

Джумагулова К.Н.,
Шаленов Е.О., Габдуллина Г.Л.

Об эффекте Рамзауэра в плотной квазиклассической плазме

В данной работе представлена динамическая модель взаимодействия электронов с атомами и исследованы процессы рассеяния частиц плотной квазиклассической плазмы водорода. Эта модель учитывает квантовомеханический эффект дифракции и эффект динамической экранировки. Сделано сравнение с данными, полученными на основе статических потенциалов взаимодействия, сформулированы выводы о влиянии динамических эффектов на столкновительные процессы. Задача решалась методом фазовых функций с помощью уравнения Калоджеро.

Ключевые слова: сечения рассеяния, динамический потенциал взаимодействия, неидеальная квазиклассическая плазма, уравнение Калоджеро.

Dzhumagulova K.N., Shalenov
E.O., Gabdullina G.L.

Influence of Ramseur effect of the dense semiclassical plasmas

The elastic scattering processes of the charged particles in the dense nonideal plasma on the basis of the dynamic interaction potential were investigated. This model takes into account the quantum mechanical effects of diffraction and the effect of dynamic screening. It is shown that dynamic charge screening increases the phase shifts and the scattering cross sections in comparison with static screening. The problem was solved on the basis of the Calogero equation for finding the phase shifts.

Key words: scattering cross section, the dynamic interaction potential, nonideal semiclassical plasma, equation Calogero.

Жұмағұлова Қ.Н., Шаленов Е.О.,
Габдуллина Г.Л.

Тығыз квазиклассикалық плазмадағы Рамзауэр эффектісі

Бұл жұмыста тығыз квазиклассикалық сутегі плазманың электронның атомдарға әсерлесуінің динамикалық моделі ұсынылған және бөлшектердің шашырау процестері зерттелген. Бұл моделде дифракцияның кванттық-механикалық эффектілері және динамикалық экрандалу эффектісі ескеріледі. Нәтижелер статикалық әсерлесу потенциалдарының негізінде алынған мәліметтермен салыстырылды, осының негізінде динамикалық эффектілердің идеал емес плазманың соқтығысу процестеріне және транспорттық қасиеттеріне әсері туралы қорытынды жасалды. Есепті Калоджеро теңдеуін пайдаланып фазалық функция әдісімен шешілді.

Түйін сөздер: шашырау кескіндері, динамикалық әсерлесу потенциалы, идеалды емес квазиклассикалық плазма, Калоджеро теңдеуі.

**ОБ ЭФФЕКТЕ
РАМЗАУЭРА
В ПЛОТНОЙ
КВАЗИКЛАССИЧЕСКОЙ
ПЛАЗМЕ****Введение**

Безусловно, основным инструментом изучения природы взаимодействия частиц являются элементарные процессы [1]. Элементарные процессы в плазме представляют собой процессы столкновения частиц плазмы, а также процессы изменения состояния атомных частиц при поглощении и излучении фотонов. Столкновения атомных частиц делятся на упругие и неупругие, в зависимости от того, сохраняется или изменяется внутреннее состояние частиц при соударении. В результате упругого рассеяния может измениться только скорость частицы, т.е. направление движения и кинетическая энергия. Поэтому упругие столкновения частиц ответственны за распределения частиц по энергиям движения в плазме, дрейфовую скорость электронов, проводимость частично-ионизованной плазмы. Неупругие столкновения частиц устанавливают распределения частиц по внутренним степеням свободы, а также распределения атомных частиц по сортам. Например, они определяют ионизационное и диссоциативное равновесия в плазме. Таким образом, элементарные процессы столкновения атомных частиц определяются взаимодействием частиц в плазме и, в свою очередь, устанавливают характер равновесия в плазме атомных частиц. За всю историю изучения этих процессов развито множество подходов к получению сечений элементарных процессов для тех или иных плазменных параметров, некоторые теоретические и экспериментальные работы представлены в этих статьях [2-6]. Для кинетики частично ионизованной плазмы наибольший интерес представляет упругое рассеяние электронов на атомах.

