



УДК 539.184.01

© 2011

Е. Ю. Ремета, В. И. Келемен

**Релятивистское приближение для определения положений минимумов дифференциальных сечений и точек полной спиновой поляризации процесса упругого рассеяния электронов на тяжелых атомах**

*(Представлено академиком НАН Украины О. Б. Шпеником)*

*Пропонується метод оптичного потенціалу для описання процесу потенціального пружного розсіювання електронів багатоелектронними атомами з релятивістською поправкою до обмінної взаємодії. Ця поправка також використовується при самоузгоджених розрахунках атомних характеристик та величини дипольної статичної поляризованості атома-мішені. Підхід базується на наближенні локальної густини теорії функціонала густини та застосовується для розрахунку енергій та кутів особливостей у диференціальних перерізах і функціях спінової поляризації – відповідно критичних мінімумів та точок повної (100%) поляризації – при розсіюванні електронів на атомах ртуті в широкій, 10–1500 еВ, області енергій зіткнень.*

Спин-орбитальное взаимодействие налетающего электрона с тяжелым атомом-мишенью является наиболее сильным, зависящим от заряда ядра, релятивистским эффектом (рассеяние Мотта). Оно приводит к тому, что процесс упругого рассеяния на бесспиновой мишени становится спин-зависимым и, в дополнение к прямой амплитуде  $f$ , определяется амплитудой переворота спина  $g$  [1, 2]. Эффекты поляризации электронов при рассеянии на таком атоме обязаны именно этому, а не обменному, взаимодействию. Описание атомных характеристик и потенциалов взаимодействия электрона с многоэлектронным атомом при рассеянии определяется качеством учета релятивистских эффектов.

Амплитуды  $f(\theta, E)$  и  $g(\theta, E)$  рассеяния электрона на бесспиновом атоме являются функциями угла рассеяния  $\theta$  и энергии столкновения  $E$  и характеризуются своими модулями  $|f|$ ,  $|g|$  и фазами  $\gamma_1, \gamma_2$ :  $f(\theta, E) = |f|e^{i\gamma_1}$ ,  $g(\theta, E) = |g|e^{i\gamma_2}$  [1, 2]. Полная информация об этих величинах содержится в дифференциальных сечениях (ДС) рассеяния неполяризованных электронов

$$\frac{d\sigma_u(\theta, E)}{d\theta} = |f|^2 + |g|^2 \quad (1)$$

и в спиновых наблюдаемых, характеризующих вектор конечной поляризации электронов, обязанной спин-орбитальному взаимодействию

$$\vec{P}'_e = \frac{[P_{en} + S(\theta, E)]\hat{n} + T(\theta, E)\vec{P}_{ep} + U(\theta, E)(\hat{n} \times \vec{P}_{ep})}{1 + P_{en}S(\theta, E)}. \quad (2)$$

Здесь  $S^2 + T^2 + U^2 = 1$ ,  $\vec{P}_e = \vec{P}_{ep} + \vec{P}_{en}$  — начальная поляризация электронов, а  $\vec{P}_{ep}$  и  $\vec{P}_{en}$  — компоненты этого вектора — параллельная и нормальная плоскости рассеяния;  $\hat{n}$  — вектор-нормаль к плоскости рассеяния. Когда  $\vec{P}_e = \vec{P}_{en} + \vec{P}_{ep} = 0$ , из (2) имеем, что вектор  $\vec{P}'_e = S(\theta, E)\hat{n}$ . Таким образом, если начальный пучок электронов неполяризован, то его поляризация после рассеяния прямо связана с  $S$  (функция Шермана). Параметры спиновой поляризации  $S, T, U$  являются функциями угла  $\theta$  и энергии  $E$  и связаны с амплитудами

$$S(\theta, E) = i \frac{fg^* - f^*g}{|f|^2 + |g|^2}, \quad T(\theta, E) = \frac{|f|^2 - |g|^2}{|f|^2 + |g|^2}, \quad U(\theta, E) = \frac{fg^* + f^*g}{|f|^2 + |g|^2}. \quad (3)$$

