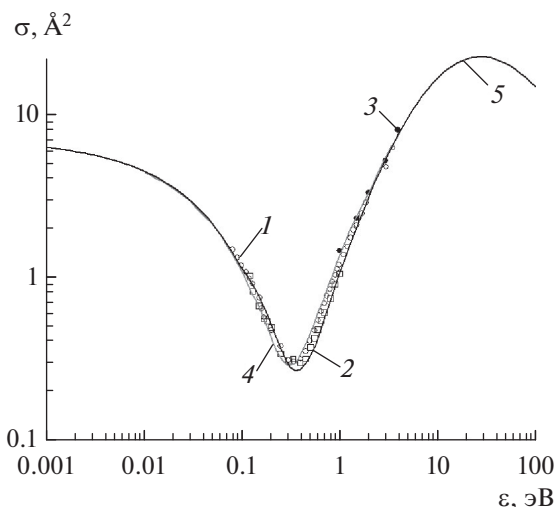


Рис. 3. Полное сечение упругого рассеяния электрона на атоме аргона: эксперимент: 1 – [17], 2 – [18], 3 – [19]; теория: 4 – [5], 5 – настоящая работа при $\epsilon_e < 0.11$ эВ [3], $L = -1.441$ [5] и $\epsilon_e > 0.35$ эВ – расчет по (1), (3), (4), $\Lambda_0 = 1.02$ нм; в интервале 0.105–0.54 эВ – сшивка сечений.

$$\omega_0^2 = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 a_0^3 z m_e \alpha_0},$$

где учтено, что за поляризацию отвечают z валентных электронов.

Пусть атом находится в начале координат. Угловая скорость движущегося вдоль оси x со скоростью v электрона $\dot{\phi} = -bv/r^2$, где ϕ – полярный угол, $r = \sqrt{b^2 + v^2 t^2}$ – расстояние между электроном и атомом, момент $t = 0$ соответствует наибольшему сближению электрона с атомом. Если $|\dot{\phi}| > \omega_0$, то вектор индуцированного дипольного момента атома будет отставать на угол Ω от вектора напряженности электрического поля налетающего электрона. Приращение потенциальной энергии поляризационного взаимодействия электрона с атомом будет иметь вид

$$dU_p = -(\mathbf{E}d\mathbf{p}) = -4\pi\epsilon_0\alpha \cos\Omega EdE, \quad (5)$$

$\Omega \geq 0$. Случай $\Omega = 0$ соответствует полному установлению поляризации при движении частицы.

Скорость изменения угла Ω равна $\dot{\Omega} = b\dot{v}/(r^2 - \omega_0)$, причем должно выполняться условие $\dot{\Omega} \geq 0$. Из данного условия определяется расстояние r_a и момент времени $-t_a$, при которых $\dot{\Omega} > 0$:

$$r_a = \sqrt{bv/\omega_0}, \quad t_a = \sqrt{(r_a^2 - b^2)/v^2}. \quad (6)$$

При $t < -t_a$ поляризация атома устанавливается полностью и $\Omega = 0$. Зависимость $\Omega(t)$ при $t > -t_a$ задается выражением

$$\Omega(t) = \int_{-t_a}^t \dot{\Omega}(t') dt' = \arctg(\bar{t}) + \arctg(\bar{t}_a) - \bar{\omega}_0(\bar{t} + \bar{t}_a), \quad (7)$$

где $\bar{t} = t/t_0$, $\bar{t}_a = t_a/t_0$, $\bar{\omega}_0 = \omega_0 t_0$, $t_0 = b/v$.

Осредняя в (5) $\cos\Omega$ по времени пролета электрона, запишем выражение для поляризационного потенциала в виде [22]

$$U_p(r) = -\frac{e^2 a_0^3 \alpha_0 \langle \cos\Omega(b) \rangle}{8\pi\epsilon_0 r^4}, \quad (8)$$

$$\langle \cos\Omega(b) \rangle = \frac{1}{2t_a} \int_{-t_a}^{t_a} \cos\Omega(t) dt.$$

Величина поляризационного потенциала (8) определяется деформацией электронной плотности в атоме полем налетающей частицы. Этот процесс должен повлечь изменение длины экранирования, которое может быть описано аналогично (4).

