Рассеяние позитронов низкой энергии на эндоэдралах

М. Я. Амусья^{+*1)2)}, Л. В. Чернышева^{*}

+ Институт физики им. Рака, Еврейский университет, 91904 Иерусалим, Израиль

* Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе, 194021 Санкт-Петербург, Россия

Поступила в редакцию 15 мая 2017 г.

В работе исследовано рассеяние позитронов на эндоэдралах, оно сопоставлено с рассеянием электронов. Мы показываем, что поляризация фуллереновой оболочки значительно изменяет поляризационный потенциал фуллерена, заполненного атомом. Это существенно влияет как на фазы позитронного и электронного упругого рассеяния, так и на соответствующие сечения. Важную роль играет также взаимодействие между налетающим позитроном и электронами мишени, которое приводит к образованию виртуального позитрония. Мы иллюстрируем общий подход конкретными примерами рассеяния позитронов и электронов на эндоэдралах He@C_{60} и Ar@C_{60} и сравним его с рассеянием на фуллерене C_{60} . Для получения представленных в Письме результатов нами были использованы новые упрощенные подходы, позволяющие включить эффект поляризуемости фуллеренов в поляризационные потенциалы He@C_{60} и Ar@C_{60} и Ar@C_{60} и Ar@C_{60} и учесть образование виртуального позитрония. Используя эти подходы, мы получили числовые результаты, которые показывают сильные изменения формы, фазы рассеяния, поперечных сечений из-за эффекта поляризации эндоэдралов и образования $\tilde{P}s$.

DOI: 10.7868/S0370274X1713001X

1. На первый взгляд, рассеяние позитронов e^+ на эндоэдрале можно рассматривать аналогично рассеянию электронов e^- [1–3], просто пренебрегая обменом между налетающей частицей и электронами мишени. Нет сомнения в том, что поляризация эндоэдралов, которая оказалась важной при низкоэнергетическом рассеянии $e^- + A@C_{60}$ [1–3], также играет существенную роль в столкновениях $e^+ + A@C_{60}$.

Однако уже давно стало понятным, что при рассмотрении рассеяния $e^+ + A$ приходится учитывать относительно сильное взаимодействие между e^+ и атомными электронами e^- . Это взаимодействие существенно изменяет движение пары e^+e^- в поле остаточного иона A^+ . Поскольку потенциал Хартри атома A, который действует на e^+ , – отталкивающий, волновая функция e^+ концентрируется в тех же областях, что и виртуально возбужденные атомные электроны. Поэтому они могут временно образовать виртуальный позитроний $\tilde{P}s$ [4,5], что резко влияет на сечение e^+ рассеяния. Наша цель состоит в том, чтобы проверить, имеет ли аналогичный эффект значение в низкоэнергетическом упругом $e^+ + A@C_{60}$ рассеянии.

Таким образом, для расчета $e^+ + A@C_{60}$ рассеяния необходимо одновременно учитывать два важных эффекта, а именно поляризуемость эндоэдраламишени и эффект образования $\tilde{P}s$. Следует также учесть изменение потенциала эндоэдрала при переходе от e^+ к e^- в качестве снаряда.

Уже в [1,2] мы обсуждали удивительный результат, заключающийся в том, что добавление единственного относительно малого атома внутри фуллерена существенно влияет на сечение упругого рассеяния электронов на всем эндоэдрале несмотря на то, что присутствие дополнительного атома внутри лишь незначительно меняет общий размер рассматриваемой мишени. Как было показано в [1-3], квантовая интерференция впечатляюще изменяет ситуацию, так что полная фаза $\delta_l^{A@C_N,-}$ парциальной волны l электрона, рассеянного на эндоэдрале $A@C_N$, с хорошей точностью равна просто сумме фаз рассеяния $\delta_l^{A,-}$ и $\delta_l^{C_n,-}$ – рассеяния электрона на атоме A, находящемся внутри фуллерена C_N , и самого C_N . Это было названо правилом аддитивности фаз. Данное правило означает, вопреки интуитивной оценке, что для e^- рассеяния вклад одного атома достаточно велик по сравнению с фоном всего $e^- + C_N$ сечения [4, 5].