Поведение ДС, параметров  $S, T, U$  и положения их особенностей чувствительны к качеству приближений, используемых в оптическом потенциале (ОП). Мы применяем два метода [3–5]: комплексного ОП (SEPASo-приближение)

$$V_{\text{опт}}^{\pm}(r, E) = V_R^{\pm}(r, E) + iV_A(r, E) \quad (4)$$

и вещественного, беспараметрического, ОП (SEPSO-приближение)

$$V_{\text{опт}}^{\pm}(r, E) = V_R^{\pm}(r, E) = V_S(r) + V_e(r, E) + V_p(r) + V_{so}^{\pm}(r). \quad (5)$$

Составляющие ОП члены  $V_S, V_e, V_p, V_{so}^{\pm}, V_A$  в (4) и (5) — это статический потенциал, потенциалы обменного, поляризационного, спин-орбитального взаимодействия и поглощения [3–5]. Для согласованного описания процесса упругого рассеяния электронов на атомах эти потенциалы и атомные характеристики, применяемые в ОП, определяются нами в локальном приближении стационарной [6] и нестационарной [7] (см. также [5]) теории функционала плотности (ТФП) с определенным учетом релятивистских эффектов.

В работе [8] на основе теоретико-полевого рассмотрения взаимодействия между электронами через квантованное электромагнитное поле было получено выражение для плотности обменной энергии  $\varepsilon_x^R$  в однородном парамагнитном — все электронные спиновые состояния заполнены и спиновая поляризация газа равна нулю — релятивистском электронном газе (также см. [9]). В [9] выражения для  $\varepsilon_x^R$  и обменного потенциала  $V_x^R$  представлены через нерелятивистские  $\varepsilon_x^{NR}$  и  $V_x^{NR}$  с множителями  $\phi_R(r)$  и  $\psi_R(r)$  для локального применения в каждой точке  $r$  неоднородного электронного газа

$$\varepsilon_x^R(r_s) = \phi_R(r_s)\varepsilon_x^{NR}(r_s), \quad \phi_R(r_s) = 1 - 3[\beta\eta - \ln\xi]^2/2\beta^4, \quad (6)$$

$$V_x^R(r_s) = \frac{\delta}{\delta\rho}[\rho\varepsilon_x^R] = \frac{\delta}{\delta\rho}[\rho(\phi_R\varepsilon_x^{NR})] = \psi_R(r_s)V_x^{NR}(r_s), \quad \psi_R(r_s) = -\frac{1}{2} + \frac{3}{2}\frac{\ln\xi}{\beta\eta}. \quad (7)$$

Здесь  $\varepsilon_x^{NR}(r_s) = -3/[2\pi\alpha r_s(r)]$ ,  $\alpha = (4/9\pi)^{1/3} \cong 0,521$ ,  $r_s(r) = \{3/[4\pi\rho(r)]\}^{1/3}$ ,  $\rho(r)$  — полная плотность электронов,  $V_x^{NR}(r_s) = -2/[\pi\alpha r_s(r)]$ ,  $\beta(r_s) = [3\pi^2\rho(r)]^{1/3}/c$ ,  $\eta(r_s) = [1 + \beta(r_s)^2]^{1/2}$ ,  $\xi(r_s) = \beta(r_s) + \eta(r_s)$ ,  $c = 137,036$  — скорость света. Используем атомную систему единиц:  $\hbar = e = m_e = 1$ .

