

GRZEGORZ KARWASZ

Instytut Maszyn Przepływowych PAN, Gdańsk

CZESŁAW SZMYTKOWSKI

Wydział Fizyki Technicznej i Matematyki Stosowanej

ROZPRASZANIE ELEKTRONÓW NA DROBINACH OCS

Oceniono wkład rozpraszania sprężystego na potencjale dipolowym do całkowitego przekroju czynnego na rozpraszanie elektronów na drobinach OCS. Dla małych kątów rozproszenia użyto pierwszego przybliżenia Borna, natomiast dla kątów większych zastosowano przybliżenie klasyczne. Obliczony w ten sposób potencjałowy przekrój czynny użyto do wyodrębnienia struktury rezonansowej w zmierzonym całkowitym przekroju czynnym dla procesu $e^- + OCS$.

1. WSTEP

Rozpraszanie niskoenergetycznych elektronów na drobinach jest w ostatnich latach tematem intensywnych badań zarówno doświadczalnych [1,2] jak i teoretycznych [3,4]. Znajomość przekrojów czynnych dla tych procesów jest niezbędna przy modelowaniu zjawisk zachodzących w plazmie niskotemperaturowej, przy projektowaniu laserów, również dla poznania procesów odpowiedzialnych za niektóre właściwości atmosfery Ziemi i planet.

Zależności całkowitych przekrojów czynnych od energii padających elektronów wykazują zazwyczaj w obszarze niskich energii obecność krótkożyjących stanów związanych elektron-drobina tzw. rezonansów. Znana i przebadana doświadczalnie jest już spora ilość stanów rezonansowych [1]. Do najlepiej poznanych należą N_2^- (2,3 eV) [5], CO^- (1,7 eV) [6], CO_2^- (3,8 eV) [7] i N_2O^- (2,3 eV) [8]. Opracowano też szereg metod [3] pozwalających opisać teoretycznie podstawowe cechy stanów rezonansowych. Dotychczas brak jest jednak teorii opisującej rozpraszanie niskoenergetycznych elektronów, z pomocą której możnaby przed doświadczeniem przewidywać przebieg zależności przekrojów czynnych od energii padających elektronów. Podstawowym problemem jest opis oddziaływań dodatkowego elektronu z drobiną w obszarze samej drobiny. Bezpośrednia analiza stanów rezonansowych, jak również ocena charakteru oddziaływań elektron-drobina, na podstawie samych tylko całkowitych przekrojów czynnych jest bardzo trudna, lub wręcz niemożliwa, a to z uwagi na ilość i złożoność procesów mających swój wkład do całkowitego przekroju czynnego. Znacznie więcej informacji można uzyskać badając przekroje czynne na poszczególne procesy niesprężyste. Wyma-

ga to jednak użycia aparatur o bardzo dobrych rozdzielczościach zarówno energetycznych jak i kątowych.

Celem tej pracy jest próba wyodrębnienia, na drodze obliczeń z całkowitego przekroju czynnego jego części nierezonansowej („potencjałowej”), a następnie prosta analiza pozostałej „rezonansowej” części przekroju całkowitego. Uzyskane tą drogą informacje mogą służyć wstępnej ocenie wielkości rezonansowego przekroju czynnego w jego maksimach, jak również czasów życia stanów rezonansowych.

2. METODA

Do obliczenia całkowitego „dipolowego” przekroju czynnego na drobinie OCS zastosowano model zaproponowany przez Dickinsona [9] do badania rozproszenia elektronów na drobinach silnie polarnych. Zakłada on dla małych kątów rozproszenia stosowalność przybliżenia Borna. Założenie to jest zwykle dobrze spełnione, gdyż cząstki rozproszone pod małymi kątami ulegają słabym oddziaływaniom w czasie zderzenia, co jest z kolei istotą przybliżenia Borna. Dla kątów pośrednich model proponuje użycie klasycznego rachunku zaburzeń dla rozproszenia ładunku punktowego na nieruchomym dipolu. Wreszcie dla kątów rozproszenia większych od $\pi/3$, gdzie istotną rolę powinno odgrywać rozpraszanie na potencjałach krótkozasięgowych, model zakłada dla dużych energii stosowalność przybliżenia sztywnej kuli o promieniu porównywalnym z rozmiarami drobiny, zaś dla małych energii wartość przekroju niezależną od kąta rozproszenia i równą przekrojowi czynnemu dla kąta $\pi/3$.