При нахождении полного сечения электроны входят в состав монокинетического пучка, проходящего через газ. При этом измерение полного сечения рассеяния определяется по изменению интенсивности пучка электронов, проходящих через газ. Первые экспериментальные работы по данному методу принадлежат Рамзауэру и его группе [7, 8].

В его работе были измерены полные сечения рассеяния электронов на атомах Ar, Kr, Xe , и при этом был обнаружен эффект Рамзауэра [9]. В основе упругого рассеяния электрона на атоме лежит взаимодействие между этими частицами, имеющее место, когда пролетающий мимо атома электрон попадает в его потенциальное поле. Очевидным является то, что уменьшение скорости электрона должно приводить к увеличению времени его взаимодействия с атомом и увеличению сечения рассеяния. Однако в 1921 году Рамзауэр обнаружил, что в аргоне при уменьшении энергии электронов упругое рассеяние уменьшается, в результате чего электроны проходят через газ практически беспрепятственно. Это явление, когда атомы инертного газа становятся как бы несуществующими для электронов, обладающих определенной энергией, и электроны пролетают сквозь них без столкновений, носит название эффекта Рамзауэра-Таунсенда. Эффект необъясним с точки зрения классической теории рассеяния, только квантовомеханическое описание дало возможность интерпретировать наблюдаемое явление. Потенциальное поле наведенного дипольного момента атома приближенно можно представить как потенциальную яму. Проходящая через потенциальную яму электронная волна дважды частично отражается от ее стенок, при этом отраженные волны могут интерферировать между собой, при подходящих условиях усиливая или ослабляя отраженный электронный пучок. Модель прямоугольной ямы является хорошим приближением для атомов инертных газов, отличающихся наиболее компактной структурой и резкой внешней границей. Данный эффект считается одним из фундаментальных экспериментальных доказательств наличия у электронов волновых свойств.

На основе IAM-SCAR метода также были измерены дифференциальные и полные сечения рассеяния электронов на оксиде азота, 1,4-диоксане и тетрагидрофуране в работах [10-12]. На основе теории МЕРТ были получены дифференциальные, интегральные и транспортные сечения рассеяния на метане в работе [13]. Некоторые данные по упругим сечениям рассеяния приведены в работах [10-12, 14-19]. Некоторые данные по неупругим сечениям рассеяния приведены в статьях [10,12].

Среди работ по исследованию процессов рассеяния также можно отметить работы

[14, 17], где получены фазовые сдвиги рассеяния и сечения упругого рассеяния и возбуждения при столкновении электрона с атомом водорода методом точного численного решения уравнения Шредингера. Было показано, что полученные результаты имеют хорошее согласие с выводами, сделанными на основе метода сильной связи.

Гибридная теория упругого рассеяния электрона на водороде, использующая комбинацию метода поляризованных орбит и формализм оптического потенциала, была предложена в работе [18]. Здесь представлены результаты расчетов фазовых сдвигов рассеяния, учитывающие корреляции на малых и на больших расстояниях одновременно.

Упругое рассеяние электрона на атоме

При рассмотрении эволюции электронов в газе во внешнем электрическом поле мы учитывали, что характерная энергия электронов обычно заметно меньше энергии возбуждения атомов, с которыми они сталкиваются. Если это не выполняется, электроны возбуждают атомы и теряют энергию. При малых энергиях электронов происходит только упругое рассеяние электрона на атоме, и далее мы обсудим особенности упругих электрон-атомных столкновений при малых энергиях электрона [20-24]. Если спин атома не равен нулю, возможны два состояния для системы сталкивающихся электрона и атома, и эта система развивается по каждому каналу независимо (релятивистскими эффектами пренебрегаем). Для простоты рассмотрим рассеяние электрона на бесструктурном атоме, ориентируясь на атомы инертных газов, когда имеется только одно электронное состояние системы электрон – атом.