Так как поляризационный потенциал есть результат перераспределения зарядов в атоме, обусловленное поляризационным взаимодействием силовое воздействие на налетающую частицу также можно учесть соответствующим изменением длины экранирования.

Таким образом, осредненная по прицельным параметрам длина экранирования может быть представлена в виде

$$\langle a \rangle = a(\langle F \rangle + \langle q \rangle), \quad (9)$$

где $\langle F \rangle$ – осредненный вклад в длину экранирования, обусловленный распределением электронной плотности в атоме с учетом ее поляризации полем налетающего заряда; $\langle q \rangle$ – осредненный по прицельному параметру вклад в длину экранирования, учитывающий поляризационное силовое воздействие.

Для оценки степени деформации электронной плотности найдем область прицельных параметров, при которых поляризационное взаимодействие будет существенным. Следуя классической теории рассеяния [23], для потенциала (8) найдется минимальное расстояние между налетающим электроном и атомом

$$r_{\min}^2 = \frac{b^2}{2} \left(1 + \sqrt{1 - \frac{b_{\min}^4 \langle \cos\Omega(b) \rangle}{b^4 \langle \cos\Omega(b_{\min}) \rangle}} \right), \quad (10)$$

$$b_{\min}^4 = 2e^2 a_0^3 \alpha_0 \langle \cos\Omega(b_{\min}) \rangle / (4\pi\epsilon_0 \epsilon_e).$$

Последнее равенство представляет собой трансцендентное уравнение для нахождения b_{\min} . Для его решения используются выражения (6), (7).

Из (10) следует, что поляризационное взаимодействие необходимо учитывать при прицельных параметрах $\lambda \geq b \geq b_{\min}$, причем $b_{\min} > a_0$, или $b_{\min} Z^{-1/3} > a$, поскольку при $b < b_{\min}$ рассеяние определяется экранированным кулоновским потенциалом.

Таким образом, деформация электронной плотности в атоме полем налетающей частицы приводит к увеличению области прицельных параметров, в которой длина экранирования имеет максимальное значение $a = a_0 Z^{-1/3}$. Зависимость длины экранирования от прицельного параметра будет выражаться формулой, аналогичной (4), в которой вместо параметра a будет выступать $b_{\min} Z^{-1/3}$ при $b_{\min} Z^{-1/3} > a$:

$$F(b) = 1, \text{ если } b \leq a_p,$$

$$F(b) = \exp(-(b - a_p)/\Lambda), \text{ если } b > a_p,$$

где $a_p = \max(a, b_{\min} Z^{-1/3})$.

Осредненная по прицельным параметрам длина экранирования, обусловленная деформацией электронной плотности в атоме, будет иметь вид

$$\langle F \rangle = \frac{a_p}{\lambda} + \Lambda \frac{1 - \exp(-(\lambda - a_p)/\Lambda)}{\lambda}. \quad (11)$$

Определив область изменения прицельного параметра, в которой необходимо учитывать поляризационное взаимодействие, представим осредненный по прицельному параметру вклад в длину экранирования, учитывающий поляризационное силовое воздействие, в виде

$$\langle q \rangle = \frac{1}{\lambda} \int_{b_{\min}}^{\lambda} q(b) db, \quad (12)$$

где $q(b)$ – зависимость длины экранирования от прицельного параметра, отвечающего за поляризационное силовое воздействие.

Перепишем поляризационный потенциал (8) в виде

$$U_p(r) = -\frac{\varepsilon_e \langle \cos \Omega(b) \rangle}{4 \langle \cos \Omega(b_{\min}) \rangle} \left(\frac{b_{\min}}{r} \right)^4, \quad r \geq r_{\min}. \quad (13)$$