Мы выполнили расчеты для e^- рассеяния, полагая, что оно определяется потенциалом $\hat{V}_{\rm HF}(r)$ Хартри–Фока атома A, а также статическим $W_F^-(r)$ и поляризационным $V_F^{\rm pol,-}(r)$ потенциалом C_N . Учет $V_F^{\rm pol,-}(r)$ оказался очень важным, так как C_N для $N \gg 1$ есть легко поляризуемый объект по сравнению с атомом A.

¹⁾e-mail: amusia@vms.huji.ac.il

²⁾M.Ya. Amusia

Мы учли влияние поляризации атома и взаимное влияние поляризации C_N и A, которое называем интерференцией поляризуемостей. В [2, 3] показано, что это большой эффект при e^- -рассеянии.

Цель данного письма – исследовать рассеяние e^+ на эндоэдралах и выяснить, какую роль в этих процессах играет атомный потенциал Хартри, потенциал атомной поляризации $V_A^{\text{pol},+}$, статический потенциал фуллерена $W_F^+(r)$ и его поляризационный потенциал $V_F^{\text{pol},+}(r)$, а также поляризационная интерференция $V_{FA}^{\text{pol},+}(r)$. Мы также сравниваем все результаты для e^+ с результатами же для e^- .

В качестве конкретных объектов расчетов мы выбирали почти идеально сферический фуллерен C_{60} и эндоэдралы He@C₆₀ и Ar@C₆₀ вместе с пустым фуллереном C₆₀. Таким образом, в качестве A мы выбираем весьма малые и сферические атомы He и Ar, располагающиеся в центре эндоэдралов, рассматриваемых нами.

В исследованиях упругого рассеяния e^+ и $e^$ необходимо иметь в виду некоторое важное различие в общем поведении их соответствующих фазовых сдвигов. Пусть фазы $\delta_l(E)$ как функции энергии E нормированы таким образом, что $\delta_l(E \to \infty) \to$ \rightarrow 0. Поскольку рассматриваемые мишени состоят из электронов и ядер, для e^+ отсутствует обмен между снарядом и составляющими мишени. Поэтому справедливо следующее выражение: $\delta_l^+(0) = n_l^+ \pi$, где n_l^+ – общее число связанных состояний в системе "позитрон + эндоэдрал" [6]. Наличие обмена в $e^- + A@C_N$ столкновениях приводит к существенно отличному соотношению для фаз рассеяния е- при нулевой энергии, а именно к $\delta_l^-(0) = (n_l^- + q_l^-)\pi$, где n_l^- – число связанных электронных состояний с угловым моментом l в системе $e^- + A@C_N$, а q_l^- – число связанных электронных состояний с угловым моментом *l* в самой мишени [1–3]. Поэтому поведение фаз как функции энергии налетающей частицы Е качественно отлично для e^+ и e^- в их столкновениях с $A@C_N$, а также с C_N .

Мы учитываем образование виртуального позитрония $\tilde{P}s$ способом, подобным тому, который был развит и использован при рассмотрении рассеяния $e^+ + A$ в [4,5]. В общем случае для учета сильного e^+e^- -взаимодействия в поле остаточного иона A^+ необходимо решить хотя бы задачу трех тел. Вместо этого гораздо более простой способ уже давно был предложен в [4] и развит, например, в [5]. При таком подходе образование $\tilde{P}s$ в процессе столкновения учитывается с помощью смещения полной энергии промежуточного e^+e^- -состояния на величину энергии связывания свободного позитрония $(-I_{Ps})$, где I_{Ps} есть потенциал ионизации позитрония Ps. Другие приближенные подходы, учитывающие e^+e^- взаимодействие (см., например, [7]), намного сложнее.

Мы вычисляем поляризационный потенциал в рамках приближения случайных фаз с обменным (ПСФО) [8], а С₆₀ представляем статическим потенциалом прямоугольной ямы $W_F^+(r)$. Его параметры выбираются аналогично $W_F^-(r)$, но с противоположным знаком. Что касается $W_F^-(r)$, то его параметры выбирают так, чтобы описать в согласии с данными опыта известное электронное сродство С₆₀⁻ и сечение фотоионизации низкой и средней энергий С₆₀ [9]. Наряду с $W_F^+(r)$, мы учитываем и поляризационный потенциал фуллерена $V_F^{\text{pol},+}(r)$. Особое внимание уделено разработке приближения, позволяющего рассчитать потенциал интерференции поляризуемостей $\hat{V}_{FA}^{\text{pol}}(r)$ и соответствующие фазовые сдвиги, а также сечения.

