



УДК 539.184.01

В. И. Келемен, Е. Ю. Ремета

Релятивистский оптический потенциал и характеристики процесса упругого рассеяния электрона на тяжелом атоме

(Представлено академиком НАН Украины О. Б. Шпеником)

Предлагается метод релятивистского оптического потенциала для описания процесса потенциального упругого рассеяния электрона на многоэлектронном атоме. Интегральное упругое сечение, энергии и углы особенностей в дифференциальных сечениях (критические минимумы) и функциях спиновой поляризации (точки полной — 100-процентной — спиновой поляризации) при рассеянии электрона на атоме ртути вычислены в широкой, 0,1–2000 эВ, области энергий столкновений. Расчет атомных характеристик базируется на релятивистском локальном приближении теории функционала плотности.

Релятивистское описание взаимодействия налетающего электрона с тяжелым атомом-мишенью, как правило, базируется на использовании уравнения Дирака. Однако возможно осуществить переход от этого уравнения к уравнению Шредингера с релятивистским потенциалом [1, 2]. Этот потенциал содержит релятивистскую скалярную часть и потенциал спин-орбитального взаимодействия, учитывающие наибольшую часть релятивистских эффектов. Наличие спин-орбитального взаимодействия приводит к тому, что процесс упругого рассеяния на бесспиновой мишени становится спин-зависимым и определяется прямой f и переверота спина g амплитудами [3]. Эффекты поляризации электронов при рассеянии на таком атоме обязаны именно этому взаимодействию.

Атомные характеристики и потенциалы взаимодействия при рассеянии электрона на многоэлектронном атоме определяются качеством учета релятивистских эффектов и важным является изучение роли этих эффектов при использовании тех или иных приближений. Например, в [4, 5] применены сложные методы, которые базируются на подходе сильной связи. Оба метода релятивистские: в [4] — это метод R-матрицы (DBSR) и используется 36 состояний разложения сильной связи, а в [5] — метод сходящейся сильной связи (convergent close-coupling — RCCC) и используется 193 состояния. Для вычисления характеристик мишени и рассеяния применяется уравнение Дирака. В обоих методах для атома ртути

© В. И. Келемен, Е. Ю. Ремета, 2013

использована модель двух валентных электронов в поле остова, иона Hg^{2+} ($[\text{Xe}]4f^{14}5d^{10}$). При этом в [4] остов “заморожен” при вычислении состояний иона Hg^+ ($5d^9 n_1 \ell_1 n_2 \ell_2$) и частично “разморожен” для состояний Hg^+ ($5d^9 n_1 \ell_1 n_2 \ell_2$). Искажение остова валентными электронами в [5] учитывается одно- и двухэлектронным феноменологическими потенциалами. В [5] также показано, что дифференциальные сечения (ДС) упругого рассеяния, рассчитанные в RССС-193 и в нерелятивистском ССС-54 приближениях практически совпадают, начиная с энергий 35 эВ. Отметим, что в работах [4, 5] не проводилось детального изучения минимумов в ДС и точек полной поляризации.

Амплитуды $f(\theta, E)$ и $g(\theta, E)$ рассеяния электрона на бесспиновом атоме являются функциями угла рассеяния θ и энергии столкновения E [3, 6]. Они позволяют вычислить ДС рассеяния неполяризованных электронов

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

и параметры спиновой поляризации [3, 6]

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

$$S^2 + T^2 + U^2 = 1.$$

Отметим, что если начальный пучок электронов неполяризован, то его поляризация после рассеяния прямо связана с функцией Шермана $S(\theta, E)$ [3, 6].

