01;02

# Потенциально-резонансные характеристики процесса упругого рассеяния медленных электронов атомами кальция

© Е.Ю. Ремета

Институт электронной физики НАН Украины,
88017 Ужгород, Украина
e-mail: remeta@iep.uzhgorod.ua

(Поступило в Редакцию 29 марта 2005 г. В окончательной редакции 18 октября 2005 г.)

Предложено и проанализировано потенциально-резонансное описание характеристик упругого рассеяния электронов атомными системами в терминах энергетической зависимости сечения интегрального типа $S(E)$, получаемой с использованием гипоциклоидального электронного спектрометра. На примере рассеяния медленных, до 2 eV, электронов атомами кальция, рассматривается проявление $^2D$-резонанса формы на поведение $S(E)$. Особенности, минимум и максимум, экспериментальной функции $S(E)$ использованы для определения энергии и ширины резонанса. Из экспериментальной энергетической зависимости $S(E)$ также определены дифференциальные сечения рассеяния электронов. При этом использованы два типа углов рассеяния, несколько отличающиеся по величине. Восстановленные из экспериментальных данных дифференциальные сечения качественно совпадают с теоретическими и несколько меньше их по величине.

PACS: 03.65.Nr, 61.14.-x

## Введение

Динамическая структура полных и дифференциальных сечений — следствие интерференции амплитуд двух путей протекания соответствующих процессов: прямого и непрямого. В качестве непрямого пути зачастую выступает резонансный процесс, проходящий через возбуждение или образование некоего состояния налетающего электрона и атомной системы-мишени. Например, при фотоионизации и электроионизации атомов возбуждаются автоионизационные состояния (АИС), при упругом рассеянии или возбуждении атомов электронами образуется состояние отрицательного иона — резонанс формы (резонанс Фано) или Фешбаха.

В обзоре [1] дано подробное описание резонансных особенностей процессов столкновения частиц и фотонов с квантовыми системами при использовании разных теоретических схем. В частности, кратко упоминается теория Фано [2], рассматривающая влияние АИС на характеристики резонансного рассеяния, и формула для сечений, выраженная через параметры резонансного профиля сечений, так называемый индекс профиля $q_l(E)$ и приведенную ширину резонанса $\varepsilon_l(E)$ в $l$-й парциальной волне. В [1] детально анализируется проявление интерференции амплитуд при рассеянии различных частиц атомными мишенями. При этом формула для дифференциальных сечений выражена в удобном виде через амплитудные функции $A_l(E,\theta)$ и $B_l(E,\theta)$, которые описывают резонансную структуру сечений. В кратком сообщении [3] такой вид сечений было предложено использовать для нахождения радиальных матричных элементов, фаз рассеяния и резонансных параметров $q_l(E)$, $\varepsilon_l(E)$ из экспериментальных измерений дифференциальных сечений для некоторых углов и энергий процесса ионизации глубоких оболочек атомов (резонансный Оже-эффект) электронами. В работе [4] для этого же процесса в борновском приближении получены выражения двойных дифференциальных сечений для рассеянных или испущенных электронов в виде [1,2]. На примере ионизации атома гелия электронами в [4] определены характеристики АИС и параметры резонансного профиля по экспериментальным данным.

Работы [1,3,4] посвящены, в основном, большим энергиям столкновения, когда необходимо учитывать много парциальных волн. В нашем же случае упругого низкоэнергетического рассеяния электронов необходимое число волн существенно ограничено, например до пяти, поэтому проявление резонанса в какой-либо волне может быть весьма большим.

При упругом рассеянии медленных электронов атомами указанными выше двумя путями протекания процесса являются потенциальное и резонансное рассеяние, идущее через образование резонанса формы (для волн с $l \neq 0$). Это так называемое потенциально-резонансное рассеяние [5]. Амплитуда рассеяния состоит из двух амплитуд — потенциальной и резонансной, а сечения также можно представить в виде [1,4–6]. Заметим также, что при упругом рассеянии электронов положительными ионами кроме резонансов формы возможны резонансы (Фешбаха), обязанные возбуждению АИС, — захват рассеиваемого электрона возбужденной конфигурацией иона [2,4,7]. Нами в данной работе упругое взаимодействие медленных электронов с атомами изучается посредством их рассеяния в неполный интервал углов [8–10], задача рассматривается и формулируется как потенциально-резонансное рассеяние.

Общей экспериментальной и теоретической проблемой при упругом рассеянии медленных (несколько электронвольт) электронов атомными системами остается качественное и количественное исследование особенностей их потенциального взаимодействия с атомами, молекулами, кластерами и их ионами. Трудности измерений на этом пути частично позволяет решить, например, использование гипоциклоидального электронного спектрометра, ГЭС [8–10]. Также необходимо адекватное описание различных составляющих потенциального взаимодействия [5,7,11,12], в первую очередь это касается поляризационного потенциала, особенно для атомных систем с большой поляризуемостью. Большое значение также имеет хороший учет обменного взаимодействия и поглощения.

