

Оптические потенциалы для упругого рассеяния электрона на атоме в спин-поляризованном приближении

© Е.Ю. Ремета, В.И. Келемен

Институт электронной физики НАН Украины,
88017 Ужгород, Украина
e-mail: remetov@inbox.ru; vlad.kelemen@gmail.com

(Поступило в Редакцию 9 февраля 2010 г. В окончательной редакции 6 мая 2010 г.)

Представлены оптические потенциалы взаимодействия налетающего электрона с многоэлектронной атомной системой, которая имеет одну полузаполненную подоболочку. В спин-поляризованном приближении и приближении локальной спиновой плотности детально рассмотрены потенциальные составляющие этих потенциалов. Для исследования процесса упругого рассеяния электронов на основных состояниях атомов Ag, Sb с валентными $5s^1$ -, $5p^3$ - и атомов Mn, Eu с субвалентными $3d^5$ -, $4f^7$ -подоболочками и для энергии столкновения 10 eV вычислены следующие потенциалы взаимодействия — статический и спиновые обменный, поляризационный и поглощения. Описан средний оптический потенциал, полученный усреднением спиновых составляющих. Показана связь спин-поляризованного и локального приближения. В последнем приближении предложены потенциалы поглощения — обменный и поляризационный — для их использования при описании процесса упругого рассеяния на атомных мишенях с заполненными подоболочками.

Введение

Интегральные и особенно дифференциальные сечения упругого рассеяния электронов на многоэлектронных атомных системах — атомах, молекулах, кластерах — являются важными фундаментальными характеристиками в физике столкновений. Эти сечения находят широкое научное применение от физики плазмы до физики твердого тела и его поверхности. Они имеют большое прикладное значение в экспериментальных методах с использованием электронных пучков, а также для электронного анализа в материаловедении (см., например, обзоры [1,2] и ссылки там). Более того, особенности угловых и энергетических зависимостей сечений и даже фазы рассеяния могут быть востребованы для использования во многих приложениях [2].

Современное применение разных модельных представлений о взаимодействии налетающей частицы с атомной системой определяется важным требованием использования для этого однотипных приближений. При этом согласованное описание процесса рассеяния означает рассмотрение в одних и тех же приближениях атома-мишени и потенциального взаимодействия частицы с ней. С этой целью разнообразны функциональные характеристики, константы и потенциалы взаимодействия, необходимые для описания методом оптического потенциала (ОП) процесса рассеяния электронов на атомах, нами определяются в локальных приближениях стационарной [3] и нестационарной [4] теории функционала плотности (ТФП). При этом мишень не рассматривается в модели замороженного остова — электрон взаимодействует со всем атомом [5–10].

Особенности дифференциальных сечений (ДС) и спиновой асимметрии рассеяния, связанные со спиновой структурой мишени, в первую очередь обязаны обмен-

ному взаимодействию налетающего электрона с ней [11]. Однако потенциалы поглощения энергии и поляризационного взаимодействия для процесса упругого рассеяния электрона спин-поляризованным атомом, содержащим в основном состоянии полузаполненную электронную подоболочку, также определяются спиновой структурой электронных подоболочек мишени. При малых энергиях столкновения это влияние может быть значительнее, чем при больших. Поэтому указанные взаимодействия также определяют тот или иной вклад от спиновой структуры атома в поведение и величину сечений и спиновой асимметрии. Важным при этом является и количественное соотношение между всеми потенциальными составляющими в ОП, в первую очередь — между потенциалами обменным, поляризационным и поглощения.

В теоретических приближениях, используемых для описания потенциального рассеяния частиц на атомных системах, учитываются особенности строения их электронных оболочек. В частности, для описания характеристик спин-поляризованных систем используют приближения локальной спиновой плотности (ЛСП) ТФП [3,12–14] и Хартри–Фока [15]. Согласно правилу Хунда, основное состояние таких систем имеет максимальный спин, т.е. все электроны в полузаполненной подоболочке имеют сонаправленные спины. Поэтому вся электронная оболочка системы описывается двумя заполненными спиновыми подоболочками. Отметим также, что для описания процесса фотоионизации такого типа атомов успешно используются спин-поляризованные приближения Хартри–Фока и случайных фаз с обменом [16]. В работе [17] этот подход было предложено использовать для изучения рассеяния электронов на атомах азота и марганца при низких энергиях столкновения.

Сопоставление между собой экспериментальных и теоретических характеристик рассеяния электронов на

многоэлектронных атомах, полученных в разных приближениях, является актуальной задачей для определения наилучшего ОП и установления роли таких типов этого взаимодействия, как обменное, поляризационное и поглощение.

В настоящей работе для процесса упругого рассеяния рассматриваются оптические потенциалы и составляющие их потенциалы взаимодействия налетающего электрона с атомом, содержащим в основном состоянии одну полузаполненную валентную или субвалентную подоболочку. Исследования проведены на примере атомов $\text{Ag}(4d^{10}5s^1)$, $\text{Sb}(5s^25p^3)$, $\text{Mn}(3d^54s^2)$, $\text{Eu}(4f^76s^2)$, представляющих все типы таких оболочек. В приближениях спин-поляризованном и локальной спиновой плотности ТФП вычислены и проанализированы статические, обменные, поляризационные и поглощения потенциалы взаимодействия. Зависящие от энергии столкновения обменные потенциалы и потенциалы поглощения вычислены для энергии 10 eV. Указаны приближения для возможного применения данных потенциалов при описании рассеяния электронов промежуточных и больших энергий и в случае рассеяния на атомах с заполненными подоболочками. Описанные здесь потенциалы рассеяния впервые были использованы в [18] для вычисления ДС и параметра спиновой обменной асимметрии рассеяния электронов атомами Ag, Sb, Mn и Eu при энергии 10 eV. Для нахождения парциальных фаз решались соответствующие фазовые уравнения [19] (см. также [5–10]).