Поведение ДС, параметров S , T , U , энергетические и угловые положения их особенностей чувствительны к качеству приближений, используемых в оптическом потенциале (ОП). Для решения фазовых уравнений (см. [6]) мы применяем два релятивистских ОП: комплексный (RSEPA-приближение)

$$V_{\text{opt}}^{\pm}(r, E) = V^{\pm}(r, E) + iV_A(r, E) \quad (3)$$

и беспараметрический вещественный (RSEP-приближение), без учета потенциала поглощения $V_A(r, E)$,

$$V_{\text{opt}}^{\pm}(r, E) = V^{\pm}(r, E) = V_S(r) + V_e^R(r, E) + V_p(r) + V_R(r, E) + V_{\text{so}}^{\pm}(r, E). \quad (4)$$

Напомним, что в [6] были использованы SEPASo- и SEPSo-приближения с потенциалом спин-орбитального взаимодействия и с релятивистской поправкой к обменному потенциалу. Обозначение “ \pm ” соответствует величине полного углового момента электрона $j = \ell \pm 1/2$, ℓ — орбитальный момент электрона. Нами используется атомная система единиц (а. е.): $\hbar = e = m_e = 1$, $E = k^2/2$ — энергия и k — импульс налетающего электрона. Составляющие ОП члены V_S , V_e^R , V_p , V_{so}^{\pm} , V_A в (3) и (4) — это потенциалы: статический, обменного (с релятивистской поправкой [6]), поляризационного, спин-орбитального взаимодействия и поглощения. Скалярная часть $V_R(r, E)$ релятивистского потенциала (см. [1, 2]), потенциал спин-орбитального взаимодействия $V_{\text{so}}^{\pm}(r, E)$, а также обменный потенциал V_e^R описывают релятивистские эффекты в рассеянии.

Для согласованного описания процесса упругого рассеяния электронов на атомах указанные потенциалы и атомные характеристики, используемые в ОП, определяются нами

в локальном приближении стационарной и нестационарной теории функционала плотности (ТФП) с определенным учетом релятивистских эффектов (см. также [6] и ссылки там).

Как и в работе [6], мы использовали обменные потенциалы с релятивистской поправкой: $V_x^R(r)$ — при расчетах атомных характеристик и $V_e^R(r, E)$ в (4) — для описания взаимодействия налетающего электрона с атомом-мишенью. Последний потенциал дан в приближении свободного электронного газа (см. [6]).

Характеристики основного ($[Au^+]6s^2 1S_0$) состояния атома ртути вычислены самосогласованно в рамках локального скалярно-релятивистского приближения ТФП и с исключением энергии самодействия электронов (см. [6]). Статический потенциал $V_S(r)$ рассчитывается по аналитическому выражению, которое связано с выражением для $\rho(r)$ (см. [6]).

Спин-орбитальное взаимодействие налетающего электрона с атомом-мишенью учитывается с помощью потенциала [7]

$$V_{so}^{\pm}(r, E) = \zeta^{\pm}(j, \ell) \frac{\chi}{r} \frac{dV_S}{dr}, \quad \chi = \frac{\alpha^2}{2 + \alpha^2(E - V_S)}, \quad (5)$$

где $\zeta^+(j, \ell) = \ell/2$ для $j = \ell + 1/2$ и $\zeta^-(j, \ell) = -(\ell + 1)/2$ для $j = \ell - 1/2$; α — постоянная тонкой структуры. Скалярная часть $V_R(r, E)$ релятивистского потенциала имеет вид [1, 2]

$$V_R(r, E) = -\frac{\alpha^2}{2} V_S^2 + \frac{\chi}{4} \frac{d^2 V_S}{dr^2} + \frac{3\chi^2}{8} \left(\frac{dV_S}{dr} \right)^2. \quad (6)$$

Интересно привести оценку расстояния, начиная с которого возможно нарушение кулоновского поведения потенциала ядра [1]: $r < Z/c^2 \approx 5,33 \cdot Z \cdot 10^{-5} a_0$, где $c = 1/\alpha$ — скорость света. Интегрирование фазовых уравнений в нашем случае производится с расстояний r больших, чем $5 \cdot 10^{-3} a_0$.

