

УДК 539.184.01
PACS number(s): 34.80.-I;34.80.Bm

ПРУЖНЕ РОЗСІЮВАННЯ ПОВІЛЬНИХ ЕЛЕКТРОНІВ АТОМАМИ КАЛЬЦІЮ В НАБЛИЖЕННІ ОПТИЧНОГО ПОТЕНЦІАЛУ

В. Келемен, В. Стойка, Є. Ремета

*Інститут електронної фізики Національної академії наук України
відділ теорії елементарних взаємодій
вул. Університетська, 21, 88017 Ужгород, Україна
e-mail: kelemen@iep.uzhgorod.ua, remeta@iep.uzhgorod.ua*

Проаналізовано складові частини оптичного потенціалу взаємодії електрона з атомом. Наведено конкретні вирази для статичного, обмінного, безпараметричного поляризаційного потенціалів та потенціалу поглинання. Розглянено процес пружного розсіювання повільних, енергія зіткнення яких не більше 10 еВ, електронів атомами кальцію. Проведено порівняльний аналіз резонансних характеристик розсіювання для поляризаційних потенціалів різного виду. Зроблено спробу визначення області застосування безпараметричного поляризаційного потенціалу.

Ключові слова: оптичний потенціал, теорія функціоналу густини, пружне розсіювання, електронна густина, резонанс, локальне наближення, повний і парціальний переріз.

Широкого застосування останніми роками набуло використання модельних оптичних потенціалів для опису процесу пружного розсіювання електронів, позитронів та атомів на багатоелектронних системах – атомах, молекулах, кластерах – при малих (десятки еВ) та середніх (декілька сотень еВ) енергіях зіткнення E . Складові оптичного потенціалу (ОП) $V_{\text{opt}}(r, E) = V_s(r) + V_x(r, E) + V_p(r) + iV_a(r, E)$ мають прозорий фізичний зміст, що відображає різні аспекти міжчастинкової взаємодії. Це такі потенціали, як електростатичний $V_s(r)$, обмінний $V_x(r, E)$, поляризаційний $V_p(r, E)$ та потенціал поглинання $V_a(r, E)$ [1]. Для їх знаходження використовують різні модельні уявлення про взаємодію налітаючої частинки з атомною системою. Важливим є використання однотипних наближень або таких, що дають підстави говорити про самоузгоджений опис розсіювання. Доцільним також є дослідження отриманих у різних моделях інтегральних перерізів та таких прецизійних характеристик розсіювання, як диференціальні перерізи, резонансні і поляризаційні параметри. З цією метою ми розглядаємо розсіювання повільних (до 10 еВ) електронів атомами кальцію, де для знаходження як функціональних, так і простих величин у складових ОП використовуємо локальне наближення теорії функціоналу густини.

Пружне розсіювання повільних електронів атомами кальцію було досліджено достатньо повно. Короткий огляд праць наведено в [1] – вони різнобічно вивчають процес пружного розсіювання повільних електронів атомами лужноземельних Ca, Sr, Ba та рідкоземельних Yb елементів. Оскільки ці атоми мають дуже велику

дипольну поляризованість – від півтора до майже трьох сотень ат. од. – роль поляризаційного потенціалу має бути визначальною. Головною проблемою під час цих досліджень була ідентифікація резонансних особливостей припорогового розсіювання. Показано (див. [1]), що пружне розсіювання характеризується 2D -резонансом форми з енергією та шириною менш ніж 1 еВ. У випадку атома Са енергія та ширина є $E_2^r=0,87$ еВ, $\Gamma_2=0,98$ еВ, відповідно [1]. Результати інших авторів дещо відрізняються від наведених.

Статичний потенціал і електронну густину в цій роботі атома-мішені одержимо в локальному наближенні теорії функціоналу густини з виключенням енергії самодії електронів та з урахуванням скалярно-релятивістських ефектів. Наявність аналітичних виразів для цих характеристик значно підвищує зручність їх широкого використання.