Zaletą tej metody jest duża prostota obliczeń. Istotną wadą przyjętego modelu jest to, że w sposób półempiryczny próbuje odtworzyć ogólny charakter oddziaływań i szczególnie dla większych kątów rozproszenia, nie daje żadnych informacji odnośnie sił działających między elektronem i drobiną. Nie uwzględnia również oddziaływań ładunek-dipol indukowany i oddziaływań wymiennych, które jak wskazują obliczenia [10] odgrywają istotną rolę w tworzeniu stanów rezonansowych.

W metodzie Dickinsona całkowity przekrój czynny na rozproszenie sprężyste dany jest wyrażeniem:

$$\sigma = \sigma^B - \Delta\sigma_1 + \Delta\sigma_2 \quad (1)$$

gdzie

$$\sigma^B = -\frac{4}{3} \frac{\mu^2}{Ea_0} \ln(\sin \theta) \quad (2)$$

$\theta \rightarrow 0$

reprezentuje przekrój czynny na rozproszenie sprężyste na potencjale dipolowym w przybliżeniu Borna. W celu uniknięcia rozbieżności w całkowitym przekroju należy dolną granicę całkowania (kąt odcięcia θ_0) przekrojów różniczkowych na rozproszenie sprężyste w przybliżeniu Borna przyjąć róż-

ną od zera. Takie ograniczenie jest usprawiedliwione ograniczoną rozdzielczością kątową aparatur stosowanych przy pomiarach przekrojów czynnych jak również szczególnie trudnym do ustalenia tzw. czynnikiem geometrycznym dla kątów rozproszenia bliskich zeru [11]. Pozostałe dwa składniki przekroju są równe odpowiednio:

$$\Delta\sigma_1 = \frac{4\pi}{3} \frac{\mu^2}{Ea_0} \left(\ln \frac{32\mu}{3\pi ea_0} - 1 \right) \quad (3)$$

$$\Delta\sigma_2 = \begin{cases} \frac{\pi^2 e\mu}{8E} & \text{dla } E_0 = \frac{\pi e\mu}{2R_c^2} \geq E \\ \pi R_c^2 \left[1 - \frac{3}{4} \left(\frac{E_0}{E} \right)^{2/3} \right] & \text{dla } E \geq E_0. \end{cases} \quad (4)$$