Исследование упругого рассеяния медленных электронов атомами металлов, имеющими большую (от полутора до четырех сотен атомных единиц) величину дипольной поляризуемости имеет значительное научное и практическое значение и остается достаточно важной научной задачей. Трудным при таких значениях энергии является измерение не только полных, но и тем более дифференциальных сечений. Например, в [8,9] только с помощью энергетической зависимости сечения интегрального типа $S(E)$ можно было представить и рассмотреть результаты экспериментального исследования упругого рассеяния медленных, до 2 eV, электронов атомами Ca. Численная теоретическая интерпретация этого эксперимента впервые дана в [9,13,14], а аналитическая, на основе формул, проведена в [10,15–17]. Важна также возможность объяснения различных особенностей рассеяния при проведении в дальнейшем более тонких экспериментов с медленными электронами, например, при исследовании эффектов спиновой поляризации. Для более глубокого теоретического анализа используют составные части функции $S(E)$ — резонансную и нерезонансную (потенциальную), прямую и интерференционную. Нами, в данной работе, используя экспериментальную функцию $S(E)$ также оценивается величина дифференциального сечения рассеяния медленных электронов атомами кальция.

В [8–10] рассмотрен принцип работы ГЭС и представлен теоретический формализм, применяемый для анализа энергетической зависимости $S(E)$, получаемой в экспериментах с таким спектрометром. Этот формализм можно использовать для изучения резонансных особенностей потенциального рассеяния [5] медленных электронов. Для этого функцию $S(E)$ необходимо представить в виде потенциального и резонансного слагаемых. Такое потенциально-резонансное представление этой функции дополняет ее описание в [10], где использованы прямые и интерференционные, резонансные и нерезонансные слагаемые.

Заметим, что в [10] был также проведен общий анализ проявления на $S(E)$ одного резонанса формы. Весьма важным в дальнейшем, особенно в прикладном аспекте, является аналогичный анализ упомянутого выше процесса упругого рассеяния электронов на положительных ионах, когда возникает большое количество резонансов Фешбаха, обязанных автоионизационным состояниям атома мишени [7,12,18]. Именно энергетическая зависимость дифференциальных сечений этого процесса достаточно ярко представляет такие резонансы [7].

## Потенциально-резонансное описание рассеяния

В [6] было предложено потенциально-резонансное описание чисто упругого рассеяния (без поглощения) для рассмотрения полных и дифференциальных сечений с целью исследования интерференции между резонансным и потенциальным видами. Рассматривалась также возможность использования экспериментального поведения сечений для определения характеристик резонанса.

При наличии резонанса, с энергией $E_l^r$ и шириной $\Gamma_l$, в $l$-й парциальной волне, дифференциальное сечение представляют [6] в виде потенциального $d\sigma^{\text{pot}}/d\Omega$ и структурного $d\sigma_l/d\Omega$, ответственного за резонансное проявление, слагаемых (деленных на $4\pi/2E$) [4]:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{d\sigma^{\text{pot}}}{d\Omega} + \frac{d\sigma_l}{d\Omega}. \tag{1}$$

В потенциальной части суммирование ведется только по потенциальным парциальным фазам

$$\frac{d\sigma^{\text{pot}}}{d\Omega} = \frac{1}{4\pi}\sum_{s,t}(2s+1)(2t+1)\sin\delta_s\sin\delta_t \times \cos(\delta_s-\delta_t)P_s^0(\cos\theta)P_t^0(\cos\theta). \tag{2}$$

Фаза резонансной волны $\delta_l(E) = \delta_l^0(E) + \delta_l^r(E)$ состоит из фонового или, иначе, потенциального, $\delta_l^0(E)$ и резонансного $\delta_l^r(E)$ фазовых сдвигов [5]. Заметим, что в случае нескольких резонансов в данной парциальной волне по соответствующим им фазам $\delta_l^r(E)$ следует вести суммирование [5].

Структурную часть в (1) получают, используя резонансный фазовый сдвиг $\delta_l^r(E) = \operatorname{arctg}[(\Gamma_l/2)/(E_l^r - E)]$ [5]. Она имеет вид [6] (см. также [1,3,4])

$$\frac{d\sigma_l}{d\Omega} = \frac{\Gamma_l}{2}\,\frac{A_l(E,\theta)(E-E_l^r) + B_l(E,\theta)\Gamma_l/2}{(E-E_l^r)^2 + \Gamma_l^2/4}. \tag{3}$$

Функции $A_l(E,\theta)$ и $B_l(E,\theta)$ зависят от энергии столкновения $E$ (через фазы рассеяния $\delta_i(E)$), угла рассеяния $\theta$ (через полиномы Лежандра $P_i^0(\cos\theta)$) и являются антисимметричной и симметричной амплитудами соответственно. Заметим, что в структурной части полного сечения ($2E/4\pi\sigma_l(E)$ типа (3)) амплитуды зависят только от энергии $E$ [6]

$$A_l(E) = -(2l+1)\sin 2\delta_l^0,$$
$$B_l(E) = (2l+1)\cos 2\delta_l^0. \tag{4}$$

Переходя к использованию энергетической зависимости сечения интегрального типа $S(E)$ для потенциально-резонансного описания упругого рассеяния [19], напомним, что эта функция связана с дифференциальным сечением рассеяния $d\sigma/d\theta$ [9,10,13,14]

$$S(E) = 2\pi\int\limits_{\theta_1(E)}^{\theta_2(E)}\frac{d\sigma}{d\theta}\,\sin\theta d\theta,$$

$$\theta_{1,2}(E) = \arcsin\sqrt{\frac{a_{1,2}}{E}}. \tag{5}$$

Ток электронов, упруго рассеянных в интервал углов $[\theta_1(E), \theta_2(E)]$, при работе ГЭС в режиме энергетической зависимости, пропорционален функции $S(E)$ [8–10,13,14].