Перейдем теперь к описанию квантовомеханических методов исследования процессов рассеяния. Общий подход в вычислениях сечений рассеяния в квантовомеханическом описании заключается в анализе изменения волновой функции частицы после столкновения, если до столкновения она была известна.

Метод парциальных волн был предложен Факсеном и Хольцмарком и аналогичен подходу, развитому Рэлеем в классической теории рассеяния. Отправной точкой является уравнение Шредингера для частицы, рассеивающейся некоторым центральным полем с потенциалом

$$U(r) = \frac{2m}{\hbar^2} \Phi(r) \quad [25]:$$

$$[\Delta + k^2 - U(r)]\psi(r) = 0, \quad (1)$$

здесь k – модуль волнового вектора рассеивающейся частицы, Δ – оператор Лапласа. Решение этого уравнения ищется в виде

$$\psi(r) \rightarrow \exp(ikz) + \frac{\exp(ikr)}{r} f(\vartheta), \quad (2)$$

которое на больших расстояниях описывает падающую плоскую волну (распространяющуюся вдоль оси z) и расходящуюся сферическую волну; здесь ϑ – угол между направлениями рассеянной (\vec{k}') и падающей волн (\vec{k}). Так как потенциал $U(r)$ центрально симметричен, выражение (2) не зависит от азимутального угла φ в сферической системе координат. Величина $f(\vartheta)$, имеющая размерность длины, получила название амплитуды рассеяния. Дифференциальное сечение рассеяния равно:

$$d\sigma = |f(\vartheta)|^2 d\Omega = |f(\vartheta)|^2 \sin \vartheta d\vartheta d\varphi. \quad (3)$$

Проводя интегрирование (3) по углу φ , получим общую формулу для полного сечения рассеяния

$$Q^p(k) = 2\pi \int |f(\vartheta)|^2 \sin \vartheta d\vartheta = 2\pi \int \sigma(\vartheta) \sin \vartheta d\vartheta. \quad (4)$$

$$\frac{d\delta_l^{\alpha\beta}(k, r)}{dr} = -\frac{1}{k} U(r) \left[\cos \delta_l^{\alpha\beta}(k, r) \cdot J_l(kr) - \sin \delta_l^{\alpha\beta}(k, r) \cdot n_l(kr) \right]^2, \quad \delta_l^{\alpha\beta}(k, 0) = 0. \quad (8)$$

Здесь $J_l(kr)$ и $n_l(kr)$ – функции Риккати – Бесселя. Фазовые сдвиги находятся из решения уравнения (8) для $\delta_l(r)$ на больших расстояниях:

$$\delta_l^{\alpha\beta}(k) = \lim_{r \rightarrow \infty} \delta_l^{\alpha\beta}(k, r). \quad (9)$$

Уравнение (8) впервые было получено Друкаревым, Кинчем, Ольсоном и Калоджеро [22].

Отметим, что хотя уравнение для фаз рассеяния эквивалентно уравнению Шредингера, оно имеет ряд преимуществ. Во-первых, уравнение (8) функции Риккати–Бесселя хорошо изучено, что позволяет использовать для исследо-

Решение уравнения Шредингера позволяет определить величину, количественно описывающую эффект рассеяния, так называемую фазу рассеяния $\delta_l(k)$ (фазовый сдвиг). Амплитуда рассеяния связана с фазовым сдвигом следующим соотношением:

$$f(\vartheta) = \frac{1}{2ik} \sum_l (2l+1) [\exp(2i\delta_l) - 1] P_l(\cos \vartheta). \quad (5)$$

Подставляя (5) в формулу (4), можно получить полное сечение рассеяния, выраженное через фазовые сдвиги

$$Q^p(k) = \frac{4\pi}{k^2} \sum_l (2l+1) \sin^2 \delta_l(k). \quad (6)$$

Подставляя (5) в формулу (3), можно получить дифференциально сечение рассеяния, выраженное через фазовые сдвиги

$$\frac{d\sigma(k, l, \theta)}{d\Omega} = \left| \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos \theta) e^{i\delta_l(k)} \sin \delta_l(k) \right|^2 \quad (7)$$

Можно перейти от уравнения Шредингера к уравнению непосредственно для фазы рассеяния. Уравнение для нахождения фазовых функций $\delta_l(k, r)$ имеет вид:

вания фазового уравнения развитую математическую базу. Следующим преимуществом метода фазовых функций является то, что решение фазового уравнения хоть и имеет свои определенные трудности, но все же проще решения уравнения Шредингера. Кроме того, заметно уменьшается количество операций и, следовательно, время счета.