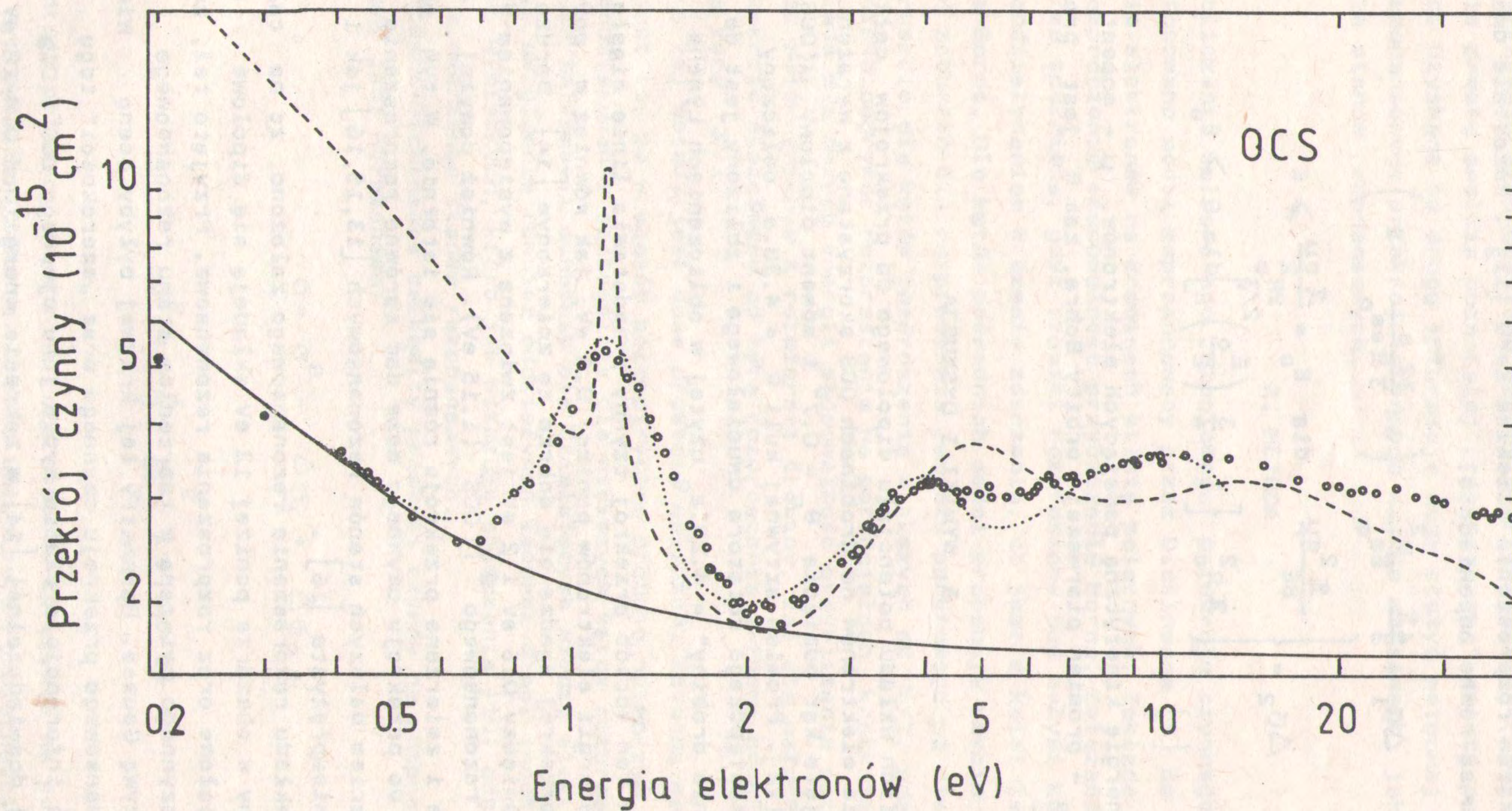
E - oznacza energię kinetyczną padających elektronów, μ - moment dipolowy drobin, a_0 - promień pierwszej orbity Bohra, zaś R_c jest promieniem sztywnej kuli.

3. WYNIKI I DYSKUSJA

W obliczeniach wkładu potencjału dipolowego do przekrojów całkowitych na rozpraszanie elektronów na drobinach OCS skorzystano z wyrażeń 1-4. Przy tym przyjęto kąt odcięcia $\theta_0 = 0.7^\circ$ i moment dipolowy $\mu(\text{OCS}) = 0.281 ea_0$ [12]. Promień sztywnej kuli $R_c = 4.38.a_0$ obliczony został jako długość zastępczego rotatora dwuciałowego i zbliżony jest do wartości „promienia drobin” = $4.28.a_0$ użytej w obliczeniach Lyncha i inn. [13].