Для поляризационного потенциала рассеяния $V_p(r)$ используется беспараметрическое выражение для локального потенциала корреляционно-поляризационного взаимодействия электронов в неоднородном электронном газе (см. [6]). Потенциал состоит из двух частей, описывающих взаимодействие на малых (SR) $V_p^{SR}(r)$, во внутренней области атома-мишени, и на больших (LR), асимптотических, расстояниях $V_p^{LR}(r)$. Дальнедействующая часть поляризационного потенциала связана с дипольной статической поляризуемостью $\alpha_d(0)$ атома: $V_p^{LR}(r) = -\alpha_d(0)/(2r^4)$. Две части, V_p^{SR} и V_p^{LR} , потенциала первый раз пересекаются в точке $r_c = 5,3092 a_0$.

Величина дипольной статической поляризуемости атома ртути равна $\alpha_d = 33,24 a_0^3$ и получена нами в локальном приближении времязависящей ТФП с релятивистским эффективным локальным потенциалом атома. При этом для индуцированного обменного потенциала также учтена релятивистская поправка (см. [6] и ссылки там).

Эффекты поглощения описываем двумя потенциалами поглощения: эмпирическим $VaMc(r, E)$ (с параметром $W(E)$) для энергий $E \leq 300$ эВ и неэмпирическим $Vaf2m(r, E)$ в модели квазисвободного рассеяния для энергий $E > 300$ эВ (см. [6]). Локальные кинетическая энергия и скорость налетающего электрона, используемые в этих потенциалах, содержат потенциалы V_S , V_e^R , V_p и V_R . Параметры $W(E)$ находим из сопоставления сечений поглощения, полученных с потенциалами $VaMc(r, E)$ и $Vaf2m(r, E)$. Энергия первого неупругого порога 5,5937 эВ, терм ${}^3P^o$ возбужденного состояния, вычислена нами в приближении локальной спиновой плотности ТФП.

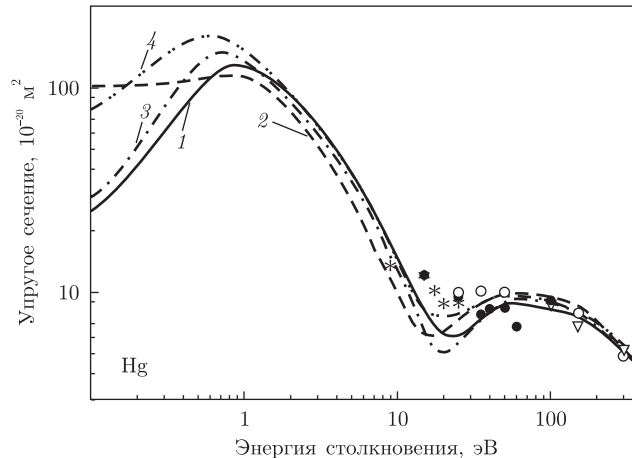


Рис. 1. Энергетическая зависимость интегрального упругого сечения рассеяния электрона на атоме ртути (в 10^{-20} м^2). Теория: RSEPA, с потенциалом поглощения $Vaf2m(r, E)$ (кривая 1); SEPSo [6] (кривая 2); DBSR-36 [4] (кривая 3); RCCC-193 [5] (кривая 4). Эксперимент: [8] (o); [9] (∇); [10] (●); [11] (*)

Для процесса рассеяния электронов атомами Hg вычислены интегральные упругие сечения рассеяния, определены положения критических минимумов (КМ) ДС (1) и положения точек полной спиновой поляризации в широкой, 0,1–2000 эВ, области энергий столкновений. Заметим, что в угловых и энергетических окрестностях КМ поляризация рассеянных электронов может быть полной — 100% [6].

На рис. 1 представлена энергетическая зависимость интегрального упругого сечения рассеяния. Как видно, поведение сечений характеризуется наличием двух максимумов (около 0,9 эВ и 60 эВ) и минимума (около 20 эВ), которые воспроизводятся в релятивистских расчетах. Большой учет релятивистских эффектов в приближении RSEPA исправляет ход сечения при энергиях до 1 эВ по сравнению с SEPSo-приближением [6]. Полученное нами сечение хорошо совпадает с расчетом DBSR-36 [4]. Оба эти сечения проходят ниже сечений, полученных в RCCC-193 [5]. Все теоретические результаты достаточно хорошо совпадают с экспериментальными [8–11] при энергиях от 10 до 400 эВ.