Проблема e^+ , так же как e^- -рассеяния на эндоэдралах, очень сложна. Наша цель здесь – представить лишь первый шаг в данном направлении.

2. Чтобы получить фазы рассеяния e^+ для сферического эндоэдрала, необходимо численно решить уравнения для радиальных частей одночастичных волновых функций $P_{El}^{A@C_N}(r)$:

$$\left(-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dr^2} + \frac{Z}{r} - V_{\rm H}(r) + W_F^+(r) + V_F^{\rm pol,+}(r) + V_F^{\rm pol,+}(r) + \frac{l(l+1)}{2r^2} - E\right) P_{El}^{A@C_N,+}(r) = 0.$$
(1)

Здесь Z – заряд ядра внутреннего атома A, а $V_{\rm H}(r)$ – хартриевский потенциал этого атома. Асимптотика $P_{El}^{A@C_N,+}(r)$ определяет фазу рассеяния $\delta_l^{A@C_N,+}(E)$:

$$P_{El}^{A@C_N,+}(r)|_{r\to\infty} \approx \frac{1}{\sqrt{\pi p}} \sin\left[pr - \frac{\pi l}{2} + \delta_l^{A@C_N,+}(E)\right],\tag{2}$$

где $p^2 = 2E$.

Если в (1) пренебречь $[Z/r - V_{\rm H}(r) + V_{FA}^{\rm pol,+}(r)]$, то уравнения (1), (2) определяют функции рассеяния и фазовые сдвиги позитрона на пустом фуллерене.

3. Более подробно о том, как получить фазы рассеяния численно, можно узнать в [10]. Предположим, что $W_F^+(r) = -W_F^-(r)$. Потенциал $W_F^-(r)$, как и в [1,2], представляет собой прямоугольную яму глубиной 0.52 и внутренним R_1 (внешним R_2) радиусом, равным $R_1 = 5.26$ ($R_2 = 8.17$). Потенциал $V_F^{\text{pol},+}(r)$ определяется выражениями, аналогичными приведенным в [1,2]:

$$V_F^{\text{pol},+}(r) = -\frac{\alpha_F^+}{2(r^2 + b^{+2})^2},\tag{3}$$

Письма в ЖЭТФ том 106 вып. 1-2 2017

$$\alpha_F^+ \equiv \alpha_F^-(I_{Ps}) = \frac{c}{2\pi^2} \int_{I_F}^{\infty} \frac{\sigma_F(\omega')d\omega'}{\omega'^2 - I_{Ps}^2},\tag{4}$$

где $\sigma_F(\omega)$ – сечение фотоионизации фуллерена. Сдвиг энергии I_{Ps} учитывает, как это было предложено в [4,5] и обсуждено выше, образование $\tilde{P}s$. Что касается выражения для $V_F^{\text{pol},-}(r)$, оно включает в себя $\alpha_F^-(0) \equiv \alpha_F$, где α_F – статическая дипольная поляризуемость фуллерена, которая для C_{60} и ряда других фуллеренов измеряется и/или вычисляется. Параметры b^+ и b^- – оба порядка радиуса фуллеренов, и результаты расчетов не слишком чувствительны к их точным значениям. Вот почему мы выбираем $b^+ = b^- = (R_1 + R_2)/2 \equiv R$. Простое выражение для $V_F^{\text{pol}}(r)$ широко используют в расчетах атомного рассеяния (см., например, [8]).

В принципе, поляризационные потенциалы зависят от энергии столкновения и нелокальны. У нас есть опыт определения их для рассеяния электронов на атоме с использованием теории возмущений по межэлектронному взаимодействию. Мы обычно ограничиваемся теорией возмущений второго порядка по взаимодействию налетающих электронов с электронами мишени (см. [8] и ссылки там). Аналогичный подход справедлив и для рассеяния позитронов.