Выбор потенциала взаимодействия электронов с атомами в квазиклассической неидеальной плазме

В работе [26] был получен поляризационный потенциал взаимодействия между электроном и атомом, учитывающий статическую экранировку Дебая-Хюккеля и эффект дифракции. В размерном виде он имеет следующий вид:

$$\Phi_{ea}(r) = -\frac{e^2 \alpha}{2r^4 (1 - 4\lambda_{ea}^2 / r_D^2)} \left(e^{-Br} (1 + Br) - e^{-Ar} (1 + Ar) \right)^2, \quad (10)$$

где

$$A^2 = \frac{1}{2\lambda_{ea}^2} \left(1 + \sqrt{1 - 4\lambda_{ea}^2 / r_D^2} \right),$$

$$B^2 = \frac{1}{2\lambda_{ea}^2} \left(1 - \sqrt{1 - 4\lambda_{ea}^2 / r_D^2} \right).$$

$\lambda_{ea} = \hbar / \sqrt{2\pi\mu_{ea} k_B T} \approx \lambda_e$ – фактически тепловая длина волны Де-Бройля электрона, так как $\mu_{ea} = m_e m_a / (m_e + m_a) \approx m_e$. На основе потенциала (10) была предложена модель, учитывающая динамическую экранировку:

$$\Phi_{ea}^{dyn}(r) = -\frac{e^2 \alpha}{2r^4 (1 - 4\lambda_{ea}^2 / r_o^2)} \left(e^{-Br} (1 + Br) - e^{-Ar} (1 + Ar) \right)^2, \quad (11)$$

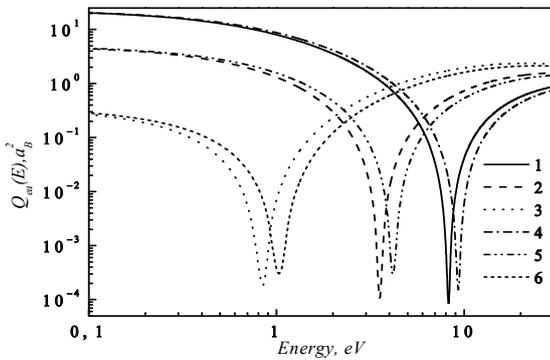
$$A^2 = \frac{1}{2\lambda_{ea}^2} \left(1 + \sqrt{1 - 4\lambda_{ea}^2 / r_o^2} \right),$$

$$B^2 = \frac{1}{2\lambda_{ea}^2} \left(1 - \sqrt{1 - 4\lambda_{ea}^2 / r_o^2} \right).$$

Отношение квадрата скорости налетающей частицы к квадрату тепловой скорости может быть выражено через параметры связи, плотности и волновой вектор, который определяет величину скорости налетающей частицы:

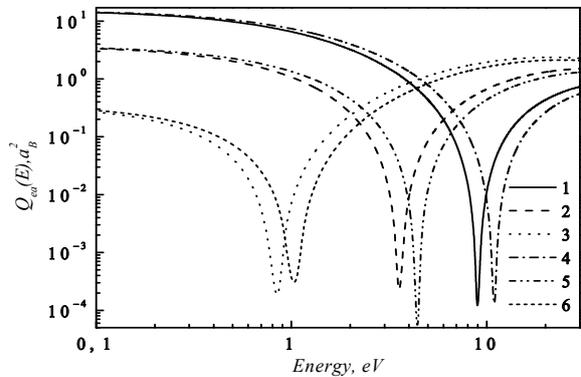
$$r_o = r_D \left(1 + \frac{g^2}{g_{Th}^2} \right)^{1/2}$$

$$\left(\frac{g}{g_{Th}} \right)^2 = \Gamma r_s k^2 \quad (12)$$



На основе потенциала (10):
1) $\Gamma = 0,25$; 2) $\Gamma = 0,275$; 3) $\Gamma = 0,3$
На основе потенциала (11):
4) $\Gamma = 0,25$; 5) $\Gamma = 0,275$; 6) $\Gamma = 0,3$