Obliczony w ten sposób przekrój czynny przedstawia linia ciągła na rysunku 1. Dla energii elektronów poniżej 0.6 eV, jak również w pobliżu 2 eV obliczony przekrój zgadza się dobrze ze zmierzonym [14]. Bardzo duża rozbieżność pomiędzy 0.6 eV i 2 eV jest związana z występowaniem dla tych energii stanu rezonansowego $^2 \Pi^- \text{OCS}^-$ (1.15 eV). Również powyżej energii 2 eV obliczone i zmierzone przekroje różnią się istotnie. W tym obszarze istotny wkład do przekroju czynnego może dać zarówno rozproszenie zachodzące z tworzeniem dalszych stanów rezonansowych [13,15,16] jak i zwykle rozpraszanie niesprężyste [16].

Dla oceny wkładu rozpraszania rezonansowego założono, że na całkowity przekrój czynny w obszarze poniżej 12 eV składają się dipolowe rozproszenie potencjałowe oraz rozproszenie rezonansowe. Przyjęto też, że zmianę przekroju czynnego związaną z tworzeniem stanu rezonansowego można odwzorować krzywą Gaussa. Parametry tej krzywej byłyby oceną wielkości maksimum rezonansowego przekroju czynnego oraz „szerokości” tego stanu, która może dać informację o czasie życia jonu ujemnego OCS^- . Dla odtworzenia krzywej doświadczalnej [14] w zakresie energii od 0.4-12 eV obliczono całkowity przekrój sprężysty metodą Dickinsona i złożono (dodano) go z trzema krzywymi Gaussa reprezentującymi rozpraszanie rezonansowe. Ja-



Rys.1. Całkowite przekroje czynne na rozpraszanie elektronów na drobinach OCS. OOOO - wartości doświadczalne [14]; Krzywa ciągła - przekrój czynny na rozproszenie sprężyste na potencjale dipolowym; Krzywa kropkowana - dopasowanie numeryczne do danych doświadczalnych (dla energii poniżej 0.4 eV pokrywa się z krzywą ciągłą); krzywa przerywana - obliczenia Lyncha i inn. [13].

kość dopasowania oceniano z pomocą wielkości χ^2 . Przebieg takiej krzywej reprezentuje linia na rys.1, natomiast parametry krzywych Gaussa zamieszczono w tablicy 1 wraz z parametrami stanów rezonansowych znanymi z doświadczeń. Zgodność otrzymanej krzywej dla „całkowitego” przekroju czynnego z przekrojem znanym z doświadczenia jest niezła, również zbieżność wartości parametrów określających stany rezonansowe jest dość dobra.

T a b l i c a 1

| doświadczenie | Położenie maksimum (eV) | | Wartość przekroju w maksimum (\AA^2) | | Szerokość połówkowa (eV) | |
|--------------------|-------------------------|--------------|---|--------------|--------------------------|--------------|
| | teoria [13] | obecna praca | doświadczenie [15]. | obecna praca | doświadczenie [15] | obecna praca |
| 1.15 [15] | 1.15 | 1.15±0.1 | 35 | 34 ± 4 | 0,7 | 0.45±0.1 |
| 3.6 [15], 4.1 [14] | 4.9 | 3.9±0.2 | 7 | 10 ± 2 | 1.3 | 1.6±0.2 |
| 11 [14] | 14 | 10±2 | | 20 ± 3 | | 9 ± 2 |

Na rys.1 pokazano również wyniki obliczeń Lyncha i.in. [13].

Podjęto również próbę zastosowania przybliżenia Borna dla odtworzenia niskoenergetycznej części zależności przekroju czynnego od energii w CO_2 . Dość dobrą zgodność otrzymano dla energii poniżej 2 eV uwzględniając sferyczną część polaryzowalności i przyjmując promień odcięcia $R_c = 4 \cdot a_0$.