Статичний потенціал атома-мішені $V_s(r)$ складається з потенціалів ядра і прямої кулонівської взаємодії між електронами, потенціалу Хартрі, який визначається електронною густиною атома $\rho(r)$. Його можна подати через електронний фактор $Z_p(r)$ (Z – заряд ядра) (тут і далі в атомних одиницях)

$$V_s(r) = \frac{Z}{r} \cdot \frac{Z_p(r)}{Z}, \quad (1)$$

для апроксимації якого в [2] запропоновано аналітичну формулу

$$\frac{Z_p(r)}{Z} = \sum_i^{n_i} A_i \exp(-B_i r) + r \cdot \sum_j^{n_j} C_j \exp(-D_j r). \quad (2)$$

Для густини атомних електронів використовується такий аналітичний вираз (див. [2]), що одержуємо з (2) та рівняння Пуассона:

$$\rho(r) = -\frac{Z}{4\pi r} \left[\sum_i^{n_i} A_i \cdot B_i^2 \cdot \exp(-B_i r) + \sum_j^{n_j} C_j D_j (D_j r - 2) \exp(-D_j r) \right]. \quad (3)$$

Коефіцієнти A_i , в першому доданку цього виразу, задовольняють співвідношення $A_1 + A_2 + \dots + A_{n_i} = 1$. У випадку атома кальцію $n_i=3$, $n_j=4$.

Спеціальною процедурою апроксимації, що використовує вирази (2) і (3), ми знайшли деякі значення коефіцієнтів, які є загальними як для статичного потенціалу, так і для густини: $A_1=-0,054$, $B_1=52,438$; $A_2=1,9839$, $B_2=2,081$; $A_3=1-(A_1+A_2)=-0,930$, $B_3=13,204$; $C_1=-8,572$, $D_1=6,1110$; $C_2=-5,006$, $D_2=18,841$; $C_3=-1,636$, $D_3=2,403$; $C_4=0,1974$, $D_4=1,088$. Густину $\rho(r)$ використовують в усіх складових оптичного потенціалу (див. нижче).

Локальний обмінний потенціал $V_x(r, E)$ знаходять у моделі вільного електронного газу (ВЕГ) [3, 4]

$$V_x(r, E) = -\frac{k_F(r)}{\pi} \left(1 + \frac{1-\xi^2}{2\xi} \ln \left| \frac{1+\xi}{1-\xi} \right| \right). \quad (4)$$

У (4) використано т.зв. локальний імпульс Фермі атомних електронів

$$k_F(r) = \left[3\pi^2 \rho(r) \right]^{1/3}, \quad (5)$$

і функцію $\xi(r) = k_s(r) / k_F(r)$ з локальним імпульсом налітаючого електрона

$$k_s^2(r) = k^2 + k_F^2(r) + 2I / [1 + (kr)^2 / 2], \quad k^2 = 2E. \quad (6)$$

В (6) І енергія (потенціал) іонізації атома мішені. Більш загальний вираз для $k_s(r)$, що містить потенціальну функцію, буде

$$k_s^2(r) = k^2 + k_F^2(r) + V(r, k^2/2). \quad (7)$$

Як $V(r, E)$ можна брати різні складові оптичного потенціалу: статичну, статично-обмінну, статично-обмінно-поляризаційну. Взагалі, як вже наголошувалося, в такому підході – описанні взаємодії електрона в електронному газі – всі типи взаємодії потрібно враховувати узгоджено.