Рисунок 1 – Парциальные сечения рассеяния электрона на атоме водорода с $\ell = 0$ на основе статического (10) и динамического потенциалов (11), при $r_s = 5$



На основе потенциала (10):
1) $r_s = 4$; 2) $r_s = 4.5$; 3) $r_s = 5$.
На основе потенциала (11):
4) $r_s = 4$; 5) $r_s = 4.5$; 6) $r_s = 5$

Рисунок 2 – Парциальные сечения рассеяния электрона на атоме водорода с $\ell = 0$ на основе статического (10) и динамического потенциалов (11), при $\Gamma = 0,3$

Результаты и сравнение

Была поставлена задача исследовать, как влияет замена статической экранировки на динамическую в эффекте Рамзауэра. Появление минимумов в первую очередь наблюдается на гармониках, дающих главный вклад в полное сечение рассеяния [27]. На рисунке 1-2 представлены минимумы на гармонике $l = 0$. Видно, что минимумы с увеличением параметра связи (соответствует уменьшению температуры) и параметр плотности сдвигаются в сторону меньших значений энергий электрона. Первое можно объяснить тем, что увеличение Γ ведет к увеличению длины волны де Бройля, т.к. уменьшается волновое число k , при котором наблюдается минимум в сечении рассеяния. Увеличение r_s также сдвигает минимумы в сторону меньших энергий налетающей частицы, это связано с увеличением ширины потенциальной ямы и соответственно с уменьшением волнового вектора налетающей частицы.

Заключение

На основе новых динамических моделей взаимодействия частиц неидеальной квазиклассической плазмы были исследованы парциальные сечения рассеяния частиц плазмы. Был использован квантовомеханический метод их расчета. Анализ полученных результатов показал, что сечения электрон-атомного рассеяния больше при динамической экранировке поля зарядов чем при статической экранировке.

Также в этом статьях был исследован эффект Рамзауэра. Обнаружено, что минимумы на главной гармонике разложения сечения рассеяния, полученные в рамках динамического потенциала взаимодействия, сдвинуты в сторону более высоких энергий налетающего электрона, относительно минимумов, полученных в рамках статического потенциала взаимодействия.