Потенциал (13) быстро убывающая функция и основной вклад в поляризационное взаимодействие дает некоторая малая область $r_{\min} < r < r_{\text{eff}}$. Из (10) следует, что $r_{\min}(b_{\min}) = b_{\min}/\sqrt{2}$ и $r_{\min}(b \gg b_{\min}) = b$, т.е. минимальное расстояние, а следовательно, и r_{eff} определяются прицельным параметром. Данные соображения позволяют для оценки эффективной области использовать соотношение $r_{\text{eff}}^4 \langle \cos \Omega(b_{\min}) \rangle \approx b^4$. Данная оценка позволяет представить поляризационный потенциал (13) в виде зависимости от прицельного параметра. Принимая во внимание, что

$$(b_{\min}/\lambda)^4 = \varepsilon_e \langle \cos \Omega(b_{\min}) \rangle / \varepsilon_*, \quad \varepsilon_e = h^2/2m_e \lambda^2;$$

$$\varepsilon_* = h^2/2m_e \lambda_*^2, \quad \varepsilon_* = \frac{4\pi\varepsilon_0 h^4}{8e^2 m_e^2 a_0^3 \alpha_0},$$

запишем

$$U_p(b) = -\frac{\varepsilon_* \langle \cos \Omega(b_{\min}) \rangle \langle \cos \Omega(b) \rangle}{4} \left(\frac{\lambda_*}{b} \right)^4. \quad (14)$$

Для нахождения длины экранирования, отвечающего за поляризационное силовое воздействие, делается предположение, что относительное приращение длины экранирования пропорционально приращению поляризационного потенциала, т.е. $dq/q = d(U_p(b)/\varepsilon_*)$. Из данного предположения и выражения (14) следует

$$q(b) =$$

$$= q_0 \exp \left(-\frac{1}{4} \langle \cos \Omega(b_{\min}) \rangle \langle \cos \Omega(b) \rangle \left(\frac{\lambda_*}{b} \right)^4 \right).$$

Подставляя данную зависимость в (12), получим

$$\langle q \rangle \approx q_0 \left(1 - \frac{b_{\min}}{\lambda} \right) \times$$

$$\times \exp \left(-\frac{\gamma \lambda_*^4}{4 \lambda^4} \langle \cos \Omega(b_{\min}) \rangle \langle \cos \Omega(\tilde{b}) \rangle \right), \quad (15)$$

где $\tilde{b} = \lambda \gamma^{-1/4}$; q_0, γ – эмпирические константы.

Таким образом, подстановка выражений (11), (15) в (9) позволяет найти среднюю длину экранирования с учетом поляризационного взаимодействия и параметр экранирования (3).

Установим критерий, при котором необходимо учитывать влияние поляризационного взаимодействия при энергии электрона более 1 эВ. Из условий $b_{\min} Z^{-1/3} > a$ и $b_{\min} \leq b \leq \lambda$ следуют неравенства

$$\left(\frac{b_{\min} Z^{-1/3}}{a} \right)^4 = \frac{2e^2 \alpha_0 \langle \cos \Omega(b_{\min}) \rangle}{4\pi\varepsilon_0 a_0 \varepsilon_e} > 1,$$

$$\left(\frac{b_{\min}}{\lambda} \right)^4 = \frac{\varepsilon_e \langle \cos \Omega(b_{\min}) \rangle}{\varepsilon_*} < 1. \quad (16)$$

Максимальная энергия электрона, при которой выполняется второе условие (16), не превышает значения $\varepsilon_*/\langle \cos \Omega \rangle$. Подставляя это значение в первое неравенство (16) и производя вычисления, получим условие на величину поляризуемости атома, при которой влияние поляризационных эффектов на длину экранирования необходимо учитывать:

$$\alpha_0 > 10/\langle \cos \Omega(b_{\min}) \rangle.$$

Из данного выражения следует, что поляризационные эффекты для гелия ($\alpha_0 = 1.4$) и аргона ($\alpha_0 = 11$) в области энергий более 1 эВ несущественны.

Таким образом, для описания сечения упругого рассеяния электрона на атоме здесь требуется знать входящие в выражения (11) и (15) три эмпирических параметра: Λ_0, q_0, γ . Параметр Λ_0 легко находится из экспериментальных данных при энергиях ~ 100 эВ, где влияние поляризационных эффектов на рассеяние отсутствует. Параметр $q_0 \leq 1$ определяет амплитуду поляризационного вклада в сечение рассеяния. Параметр γ определяет область энергии налетающей частицы, в которой поляризационные эффекты существенны. Во всех расчетах поляризуемость атомов вычислялась методом, описанным в [20], ионизационные потенциалы брались из [24].