Поляризаційний потенціал $V_p(r)$ в [5] запропоновано розглядати на малих відстанях, в області атома, та на великих, асимптотичних відстанях, тобто в, так би мовити, статично-адіабатному наближенні

$$V_p(r) = \begin{cases} 2\varepsilon_c[\rho(r)], & r \leq r_c \\ -\frac{\alpha_d}{2r^4}, & r > r_c \end{cases}, \quad (8)$$

де $\varepsilon_c[\rho(r)]$ густина кореляційної енергії міжелектронної взаємодії, α_d статична дипольна поляризованість, r_c відстань, де обидві частини потенціалу збігаються. У цьому наближенні потенціал не залежить від енергії налітаючих електронів. Енергія ε_c має безпараметричний вираз через електронну густину атома-мішені та отримана за допомогою використання т.зв. кореляційної взаємодії у ВЕГ

$$2\varepsilon_c[\rho] = \begin{cases} 0.0622 \ln r_s - 0.096 + 0.018 r_s \ln r_s - 0.02 r_s, & r_s \leq 0.7 \\ -0.1231 + 0.03796 \ln r_s, & 0.7 < r_s \leq 10 \\ -0.87 r_s^{-1} + 2.65 r_s^{-3/2} - 2.8 r_s^{-2} - 0.8 r_s^{-5/2}, & 10 \leq r_s, \end{cases} \quad (9)$$

$$r_s(r) = \left(\frac{3}{4\pi\rho(r)} \right)^{1/3}.$$

Значення дипольної поляризованості отримано в часо-залежному локальному наближенні теорії функціоналу густини $\alpha_d = 148,78 a_0^3$ (див. [1]).

Зазначимо, що в [1] потенціал $V_p(r)$ використовували або у дипольному вигляді

$$V_p(r) = -\frac{\alpha_d}{2r^4} W_6(r, x), \quad W_m(r, x) = 1 - \exp[-(r/x)^m], \quad (10)$$

або у дипольно-квадрупольному – до (10) додавали доданок $-\alpha_q / 2r^6 \cdot W_8(r, x)$. В цих виразах x підганяльний параметр, α_q статична квадрупольна поляризованість. У дослідженні [1] було отримано значення $x = 5,94 a_0$, знаючи умову існування стабільного від'ємного іона в конфігурації $4s^2 4p^2 P_J$ з енергією спорідненості 43 меВ.

Потенціал поглинання $V_a(r, E)$ починає “діяти” з енергій, які дорівнюють збудженню 1-го стану – вище від порогу непружних процесів. Його знаходять у наближенні квазівільного розсіювання електронів з блокуванням Паулі [6]

$$V_a(r, E) = -\frac{1}{2} v_{loc}(r, E) \cdot \rho(r) \cdot \bar{\sigma}_b(r, E), \quad (11)$$

де локальна швидкість електрона, що розсіюється

$$v_{loc}(r, E) = \{2 \cdot [E - V_s(r) - V_x(r, E)]\}^{1/2}. \quad (12)$$

Величина $\bar{\sigma}_b$ в (11) – повний переріз електрон-електронного зіткнення з врахуванням принципу Паулі. У [6] наведено такий вираз для цього перерізу в наближенні, що непружна взаємодія є результат дозволених за принципом Паулі бінарних зіткнень налітаючого електрона з електронами мішені

$$\bar{\sigma}_b(r, E) = [4\pi / 5 \cdot E \cdot k_F^3(r)] \cdot f(r, E), \quad (13)$$

де

$$f = \begin{cases} f_1, \Delta + k_F^2(r) \leq E \\ f_1 + f_2, \Delta + k_F^2(r) / 2 \leq E \leq \Delta + k_F^2(r), \\ 0, E \leq \Delta + k_F^2(r) / 2 \end{cases} \quad (14)$$

$$f_1 = 5k_F^3(r) / 2\Delta - k_F^3(r)[10E - 3k_F^2(r)] / [2E - k_F^2(r)]^2, \quad (15)$$

$$f_2 = 2^{7/2} [k_F^2(r) + \Delta - E]^{5/2} / [2E - k_F^2(r)]^2.$$

Величина Δ в цих формулах енергетична щілина між основним та збудженими станами атома мішені. У випадку атома кальцію вона дорівнює 1,88 еВ.