4. ZAKOŃCZENIE

Uwzględniając jedynie rozpraszanie na potencjale dipolowym oceniono wkład rozpraszania potencjałowego do całkowitego przekroju czynnego. Dla energii poniżej 0.6 eV zgodność z doświadczeniem jest dobra. Oceniono również w prosty sposób parametry stanów rezonansowych odpowiedzialnych za silne zmiany przekroju wraz z energią. Lepszą zgodność z doświadczeniem możnaby uzyskać uwzględniając dalsze wyrazy z rozwinięcia potencjału oddziaływania elektronu z drobiną oraz włączając wpływ rozpraszania niesprężystego.

Otrzymano 1985-01-25

BIBLIOGRAFIA

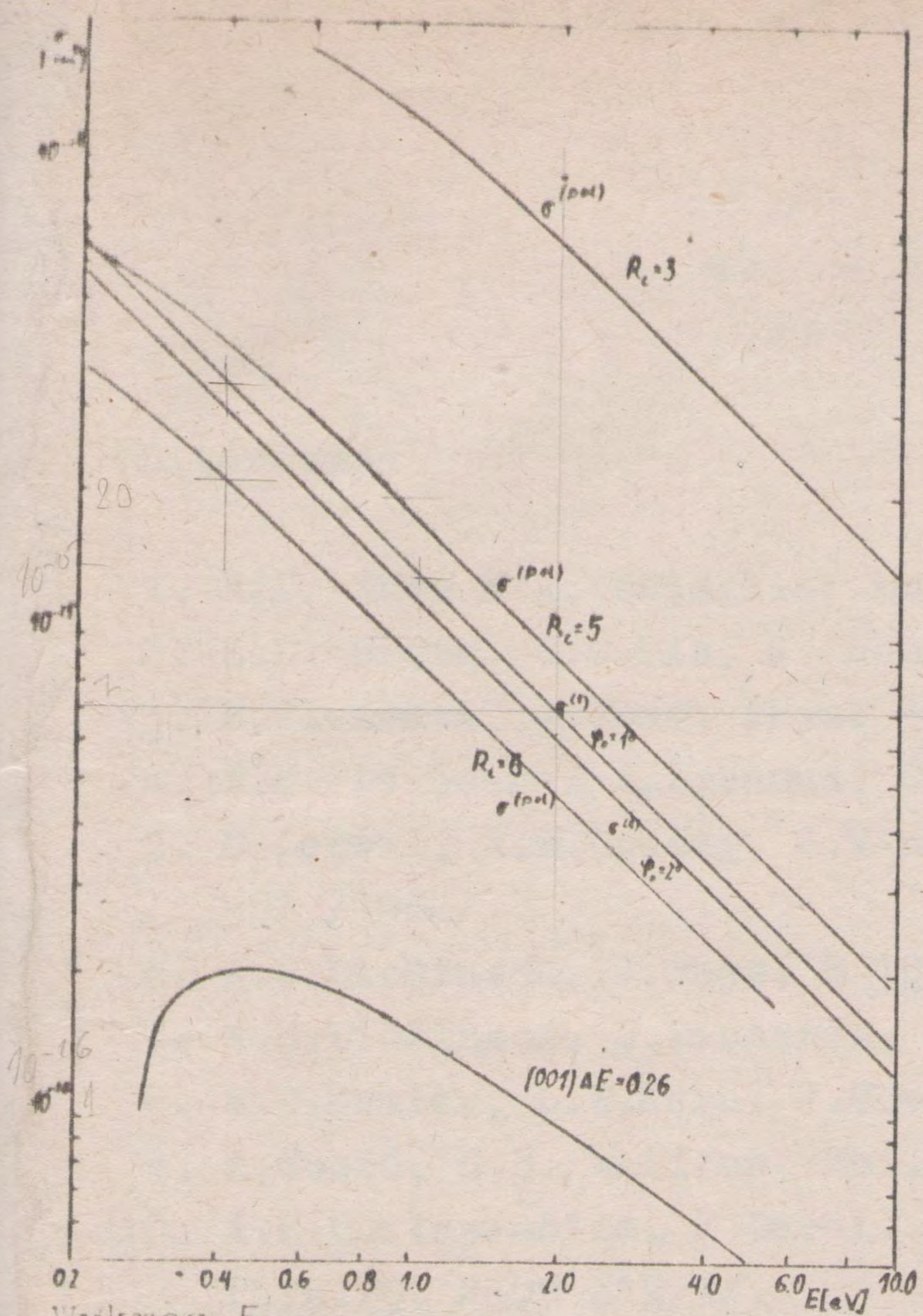
- [1] Schulz G.J.: Rev.Mod.Phys., 45, 378 (1973).
- [2] Trajmar S., Register D.F., Chutjian A.: Phys. Rep., 97, 219 (1983).
- [3] Lane N.F.: Rev.Mod.Phys. 52, 29 (1980).
- [4] Buckley B.D., Burke P.G., Noble C.J.: (w:) Electron Molecule Collisions, wyd. Shimamura I., Takayanagi K. (Plenum Press, New York 1982).