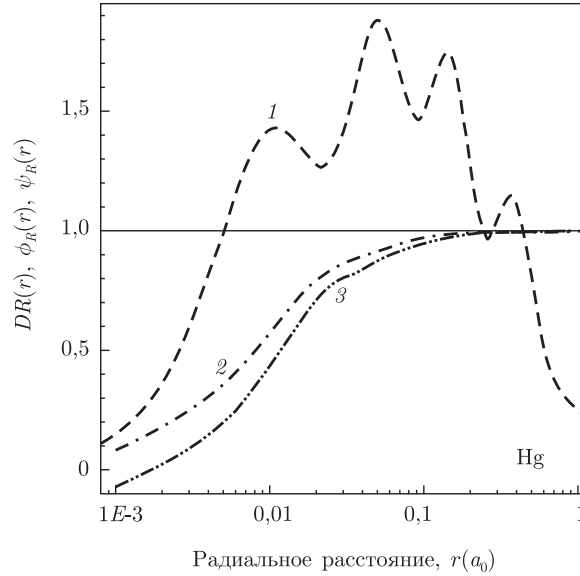


Рис. 1. Приведенная радиальная плотность электронов  $DR(r) = 4\pi r^2 \rho(r)/N$  (кривая 1) и функций  $\phi_R(r)$  (кривая 2),  $\psi_R(r)$  (кривая 3)

В настоящей работе характеристики основного ( $^1S_0$ ) состояния атома ртути вычислены нами самосогласованно в рамках локального скалярно-релятивистского приближения ТФП с учетом формул (6), (7) и с исключением энергии самодействия электронов (см. [3–5]). Отметим, что все электронные подоболочки этого состояния атома заполнены, т. е. спиновая поляризация  $\zeta(r) = 0$  (см. [3, 4]). Статический потенциал  $V_S(r)$  рассчитывается по аналитическому выражению, которое связано с выражением для  $\rho(r)$  (см. [4]). Потенциал  $V_{so}^\pm(r) \sim dV_S/dr$  описывает спин-орбитальное взаимодействие налетающего электрона с атомом-мишенью.

Обменное взаимодействие налетающего электрона с атомом-мишенью в ОП (5) описывается в приближении свободного электронного газа (см., например, [3, 4]). Для этого используется локальный обменный потенциал  $V_e^{NR}(r, E)$  [5] с релятивистской добавкой, полученной из (7),

$$V_e^R(r, E) = V_e^{NR}(r, E) + \bar{\psi}_R(r_s) V_e^{NR}(r, E), \quad \bar{\psi}_R(r_s) = \frac{3}{2} \left[ \frac{\ln \xi}{\beta \eta} - 1 \right], \quad (8)$$

где  $\bar{\psi}_R = \psi_R - 1$ . Энергия ионизации атома ртути, используемая для обменного потенциала, вычислена нами в этом же релятивистском приближении и равна  $I = 10,9401$  эВ; без релятивистской поправки —  $I = 10,8933$  эВ. Заметим, что ранее были попытки использовать приближение (8) для описания рассеяния электронов атомами Хе при вычислении ДС и  $S(\theta, E)$  для энергий столкновения до 200 эВ [10] и атомами Hg при вычислении  $S(\theta, E)$  для 12,2; 14,0 и 17,0 эВ [11].

На рис. 1 для атома ртути представлены множители  $\phi_R(r)$  и  $\psi_R(r)$  [9] и приведенная полная радиальная плотность электронов  $4\pi r^2 \rho(r)/N$ , где  $N = 80$  — число электронов. На малых  $r$  функции  $\phi_R$  и  $\psi_R$  существенно отличны от единицы, т. е. роль релятивистских эффектов достаточно большая. При  $r \sim 0,2a_0$  плотность электронов уменьшилась примерно в два раза и эти функции близки к единице. Таким образом, учет релятивистской поправки влияет, в первую очередь, на атомные характеристики.

В качестве поляризационного потенциала рассеяния  $V_p(r)$  используем беспараметрическое выражение для локального потенциала корреляционно-поляризационного взаимодействия электронов в неоднородном электронном газе. Оно является единым для всех внутриатомных расстояний (см. потенциал в [3, 4] для случая  $\zeta(r) = 0$ ). Потенциал состоит из двух потенциальных частей. Первая часть,  $V_p^{SR}(r)$ , описывает взаимодействие во внутренней области атома-мишени, т. е. на малых ( $SR$ ) расстояниях, вторая,  $V_p^{LR}(r)$ , — на больших ( $LR$ ), асимптотических, расстояниях. Для атома ртути потенциал  $V_p^{SR}(r)$  используем в спин-неполяризованном,  $\zeta(r) = 0$ , приближении [3, 4]. Дальнедействующая часть поляризационного потенциала связана с дипольной статической поляризуемостью  $\alpha_d(0)$  атома:  $V_p^{LR}(r) = -\alpha_d(0)/(2r^4)$  [4, 5]. Две части потенциала,  $V_p^{SR}$  и  $V_p^{LR}$ , первый раз пересекаются в точке  $r_c = 5,3092a_0$ .