На рис. 4 приведено сравнение рассчитанных описанным здесь методом сечений упругого рассеяния электронов с экспериментальными и теоретическими данными различных авторов. Ось абсцисс имеет разный масштаб в различных энергетических интервалах.

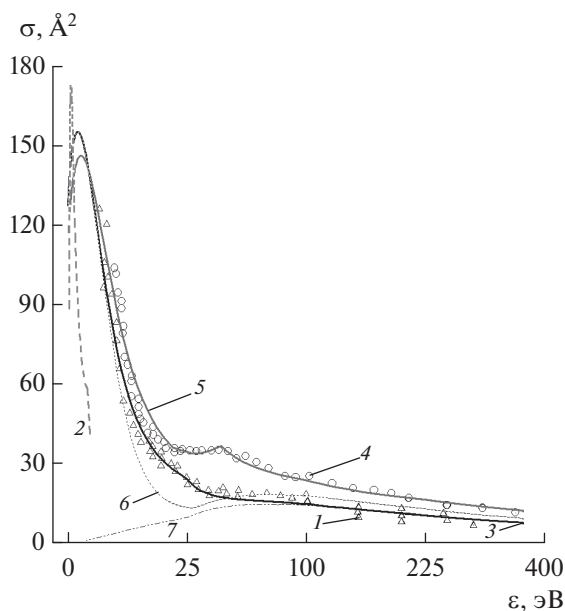


Рис. 4. Полные сечения упругого рассеяния электрона на атомах цинка: 1 – эксперимент [25], 2 – расчет [6], 3 – настоящая работа ($\Lambda_0 = 0.27$ нм, $q_0 = 0.95$, $\gamma = 100$); кадмия: 4 – эксперимент [25], 5 – настоящая работа ($\Lambda_0 = 0.27$ нм, $q_0 = 0.85$, $\gamma = 54$); 6, 7 – результаты расчетов сечения для цинка без учета запаздывания поляризации и поляризационного взаимодействия соответственно.

Для цинка вычисление длины экранирования по формулам (9), (11) и (15) дало вполне удовлетворительное согласие с экспериментальными данными. Для кадмия расчеты по этим же формулам не позволили описать детали экспериментального сечения в интервале энергий $\sim 20\text{--}100$ эВ, где поведение сечения носит немонокотный характер. Вне этого интервала рассчитанное сечение вполне удовлетворительно согласовывалось с экспериментом.

Сделано предположение, что причиной наблюдаемой зависимости сечения рассеяния от энергии налетающих электронов являются процессы возбуждения (ионизации) атома, которые приводят к уменьшению поляризуемости атома подобно тому, как уменьшается с ростом температуры диэлектрическая восприимчивость диэлектрика из полярных молекул [21]. Для описания зависимости поляризации атома от процессов возбуждения и ионизации, т.е. от энергии налетающих электронов, была введена зависимость $\alpha_0(\epsilon_e)$ в виде $\alpha_0(\epsilon_e \leq \epsilon_A) = \alpha_0^A$, где α_0^A – поляризуемость атома в основном состоянии; в интервале $\epsilon_A < \epsilon_e < \epsilon_B$ $\alpha_0(\epsilon_e) = \alpha_0^A \exp[-k(\epsilon_e - \epsilon_A)]$, где k находится по заданной поляризуемости $\alpha_0(\epsilon_B) = \alpha_0^B$, $\alpha_0(\epsilon_e > \epsilon_B) = \alpha_0^B$, где $\epsilon_B' \leq \epsilon_B$. Значения ϵ_A , ϵ_B определяются непосредственно по экс-