- [5] Schulz G.J.: Phys.Rev., 125, 229 (1962).
- [6] Ehrhardt H., Langhans L., Linder F., Taylor H.S.: Phys.Rev., 173, 222 (1968)
- [7] Schulz G.J., Phys.Rev., 135A, 988 (1964).
- [8] Andrić L., Hall R.I., J.Phys. B 17, 2713 (1984).
- [9] Dickinson A.S.: J.Phys. B 10, 967 (1977)
- [10] Morrison M.A., Lane N.F., Collins L.A.: Phys.Rev. A. 15, 2136 (1977).
- [11] Brinkmann R. T., Trajmar S.: informacja prywatna.
- [12] Foord A., Whiffen G. H.: Mol.Phys., 26, 959 (1973).
- [13] Lynch M., Dill D., Siegel J., Dehmer J. L.: J. Chem.Phys., 71, 4249 (1979).
- [14] Szmytkowski Cz., Karwasz G., Maciąg K.: Chem. Phys.Letters 107, 48 (1984).
- [15] Tronc M., Azria R.: (w:) Invited Papers of the Symposium on Electron-Molecule Collisions, Tokyo 1979, wyd. Shimamura I., Matsuzawa M. (University of Tokyo, 1979), s.105.
- [16] Hubin-Franskin M. - J., Katihabwa J., Collin J. E.: Internat.J.Mass Spect.Ion Phys., 20, 285 (1976).