Теоретические приближения для потенциалов

Атомная система, содержащая в основном состоянии одну полузаполненную подоболочку $(nl)^{2l+1}$ уровня $2l+2S$, имеет максимальный спин $(2l+1)/2$. Направление спина электрона, который рассеивается на такой системе, может быть ориентировано как по направлению спина системы — параллельно ($\Lambda = p$), так и против — антипараллельно ($\Lambda = a$). Отметим, что при рассеянии электрона на атоме (ионе), имеющем в электронной структуре одну полузаполненную s -подоболочку, сечения параллельного и антипараллельного рассеяния связаны с синглетным и триплетным сечениями.

В приближении локальной спиновой плотности ТФП электронную оболочку такой системы разбивают на две спиновые подоболочки — спинов вверх ($\lambda = \uparrow$), включая полузаполненную, и спинов вниз ($\lambda = \downarrow$). В самосогласованном атомном расчете, проведенном с исключением энергии самодействия электронов [20] и с использованием скалярно-релятивистского приближения (см. [5]), получаем электронные оболочечные, спиновые плотности $\rho_\lambda(r)$ и полную плотность $\rho(r) = \rho_\uparrow(r) + \rho_\downarrow(r)$. Для аппроксимации табличных значений этих электронных плотностей используются аналитические выражения из [21], а параметры можно найти по методу наименьших квадратов (см., например, [7–10] для случая атомов Yb, Ag, In).

Использование приближения ЛСП [3,12–14] приводит к модификации таких потенциалов взаимодействия, как обменный $V_X^\Lambda(r, E)$ и поляризационный $V_P^\Lambda(r)$, в вещественной $V_R^{\Lambda,\pm}(r, E)$ части ОП [5] и потенциала поглощения $V_A^\Lambda(r, E)$, составляющего мнимую часть ОП

$$V_{\text{opt}}^{\Lambda,\pm}(r, E) = V_R^{\Lambda,\pm}(r, E) + iV_A^\Lambda(r, E), \quad (1)$$

$$V_R^{\Lambda,\pm}(r, E) = V_S(r) + V_X^\Lambda(r, E) + V_P^\Lambda(r) + V_{SO}^\pm(r). \quad (2)$$

Здесь $V_S(r)$ — статический и $V_{SO}^\pm(r)$ — спин-орбитальный потенциалы, E — энергия столкновения.

Статический потенциал $V_S(r)$ (здесь и далее используются атомные единицы — а.у.):

$$V_S(r) = V_n(r) + V_H(r) = -\frac{Z}{r} + \frac{1}{2} \int d\mathbf{r}' \frac{\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}, \quad (3)$$

где $V_n(r)$ — потенциал кулоновского взаимодействия электрона с ядром, а потенциал Хартри $V_H(r)$ описывает кулоновское взаимодействие налетающего электрона с N электронами атома-мишени с электронной плотностью $\rho(r)$. Для количественного описания релятивистских эффектов к вещественной части ОП добавляют потенциал спин-орбитального взаимодействия электрона с атомом-мишенью [22] (это учет наибольшей части этих эффектов при рассеянии)

$$V_{SO}^\pm(r) = \xi^\pm(j, l) \left(\frac{1}{r} \right) \left(\frac{dV_S}{dr} \right). \quad (4)$$

Здесь $\xi^+(l+1/2, l) = l/2$, $\xi^-(l-1/2, l) = -(l+1)/2$, l — орбитальный момент, j — полный угловой момент электрона. Сингулярное поведение потенциала (4) на малых расстояниях исправляют, умножая его на выражение $-\alpha^2 / \{2 + \alpha^2 [E - V_S(r)]\}$, где α — постоянная тонкой структуры [22]. В результате потенциал (2) при $r \rightarrow 0$ имеет менее сингулярное поведение типа (см. выражение (2.23) в [19])

$$r^2 V_R^{\Lambda,\pm}(r) \rightarrow r^2 V_{SO}^\pm(r) \rightarrow \text{const} = \xi^\pm(j, l).$$

Особенности решения фазового уравнения с соответствующими начальными условиями в этом случае подробно рассмотрены в [19] (см. также выражения (7) в [6]). Из (4) видим, что важным для расчетов является наличие аналитического выражения для потенциала $V_S(r)$ (см. также [1,2,21]).

Обменное взаимодействие налетающего электрона со спин-поляризованной системой происходит только с соответствующей спиновой подоболочкой. В приближении свободного электронного газа (см. [5]) имеем два обменных потенциала

$$V_X^\Lambda(r, E) = -\frac{2k_F^\lambda(r)}{\pi} \left(1 + \frac{1 - \kappa_\lambda^2}{2\kappa_\lambda} \ln \left| \frac{1 + \kappa_\lambda}{1 - \kappa_\lambda} \right| \right), \quad (5)$$

где $k_F^\lambda(r) = [6\pi^2 \rho_\lambda(r)]^{1/3}$ — импульсы Ферми, $\kappa_\lambda(r, E) = k_S^\lambda(r, E) / k_F^\lambda(r)$, $[k_S^\lambda(r, E)]^2 = k^2 + V^\lambda(r, k^2/2)$, $k^2 = 2E$.

Потенциальная функция $V^\lambda(r, k^2/2)$ определяется статическим, обменным и поляризационным потенциалами взаимодействия налетающего электрона с мишенью. Для вычисления характеристик электронных состояний в атомах и твердых телах эта функция рассмотрена в [23,24]. В настоящей работе для нее используется простой модельный вид [5,25]:

$$V^\lambda(r, k^2/2) = [k_F^\lambda(r)]^2 + 2I/[1 + (kr)^2/2].$$

Здесь I — потенциал ионизации атома-мишени. Различные выражения для локальных обменных потенциалов с функцией $V(r, E)$, используемые для исследования электронных состояний в твердых телах и рассеяния электронов атомами и молекулами, приведены в работах [26–29]. Отметим, что в локальном спин-неполяризованном приближении для обменного взаимодействия электрона с заполненными подболочками импульс Ферми равен $k_F(r) = [3\pi^2\rho(r)]^{1/3}$, и величины, входящие в единственный обменный потенциал типа (5), определяются полной плотностью $\rho(r)$.