Аналогично выражению (1) имеем для $S(E)$

$$S(E) = S^{\text{pot}}(E) + S_l^r(E), \tag{6}$$

где, см. (2) и (3),

$$S^{\text{pot}}(E) = \frac{1}{2\pi} \sum_{s,t} \sqrt{(2s+1)(2t+1)} \sin\delta_s \sin\delta_t \times \cos(\delta_s - \delta_t) Q_{st}^{00}(E), \tag{7}$$

$$S_l^r(E) = \frac{\Gamma_l}{2} \frac{\bar{A}_l(E)(E - E_l^r) + \bar{B}_l(E)\Gamma_l/2}{(E - E_l^r)^2 + \Gamma_l^2/4}. \tag{8}$$

Из (8) видно, что при $E = E_l^r$ резонансная часть $S_l^r = \bar{B}_l(E_l^r)$. Функции $\bar{A}_l(E)$ и $\bar{B}_l(E)$ в (8) связаны с амплитудами $A_l(E, \theta)$, $B_l(E, \theta)$ из (3)

$$\bar{A}_l(E) = \int_{\theta_1}^{\theta_2} d\theta \sin\theta A_l(E, \theta) = -\frac{\sqrt{2l+1}}{4\pi} \Big[\sqrt{2l+1} \sin 2\delta_l^0 Q_{ll}^{00}(E) + 2\sum_{s \neq l} \sqrt{2s+1} \sin\delta_s \cos(2\delta_l^0 - \delta_s) Q_{sl}^{00}(E)\Big], \tag{9}$$

$$\bar{B}_l(E) = \int_{\theta_1}^{\theta_2} d\theta \sin\theta B_l(E, \theta) = \frac{\sqrt{2l+1}}{4\pi} \Big[\sqrt{2l+1} \cos 2\delta_l^0 Q_{ll}^{00}(E) - 2\sum_{s \neq l} \sqrt{2s+1} \sin\delta_s \sin(2\delta_l^0 - \delta_s) Q_{sl}^{00}(E)\Big]. \tag{10}$$

Функции $Q_{kt}^{00}(E)$, используемые в (7)–(10), являются интегралами по интервалу углов $[\theta_1(E), \theta_2(E)]$ от полиномов Лежандра [10]. Для полного интервала $[0, \pi]$, когда функции $Q_{kt}^{00} = 1$ для $k = t$ и $Q_{kt}^{00} = 0$ для $k \neq t$ [10], формулы (5)–(10) совпадают с соответствующими известными выражениями для полных сечений [6]. При рассеянии на угол $\theta$ интегрирование по нему не проводится, и выражения (5)–(10) определяют дифференциальные характеристики (1)–(3) процесса [6].

Альтернативным аналитическим видом для $S(E)$ (и соответственно $S_l^r(E)$, см. (6)) будет их выражение через приведенную ширину $\varepsilon_l(E) = -\operatorname{ctg}\delta_l^r(E)$

$$S(E) = S^{\text{pot}}(E) + \frac{\bar{A}_l(E)\varepsilon_l + \bar{B}_l(E)}{1 + \varepsilon_l^2}. \tag{11}$$

Если функция $\bar{A}_l(E)$ не равна нулю, тогда, введя функцию, подобную индексу профиля линии для полных сечений $q_l(E) = -\operatorname{ctg}\delta_l^0(E)$ [6,10] (для дифференциальных сечений ее вводят через амплитуды $A_l(E, \theta)$ и $B_l(E, \theta)$ $q_l(E, \theta) = A_l^{-1}\big(B_l + \sqrt{B_l^2 + A_l^2}\big)$),

$$q_l(E) = \bar{A}_l^{-1}\Big(\bar{B}_l + \sqrt{\bar{B}_l^2 + \bar{A}_l^2}\Big), \tag{12}$$

получаем для $S(E)$ (и $S_l^r(E)$, см. (6))

$$S(E) = S^{\text{pot}}(E) + S_l^{\text{pot}}(E)\left[\frac{(q_l + \varepsilon_l)^2}{1 + \varepsilon_l^2} - 1\right]. \tag{13}$$

Величина $S_l^{\text{pot}}(E)$ — потенциальная часть энергетической зависимости (7) только для одной, $l$-й резонансной парциальной волны

$$S_l^{\text{pot}}(E) = \frac{2l+1}{2\pi} \sin^2\delta_l^0 Q_{ll}^{00}(E) + \frac{\sqrt{2l+1}}{2\pi} \sum_{t \neq l} \sqrt{2t+1} \sin\delta_l^0 \sin\delta_t \cos\big(\delta_l^0 - \delta_t\big) Q_{lt}^{00}(E). \tag{14}$$

Между величинами $\bar{A}_l(E)$, $\bar{B}_l(E)$, $q_l$ и $S_l^{\text{pot}}(E)$ имеется следующее соотношение

$$\bar{A}_l(E) = 2q_l S_l^{\text{pot}}(E), \quad \bar{B}_l(E) = (q_l^2 - 1)S_l^{\text{pot}}(E). \tag{15}$$

В [6] было показано (используя формулы (3) и (4), но для полных сечений), что, если $\delta_l^0(E) = 0$, то резонанс в полном сечении будет проявляться в виде симметричного максимума; если же $\delta_l^0(E) = \pi/2$, то будет наблюдаться симметричный минимум. Для дифференциальных сечений при любых значениях фазы $\delta_l^0(E)$ резонанс будет проявляться в виде минимума и максимума одновременно, поскольку при $\delta_l^0(E) = 0$, $\pi/2$, так называемый прямой член в амплитуде $A_l(E, \theta)$ равен нулю, однако интерференционный не равен нулю. Аналогичная ситуация и для используемых нами энергетических зависимостей $S(E)$: резонанс также должен проявляться в виде двух экстремумов — минимума и максимума, благодаря слагаемому $S_l^r(E)$ (8) в (6).