SCATTERING OF ELECTRONS ON OCS MOLECULES

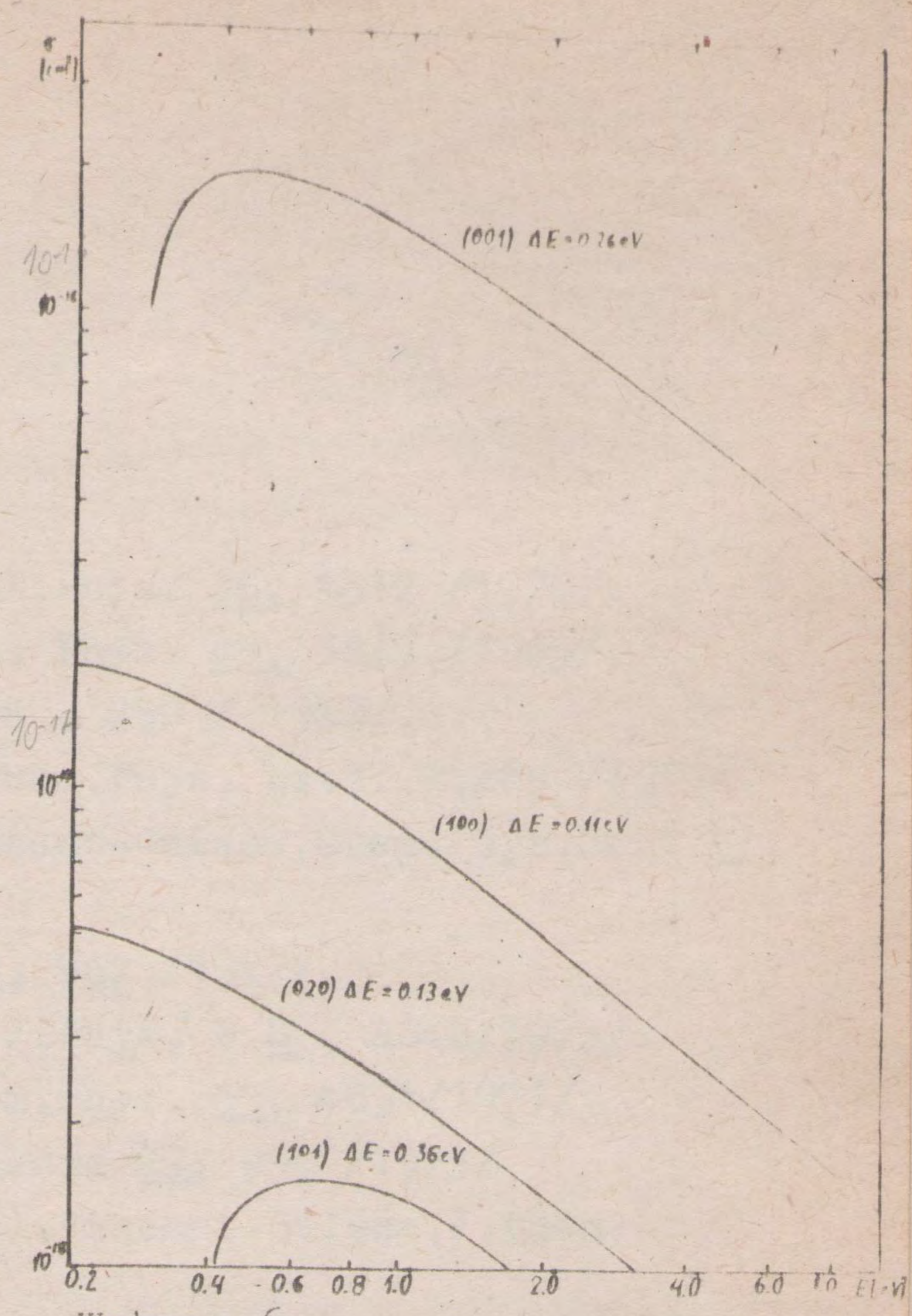
A simple model, combining the Born approximation and classical theory, has been used for calculations of contribution of point dipole interaction to the total cross section for electron scattering by OCS molecule. By using the calculated cross sections for "potential" scattering an analysis of resonant structure observed in experimental cross section for $e^- + \text{OCS}$ process was performed.