Поляризационный потенциал состоит из двух частей [30,31] — на малых (Short Range — SR) и больших (Long Range — LR) расстояниях

$$V_P^\Lambda(r) = \begin{cases} V_P^{SR,\Lambda}(r), & r \leq r_c^\lambda, \\ V_P^{LR}(r), & r > r_c^\lambda. \end{cases} \quad (6)$$

Здесь $r_c^{\uparrow,\downarrow}$ — точки пересечения этих потенциальных частей. Поляризационный потенциал во внутренней области атома определяется корреляционным взаимодействием налетающего электрона с электронами мишени. Это так называемый поляризационно-корреляционный потенциал (см. [30,31]). В этих работах на основе приближения локальной плотности были предложены два типа таких потенциалов, введенных двумя разными способами. Корреляционное взаимодействие в ТФП описывается корреляционным функционалом $E_c[\rho]$. В приближении локальной спиновой плотности (LSDA — Local Spin Density Approximation) [3,12–14] функционал $E_c^{LSDA}[\rho]$ определяется спиновыми плотностями электронов $\rho_\lambda(r)$ и плотностью корреляционной энергии — энергии на один электрон — $\varepsilon_c[\rho_\uparrow, \rho_\downarrow]$. Последнюю величину выражают через функции

$$r_s(r) = \{3/[4\pi\rho(r)]\}^{1/3}$$

и спиновую поляризацию

$$\xi(r) = [\rho_\uparrow(r) - \rho_\downarrow(r)]/\rho(r)$$

и тогда

$$\varepsilon_c[\rho_\uparrow(r), \rho_\downarrow(r)] \equiv \varepsilon_c[r_s(r), \xi(r)].$$

Последовательное применение вариационной процедуры для функционала $E_c^{LSDA}[\rho]$ в приближении ЛСП приводит к следующим двум спиновым потенциалам корреляционного взаимодействия для электронов спиновых подболочек:

$$V_c^\lambda(r) = \varepsilon_c(r_s, \xi) - \frac{r_s}{3} \frac{\partial \varepsilon_c}{\partial r_s} \pm (1 \mp \xi) \frac{\partial \varepsilon_c}{\partial \xi}. \quad (7)$$

Верхние знаки соответствуют $\lambda = \uparrow$, а нижние $\lambda = \downarrow$. Таким образом, для случаев $\Lambda = p$ и $\Lambda = a$ поляризационное взаимодействие налетающего электрона с атомом на малых расстояниях описывается двумя потенциалами: $V_P^{SR,p}(r) = V_c^\uparrow(r)$ и $V_P^{SR,a}(r) = V_c^\downarrow(r)$. Потенциал $V_c^\downarrow(r)$ более притягивающий, чем потенциал $V_c^\uparrow(r)$ для $\xi(r) > 0$.

Отметим, что в спин-неполяризованном приближении, при $\xi(r) = 0$, потенциал (7) соответствует потенциалу $V_c^p(r) = \varepsilon_c^p(r_s) - r_s d\varepsilon_c^p/3dr_s$ из [31], а его первое слагаемое $V_c^p(r) = \varepsilon_c^p(r_s)$ — потенциалу [30]. Здесь $\varepsilon_c^p[r_s(r)]$ — плотность корреляционной энергии в парамагнитном спин-неполяризованном электронном газе. Эти потенциалы используются для учета поляризационного взаимодействия электрона с атомом, имеющим заполненные подболочки. На больших расстояниях поляризационный потенциал рассеяния имеет асимптотический вид (см. также [5,30]):

$$V_P^{LR}(r) = -\frac{\alpha_d(0)}{2r^4}, \quad (8)$$

начиная с расстояний $r > r_c^\lambda$ (см. (6)). В (8) $\alpha_d(0)$ — статическая дипольная поляризуемость атома-мишени. Точки пересечения $r_c^{\uparrow,\downarrow}$ потенциалов $V_c^{\uparrow,\downarrow}$ с асимптотикой (8), как правило, существенно различаются между собой (см. ниже).

Для исследований в широком интервале промежуточных и больших энергий при вычислении характеристик рассеяния вполне могут быть использованы такие средние потенциалы:

— обменный

$$V_X^{Av}(r, E) = [V_X^p(r, E) + V_X^a(r, E)]/2,$$

— поляризационный

$$V_P^{Av}(r) = V_c(r) = [V_P^{SR,p}(r) + V_P^{SR,a}(r)]/2.$$

В потенциале $V_P^{Av}(r)$ неявно учитывается спиновое строение мишени. Однако он имеет одну точку пересечения r_c^{Av} с асимптотикой (8) и отличается от потенциала из [31] на функцию $-\xi \partial \varepsilon_c / \partial \xi$ [18].

Эффекты поглощения для промежуточных энергий столкновения (десятки электрон-вольт) достаточно хорошо можно описать простой модификацией, учтена зависимость от Λ , полуэмпирического потенциала из [32,33] (см. также [7,8,34]):

$$V_A^\Lambda(r, E) = -W_\Lambda(E)r^2\rho_H(r)/[T_{loc}^\Lambda(r, E)]^2. \quad (9)$$

Здесь $T_{loc}^\Lambda = E - V_S - V_X^\Lambda - V_P^\Lambda$ — локальная кинетическая энергия налетающего электрона, $\rho_H(r)$ — плотность электронов валентной подболочки атома. Параметры $W_\Lambda(E)$ находим из сопоставления с сечениями поглощения, вычисленными с использованием неэмпирических потенциалов поглощения [7,34] (см., также табл. 1 в [7] и рис. 1 в [9]). Средний потенциал поглощения определяем так:

$$V_A^{Av}(r, E) = [V_A^p(r, E) + V_A^a(r, E)]/2.$$

В этом случае имеются два параметра $W_{\Lambda}(E)$. Если в локальной кинетической энергии T_{loc}^{Av} использовать средние обменный и поляризационный потенциалы, то это приводит к одному параметру $W^{Av}(E)$. Такое приближение более удобно в систематических расчетах. В локальном спин-неполяризованном приближении, когда обменный и поляризационный потенциалы не зависят от ориентации спинов, также будет один параметр $W(E)$. Для энергий столкновения от 100 eV и выше в расчетах можно использовать потенциалы поглощения без параметров [34] (см. также [7,8]).