Оптичний потенціал, у вигляді $V_{\text{opt}}(r, E) = V_R(r, E) + iV_a(r, E)$, використовують в системі рівнянь для комплексної фазової функції [7, 8] $\delta_\ell(E, r) = \varepsilon_\ell(E, r) + i\bar{\eta}_\ell(E, r)$

$$\begin{aligned} \frac{d\varepsilon_\ell}{dr} &= -\frac{1}{4k\eta_\ell} \{V_R [(1+\eta_\ell)^2(j_\ell \cos \varepsilon_\ell - n_\ell \sin \varepsilon_\ell)^2 - (1-\eta_\ell)^2(j_\ell \sin \varepsilon_\ell + n_\ell \cos \varepsilon_\ell)^2] + \\ &\quad + 2V_a(1-\eta_\ell^2)(j_\ell \cos \varepsilon_\ell - n_\ell \sin \varepsilon_\ell)(j_\ell \sin \varepsilon_\ell + n_\ell \cos \varepsilon_\ell)\}, \\ \frac{d\eta_\ell}{dr} &= \frac{1}{2k} \{V_a[(1+\eta_\ell)^2(j_\ell \cos \varepsilon_\ell - n_\ell \sin \varepsilon_\ell)^2 - (1-\eta_\ell)^2(j_\ell \sin \varepsilon_\ell + n_\ell \cos \varepsilon_\ell)^2] - \\ &\quad - 2V_R(1-\eta_\ell^2)(j_\ell \cos \varepsilon_\ell - n_\ell \sin \varepsilon_\ell)(j_\ell \sin \varepsilon_\ell + n_\ell \cos \varepsilon_\ell)\}. \end{aligned} \quad (16)$$

Тут $\eta_\ell(E, r) = \exp(-2\bar{\eta}_\ell(E, r))$, $j_\ell \equiv j_\ell(kr)$, $n_\ell \equiv n_\ell(kr)$ - функції Риккати-Бесселя. Реальну $\varepsilon_\ell(E)$ та уявну $\bar{\eta}_\ell(E)$ частини парціальної фази розсіювання $\delta_\ell(E)$ отримують з відповідних фазових функцій при $r \rightarrow \infty$

$$\varepsilon_\ell(E) = \lim[\varepsilon_\ell(E, r)], \quad \bar{\eta}_\ell(E) = -\frac{1}{2} \ln \lim[\eta_\ell(E, r)]. \quad (17)$$

Під час знаходження розв'язків виконуються такі граничні умови: $\varepsilon_\ell(E, 0) = 0$, $\eta_\ell(E, 0) = 1$. Для енергій зіткнення $E < \Delta$ система рівнянь зведена до одного рівняння на реальну частину $\varepsilon_\ell(E, r)$ фазової функції.

З наведеними потенціалами (1), (4), (8), (11), як складовими ОП, ми провели дослідження характеристик пружного розсіювання електронів атомами кальцію. Наші розрахунки зроблені для дійсного ОП у два етапи, залежно від виду асимптотики поляризаційного потенціалу (8): для дипольної і дипольно-квадрупольної. Для комплексного ОП використовували тільки другий етап.

На першому етапі знайдена відстань r_c у (8) дорівнює $7,104a_0$ (порівняймо з $x = 5,94a_0$ в [1]). При цьому два терми ${}^2P_{1/2,3/2}$ конфігурації $4s^24p$ від'ємного іона Ca^- відповідають зв'язаним станам з енергіями спорідненості E_a які становлять 60 та 51 меВ, відповідно. Це розщеплення на стани тонкої структури зроблено завдяки спін-орбітальній взаємодії, яка зв'язана з відповідним потенціалом, пропорційним до величини $1/r \cdot dV_s(r) / dr$. 2D -резонанс форми є метастабільним (дуже мале

значення його ширини) при малій енергії 4,5 меВ. Мінімум Рамзауера-Таунсенда, в парціальній s -хвилі, знаходиться при енергії 50 меВ (порівняймо з 12 меВ в [1]).