Решим уравнение (1) в интегральной форме и в энергетическом представлении, где для парциальной волны l оно выглядит как (см. главу 3 из [8] и ссылки там):

$$\langle E\ell | \hat{\bar{\Sigma}}^{l}(E_{1}) | E'\ell \rangle = \langle E\ell | \hat{\Sigma}^{l}(E_{1}) | E'\ell \rangle +$$

+
$$\sum_{E''} \langle E\ell | \hat{\Sigma}^{l}(E_{1}) | E''\ell \rangle \frac{1}{E_{1} - E'' + i\delta} \langle E''\ell | \hat{\bar{\Sigma}}^{l}(E_{1}) | E'\ell \rangle.$$
(5)

Здесь сумма по E'' включает также интегрирование по непрерывному спектру.

Поляризационное взаимодействие $\hat{\Sigma}(E)$ приводит к дополнительному фазовому сдвигу рассеяния $\Delta \delta_l(E)$, связанному с диагональным матричным элементом (5):

$$e^{i\Delta\delta_l^+(E)}\sin\Delta\delta_l^+(E) = \langle E\ell \| \hat{\Sigma}_l^+(E) \| E\ell \rangle.$$
(6)

Вместо полуэмпирических потенциалов в (6) используется подход многочастичной теории возмущений со своей диаграммной техникой [8]. Матричные элементы $\langle E\ell | \hat{\Sigma}_l^+(E_1) | E'\ell \rangle$ называют: "неприводимая собственно-энергетическая часть одночастичной функции Грина".

Такой подход учитывает нелокальность и энергетическую зависимость поляризационного взаимодействия, но чтобы расчет обладал высокой точностью, необходимо включить в него достаточное количество последовательностей диаграмм. Заметим, что фазы, определенные как с помощью уравнений (1), (2), так и (5), (6), одинаковы (см., например, [8]). Это было проверено нами также чисто численно, применяя обе процедуры к случаю пустого фуллерена, что привело к идентичным результатам.

Как и в случае e^- , мы ограничиваемся теми же диаграммами [8], но пренебрегаем обменом и добавляем e^+e^- -взаимодействие, что приводит к (7), где для обозначения e^+ используется жирная линия. В (3) это соответствует учету $V_F^{\text{pol},+}(r)$. Заштрихованный овал обозначает e^+e^- взаимодействие.

$$v_1$$
 v_4 v_1'
 v_2 v_2 (7)

Волнистая линия представляет собой межэлектронное взаимодействие, $\nu_i = E_i l_i$. Линия, направленная вправо (влево), обозначает электрон (вакансию). Диаграмма (7) автоматически включает в себя некоторую бесконечную последовательность в разложении по степеням электрон-дырочного взаимодействия (см. главу 3 в [8] и [11]).

4. Когда мы рассматриваем позитрон, сталкивающийся с эндоэдралом, следует учитывать вклад взаимодействия между атомными и фуллереновыми электронами. Диаграммы (8) представляют примеры такого взаимодействия, которое дает вклад в $V_{FA}^{\mathrm{pol},+}(r)$, где F обозначает виртуальные возбуждения оболочек фуллеренов.



Рассматривая виртуальные возбуждения оболочек фуллеренов и оценивая соответствующие вклады, следует иметь в виду, что между существенным для рассеяния расстоянием налетающей частицы r_p до центра атома, радиусом фуллерена R_C и радиусом атомной орбиты r_A имеет место неравенство $r_p > R_C > r_A$.

Чтобы упростить задачу учета взаимного влияния электронов атома и фуллерена, воспользуемся приведенным выше неравенством, превратив его в сильное $r_p \gg R_C \gg r_A$. Это позволяет ограничиться только коррекцией дипольного межэлектронного взаимодействия, что требует замены кулоновского межэлектронного потенциала с использованием соотношения $1/|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2| \rightarrow \mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2/r_2^3$ для $r_1 \ll r_2$. Учет матричных элементов дальнодействующего дипольного межэлектронного взаимодействия V_1 осуществляется аналогично тому, как это делается при включении поляризационного множителя в амплитуду фотоионизации эндоэдралов, что было продемонстрировано в [12]. Поэтому мы корректируем их приближенно, заменяя $|V_1|^2$ следующим образом:

$$\begin{aligned} |V_1|^2 &\to |V_1[1 - \alpha_F^+(E_{\nu_1} - E_{\nu_4})/R_F^3]|^2 \equiv \\ &\equiv |V_1[1 - \alpha_F^-(E_{\nu_1} - E_{\nu_4} + I_{Ps})/R_F^3]|^2. \end{aligned} \tag{9}$$

Вклад заштрихованного овала или e^+e^- взаимодействия учитывается путем введения I_{Ps} в энергетический аргумент поляризуемости. Мы оставляем без изменений все компоненты, кроме дипольных, матричных элементов взаимодействия.