Наличие двух типов обменного (5), поляризационного (6) и поглощения (9) потенциалов взаимодействия приводит к тому, что упругое рассеяние электронов на атомах Ag, Sb, Mn, Eu описывается двумя ОП. Благодаря этому более детально вычисляются ДС рассеяния электронов со спином, параллельным и антипараллельным спину атомной системы с полузаполненной подболочкой. Более того, в данном спин-поляризованном приближении можно найти спиновую обменную асимметрию рассеяния $A(E, \theta) = (d\sigma^a/d\theta - d\sigma^p/d\theta)/(d\sigma^a/d\theta + d\sigma^p/d\theta)$, используя спиновые сечения $d\sigma^{p,a}/d\theta$ [11,18]. Поведение и величина асимметрии определяются спиновой зависимостью как обменного, так и поляризационного взаимодействия налетающего электрона с атомом-мишенью [18].

Необходимые для определения амплитуд рассеяния парциальные фазовые сдвиги вычисляются при решении фазовых уравнений, согласно методике [5–7,9,10,19]. Фазы являются асимптотикой соответствующих парциальных фазовых функций при $r \rightarrow \infty$. Фазовые функции — удобный, прецизионный инструмент изучения характеристик потенциалов — ширины и глубины потенциальной ямы, особенностей радиального поведения и энергетической зависимости. По ступенчатому поведению парциальной фазовой функции при значениях энергии, близких к нулю, можно судить о количестве связанных состояний в данных оптических потенциалах, обязанных заполненным подболочкам (см. [19,35] и ссылки там).

С учетом спин-орбитального взаимодействия (4) получаем четыре набора комплексных парциальных фаз рассеяния — $\delta_i^{\Lambda,\pm}(E) = \epsilon_i^{\Lambda,\pm}(E) + i\mu_i^{\Lambda,\pm}(E)$, $\Lambda = (p, a)$. Для значений энергии ниже первого порога возбуждения и для расстояний меньше $0.005a_0$ ОП берем в вещественном виде — $V_A^{\Lambda}(r, E) = 0$ и $\mu_i^{\Lambda,\pm}(E) = 0$. Отметим, что приближение вещественного ОП, как правило, качественно описывает общие закономерности поведения ДС. Более того, для больших энергий применение вещественного ОП (2) является достаточно хорошим приближением и удовлетворительно качественно и количественно описывает поведение ДС (см., например, [8–10]) и параметров асимметрии [18]. Отметим, что в работе [1] при вычислении ДС в широком диапазоне энергий для ОП используется приближение статического потенциала, а в [2] — статического и обменного. При этом плотность электронов атома-мишени получена в спин-неполяризованных приближениях — Томаса–Ферми–Дирака [1] и Дирака–Хартри–Фока–Слэтера [2]. Она

аппроксимирована простой суперпозицией только трех экспонент. Статический потенциал в этом случае равен суперпозиции трех юкавовских потенциалов.

Обсуждение потенциалов

На рис. 1–4 представлены радиальные зависимости потенциальных составляющих оптических потенциалов (1), (2) процесса рассеяния электронов атомами Ag, Sb, Mn и Eu. Так, на рис. 1 и 3 приведены статические $V_S(r)$ (3) и корреляционно-поляризационные потенциалы с асимптотикой (8). На рис. 2 и 4 для одной энергии столкновения $E = 10$ eV приведены обменные потенциалы $V_X^{\Lambda}(r, E)$ (5) и потенциалы поглощения $V_A^{\Lambda}(r, E)$ (9). В обсуждении также используются результаты расчетов потенциалов (5) и (9) для энергии 20 eV и в локальном спин-неполяризованном приближении, когда в атомном расчете нет разделения на спиновые подболочки ($\xi(r) = 0$).

На рис. 1 видно, что статический потенциал для атома Eu превышает потенциалы для других атомов начиная с расстояний $\sim 2a_0$. При этом потенциал атома Mn является наименьшим из них на малых расстояниях и, пересекая потенциалы атома Ag при $\sim 1.5a_0$ и атома Sb при $\sim 4a_0$, превышает их. В свою очередь, начиная с расстояний $\sim 8.5a_0$ потенциал атома Sb меньше потенциала атома Ag. Более того, на малых расстояниях статические потенциалы примерно на порядок больше обменных и на всех расстояниях они значительно больше поляризационных потенциалов и поглощения.

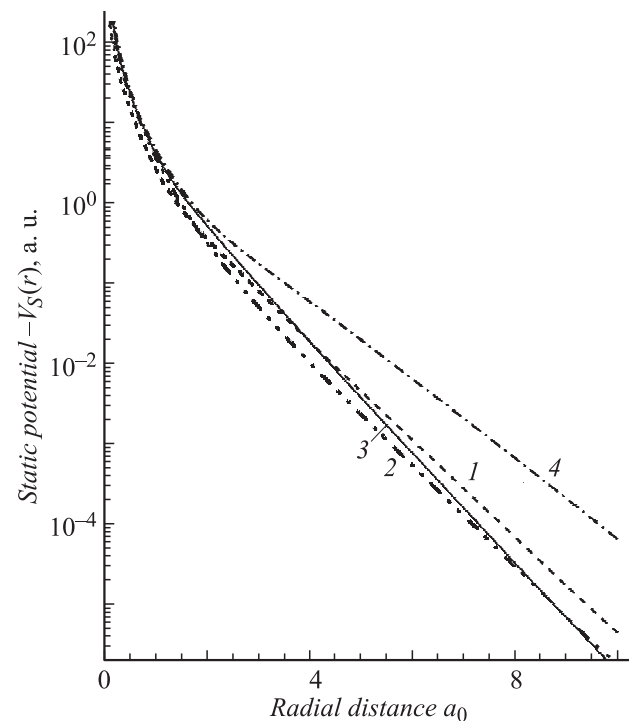


Рис. 1. Статические потенциалы взаимодействия электрона с атомами Mn (1), Ag (2), Sb (3), Eu (4).