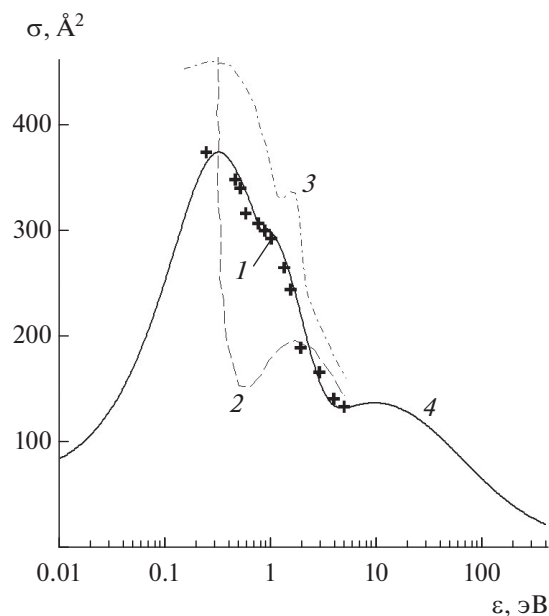


Рис. 5. Полные сечения упругого рассеяния электрона на атоме цезия: эксперимент: 1 – [26]; теория: 2 – [27], 3 – [28], 4 – настоящая работа при $\epsilon_e < 0.01$ эВ [3] и $\epsilon_e > 0.875$ эВ – расчет при $\Lambda_0 = 6.5$ нм, $q_0 = 0.453$, $\gamma = 100$; в интервале $0.01\text{--}0.875$ эВ – сшивка сечений.

периментальным данным, величины α_0^B, ϵ_B' – подгоночные параметры. Приведенная для кадмия рассчитанная кривая получена при $\epsilon_A = 22$ эВ, $\epsilon_B = 55$ эВ, $\epsilon_B' = 0.84\epsilon_B$, $\alpha_0^B/\alpha_0^A = 0.6$.

Для оценки влияния запаздывания индуцированной поляризации на рассеяние выполнен расчет без учета запаздывания (кривая 6 на рис. 4), т.е. среднее значение поляризации полагалось равным максимальному значению для всех энергий налетающей частицы. Видно, что роль запаздывания поляризации атома достаточно велика и заключается в увеличении длины экранирования за счет увеличения времени жизни индуцированного дипольного момента. Кривая 7 рассчитана без учета поляризационного взаимодействия. В отсутствие поляризационного взаимодействия уменьшение сечения рассеяния в низкоэнергетической области обусловлено, как видно из выражения (4), увеличением доли электронов с большим прицельным параметром ($b > a$), что приводит к уменьшению средней длины экранирования. Уменьшение средней длины экранирования является следствием того, что экранирующее действие электронной оболочки атома возрастает с увеличением прицельного параметра.

На рис. 5 приводится сравнение рассчитанного сечения в цезии с результатами эксперимента и теорий различных авторов. Расчеты для цезия проводились при постоянной поляризуемости атома.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Полуэмпирический метод описания сечения упругого рассеяния электронов на атоме, основанный на полуклассическом рассмотрении, позволил получить простые аналитические выражения для длины экранирования, рассчитанные с помощью которых сечения хорошо согласуются с экспериментальными данными в широком энергетическом интервале.

Алгоритм нахождения эмпирических констант весьма прост, поскольку эти константы отвечают за доминирующие в различных энергетических интервалах процессы. Для нахождения констант можно использовать экспериментальные либо теоретические данные по сечениям.

Поскольку данный метод описания сечений основан только на коррекции длины экранирования, его можно применять для описания дифференциальных сечений, что дает возможность для решения задачи переноса электронов низких энергий в веществе.

Как показали расчеты с кадмием, данный полуэмпирический подход к описанию сечений упругого рассеяния позволяет учесть изменение внутренней энергии атома в результате процессов возбуждения или ионизации.