Исходя из (13) и считая, что $S^{\text{pot}}(E)$ и $S_l^{\text{pot}}(E)$ слабо зависят от энергии в области резонанса, получаем для энергий максимума $E_1$ и минимума $E_2$ выражения

$$E_{1,2} = E_l^r + \frac{\Gamma_l}{2} \frac{-\big[q_l^2 - 1 - q_l' \frac{\Gamma_l}{2}\big] \pm \sqrt{\big[q_l^2 - 1 - q_l' \frac{\Gamma_l}{2}\big]^2 + 4q_l^2\big(1 - q_l'^2 \frac{\Gamma_l^2}{4}\big)}}{2\big(1 - q_l' \frac{\Gamma_l}{2}\big) q_l}, \tag{16}$$

где $q_l' = dq_l/dE$. Отсюда следует, что

$$(E_1 - E_l^r)(E_2 - E_l^r) = -\frac{\Gamma_l^2}{4} \frac{1 + q_l'\Gamma_l/2}{1 - q_l'\Gamma_l/2}. \tag{17}$$

Из (17) видно, что резонанс расположен между минимумом и максимумом энергетической зависимости. Более того, можно сделать следующий вывод: так как функция $q_l(E)$ связана с амплитудами $\bar{A}_l(E)$ и $\bar{B}_l(E)$, согласно (12) или (15), которые, в свою очередь связаны с функциями $Q^{00}_{ij}(E)$ [10] и через них с углами $\theta_{1,2}(E)$ (а значит, и с константами $a_{1,2}$ в (5), характеризующими экспериментальную установку), то именно положение и проявление этих экстремумов — а не положение резонанса или резонансов рассеяния — определяются экспериментальными условиями.

Считая, что $q'_l \approx 0$, т. е. индекс профиля линии $q_l$ (12) не зависит от энергии (является почти постоянной величиной) в области резонанса, получаем для приведенных ширин при энергиях минимума, средней и максимума: $\varepsilon_l(E_2) = -q_l$, $\varepsilon_l\big((E_1+E_2)/2\big) = (1-q_l^2)/2q_l$, $\varepsilon_l(E_1) = 1/q_l$ соответственно. Используя эти значения в квадратной скобке (13) (которая равна $-1$, 0 и $q_l^2$ соответственно указанным энергиям) получаем

$$S_1(E_1) \equiv S_1 = \frac{4\pi}{2E_1}\left(\bar{S}^{\text{pot}} + q_l^2 \bar{S}_l^{\text{pot}}\right),$$

$$S_2(E_2) \equiv S_2 = \frac{4\pi}{2E_2}\left(\bar{S}^{\text{pot}} - \bar{S}_l^{\text{pot}}\right), \tag{18}$$

$$S_{1/2}\big((E_1+E_2)/2\big) \equiv S_{1/2} = \frac{4\pi}{E_1+E_2}\,\bar{S}^{\text{pot}}. \tag{19}$$

Ширину $\Gamma_l$ и энергию $E_l^r$ резонанса можно найти, используя экспериментальные значения энергий $E_{1,2}$ и величину $q_l$ (см. также Дополнение A в [1]),

$$\frac{\Gamma_l}{2} = \frac{q_l}{1+q_l^2}\,(E_1 - E_2), \tag{20}$$

$$E_l^r = (E_1 q_l^2 + E_2)/(1+q_l^2). \tag{21}$$

Индекс профиля линии $q_l$ находим по экспериментальным значениям $S_{1,2}$ и $S_{1/2}$ (18), (19) из выражения

$$q_l = \sqrt{\frac{2E_1S_1 - (E_1+E_2)S_{1/2}}{(E_1+E_2)S_{1/2} - 2E_2S_2}}, \tag{22}$$

а $S^{\text{pot}} = S_{1/2}$ и $S_l^{\text{pot}} = (E_1+E_2)S_{1/2}/(2E_2) - S_2$. Из (22) видно, что можно использовать даже относительные экспериментальные значения функции $S(E)$, что повышает достоверность при определении величины $q_l$.