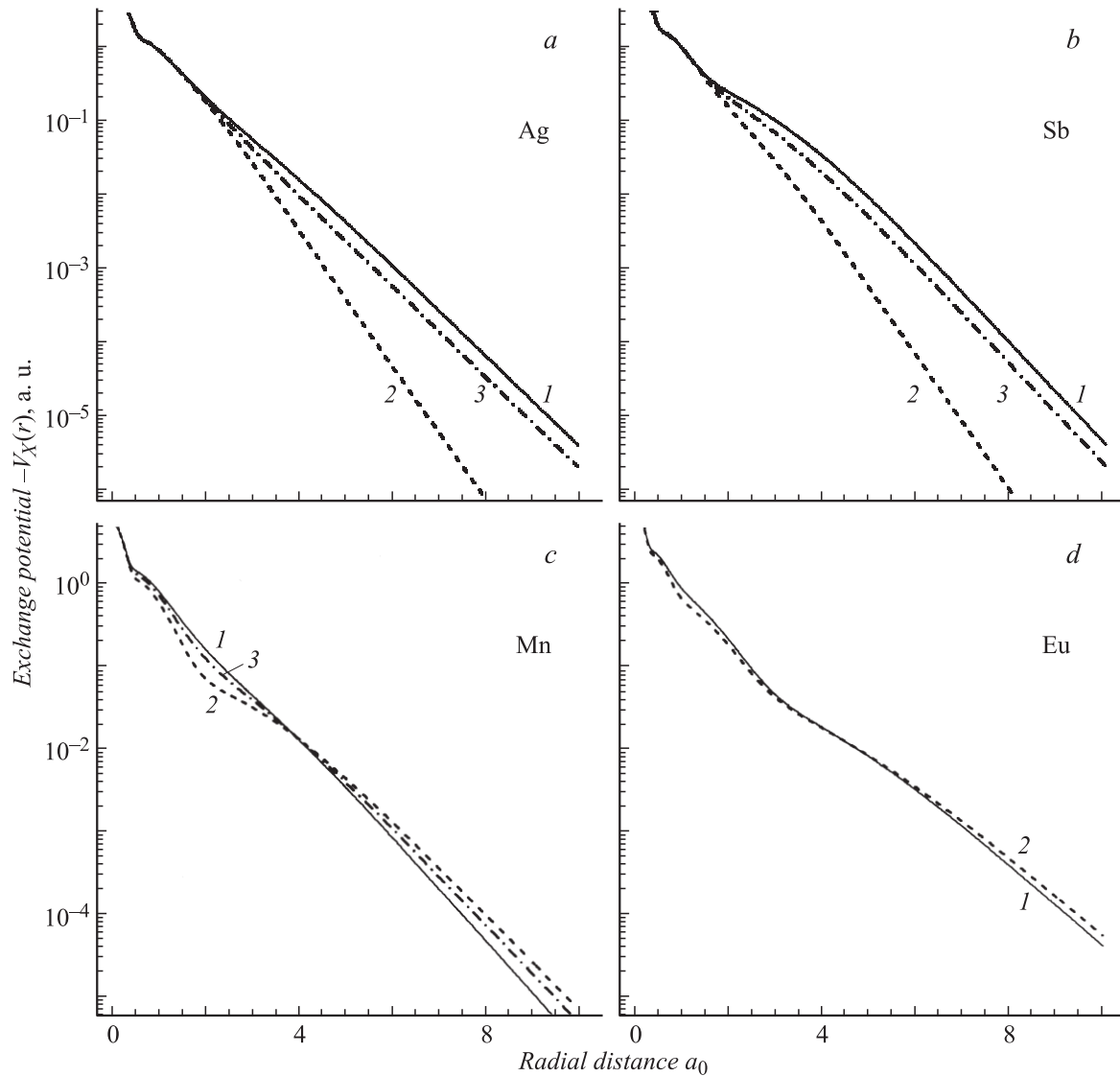


Рис. 2. Обменные потенциалы взаимодействия электрона с атомами Ag (a), Sb (b), Mn (c) и Eu (d) при энергии 10 eV. 1 — потенциал для параллельных (p) спинов $V_X^p(r, E)$, 2 — потенциал для антипараллельных (a) спинов $V_X^a(r, E)$, 3 — потенциал в локальном спин-неполяризованном приближении, с $\xi(r) = 0$.

Спиновые обменные потенциалы $V_X^{p,a}(r, E)$ параллельного и антипараллельного рассеяния на атомах Ag, Sb на рис. 2 имеют похожее радиальное поведение. Так, потенциалы $V_X^p(r, E)$ с расстояний $\sim 2a_0$ для Ag и с $\sim 1.5a_0$ для Sb систематически превышают потенциалы $V_X^a(r, E)$. Потенциалы $V_X^p(r, E)$ на атоме Mn превышают потенциалы $V_X^a(r, E)$ только до расстояния $\sim 4a_0$. Различие в потенциалах при увеличении энергии столкновения от 10 до 20 eV сравнимо со спиновым влиянием. Для атома Eu потенциалы $V_X^p(r, E)$ несколько превышают потенциалы $V_X^a(r, E)$ до расстояния $\sim 4.5a_0$, и спиновое различие у них меньше различия потенциалов за счет изменения энергии столкновения. С увеличением энергии столкновения каждый из обменных потенциалов для всех атомов несколько уменьшается. Потенциалы локального спин-неполяризованного приближения для атомов Ag,