РАССЕЯНИЕ ЭЛЕКТРОНОВ НА МОЛЕКУЛАХ OCS

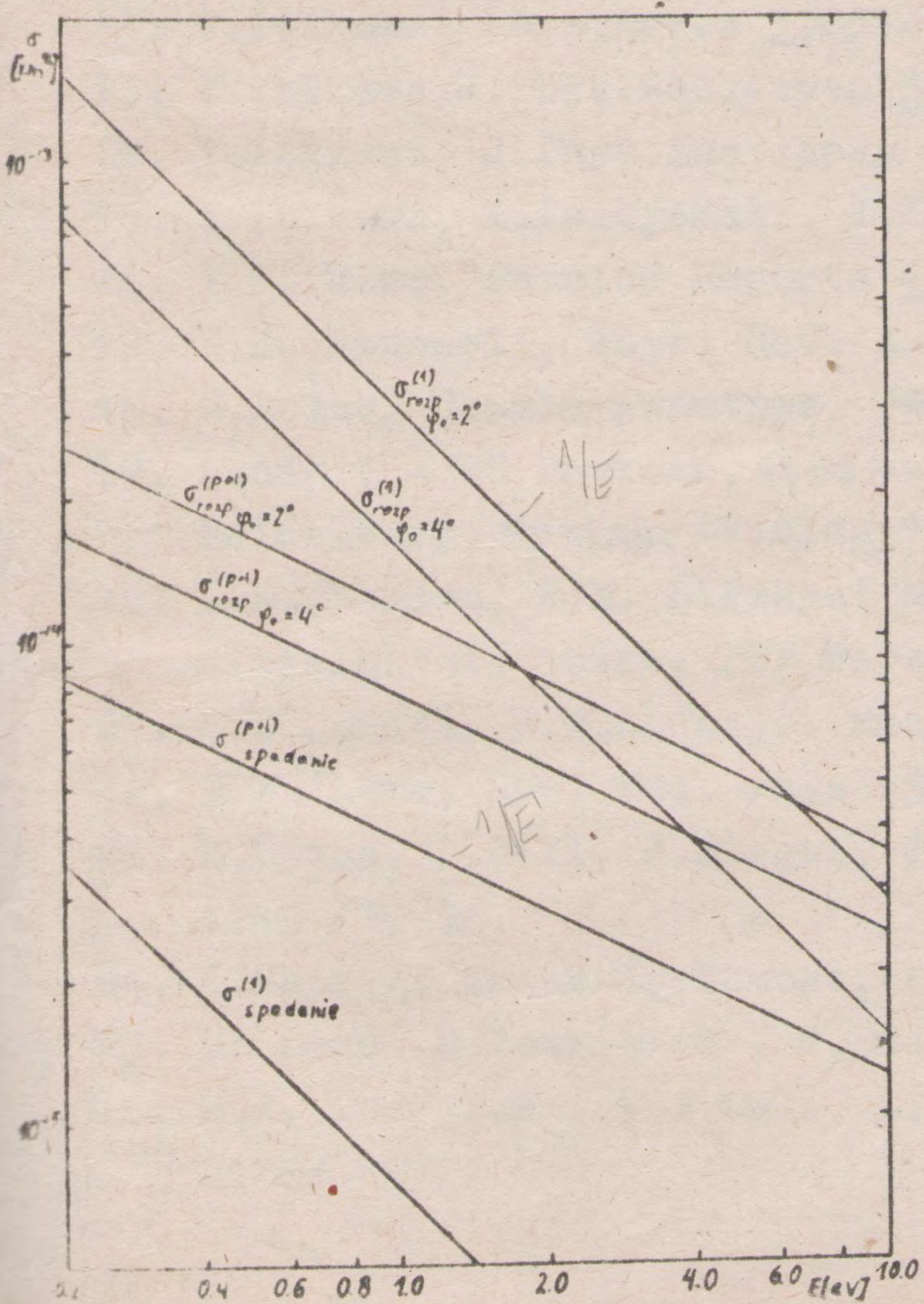
Для расчета вклада дипольного рассеяния электронов на молекулах OCS было использовано Борна приближение для малых углов и классические приближение для больших углов рассеяния. Рассчитанное "потенциальное" поперечное сечение было последовательно использовано для анализа резонансной структуры наблюдаемой в полном поперечном сечении в рассеянии $e^- + \text{OCS}$.



Wykres 5.



Wykres 6.



Wykres 7.

Wykres 5. Przybliżenie Borna. Wkłady potencjału polaryzacyjnego σ^{pol} i dipolowego σ^{dip} dla różnych R_c i dolnych granic całkowania/ do całkowitego przekroju na rozpaszanie sprężyste. Zaznaczono największy wkład rozpraszania niesprężystego.

Wykres 6. Przekroje czynne na rozpraszanie niesprężyste na potencjale dipolowym w przybliżeniu Borna.

Wykres 7. Przekroje czynne na rozpraszanie sprężyste na potencjale dipolowym σ^{dip} i polaryzacyjnym σ^{pol} dla różnych dolnych granic całkowania ψ_0 .

Przekroje na tworzenie stanu związanego. Przybliżenie klasyczne.