## Определение характеристик резонанса и дифференциального сечения

При использовании экспериментальной энергетической зависимости $S^e(E)$ для упругого рассеяния медленных (0.6–2.0 eV) электронов атомами кальция нами были взяты значения констант $a_1 = 0.482$ и $a_2 = 0.508$ eV, соответствующие эксперименту [8,9], см. также [10,13,14]. Эта функция была нормирована на теоретическое значение при 1.3 eV. Угловой аксептанс анализатора, задаваемый углами $\theta_1(E)$ и $\theta_2(E)$, изменяется от 76.9–90° (для $E = 0.508$ eV) до 29.4–30.3° ($E = 2.0$ eV). Метод вычисления парциальных фазовых сдвигов и характеристик резонансов упругого рассеяния (без учета эффектов поглощения), выбор приближений и обсуждение модельного оптического потенциала, необходимые для нахождения дифференциальных сечений, представлены в [9,13,14]. Проведенные в [9,10,13,14] с помощью более двухсот волн расчеты показали, что особенности, в виде минимума и максимума, измеренной функции $S^e(E)$ определяются $^2D$-резонансом формы (парциальная волна $l = 2$) с энергией $E_2^r = 0.87$ eV и шириной $\Gamma_2 = 0.98$ eV. Минимум функции $S(E)$, при энергии $\sim 0.8$ eV, обязан подавлению вклада $d$-волны — при этой энергии в интервале $[\theta_1, \theta_2]$ содержится угол 54.7°, для которого $P_2^0(\cos\theta) = 0$. Таким образом, наличие заметного минимума $S^e(E)$ и нуля соответствующего полинома позволяет судить о возможном резонансе в данной парциальной волне.

Ниже мы используем теоретические значения $S^t(E)$, полученные с использованием первых пяти ($l = 0$–4) фаз рассеяния из [9,13,14].

Характеристики $^2D$-резонанса

Используя формулы (6)–(8) или (11) и (13) фиттированием (аппроксимацией) экспериментальной энергетической зависимости сечения интегрального типа $S^e(E)$ нетрудно определить величины $E_l^r$, $\Gamma_l$ и функции $\varepsilon_l(E)$, $q_l(E)$, $S_l^{\text{pot}}(E)$. По экспериментальным $S^e(E)$ и $d\sigma/d\theta$ при помощи этой же процедуры аппроксимации, однако с большими усилиями, можно определить фазы рассеяния.

Анализируя (20) и (21), видим, что при $q_l < 1$ энергия резонанса $E_l^r \approx E_2$, а его ширина $\Gamma_l \approx \approx 2(E_1 - E_2)q_l < 2(E_1 - E_2)$. При $q_l > 1$: $E_l^r \approx E_1$ и $\Gamma_l \approx (E_1 - E_2)/q_l < E_1 - E_2$. Если $q_l = 1$, то $E_l^r \approx (E_1 + E_2)/2$ и $\Gamma_l \approx E_1 - E_2$. Таким образом, при наших допущениях, максимальная величина энергии резонанса равна энергии максимума функции $S^e(E)$, а максимальное значение ширины резонанса равно разности энергий $E_1 - E_2$. При этом эти значения достигаются в разных приближениях по $q_l$.

Формулы (18), (19), (20)–(22) применим для оценки величин $q_l$, $E_l^r$, $\Gamma_l$, $S^{\text{pot}}$, $S_l^{\text{pot}}$, характеризующих рассеяние медленных электронов атомами кальция [8–10,13,14]. Экспериментальные значения энергий минимума, максимума и средней равны соответственно: $E_2 = 0.8$, $E_1 = 1.2$ и $E_{1/2} = 1.0$ eV. Величина экспериментальной функции $S^e(E)$ при этих энергиях составляет: $S_2 = 3.04$, $S_1 = 4.01$, $S_{1/2} = 3.35$ a.u. Заметим, что соответствующие теоретические значения [10] минимума $S_2(0.82\,\text{eV}) = 3.42$, максимума $S_1(1.15\,\text{eV}) = 4.06$ и при средней энергии $S_{1/2}(0.985\,\text{eV}) = 3.83$ a.u. Из экспериментальных данных получаем для индекса профиля линии $q_l = 1.262$. Это дает $E_l^r = 1.05$, $\Gamma_l = 0.39$ eV, $S^{\text{pot}} = 3.35$, $S_l^{\text{pot}} = 1.15$ a.u. Из соответствующих теоретических величин [10] для $S^t(E)$ имеем следующие значения: $q_l = 0.962$, $E_l^r = 0.979$, $\Gamma_l = 0.330$ eV, $S^{\text{pot}} = 3.83$, $S_l^{\text{pot}} = 1.18$ a.u. Оценки аналогичных значений энергий и значений $S^t(E)$, определенные достаточно грубо по ее графическому поведению из работ [9,13,14], следующие: $S_2(0.8\,\text{eV}) \cong 2.85$, Полное сечение упругого рассеяния электронов $\sigma$, a.u. Экспериментальная $S^e(E)$ и теоретическая $S^t(E)$ энергетические зависимости сечений интегрального типа, a.u. Значения средних углов $\bar{\theta}^1$ и $\bar{\theta}^2$ рассеяния двух типов, deg. Теоретическое $dcs^t(E,\theta)$ и восстановленное $dcs^e(E,\theta)$ (из $S^e(E)$, $a_1 = 0.482$, $a_2 = 0.508$ eV) дифференциальные сечения, a.u., упругого рассеяния электронов атомами кальция.