Величина дипольной статической поляризуемости атома ртути получена нами в локальном приближении времязависящей ТФП [5, 7] с релятивистским эффективным локальным потенциалом атома. Индуцированный релятивистский обменный потенциал  $\Delta V_x^R$  (см. [7]), связанный с изменением электронной плотности  $\Delta\rho$  атома, находящегося во внешнем электромагнитном поле, нами выражен через индуцированный нерелятивистский потенциал  $\Delta V_x^{NR}$  с учетом релятивистской поправки (7)

$$\Delta V_x^R(r) \cong \left. \frac{\partial V_x^R}{\partial \rho} \right|_{\rho} \Delta\rho(r) = \Delta V_x^{NR}(r) + \left[ V_x^{NR}(r) \frac{d\psi_R}{d\rho} + \bar{\psi}_R \frac{dV_x^{NR}}{d\rho} \right] \Big|_{\rho} \Delta\rho(r). \quad (9)$$

Это выражение получено линеаризацией разложения потенциала  $V_x^R$  около электронной плотности  $\rho(r)$  основного состояния атома. Используя (7) и выражение для  $V_x^{NR}(r_s)$ , имеем для производных в (9)

$$\frac{d\psi_R}{d\rho} = \frac{\pi^2}{\eta^2} \frac{1,5}{(c\beta)^3} \left[ 1 - (\beta^2 + \eta^2) \frac{2\psi_R + 1}{3} \right], \quad \frac{dV_x^{NR}}{d\rho} = \frac{dV_x^{NR}}{dr_s} \frac{dr_s}{d\rho} = -\frac{1}{[9\pi\rho^2]^{1/3}}. \quad (10)$$

Полученная с потенциалом  $\Delta V_x^R$  поляризуемость равна  $\alpha_d = 33,55a_0^3$ , с потенциалом  $\Delta V_x^{NR} - \alpha_d = 33,24a_0^3$ , а в расчете с нерелятивистским эффективным потенциалом атома и с  $\Delta V_x^{NR} - \alpha_d = 55,46a_0^3$ . Экспериментальное значение поляризуемости составляет  $33,91 \pm 0,34a_0^3$ , а теоретические заключены в интервале от 31,2 до  $34,4a_0^3$  [12].

Эффекты поглощения описываем двумя потенциалами поглощения: эмпирическим  $V_{aMc}(r, E)$ , который содержит феноменологический параметр  $W(E)$ , для энергий  $E \leq 300$  эВ и неэмпирическим  $V_{af2}(r, E)$  в модели квазисвободного рассеяния для энергий  $E > 300$  эВ (см. [3–5] и ссылки там). Локальные кинетическая энергия и скорость налетающего электрона, используемые в этих потенциалах, содержат потенциалы  $V_S$ ,  $V_e^R$ ,  $V_p$ . Параметры  $W(E)$  находим из сопоставления сечений поглощения, полученных с потенциалами  $V_{aMc}(r, E)$  и  $V_{af2}(r, E)$ . Энергия первого неупругого порога 5,5937 эВ, терм  ${}^3P^o$  возбужденного состояния, вычислена нами в приближении локальной спиновой плотности ТФП [4].