В табл. 1 приведены положения $[E_c, \theta_c]$ 13-ти КМ в ДС, вычисленные с учетом поглощения в SEPASo- [6] и RSEPA-приближениях. Как следует из таблицы, имеется большое различие в энергетических и угловых положениях КМ, полученных в этих приближениях. Так, использование приближения RSEPA привело в области энергий столкновений больше 100 эВ к систематическому увеличению энергий минимумов (например, на 222 эВ для наиболее высокоэнергетического КМ) и к небольшому изменению их угловых положений. Также, для энергий, меньше 100 эВ, изменилось число минимумов.

В табл. 2 даны положения $[E, \theta]$ 23-х точек полной спиновой поляризации ($S(\theta) = \pm 1$), вычисленные в SEPASo- [6] и RSEPA-приближениях. Как и в случае КМ, влияние релятивистского потенциала на величины энергий и углов этих точек весьма велико для всех энергий столкновения. Так, все энергии точек стали больше по величине (например, на 236 эВ для наибольшей энергии 1712 эВ). Энергии и углы этих точек по величине хорошо коррелируют с данными [12], которые вычислены в простом приближении со статическим потенциалом, точным учетом обмена и с использованием уравнения Дирака (RSE).

Таким образом, влияние скалярной части релятивистского потенциала на величину и поведение характеристик рассеяния, на энергетические и угловые положения их особеннос-

Таблица 1. Энергетические E_c и угловые θ_c положения критических минимумов в ДС упругого рассеяния электрона атомом ртути, вычисленные в SEPASo-приближении [6] и с учетом всех релятивистских поправок (RSEPA-приближение). Используются два потенциала поглощения $VaMc(r, E)$ или $Vaf2m(r, E)$

SEPASo [6]		RSEPA	
E_c , эВ	θ_c , град	E_c , эВ	θ_c , град
—	—	6,8	109,49
—	—	14,6	64,69
12,9	115,07	17,2	124,03
34,1	80,12	31,3	84,22
66,3	140,27	—	—
128,1	111,34	146,0	113,20
140,6	170,54	157,8	161,33
208,5	84,04	236,4	83,12
240,3	143,03	264,6	146,81
279,9	122,34	334,0	119,10
416,3	69,30	482,1	67,92
482,2	155,45	555,6	153,21
777,6	101,10	916,2	99,67
1434,3	136,70	1656,6	137,14

Таблица 2. Энергетические E и угловые θ положения точек полной спиновой поляризации упругого рассеяния электрона атомом ртути, вычисленные с оптическими потенциалами в SEPASo [6] и RSEPA-приближениях. Используются потенциалы поглощения $VaMc(r, E)$ или $Vaf2m(r, E)$

$S(\theta)$	SEPASo [6]		RSEPA		RSE [12]	
	E , эВ	θ , град	E , эВ	θ , град	E , эВ	θ , град
-1	13,5	119,04	5,1	116,55	4	118
+1	10,9	95,02	8,1	103,21	9	101
+1	35,7	77,62	15,7	77,64	—	—
-1	—	—	17,1	46,15	19	42
+1	—	—	15,7	119,38	17	121
-1	—	—	17,9	126,66	19	129
+1	—	—	26,0	82,95	29	83
-1	28,7	83,46	—	—	—	—
+1	68,3	139,11	—	—	—	—
+1	125,3	110,89	—	—	—	—
+1	140,3	171,46	156,5	162,22	154	163
-1	141,0	169,33	159,5	160,33	157	160
+1	195,2	85,70	224,2	84,17	215	85
-1	221,2	83,01	248,3	82,43	246	82
-1	238,8	144,10	264,0	147,40	261	148
+1	241,8	141,72	265,0	146,15	267	146
+1	271,5	124,21	322,0	120,22	317	120
-1	291,3	120,55	349,8	118,02	350	117
+1	396,6	69,42	462,3	68,04	430	68
-1	438,0	69,04	502,9	67,72	490	68
+1	480,9	155,75	551,8	153,48	544	152,5
-1	483,5	155,14	560,6	152,92	549	153,2
+1	761,2	100,46	894,5	99,20	870	98
-1	796,0	101,68	939,4	100,09	915	100
-1	1394,4	138,05	1601,3	138,59	1525	139
+1	1476,7	135,22	1712,1	135,59	1670	135