Для другого етапу, коли асимптотична поведінка поляризаційного потенціалу в (8) визначається ще й квадрупольним членом з $\alpha_q=3356,9a_0^5$ [9], відстань $r_c=8,113a_0$, енергія спорідненості термів ${}^2P_{1/2,3/2}$ є 87 та 80 меВ, відповідно. 2D -резонанс форми знаходиться при тій же енергії та також є метастабільним. Мінімум Рамзауера-Таунсенда перебуває при енергії 86 меВ. На меті було зробити більш правильну, неточкову зшивку короткодіючої частини (9) $2\varepsilon_c[\rho(r)]$ (при $r_s>10$) потенціалу (8) з асимптотичною поведінкою. З використанням обмежуючої функції з (10) формула зшивки має вигляд

$$V_p(r) = \varepsilon_c \cdot [1 - W_D(r, A)] + B \cdot \left(-\frac{\alpha_d}{2r^4} \right) \cdot W_D(r, A) + \varepsilon_c \cdot [1 - W_E(r, C)] + B \cdot \left(-\frac{\alpha_q}{2r^6} \right) \cdot W_E(r, C) \quad (18)$$

Коефіцієнти апроксимації: $A=8,0337a_0$, $B=0,99995$, $C=7,9993a_0$, $D=49,808$, $E=37,559$. Зазначимо, що ця зшивка легко проробляється завдяки врахуванню саме квадрупольної асимптотики. Розглянуті вище характеристики розсіювання, які ми отримали, суттєво не змінилися.

На рис. 1 наведено перші три парціальні фазові зсуви, розраховані для дійсного ОП. Порівняння цих фаз з тими, що розраховані в комплексному представленні дає дещо більші величини. Так, при 10 еВ s -фаза більша на 2%, p -фаза на 3% та d -фаза на 8%. На рис. 2 наведено відповідні парціальні перерізи розсіювання. Фазові зсуви, загалом, мають монотонну поведінку. З рис. 2 бачимо, що, як зазначено вище, s -переріз має мінімум Рамзауера-Таунсенда. Парціальний d -переріз для енергій більше 0,1 еВ невеликий з максимумом при енергії $\sim 1,5$ еВ. Теоретичні повні (інтегральні) перерізи для комплексного ОП зі зшивкою (18) наведено на рис. 3. У розрахунках враховано від 10 (при 0,1 еВ) до 25 (10 еВ) парціальних хвиль.

Рис. 1 дає підстави зробити висновок про добре узгодження поведінки та величин s - і p -фазових зсувів з працею [1]. Має дещо іншу поведінку та величину d -фаза – є скачок на π при дуже малих (4,5 меВ) енергіях. Це свідчення того, що при цих енергіях вона проходить через $\pi/2$ і тому 2D -резонанс форми дуже близький до порогу розсіювання, а отже, потенціал взаємодії достатньо сильний. Парціальні перерізи з рис. 2 мають такі максимальні значення: s – $120 a_0^2$ (при 1 еВ), p – $380 a_0^2$ (0,5 еВ), d – $130 a_0^2$ ($\sim 1,5$ еВ). У [1] вони такі: $\sim 200 a_0^2$ ($\sim 0,4$ еВ), $600 a_0^2$ ($\sim 0,4$ еВ) та $780 a_0^2$ (1,2 еВ), відповідно. Бачимо, що величини та поведінка різні. Це, своєю чергою відбивається на повному перерізі, який на рис. 3 досягає максимального значення $\sim 570 a_0^2$ (при $\sim 0,8$ еВ), що менше першого експериментального максимуму $950 a_0^2$ (при 0,8 еВ) та дещо вище другого, зобов'язаного відкриттю непружного каналу, $\sim 500 a_0^2$ (при $\sim 1,8$ еВ). У дослідженні [1] теоретичний повний переріз $\sim 1350 a_0^2$ (при $\sim 1,2$ еВ). Зазначимо, що у нас, як і в [1], цей другий максимум не описаний.