5. В [12] (см. также [8]) мы рассчитали поляризуемость $\alpha_F^-(\omega+I_{Ps})$. Подробности о том, как получить $\langle E\ell|\hat{\Sigma}_l^+(E_1)|E'\ell\rangle$ и решить уравнения (3) и (4), можно найти в гл. 3 из [8].

В этом Письме мы сосредоточимся на обсуждении полученных в конкретных расчетах качественных отличий позитронного и электронного низкоэнергетических рассеяний на эндоэдрале $A@C_{60}$. Вот почему мы уделяем так много внимания именно случаю атома малого радиуса, который включен внутрь С₆₀. На рис. 1 приведены результаты расчетов s-фаз и сечений рассеяния e^+ и e^- на He, C₆₀ и He@C₆₀. Видно, что влияние внутреннего атома Не относительно невелико. Заметим, что мало и сечение низкоэнергетических позитронов в столкновении e^+ + He по сравнению с сечением e^- + He. Эта малость следует из того, что для Не отталкивающий потенциал $W_F^+(r)$ почти полностью компенсирует эффект притягивающего потенциала $V_F^{\mathrm{pol},+}(r)$. Результаты для s-фазы при столкновении e^- + Не демонстрируют правило аддитивности фаз, согласно которому фаза рассеяния на He@C₆₀ равна сумме фаз рассеяния на Не и С₆₀ [1].

В парциальном поперечном сечении *s*-волны при очень низкой энергии доминирует вклад C₆₀. Сечение e^+ -рассеяния на He@C₆₀ имеет глубокий и узкий минимум типа Рамзауэра. Структура сечения намного более заметна, чем в случае рассеяния e^- . Примечательно, что большой максимум при 0.3 Р в $e^- + C_{60}$ из-за квантовых эффектов полностью исчезает в столкновении $e^- + \text{He}@C_{60}$.



Рис. 1. (Цветной онлайн) Роль e^+e^- взаимодействия в s-фазе и сечениях e^+ -рассеяния на He, C₆₀ и He@C₆₀. (a) – s-фаза с $I_{\rm Ps}$ сдвигом и без него. (b) – Парциальные s-сечения e^+ с $I_{\rm Ps}$ сдвигом и без него

На рис. 2 представлены результаты для *p*-фазы и *p*-парциального сечения. Для e^+ -случая фаза, естественно, много меньше, чем для e^- , и роль Не в Не@С₆₀ также мала. В e^- -случае фаза рассеяния на Не велика и справедливо правило аддитивности для фаз.

Парциальное сечение *p*-волны для обоих e^+ и e^- случаев имеет сильный максимум около 0.1 P, абсолютное значение для e^- -случая в 1.5 раза больше, чем для e^+ . Сечение e^+ имеет глубокий минимум типа Рамзауэра, расположенный немного выше для *p*-волны (на 0.5 P), чем для *s*-волны. Для e^- такого минимума нет.

На рис. 3 представлены фазы и парциальные сечения упругого рассеяния низких энергий на Ar и Ar@C₆₀. Для удобства читателя рис. 3 включает также кривые, которые представляют столкновение e^+ с C₆₀. Оказалось, что в то время как для *p*-волны справедливо правило аддитивности фаз, оно не работает для *s*-волны. Отсутствие обмена с компонентами мишени и отсутствие реальных *s*-связанных состояний e^+ с рассматриваемыми мишенями требу-



Рис. 2. (Цветной онлайн) Роль e^+e^- взаимодействия в *p*-фазе и сечениях e^+ -рассеяния на He, C₆₀ и He@C₆₀. (a) – *p*-фаза с $I_{\rm Ps}$ сдвигом и без него. (b) – Парциальные *s*-сечения e^+ с $I_{\rm Ps}$ сдвигом и без него