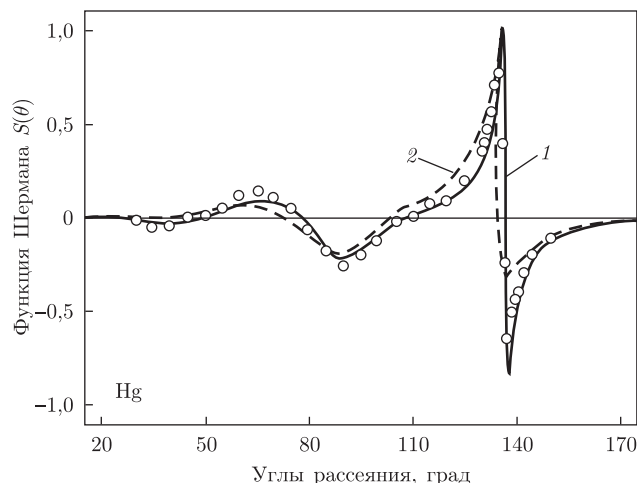


Рис. 2. Угловая зависимость функции Шермана $S(\theta, E)$ упругого рассеяния электрона на атоме ртути для энергии столкновения 1700 эВ. Теория: RSEPA, с потенциалом поглощения $Vaf2m(r, E)$ (кривая 1); SEPASo [6] (кривая 2). Эксперимент [13] (o)

тей — минимумы и максимумы — значительно больше, чем учет релятивистских эффектов в обменном потенциале [6].

На рис. 2 приведен пример угловой зависимости функции Шермана $S(\theta, E)$, вычисленной в RSEPA-приближении для энергии столкновения 1700 эВ, принадлежащей окрестности высокоэнергетического КМ [1656,6 эВ; 137,14°] (см. табл. 1 и табл. 2). Как видно, имеется хорошее согласие с экспериментом [13] и описывается скачок функции Шермана от значения +0,99 до -0,81 в окрестности углов 135,5–138°. Функция Шермана, вычисленная в приближении SEPASo [6], хуже описывает экспериментальные данные [13] в области углов, начиная с 50°. Также она имеет максимальное +0,5 и минимальное -0,3 значения в окрестности критического угла ~137°. Отметим, что КМ в SEPASo-приближении расположен при меньшей энергии 1434,3 эВ (см. табл. 1). То есть, пренебрежение скалярной частью $V_R(r, E)$ (6) релятивистского потенциала смещает значения E_c в область меньших энергий столкновения.

Таким образом, в данной работе предложен метод релятивистского потенциального описания процесса упругого рассеяния электронов многоэлектронными тяжелыми атомами с заполненной оболочкой. Метод базируется на релятивистском оптическом потенциале, скалярно-релятивистском приближении локальной плотности с релятивистской поправкой к обменному взаимодействию при вычислении как характеристик мишени, так и процесса рассеяния. Релятивистская форма оптического потенциала существенно влияет на характеристики рассеяния, приводит к поведению интегральных сечений, близкому к экспериментальному и подобному другим теоретическим, существенному уточнению энергий и углов критических минимумов дифференциальных сечений и точек полной спиновой поляризации. Теоретическое определение сечений рассеяния, параметров спиновой поляризации и предсказание положений их особенностей при рассеянии электронов на тяжелых атомах может быть использовано для их экспериментального обнаружения и может иметь дальнейшее практическое применение.