Sb проходят между спиновыми потенциалами и близки к потенциалам параллельного рассеяния. Более того, для этих атомов локальный потенциал для 10 eV почти совпадает со спиновым потенциалом $V_X^p(r, 20 \text{ eV})$. Более сложное поведение локальных потенциалов для атомов Mn и Eu. Они на всех расстояниях также находятся между спиновыми потенциалами. Например, потенциал при 10 eV для атома Mn до расстояний $\sim 2a_0$ близок к $V_X^p(r, 20 \text{ eV})$, а затем сближается с $V_X^a(r, 10 \text{ eV})$. Потенциал при 20 eV до $\sim 4a_0$ проходит ниже $V_X^p(r, 20 \text{ eV})$, а затем превышает его, проходя ниже $V_X^a(r, 20 \text{ eV})$ и сближаясь с $V_X^p(r, 10 \text{ eV})$. Для атома Eu локальные потенциалы при энергии 10 и 20 eV почти совпадают соответственно с $V_X^{p,a}(r, 10 \text{ eV})$ и $V_X^{p,a}(r, 20 \text{ eV})$ (по этой причине он не приводится на рис. 2, d). Необходимые для обменных потенциалов энергии ионизации атомов вы-

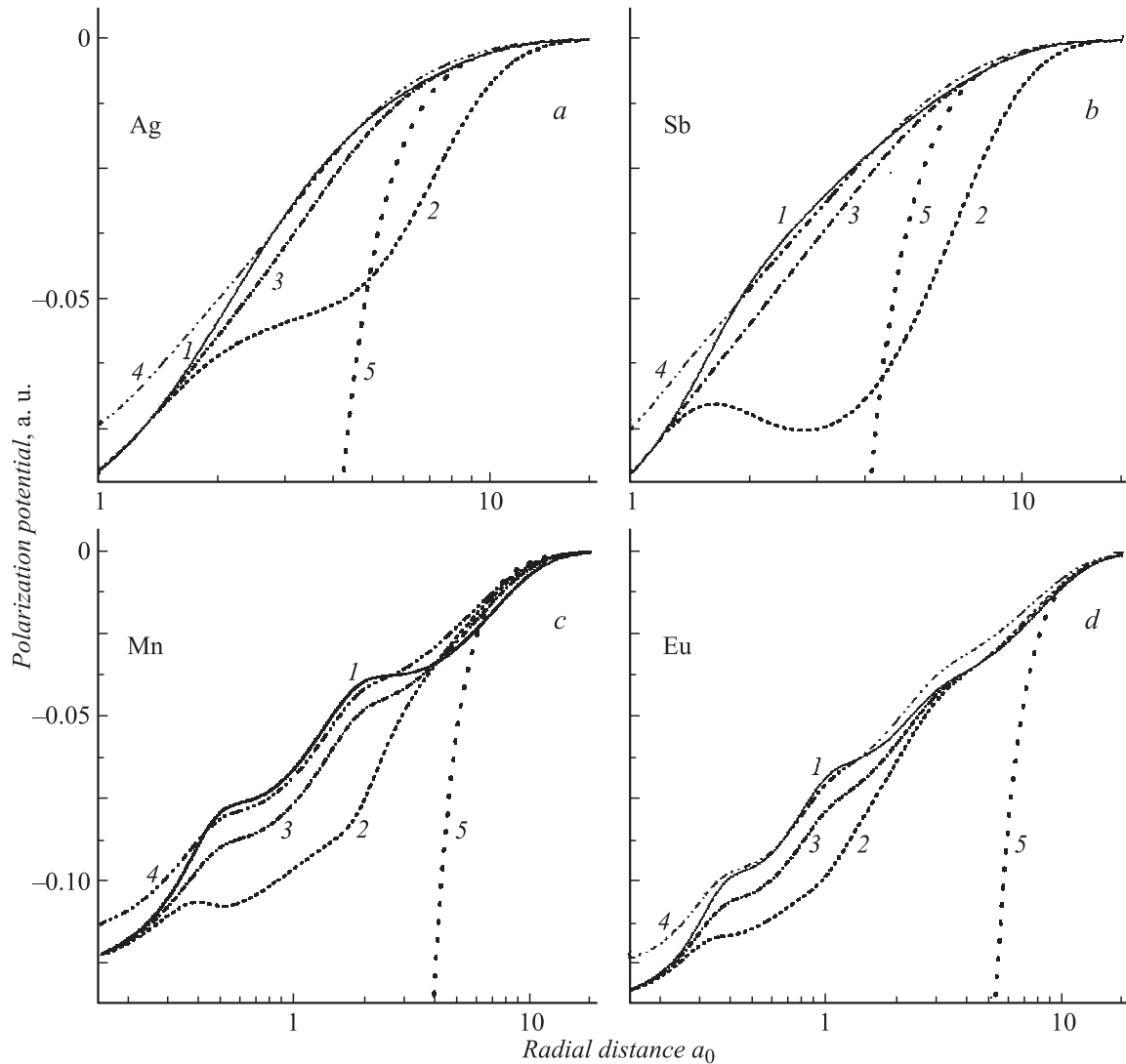


Рис. 3. Корреляционно-поляризационные потенциалы взаимодействия электрона с атомами Ag (a), Sb (b), Mn (c) и Eu (d). 1 — потенциал (7) для параллельных (p) спинов $V_p^{SR,p}(r)$, 2 — потенциал (7) для антипараллельных (a) спинов $V_p^{SR,a}(r)$, 3 — потенциал $V_c(r) = \varepsilon_c(r_s, \xi) - r_s \partial \varepsilon_c / 3 \partial r_s$, 4 — потенциал $V_c(r) = \varepsilon_c(r_s, \xi)$, 5 — асимптотика $V_p^{LR}(r)$ (8) поляризационного потенциала.

числены в локальном приближении ТФП и равны (в eV): 8.0178 (Ag), 8.9701 (Sb), 8.5769 (Mn) и 6.0434 (Eu). Эти значения достаточно близки по величине к данным из [36]. Понятно, что средний обменный потенциал $V_X^{Av}(r, E)$ проходит посередине между потенциалами $V_X^p(r, E)$ и $V_X^a(r, E)$.