References

- 1 Achim von Keudell, Wolfgang Jacob. Elementary processes in plasma-surface interaction: H-atom and ion-induced chemisorption of methyl on hydrocarbon film surfaces. // *Progress in Surface Science*. – 2004. – Vol. 76. – P.21–54.
- 2 Sullivan J.P., Makochekanwa C., Jones A., Caradonna P. and Buckman S.J. High-resolution, low-energy positron scattering from helium: measurements of the total scattering cross section // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* – 2008. – Vol.41. – P.081001.
- 3 Milton M. Fujimoto, Jonathan Tennyson, and Sergio E. Michelin. Low-energy electron collisions with the alanine molecule // *Eur. Phys. J. D*. – 2014. – Vol. 68: 67.
- 4 Nishimura T. Theoretical study of electron scattering from CH₂F₂ Molecules // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* – 1998. – Vol.31. – P.3471–3478.
- 5 Bouchiha D., Gorfinkiel J.D., Caron L.G. and Sanche L. Low-energy electron collisions with methanol // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* – 2007. – Vol. 40. – P.1259–1270.
- 6 Marcio T. do N. Varela, Marcio H.F. Bettega, Marco A.P. Lima. Cross sections for rotational excitations of CH₄, SiH₄, GeH₄, SnH₄ and PbH₄ by electron impact // *Z. Phys. D* – 1997. – Vol.39. – P.59-67.
- 7 Ramsauer C. Über den Wirkungsquerschnitt der Gasmoleküle gegenüber langsamen Elektronen // *Annalen der Physik*. – 1921. – Vol.369. – P.513-540.
- 8 Ramsauer C., Kollath R. Über den Wirkungsquerschnitt der Edelgasmoleküle gegenüber Elektronen unterhalb 1 Volt // *Annalen der Physik*. – 1929. – Vol.395. – P.536-564.
- 9 Robinson D.-A., Denning J. The Ramsauer-Townsend Effect. – 2010. – 10 p.
- 10 Chiari L., Zecca A., Trainotti E. et al. Positron and electron collisions with nitrous oxide: Measured and calculated cross sections. // *Phys. Rev. A*. – 2013. – Vol.88. – P. 022708.
- 11 Palihawadana P., Sullivan J.P. et al. A joint theoretical and experimental study for elastic electron scattering from 1,4-dioxane. // *J. Chem. Phys.* – 2013. – Vol.139. – P.014308.
- 12 Chiari L., Anderson E. et al. Total, elastic, and inelastic cross sections for positron and electron collisions with Tetrahydrofuran. // *J. Chem. Phys.* – 2013. – Vol.138. – P.074301.
- 13 Fedus K. and Grzegorz P. Karwasz. Ramsauer-Townsend minimum in methane – modified effective range analysis. // *Eur. Phys. J. D*. – 2014. – Vol. 68: 93.
- 14 Sultana N. Nahar and J. M. Wadehra. Elastic scattering of positrons and electrons by argon. // *Phys. Rev. A*. – 1987. – V. 35, N. 5.
- 15 Parcell L.A., McEachran R.P., Stauffer A.D. Positron scattering from xenon // *Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B*. – 2002. – Vol. 192. – P.180–184.
- 16 Hein J.D., Zetner P.W., Bostock C.J., Fursa D.V., Bray I., Das T. and Srivastava R. Differential cross sections and electron impact coherence parameters for elastic electron scattering from laser-excited 138Ba. // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* – 2012. – Vol. 45. – P.115202.
- 17 Limão-Vieira P., Horie M., Kato H., Hoshino M., Blanco F. et al. Differential elastic electron scattering cross sections for CCl₄ by 1.5–100 eV energy electron impact. // *J. Chem. Phys.* – 2011. – Vol. 135. – P. 234309.

- 18 Bhatia A.K. Hybrid theory of electron-hydrogen elastic scattering //Phys.Rev. A. – 2007. – V.75. – P.032713.
- 19 Ghoshal A., Ho Y.K. Elastic scattering of positrons from hydrogen atoms with exponential cosine-screened Coulomb potentials. // Phys. Scr. – 2011. – Vol. 83. – P.065301.
- 20 Сена Л.А. Столкновения электронов и ионов с атомами газа. – Л.-М.: ГИТТЛ, 1948. – 215 с.
- 21 Мотт Н, Месси Г. Теория атомных столкновений. – М.: Мир, 1969. – 756 с.
- 22 Друкарев Г. Ф. Столкновения электронов с атомами и молекулами. – М.: Наука, 1978. – 256 с.
- 23 Massey H.S.W. Atomic and Molecular Collisions. – London: Taylor & Francis, 1979.
- 24 Mc Daniel E.W., Mitchell J.B.A., Rudd M.E. Atomic Collisions: Heavy Particle Projectiles. – New York: Wiley, 1993.
- 25 Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика (нерелятивистская теория). – Издание 4-е. – М.: Наука, 1989. – 768 с.
- 26 Ramazanov T.S., Dzhumagulova K.N. and Omarbakiyeva Y.A. Effective polarization interaction potential “charge-atom” for partially ionized dense plasma // Phys.Plasmas. – 2005. – Vol.12.- P.092702
- 27 Арцимович Л. А. Элементарная физика плазмы. –М.: Атомиздат, 1966. – 220 с.