| $E$, eV | $\sigma$ | $S^e$ | $S^t$ | $\bar{\theta}^1$ | $\bar{\theta}^2$ | $dcs^t(\bar{\theta}^1)$ | $dcs^t(\bar{\theta}^2)$ | $dcs^e(\bar{\theta}^1)$ | $dcs^e(\bar{\theta}^2)$ |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 0.5 | 938.2 | – | – | – | – | – | – | – | – |
| 0.508 | – | – | – | 83.46 | – | – | – | – | – |
| 0.51 | 945.4 | – | 11.81 | 81.43 | – | 68.61 | – | – | – |
| 0.6 | 1022.8 | 4.29 | 5.67 | 65.31 | 63.67 | 107.34 | 110.30 | 82.74 | 83.87 |
| 0.7 | 1132.6 | 3.42 | 3.98 | 57.25 | 56.08 | 112.73 | 115.40 | 99.57 | 100.91 |
| 0.8 | 1246.7 | 3.04 | 3.42 | 51.87 | 50.91 | 126.11 | 131.19 | 115.33 | 116.88 |
| 0.9 | 1330.3 | 3.14 | 3.52 | 47.87 | 47.26 | 159.42 | 165.23 | 145.90 | 147.57 |
| 1.0 | 1357.5 | 3.35 | 3.83 | 44.72 | 44.30 | 205.54 | 211.20 | 183.09 | 184.45 |
| 1.1 | 1327.7 | 3.91 | 4.04 | 42.13 | 41.79 | 249.81 | 255.31 | 245.56 | 247.19 |
| 1.2 | 1259.8 | 4.01 | 4.03 | 39.96 | 39.67 | 282.07 | 287.11 | 283.92 | 285.65 |
| 1.3 | 1174.8 | 3.84 | 3.84 | 38.10 | 37.86 | 299.96 | 304.09 | 302.18 | 303.80 |
| 1.4 | 1087.2 | 3.35 | 3.54 | 36.48 | 36.31 | 305.66 | 308.41 | 290.03 | 292.02 |
| 1.5 | 1003.8 | 2.72 | 3.20 | 35.06 | 35.01 | 302.52 | 303.27 | 255.94 | 256.26 |
| 1.6 | 927.3 | 2.23 | 2.86 | 33.79 | 33.93 | 293.50 | 291.66 | 228.13 | 226.64 |
| 1.7 | 858.3 | 1.74 | 2.53 | 32.66 | 33.09 | 280.82 | 275.42 | 190.48 | 188.25 |
| 1.8 | 796.3 | 1.39 | 2.22 | 31.63 | 32.08 | 266.14 | 260.95 | 163.32 | 161.24 |
| 1.9 | 741.1 | 1.08 | 1.95 | 30.69 | – | 250.65 | – | 134.71 | 136.52 |
| 2.0 | 691.8 | 0.94 | 1.71 | 29.83 | 29.40 | 235.24 | 159.73 | 125.90 | 127.57 |

$S_1(1.1\,\text{eV}) \cong 4.0$, $S_{1/2}(0.95\,\text{eV}) \cong 3.28$ a.u. С их помощью получаем: $q_l = 1.239$, $E_l^r = 0.982$, $\Gamma_l = 0.293$ eV, $S^{\text{pot}} = 3.28$, $S_l^{\text{pot}} = 1.05$ a.u.

Если индекс профиля линии $q_l$ линейно ($\bar{q}_l = q_l + bE$) зависит от энергии в области резонанса, тогда для $b < 1$ $\bar{\varepsilon}_l(E) \cong \varepsilon_l(E)(1 + b\bar{\Gamma}_l/2 - bE/q_l)$. В этом случае энергия резонанса увеличивается (при $b > 0$) на величину $(E_1 - E_2)b\bar{\Gamma}_l/2(1+q_l^2)$, а ширина примерно равна

$$\bar{\Gamma}_l \cong \Gamma_l + b\left(\frac{E_1 + q_l^2 E_2}{q_l(1+q_l^2)} - \frac{\Gamma_l}{2}\right)\Gamma_l.$$

Оценки показывают, что добавка к ширине резонанса хотя и мала, но значительно, в несколько раз, больше, чем добавка к его энергии. Это также означает, что в области резонанса индекс профиля линии должен расти с увеличением энергии столкновения, по крайней мере линейно.

Как видим, все результаты весьма удовлетворительно соотносятся между собой. Они также свидетельствуют о том, что ширина резонанса наиболее чувствительна к сделанным при выводе формул приближениям. Также важна энергетическая зависимость индекса профиля линии $q_l(E)$ и потенциальных составляющих рассеяния $S^{\text{pot}}(E)$, $S_l^{\text{pot}}(E)$ в области резонанса.

### Дифференциальные сечения

Энергетическая зависимость $S^e(E)$ (5) может быть использована для получения дифференциального сечения рассеяния [20]. Применяя формулу для среднего значения интеграла в (5), имеем

$$\left.\frac{d\sigma}{d\theta}\right|_{\bar{\theta}} = \frac{S^e(E)/2\pi}{\sin\bar{\theta}(\theta_2 - \theta_1)}. \qquad (23)$$

Если интервал углов $\Delta\theta = \theta_2 - \theta_1 \to 0$, то средний угол рассеяния $\bar{\theta}$ стремится к некоторому значению $\theta$. Отсюда следует, что при малых интервалах углов, которые задаются методикой с использованием ГЭС, можно достаточно точно определить по функции $S^e(E)$ дифференциальное сечение рассеяния.

Вычисление энергетической зависимости $S^t(E)$, дифференциального сечения $d\sigma^t(\theta, E)/d\theta$ (обозначение $dcs^t$ в таблице) и полного сечения $\sigma(E)$ проведены нами с учетом первых пяти парциальных волн [10]. В таблице приведены полное сечение и средние углы рассеяния двух типов, значения вычисленного по экспериментальной энергетической зависимости $S^e(E)$, нормированной на теоретическое значение $S^t(1.3\,\text{eV})$, энергетической зависимости дифференциальных сечений $2\pi d\sigma/d\theta|_{\bar{\theta}}$ (обозначение $dcs^e$) для этих средних углов [20].