Предложенный метод описания сечений содержит малый объем вычислений, что делает его применение удобным при решении различного рода практических задач.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Бабиков В.В.* Метод фазовых функций в квантовой механике // УФН. 1967. Т. 92. Вып. 1. С. 3.
2. *Елецкий А.В., Палкина Л.А., Смирнов Б.М.* Явления переноса в слабоионизированной плазме. М.: Атомиздат, 1975. 333 с.
3. *Храпак А.Г., Якубов И.Т.* Электроны в плотных газах и плазме. М.: Наука, 1981. 282 с.
4. *Друкарев Г.Ф.* Столкновение электронов с атомами и молекулами. М.: Наука, 1978. 256 с.
5. *McEachran R.P., Stauffer A.D.* Relativistic Effects in Low-energy Electron-Argon Scattering // Aust. J. Phys. 1997. V. 50. P. 511.
6. *Zatsarinny O., Bartschat K.* Benchmark Calculations for Electron Collisions with Zinc Atoms // Phys. Rev. A. 2005. V. 71. P. 022716.
7. *Калашиников Н.П., Ремизович В.С., Рязанов М.И.* Столкновения быстрых заряженных частиц в твердых телах. М.: Атомиздат, 1980. 272 с.
8. *Crompton R.W., Elford M.T., Jory R.L.* The Momentum Transfer Cross Section for Electrons in Helium // Austral. J. Phys. 1967. V. 20. P. 369.
9. *Hirshfield J.L., Brown S.C.* Microwave Method for Measuring the Probability of Elastic Collision of Electrons in a Gas // J. Appl. Phys. 1958. V. 29. P. 1749.
10. *Pack J.L., Phelps A.V.* Drift Velocities of Slow Electrons in Helium, Neon, Argon, Hydrogen, and Nitrogen // Phys. Rev. 1961. V. 121. P. 798.
11. *Michels H.H., Harris F.E., Scolsky R.M.* Calculation of Cross-sections for Electron-Helium Collisions // Phys. Lett. 1969. V. 28A. P. 467.
12. *Galloway J., La Bahn R.W., Pu R.T., Duxler W.M.* Extended Polarization Potential: Applications to Atomic Scattering // Phys. Rev. 1968. V. 168. P. 12.
13. *Frost L.S., Phelps A.V.* Momentum-Transfer Cross Sections for Slow Electrons in He, Ar, Kr, and Xe from Transport Coefficients // Phys. Rev. 1964. V. A136. P. 1538.
14. *Tice R., Kivelson D.* Cyclotron Resonance in Gases. I. Atoms and Nonpolar Molecules // J. Chem. Phys. 1967. V. 46. P. 4743.
15. *Barbiere D.* Energy Distribution, Drift Velocity, and Temperature of Slow Electrons in Helium and Argon // Phys. Rev. 1951. V. 84. P. 653.
16. *O'Malley T.F.* Extrapolation of Electron-Rare Gas Atom Cross Sections to Zero Energy // Phys. Rev. 1963. V. 130. P. 1020.
17. *Ferch J., Granitza B., Masche C., Raith W.* Electron-argon Total Cross Section Measurements at Low Energies by Time-of-flight Spectroscopy // J. Phys. B: At. Mol. Phys. 1985. V. 18. P. 967.
18. *Buckman S.J., Lohmann B.* Low-energy Total Cross Section Measurements for Electron Scattering from Helium and Argon // J. Phys. B: At. Mol. Phys. 1986. V. 19. P. 2547.
19. *Gibson J.C., Gulley R.J., Sullivan J.P., Buckman S.J., Chan V., Burrow P.D.* Elastic Electron Scattering from Argon at Low Incident Energies // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 1996. V. 29. P. 3177.
20. *Ликальтер А.А.* Поляризуемость атомов металлов // ТВТ. 1985. Т. 23. № 6. С. 1033.
21. *Павлов П.В., Хохлов А.Ф.* Физика твердого тела. М.: Высшая школа, 2000. 494 с.
22. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Квантовая механика. М.: Наука, 1989. 767 с.
23. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Механика. М.: Наука, 1988. 215 с.
24. *Carlson T.A., Nestor C.W., Wasserman Jr.N., McDowell J.D.* Calculated Ionization Potentials for Multiply Charged Ions // At. Data. 1970. V. 2. P. 63.
25. *Brode R.B.* The Absorption Coefficient for Slow Electrons in Cadmium and Zinc Vapors // Phys. Rev. 1930. V. 35. P. 504.
26. *Visconti P.J., Slevin J.A., Rubin K.* Absolute Total Cross Sections for the Scattering of Low-energy Electrons by Rubidium, Cesium, and Potassium // Phys. Rev. 1971. V. 3A. P. 1310.
27. *Crown J.C., Russek A.* Electron-alkali-atom Interaction Potential and Elastic-scattering Cross Section // Phys. Rev. 1965. V. 138. P. A669.
28. *Burke P.G., Mitchell J.F.* Low Energy Scattering of Electrons by Cesium Atoms // J. Phys. B: At. Mol. Phys. 1973. V. 6. P. L161.