На рис. 3 приведены поляризационные потенциалы для атомов, вычисленные в различных приближениях. Различие между спиновыми потенциалами $V_p^{SR,p}(r)$ и $V_p^{SR,a}(r)$ довольно существенное на следующих интервалах расстояний для атомов с валентными и субвалентными полузаполненными подоболочками: Ag — от $\sim 1.3a_0$ до $15a_0$, Sb — от $\sim 1.3a_0$ до $\sim 12a_0$, Mn и Eu — от $\sim 0.2a_0$ до $\sim 4a_0$. Эти потенциалы на больших и малых расстояниях переходят в потенциал $V_c(r) = \varepsilon_c(r, \xi) - r_s \partial \varepsilon_c / 3 \partial r_s$ с $\xi(r) \neq 0$. Средний потенциал $V_p^{Av}(r)$ проходит посередине между

спиновыми потенциалами $V_p^{SR,r}(r)$ и $V_p^{SR,a}(r)$. Он достаточно сильно отличается от потенциала $V_c(r) = \varepsilon_c(r_s, \xi) - r_s \partial \varepsilon_c / 3 \partial r_s$, что свидетельствует о большом влиянии функции $-\xi \partial \varepsilon_c / \partial \xi$ (см. (7) и [18]). Заметим, что между собой потенциалы $V_c(r) = \varepsilon_c(r_s, \xi)$, $V_c(r) = \varepsilon_c(r_s, \xi) - r_s \partial \varepsilon_c / 3 \partial r_s$, когда функции спиновой поляризации $\xi(r) \neq 0$, и $V_c^p(r) = \varepsilon_c^p(r_s)$, $V_c^p(r) = \varepsilon_c^p(r_s) - r_s \partial \varepsilon_c^p / 3 \partial r_s$ в случае $\xi(r) = 0$ также отличаются достаточно существенно, т.е. даже приближение с неявным учетом спиновой структуры атома-мишени (за счет $\xi(r) \neq 0$) отличается от локального спиннеполяризованного (с $\xi(r) = 0$). В последнем приближении два этих потенциала, введенные соответственно в [30] и [31], также сильно отличаются между собой. Отметим, что потенциал $V_c^p(r) = \varepsilon_c^p(r_s) - r_s \partial \varepsilon_c^p / 3 \partial r_s$ проходит примерно посередине между потенциалами $V_c(r) = \varepsilon_c(r_s, \xi) - r_s \partial \varepsilon_c / 3 \partial r_s$ и средним $V_p^{Av}(r)$.

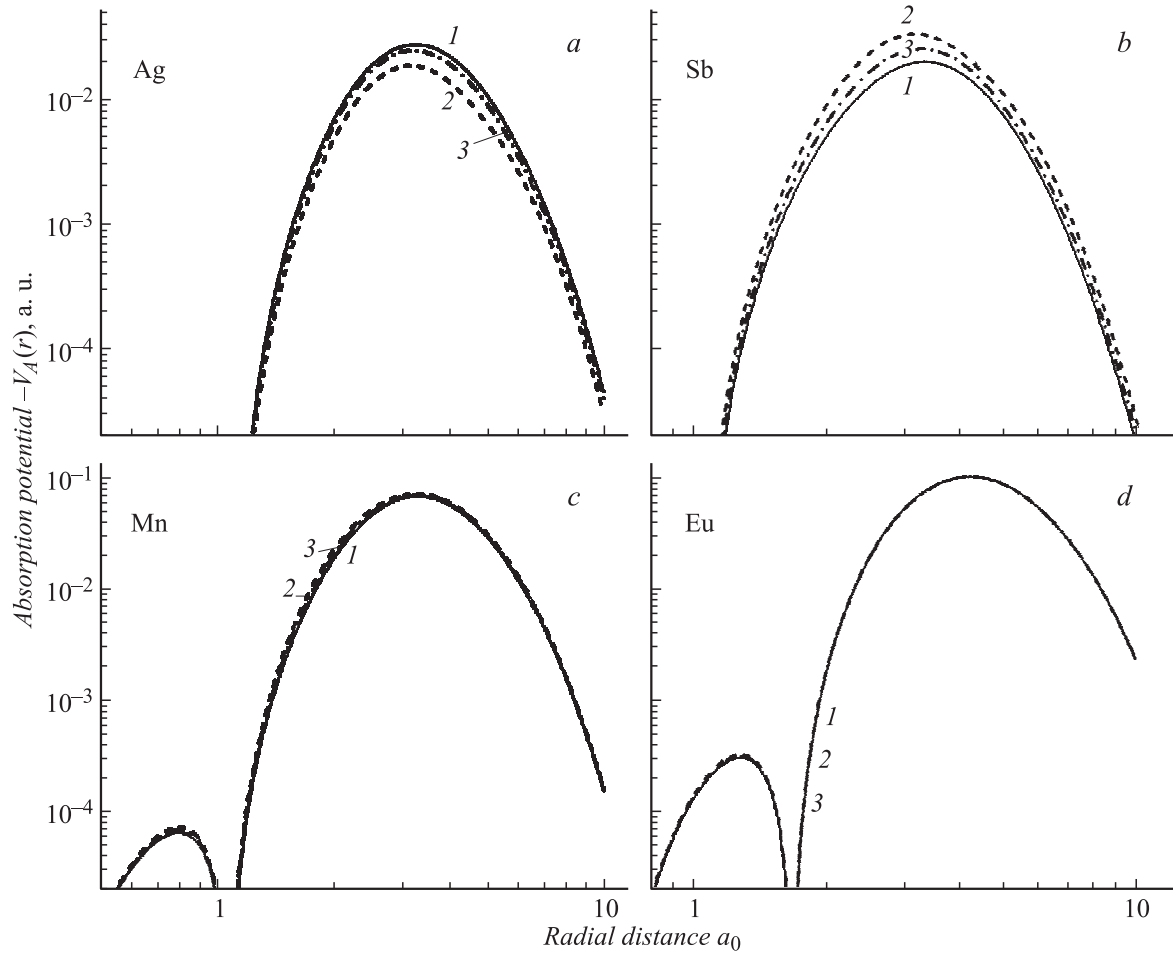


Рис. 4. Потенциалы поглощения для процесса упругого рассеяния электрона на атомах Ag (a), Sb (b), Mn (c) и Eu (d) при энергии 10 eV. 1 — потенциал для параллельных (p) спинов $V_A^p(r, E)$, 2 — потенциал для антипараллельных (a) спинов $V_A^a(r, E)$, 3 — потенциал в локальном спин-неполяризованном приближении, с $\xi(r) = 0$.