Средний угол 1-го типа, $\bar{\theta}^1(E)$, находим по формуле среднего арифметического $\bar{\theta}^1(E) = \left[\theta_1(E) + \theta_2(E)\right]/2$. Средний угол 2-го типа, $\bar{\theta}^2(E)$, находим из совпадения теоретического дифференциального сечения $d\sigma^t/d\theta$ с тем значением, которое находят по (23). Для достижения совпадения используем условие

$$0.001 < S^t(E)/\left\{\left[(\theta_2 - \theta_1)\sin\bar{\theta}^2 d\sigma^t/d\theta|_{\bar{\theta}^2}\right] - 1\right\} < C,$$

с шагом по углу в интервале $\left[\theta_1(E), \theta_2(E)\right]$, равным 0.0001 rad, а число $C = 0.0013$ для энергий электронов $E = 1.3{-}1.7$ и 0.45 для 2.0 eV. Из таблицы видно, что угол рассеяния 2-го типа несколько меньше угла 1-го типа. По нашему мнению, угол $\bar{\theta}^2(E)$ более соответствует истинному углу рассеяния.

Функция $S(E)$ имеет черты полного и дифференциального сечений (см. соответствующий рисунок в [10]). Восстановленные дифференциальные сечения подобны теоретическим, вычисленным по углам $\bar{\theta}^{1,2}(E)$. В условиях эксперимента [8,9] и с учетом особенностей резонансного взаимодействия медленных электронов с атомами кальция [13,14], функции $S^{e,t}(E)$ более близки к полному сечению, хотя и несколько искаженному при начальных энергиях. Форма $S^{e,t}(E)$ качественно совпадает с поведением полного сечения при энергиях выше 1.3 eV. В области минимума $S^{e,t}(E)$, при $0.7 < E < 0.8$ eV, имеется минимум дифференциального сечения, потому что при этих энергиях интервал $[\theta_1, \theta_2]$ содержит угол $54.7°$ (при котором полином $P_2^0(\cos\theta) = 0$ и вклад парциальной $d$-волны минимален). Таким образом, $^2D$-резонанс формы на энергетической зависимости дифференциального сечения, в представленном в таблице виде (каждой энергии соответствует определенный угол рассеяния) проявляется именно в переходе от минимума к максимуму. По-видимому, таким должно быть проявление любого резонанса и тем заметнее, чем больше вклад соответствующей парциальной волны. Максимум полного сечения $\sigma(0.98\,\text{eV}) = 1357.5$ a.u. (при этом максимум $d$-парциального сечения равен 766.9 a.u. при 1.04 eV, а $s$-, $p$-, $f$-, $g$-парциальные сечения при этих энергиях примерно равны 150, 403, 25, 5 a.u. соответственно) расположен между минимумом (при $\sim 0.8$ eV) и максимумом (при $\sim 1.2$ eV) функций $S^{e,t}(E)$. Это свидетельствует о том, что указанный $^2D$-резонанс рассеяния также находится между этими особенностями энергетической зависимости. Заметим, что минимум $S(E)$ обязан минимальному значенияю ее резонансной части, а максимум связан с ростом этой части до ее максимального значения при 1.27 eV [10]. Максимум дифференциального сечения смещен в область больших энергий по сравнению с максимумами функций $S^{e,t}(E)$. Очевидно то, что величины этих трех характеристик рассеяния существенно отличаются. Некоторое различие в дифференциальных сечениях при энергиях более 1.2 eV можно, по-видимому, объяснить достаточно сильной зависимостью величины теоретического сечения от угла рассеяния (см. в таблице $dcs^t(\bar{\theta}^2)$, которое быстрее, чем $dcs^t(\bar{\theta}^1)$, спадает с ростом энергии), а также недостаточным учетом в теоретическом дифференциальном сечении высших ($l > 5$) парциальных волн. При этом величина восстановленных экспериментальных сечений слабее, чем сечений теоретических, зависит от типа среднего угла.

Следует отметить, что в теоретических работах [21,22] функции $S^{e,t}(E)$, вычисленные и измеренные в [8,9,13,14], необоснованно, по-нашему мнению, считались совпадающими с полным сечением. В [21,22] экспериментальная $S^e(E)$ была отнормирована на вычисленное в этих же работах значение полного сечения. Она не рассматривалась как новая, достаточно независимая и дополнительная экспериментальная характеристика, связанная с новейшими методиками, которые используют ГЭС [10,17]. Расчеты в [21] проводили в приближении связанных каналов для шести $S, P, D$ синглетных и триплетных состояний атома Ca в рамках $R$-матричного метода. В работе [22], также в рамках $R$-матричного метода, для более точного описания взаимодействия налетающего электрона с атомом учитывалось корреляционное взаимодействие между остовом и валентными электронами для пяти состояний Ca (трех синглетных $S, P, D$ и двух триплетных $P, D$). При этом в [21] вычисленная энергия $^2D$-резонанса была равна 1.2 eV, а в [22] без учета корреляций — 1.1, а с учетом — 1.3 eV. Как видим, эти значения энергии резонанса больше, чем приведенные выше величины, найденные по функции $S(E)$ и в [13,14], и достаточно чувствительны к качеству потенциалов взаимодействия.