ет, чтобы все фазы *s*-рассеяния для нулевой энергии столкновения были бы равны нулю. Тот факт, что *s*-фаза имеет в Ar отличное от нуля значение при низкой энергии, свидетельствует о наличии резонанса рассеяния, очень близкого к нулевой энергии. И действительно, *s*-поперечное сечение имеет мощный максимум (до 500!), а затем около 0.3 Р имеет очень глубокий рамзауэровский минимум. Что касается *p*волны, то ее максимум составляет около 0.15 Р и в два раза ниже, чем для *s*-волны. Роль Ar внутри C₆₀ заметна для обеих рассматриваемых парциальных волн – *s* и *p*.

6. В этом письме предложен подход, позволяющий исследовать рассеяние позитронов на эндоэдралах $A@C_{60}$. Такой подход дает возможность учесть поляризацию A и C_{60} , а также интерференцию их поляризуемостей. Этот подход позволяет также учесть сильное взаимодействие позитрона с электронами мишени, используя концепцию образования виртуального позитрония в процессе рассеяния.



Рис. 3. (Цветной онлайн) Сравнение фаз и сечений рассеяния e^+ на Ar, C₆₀ и Ar@C₆₀. (a) – *s*- и *p*-фазы рассеяния. (b) – Парциальные *s*- и *p*-сечения рассеяния

Для двух объектов, а именно He@C₆₀ и Ar@C₆₀, мы провели численные расчеты, которые демонстрируют заметную роль атома *A* в формировании сечения рассеяния и большое различие между позитронным и электронным рассеянием. Как и в случае рассеяния электронов на эндоэдралах, мы наблюдаем большое различие сечений фуллерена и эндоэдрала. Это означает, что сечение определяется квантовой механикой, теряя свою наиболее заметную особенность – зависимость при низкой энергии рассеяния только от размера мишени.

Наблюдаемая резонансная структура сечений заслуживает экспериментального исследования, поскольку позволяет пролить свет на различие потенциалов, с помощью которых эндоэдралы воздействуют на налетающую частицу – позитрон или электрон.

Мы полагаем, что предложенный метод и представленные результаты конкретных расчетов будут стимулировать теоретические и экспериментальные исследования упругого рассеяния медленных позитронов на эндоэдральных атомах.

- M. Ya. Amusia and L. V. Chernysheva, Письма в ЖЭТФ 101(7), 556 (2015) [JETP Lett. 101(7), 503 (2015)].
- M. Ya. Amusia and L. V. Chernysheva, Письма в ЖЭТФ 103(4), 286 (2016) [JETP Lett. 103(4), 260 (2016)].
- V. K. Dolmatov, M. Ya. Amusia, and L. V. Chernysheva, Phys. Rev. A 95, 012709 (2017).
- M. Ya. Amusia, N. A. Cherepkov, L. V. Chernysheva, and S. G. Shapiro, J. of Phys. B: At. Mol. Phys. 9(17), L531 (1976).
- 5. M. Ya. Amusia, N. A. Cherepkov, and L. V. Chernysheva, JETP **124**, 1 (2003).
- L. D. Landau and E. M. Lifshits, Quantum mechanics: non-relativistic theory, 3rd edn, Pergamon Press, Oxford (1973).

- G. F. Gribakin and J. Ludlow, Phys. Rev. A 70, 032620 (2004).
- M. Ya. Amusia, L. V. Chernysheva, and V. G. Yarzhemsky, Handbook of Theoretical Atomic Physics, Data for Photon Absorption, Electron Scattering, Vacancies Decay, Springer, Berlin (2012), p. 806.
- V. K. Dolmatov, J. L. King, and J. C. Oglesby, J. Phys. B 45, 105102 (2012).
- М. Я. Амусья, С.К. Семенов, Л.В. Чернышева, ATOM-M. Алгоритмы и программы для исследования атомных и молекулярных процессов, Наука, СПб (2016).
- R. D. Mattuck, A Guide to Feynman Diagrams in the Many-Body Problem: Second Ed., Dover books in physics (2012), p. 464.
- M. Ya. Amusia and A.S. Baltenkov, Phys. Lett. A 360, 294 (2006).