1. Фок В. А. Начала квантовой механики. – Москва: Наука, 1976. – 376 с.
2. Sin Fai Lam L. T. Relativistic effects in electron scattering by atoms III. Elastic scattering by krypton, xenon and radon // J. Phys. B: At. Mol. Phys. – 1982. – 15. – P. 119–142.

3. Kessler J. Electron-polarization phenomena in electron-atom collisions // Adv. in Atomic, Molecular, and Optical Physics. – 1991. – **27**. – P. 81–163.
4. Zatsarinny O., Bartschat K. Fully relativistic *B*-spline *R*-matrix calculations for electron collisions with mercury // Phys. Rev. A. – 2009. – **79**. – 042713, 9 p.
5. Bostock C. J., Fursa D. V., Bray I. Relativistic convergent close-coupling method applied to electron scattering from mercury // Ibid. – 2010. – **82**. – 022713, 13 p.
6. Ремета Е. Ю., Келемен В. И. Релятивистское приближение для определения положений минимумов дифференциальных сечений и точек полной спиновой поляризации процесса упругого рассеяния электронов на тяжелых атомах // Доп. НАН України. – 2011. – № 11. – С. 84–90.
7. Cowan R. The theory of atomic structure and spectra. – Berkeley: Univ. of California Press, 1981. – 731 p.
8. Holtkamp G., Jost K., Peitzmann F. J., Kessler J. Absolute differential cross sections for elastic electron scattering from mercury // J. Phys. B: At. Mol. Phys. – 1987. – **20**. – P. 4543–4569.
9. Peitzmann F. J., Kessler J. Cross-check of elastic differential cross sections and measurement of excitation and ionization cross sections for electron-mercury scattering // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. – 1990. – **23**. – P. 4005–4018.
10. Panajotović R., Pejčev V., Konstantinović M., Filipović D., Bočvarski V., Marinković B. Elastic and inelastic electron scattering by mercury // Ibid. – 1993. – **26**. – P. 1005–1024.
11. Zubek M., Danjo A., King G. C. Differential cross sections for elastic electron scattering by mercury in the energy range 9 to 25 eV // Ibid. – 1995. – **28**. – P. 4117–4127.
12. Walker D. W. Relativistic effects in low energy electron scattering from atoms // Adv. Phys. – 1971. – **20**. – P. 257–323.
13. Jost K., Kessler J. Zur Polarisation langsamer Elektronen durch Streuung an Quecksilber zwischen 180 und 1700 eV // Zeitschrift für Physik. – 1966. – **195**. – P. 1–12.

Институт электронной физики
НАН Украины, Ужгород

Поступило в редакцию 29.05.2012

В. І. Келемен, Є. Ю. Ремета

Релятивістський оптичний потенціал та характеристики процесу пружного розсіювання електрона на важкому атомі

Пропонується метод релятивістського оптичного потенціалу для опису процесу потенціального пружного розсіювання електрона на багатоелектронному атомі. Інтегральний пружний переріз, енергії та кути особливостей у диференціальних перерізах (критичні мінімуми) і функціях спигової поляризації (точки повної – 100-відсоткової – спигової поляризації) при розсіюванні електрона на атомі ртуті розраховані в широкій, 0,1–2000 eV, області енергій зіткнень. Розрахунок атомних характеристик базується на релятивістському локальному наближенні теорії функціонала густини.

V. I. Kelemen, E. Yu. Remeta

Relativistic optical potential and the characteristics of the process of elastic electron scattering by a heavy atom

A relativistic optical potential approach has been suggested to describe the process of potential elastic electron scattering by a multielectron atom. The integral elastic cross section, energies, and angles of features in the differential cross sections (critical minima) and in the spin polarization functions (points of 100%-polarization) of the electron scattering by a Hg atom are calculated in the wide (0.1–2000 eV) impact energy range. The calculation of the atomic characteristics is based on the relativistic local approximation of the density functional theory.