## Заключение

Предложен формализм потенциально-резонансного описания процесса упругого рассеяния медленных электронов атомными системами на основе энергетической зависимости сечения интегрального типа $S(E)$, получаемой в относительных измерениях с использованием гипоциклоидального электронного спектрометра, работающего в режиме энергетической зависимости. По особенностям (минимум и максимум) экспериментальной функции $S(E)$, которые определяются резонансным рассеянием медленных электронов атомами кальция, достаточно достоверно найдена энергия и удовлетворительно оценена ширина $^2D$-резонанса формы. Также определен ряд величин, характеризующих потенциальные и резонансные черты упругого рассеяния медленных электронов.

Энергетическая зависимость сечения интегрального типа использована также для определения абсолютной величины дифференциального сечения указанного процесса рассеяния медленных, с энергией до 2 eV, электронов. Набор энергетических зависимостей, полученных при измерениях в различные угловые интервалы, позволит более детально определить угловое и энергетическое поведение дифференциальных сечений рассеяния. Особенности энергетического поведения восстановленного таким образом сечения позволяют судить о резонансном характере рассеяния.

Выражаем благодарность О.Б. Шпенику, В.И. Келемену, А.В. Снегурскому, Н.И. Романюку, В.М. Фейеру и Ю.Ю. Билаку за плодотворное обсуждение результатов и помощь в работе.

Работа выполнена при частичном финансировании по гранту INTAS № 03-51-4706.

## Список литературы

[1] *Shore B.W.* // Rev. Mod. Phys. 1967. Vol. 39. N 2. P. 439–462.
[2] *Fano U.* // Phys. Rev. 1961. Vol. 124. P. 1866–1878.
[3] *Ogurtsov G.N.* // Proc. IX Int. Conf. On the Physics of Electronic and Atomic Collisions (ICPEAC). Seattle (USA), 1975. P. 771.
[4] *Балашов В.В., Липовецкий С.С., Сенашенко В.С.* // ЖЭТФ. 1972. Т. 63. Вып. 5(11). С. 1623–1627.

[5] *Бэрк Ф.Дж.* Потенциальное рассеяние в атомной физике / Пер. с англ. М.: Атомиздат, 1980. 101 с.
[6] *Медведев С.Ю., Кривский И.Ю.* Об интерференции резонансного и потенциального рассеяний. I. Одноканальный резонанс. Киев, 1982. 21 с.
[7] *Лендьел В.И., Навроцкий В.Т., Сабад Е.П.* Теория резонансных явлений в электрон-атомных столкновениях. Киев: Наукова думка, 1988. 216 с.
[8] *Романюк Н.И., Папп Ф.Ф., Чернышова И.В.* и др. Физика электронных и атомных столкновений. СПб: 1991. № 12. С. 174–186.
[9] *Романюк Н.И., Шпеник О.Б., Папп Ф.Ф.* и др. // УФЖ. 1992. Т. 37. № 11. С. 1639–1647.
[10] *Ремета Е.Ю., Шпеник О.Б., Билак Ю.Ю.* // ЖТФ. 2001. Т. 71. Вып. 4. С. 13–22.
[11] *Amusia M.Ya., Cherepkov N.A.* // Case Studies in Atomic Physics. 1975. Vol. 5. P. 47–179.
[12] *Lengyel V., Zatsarinny O., Remeta E.* // Electron Scattering on Complex Atoms (Ions). Nova Science. Ser. Horizons in World Physics New York, 2000. Vol. 234. 474 p.
[13] *Келемен В.И., Ремета Е.Ю., Сабад Е.П.* // Физика электронных и атомных столкновений СПб: 1991. № 12. С. 152–161.
[14] *Kelemen V.I., Remeta E.Yu., Sabad E.P.* // J. Phys. B. 1995. Vol. 28. N 8. P. 1527–1546.
[15] *Remeta E.Yu., Bilak Yu.Yu.* Book of Abstracts Photon and Electron Collisions with Atoms and Molecules (PECAM-2). Belfast (N. Ireland, UK), 1996. Abst. 8. P. 66.
[16] *Remeta E.Yu., Bilak Yu.Yu., Shimon L.L.* // Proc. XX Int. Conf. On the Physics of Electronic and Atomic Collisions (ICPEAC). Vienna (Austria). 1997. P. TH 013.
[17] *Remeta E.Yu., Kelemen V.I., Bilak Yu.Yu.* и др. // УФЖ. 2002. Т. 47. № 5. С. 423–429.
[18] *Контрош Е.Э., Чернышова И.В., Совтер Л.Л.* и др. // Опт. и спектр. 2001. Т. 90. № 3. С. 394–399.
[19] *Remeta E.Yu., Bilak Yu.Yu.* // Proc. XXIII Int. Conf. On the Physics of Electronic and Atomic Collisions (ICPEAC). Stockholm (Sweden), 2003. P. Mo 061.
[20] *Remeta E.Yu., Bilak Yu.Yu.* // Proc. XXIII Int. Conf. on the Physics of Electronic and Atomic Collisions (ICPEAC). Stockholm (Sweden), 2003. P. Mo 060.
[21] *Yuan J., Fritsche L.* // Phys. Rev. A. 1997. Vol. 55. N 2. P. 1020–1027.
[22] *Yuan J., Lin C.D.* // Phys. Rev. A. 1998. Vol. 58. N 4. P. 2824–2827.