Вперше для розсіювання електронів малих енергій на атомі кальцію використано безпараметричний поляризаційний потенціал з різними типами його зшивки з асимптотичною поведінкою. Розрахунки, зроблені в узгодженому підході

– з використанням атомних характеристик, знайдених у наближеннях теорії функціонала густини – засвідчили про значну залежність резонансних параметрів

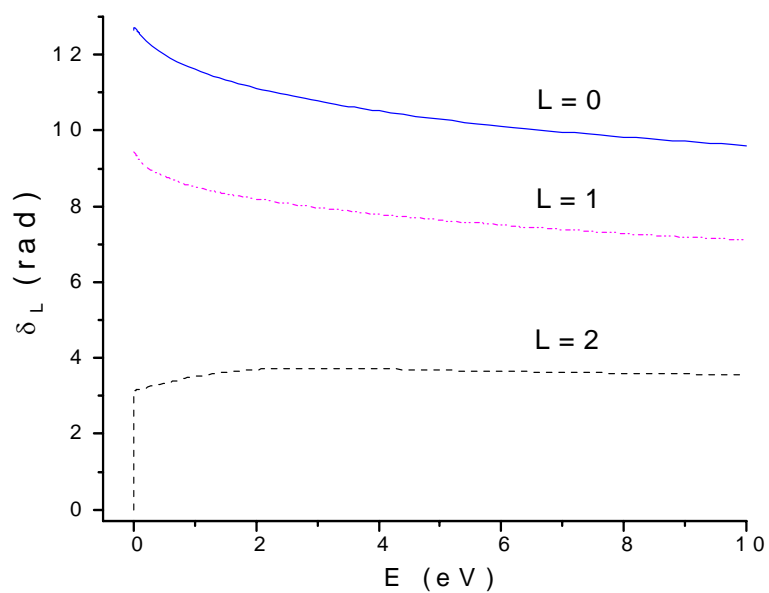


Рис. 1. s -, p -, d -парціальні фази пружного розсіювання електронів атомами Ca

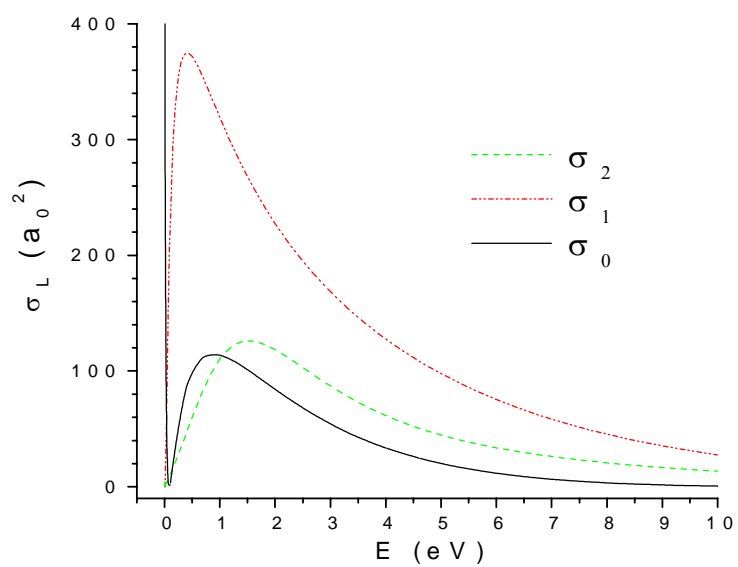


Рис. 2. s -, p -, d -парціальні перерізи пружного розсіювання електронів атомами Ca