Для процесса упругого рассеяния электронов атомами Hg нами вычислены положения критических минимумов ДС (1). Эти особенности изучаются экспериментально и теоретически, например, для рассеяния на атомах инертных газов. Это наиболее глубокие, от  $\sim 10^{-22}$  до  $10^{-25}$  м<sup>2</sup>/ср, минимумы ДС. В их угловых и энергетических окрестностях поляризация рассеянных электронов может быть полной, 100%-ной. В табл. 1 приведены

Таблица 1. Энергетические  $E_c$  и угловые  $\theta_c$  положения критических минимумов в ДС упругого рассеяния электронов атомами Hg, вычисленные без и с учетом релятивистской поправки [9]. Используются два приближения — без учета (SEPSo (5)) и с учетом (SEPASo (4)) потенциалов поглощения  $VaMc(r, E)$  или  $Vaf2(r, E)$

Без релятивистской поправки				С релятивистской поправкой			
SEPSo		SEPASo		SEPSo		SEPASo	
$E_c$ , эВ	$\theta_c$ , град	$E_c$ , эВ	$\theta_c$ , град	$E_c$ , эВ	$\theta_c$ , град	$E_c$ , эВ	$\theta_c$ , град
14,0	118,17	12,9	115,16	13,9	118,03	12,9	115,07
30,0	82,03	34,2	80,1	30,0	82,04	34,1	80,12
68,1	139,65	66,7	140,26	67,8	139,63	66,3	140,27
128,3	111,18	128,4	111,45	127,7	111,17	128,1	111,34
139,5	170,65	140,9	170,73	139,2	170,49	140,6	170,54
211,0	83,47	209,2	84,03	210,6	83,44	208,5	84,04
240,9	143,12	241,1	143,08	240,0	143,09	240,3	143,03
281,3	122,14	281,1	122,28	280,2	122,19	279,9	122,34
407,8	69,51	417,9	69,26	405,7	69,57	416,3	69,30
483,6	155,32	484,2	155,42	481,5	155,35	482,2	155,45
777,9	101,06	779,4	101,10	775,4	101,08	777,6	101,10
1441,5	136,69	1439,8	136,70	1436,6	136,68	1434,3	136,70

Таблица 2. Энергетические  $E$  и угловые  $\theta$  положения точек полной спиновой поляризации упругого рассеяния электронов атомами Hg, вычисленные без и с учетом релятивистской поправки [9]. Использовано SEPASo-приближение (4) с учетом потенциалов поглощения  $VaMc(r, E)$  или  $Vaf(r, E)$

Без релятивистской поправки			С релятивистской поправкой		
$S(\theta)$	$E$ , эВ	$\theta$ , град	$S(\theta)$	$E$ , эВ	$\theta$ , град
+1	10,7	93,61	+1	10,9	95,02
-1	13,5	119,10	-1	13,5	119,04
-1	28,4	83,57	-1	28,7	83,46
+1	35,7	77,63	+1	35,7	77,62
+1	68,8	139,07	+1	68,3	139,11
+1	126,4	110,73	+1	125,3	110,89
+1	140,6	171,65	+1	140,3	171,46
-1	141,3	169,50	-1	141,0	169,33
+1	195,6	85,73	+1	195,2	85,70
-1	221,7	83,02	-1	221,2	83,01
-1	239,7	144,12	-1	238,8	144,10
+1	242,6	141,76	+1	241,8	141,72
+1	272,6	124,15	+1	271,5	124,21
-1	292,5	120,50	-1	291,3	120,55
+1	398,2	69,38	+1	396,6	69,42
-1	439,7	69,00	-1	438,0	69,04
+1	483,0	155,72	+1	480,9	155,75
-1	485,7	155,10	-1	483,5	155,14
+1	764,0	100,44	+1	761,2	100,46
-1	791,5	101,56	-1	796,0	101,68
-1	1398,5	138,06	-1	1394,4	138,05
+1	1503,7	135,30	+1	1476,7	135,22

вычисленные в разных приближениях положения  $[E_c, \theta_c]$  12 минимумов ДС, а в табл. 2 — положения  $[E, \theta]$  22 точек полной спиновой поляризации, в которых функция Шермана  $S(\theta) = \pm 1$ . Совокупное влияние релятивистской поправки на энергии и углы в целом невелико, однако оно увеличивается с энергией столкновения. Поправка ведет к изменению положений особенностей — энергий в большей мере, а углов — в меньшей. Так, для самых высокоэнергетических точек она приводит к большому уменьшению их энергии — на 5,5 и 27,0 эВ (табл. 1 и табл. 2, соответственно). Наиболее чувствительными к поправке являются особенности функций  $S(\theta, E)$  и  $U(\theta, E)$ , более прямо связанных со спин-орбитальным взаимодействием (см. (3)).