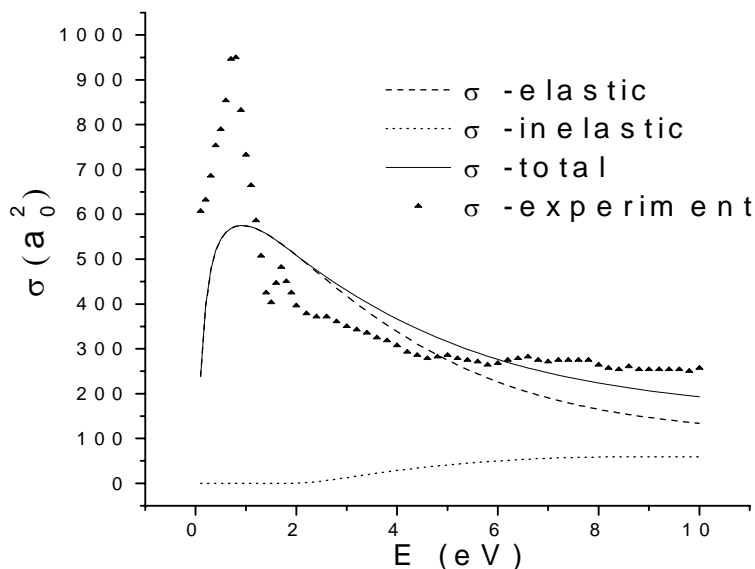


Рис. 3. Повні перерізи пружного розсіювання електронів атомами Ca

розсіювання від цього потенціалу. Все це дає змогу зробити висновок про потребу подальших досліджень поляризаційних особливостей деформації електронної густини атома-мішені налітаючою зарядженою частинкою.

1. *Баби́ков В.В.*, Метод фазовых функций в квантовой механике. М.: Наука, 1988. 256 с.
2. *Calogero F.*, Variable Phase Approach to Potential Scattering. New York & London: Acad. Press, 1967. 292 p.
3. *Kelemen V.I., Remeta E.Yu., Sabad E. P.* Scattering of electrons by Ca, Sr, Ba and Yb atoms in the 0-200 eV energy region in the optical potential model // *J. Phys. B* 1995. Vol. 28. P. 1527–1546.
4. *Raimes S.* Many-Electron Theory. Amsterdam: North-Holland, 1972. 333 p.
5. *O'Connell J.K., Lane N.F.* Nonadjustable exchange-correlation model for electron scattering from closed-shell atoms and molecules // *Phys. Rev.* 1983. Vol. 27. № 4. P. 1893–1903.
6. *Sen K.D., Schmidt P.C.* Static dipole and quadrupole polarizabilities of alkaline earth atoms // *Int. J. Quantum Chem.* 1981. Vol. 19. P. 373–376.
7. *Strand T. G., Bonham R. A.* Analytical expressions for the Hartree-Fock potential of neutral atoms and for the corresponding scattering factors for X rays and electrons // *J. Chem. Phys.* 1964. Vol. 40. № 6. P. 1686–1691.
8. *Staszewska G., Schwenke D.W., Thruhlar D.G.* // *Int. J. Quant. Chem.: Quant. Chem. Symp.* 1983. Vol. 17. 163 p.
9. *Sur S., Ghosh A.S.* Local model exchange potential // *Indian J. Phys.* 1983. Vol. 57B. №. 1. P. 67–70.

**ELASTIC SLOW ELECTRON SCATTERING BY CALCIUM ATOMS
WITHIN THE OPTICAL POTENTIAL APPROACH****V. Kelemen, V. Stoyka, E. Remeta**

*Institute of Electron Physics of National Academy of Sciences of Ukraine,
Universitetska Str., 21, UA-88017 Uzhgorod, Ukraine
e-mail: kelemen@iep.uzhgorod.ua, remeta@iep.uzhgorod.ua*

The components of optical electron-atom interaction potential are analyzed. The specific expressions for the static, exchange, non-parametric polarization and absorption potentials are presented. The process of elastic scattering of slow (collision energy not exceeding 10 eV) electrons by calcium atoms is considered. A comparative analysis of the resonance scattering characteristics has been performed for different-type polarization potentials. An attempt to determine the application range for the parameter-free polarization potential is made.

Key words: Optical potential, elastic scattering, electron density, density functional theory, local approach, resonance, total and partial cross sections.

Стаття надійшла до редколегії 19.05.2004

Прийнята до друку 21.11.2005