Предложен метод описания процесса потенциального упругого рассеяния электронов многоэлектронными тяжелыми атомами с заполненной оболочкой. Метод базируется на скалярно-релятивистском приближении локальной плотности с релятивистской поправкой к обменному взаимодействию при вычислении характеристик мишени и процесса рассеяния. Учет релятивистской поправки уточняет энергии и углы критических минимумов дифференциальных сечений и точек полной спиновой поляризации. Теоретическое предсказание положений этих особенностей для атома ртути может быть использовано для их экспериментального обнаружения и практического применения.

1. *Kessler J.* Polarized electrons. — Berlin; Heidelberg; New York: Springer, 1976. — 223 p.
2. *Kessler J.* Electron-Polarization Phenomena in electron-atom collisions // *Advances in Atomic, Molecular, and Optical Physics.* — 1991. — **27.** — P. 81–163.
3. *Ремета Е. Ю., Келемен В. І.* Асиметрія пружного розсіювання електронів атомами з напівзаповненими підоболонками // *Доп. НАН України.* — 2010. — № 1. — С. 77–82.
4. *Remeta E. Yu., Kelemen V. I.* Potential elastic electron scattering by atoms in the spin-polarized approach // *J. Phys. B.* — 2010. — **43.** — 045202 (10 p).
5. *Kelemen V., Remeta E., Sabad E.* Scattering of electrons by Ca, Sr, Ba and Yb atoms in the 0–200 eV energy region in the optical potential model // *Ibid.* — 1995. — **28.** — P. 1527–1546.
6. *Теория* неоднородного электронного газа. — Москва: Мир, 1987. — 400 с.
7. *Zangwill A., Soven P.* Density-functional approach to local-field effects in finite systems: Photoabsorption in the rare gases // *Phys. Rev. A.* — 1980. — **21.** — P. 1561–1572.
8. *Ахизер И. А., Пелетминский С. В.* О применении методов квантовой теории поля к исследованию термодинамических свойств газа // *Журн. эксперим. и теорет. физики.* — 1960. — **38,** № 6. — С. 1829–1839.
9. *MacDonald A. H., Vosko S. H.* A relativistic density functional formalism // *J. Phys. C: Solid State.* — 1979. — **12.** — P. 2977–2990.
10. *Awe B., Kemper F., Rosicky F., Feder R. J.* Elastic scattering of slow electrons from Xe atoms // *Phys. B: At. Mol. Phys.* — 1983. — **16.** — P. 603–612.
11. *Fritsche L., Kroner C., Reinert Th.* A consistent relativistic theory of electron scattering by atoms // *Ibid.* — 1992. — **25.** — P. 4287–4312.
12. *available* at <http://ctcp.massey.ac.nz/dipole-polarizabilities>.

**E. Yu. Remeta, V. I. Kelemen**

**Relativistic approach to determining the positions of differential cross section minima and total spin polarization points in the process of elastic electron scattering by heavy atoms**

*The optical potential approach has been suggested to describe the process of potential elastic electron scattering by a multielectron atom with the relativistic correction to the exchange interaction. This correction is also used for the self-consistent calculation of atomic characteristics and the target atom dipole static polarizability. The above approach is based on the local density approximation of the density functional theory. It is applied to calculate the energies and angles of the features in the differential cross sections and spin polarization functions, i. e. the critical minima and the points of total (100%) polarization of the electron scattering by Hg atoms in the wide (10–1500 eV) impact energy range.*