На больших расстояниях все корреляционно-поляризационные потенциалы пересекаются с асимптотическим потенциалом $V_P^{LR}(r)$ (8) (см. соответствующие кривые на рис. 3). Дипольные поляризуемости $\alpha_d(0)$ вычислены в локальном приближении нестационарной ТФП с использованием релятивистского эффективного атомного потенциала [37,38] и равны (в а.е.): 52.59 (Ag), 47.84 (Sb), 60.36 (Mn) и 204.4 (Eu). Их величина для атомов Ag, Mn и Eu хорошо, а для атома Sb — удовлетворительно согласуется с данными из [39] (см. также [36]). Однако заметим, что погрешности представленных в [39] эмпирических и теоретических данных для этих атомов составляют $\pm 50\%$. Отметим, что более последовательные вычисления поляризуемостей атомов с полузаполненной подболочкой необходимо проводить в рамках нестационарной ТФП с использованием локального спинового приближения [40,41].

Точки пересечения $r_c^{\uparrow, \downarrow}$ корреляционно-поляризационных потенциалов (7) с асимптотикой (8) существенно различаются для случаев спина вверх (рассеяние с параллельными спинами) и вниз (с антипараллельными

спинами) (см. также рис. 3). Например, для Ag — 9.161 и 4.883; Sb — 7.551 и 4.373; Mn — 6.053 и 6.841; Eu — 9.544 и 11.6 (все значения в а.е.). Отметим, что для атомов Ag и Sb $r_c^{\uparrow} > r_c^{\downarrow}$, а для Mn и Eu — $r_c^{\uparrow} < r_c^{\downarrow}$. Для атомов Ag и Sb точки пересечения достаточно существенно зависят от типа приближения для поляризационного потенциала. Для следующих потенциалов они равны (в а.е.): средний $V_P^{Av}(r) = 5.750$ и 5.056 ; $V_c^p(r) = \epsilon_c^p(r_s) - r_s d\epsilon_c^p/3dr_s = 6.441$ и 5.785 ; $V_c^a(r) = \epsilon_c^a(r_s) = 7.357$ и 6.422 для Ag и Sb соответственно. Для атомов Mn и Eu точки пересечения почти не зависят от типа приближений для поляризационного потенциала.

Радиальное поведение спиновых потенциалов поглощения (9), вычисленных с обменными (5) и поляризационными (7) потенциалами для энергии столкновения 10 eV, демонстрируется на рис. 4 (для значений $> 2 \cdot 10^{-5}$ а.е.). Параметры $W_\Lambda(E)$ этих потенциалов для энергий 10 и 20 eV достаточно существенно различаются между собой для разных атомов. Например, для атомов Ag и Sb их величина для энергии 10 eV состав-

ляет (в а.е.): $W_p = 0.2465$, $W_a = 0.1657$ и $W_p = 0.08426$, $W_a = 0.13249$. Различие между параметрами W_p и W_a для каждого атома падает с ростом энергии. Эти параметры для атомов Mn и Eu достаточно близки между собой для указанных энергий.

Параметры $W^{Av}(E)$ в приближении с использованием средних обменного и поляризационного потенциалов и $W(E)$ в локальном спин-неполяризованном приближении имеют для каждого атома величину, близкую к спиновым параметрам для соответствующей энергии. Таким образом, параметры чувствительны к типу приближения, энергии столкновения и виду атому. Заметим, что используемые значения энергии 10 и 20 eV примерно соответствуют максимумам функций суммарного возбуждения и ионизации.

Потенциалы $V_A^P(r, E)$ и $V_A^a(r, E)$ для атомов Ag, Sb и Mn имеют по две потенциальные ямы: узкую и широкую, с примерно одинаковыми положениями — $\sim 1a_0$ и $\sim 3a_0$. Для атома Eu потенциал поглощения имеет три ямы: две узких при $\sim 0.5a_0$, $\sim 1.3a_0$ и одну широкую $\sim 4a_0$. Наиболее широкие ямы для атомов Ag и Sb имеют примерно одинаковую глубину ~ 0.03 а.е., а для Mn и Eu — ~ 0.1 а.е. Узкие ямы имеют глубину на несколько порядков меньше. С ростом энергии столкновения глубина потенциальных ям увеличивается — больше для атомов Ag, Sb, Mn и меньше для Eu.

Для атома Ag потенциал $V_A^P(r, E)$ систематически больше потенциала $V_A^a(r, E)$, а для атомов Sb и Mn картина обратная. Для атома Eu эти спиновые потенциалы визуально весьма близки. Локальные спин-неполяризованные потенциалы поглощения с использованием поляризационного потенциала $V_c^P(r) = \epsilon_c^P(r_s) - r_s d\epsilon_c^P/3dr_s$ в $T_{loc}(r, E)$ (см. (9)) также приведены на рис. 4 (кривая 3). Отметим существенно различное поведение этих потенциалов для разных атомов. Так, для атома Ag этот потенциал близок к $V_A^P(r, E)$ и проходит несколько ниже его и выше $V_A^a(r, E)$. С увеличением энергии он почти совпадает с $V_A^P(r, E)$. Для атома Sb для обеих значений энергии локальный потенциал проходит примерно посередине между $V_A^a(r, E)$ и $V_A^P(r, E)$, а для атомов Mn и Eu он визуально совпадает со спиновыми потенциалами.

Отметим, что для атомов с небольшой поляризуемостью поляризационные потенциалы могут быть как сравнимы, так и меньше потенциалов поглощения. В этом случае меньшие по величине потенциалы и эффекты, которые они описывают, можно рассматривать как возмущение. Особенности характеристик рассеяния при этом будут в большей мере обязаны сильным потенциалам и в меньшей мере слабым.

Заключение

Предложены оптические потенциалы для описания взаимодействия при потенциальном упругом рассеянии электронов атомами с одной валентной или субвалентной полузаполненной s^1 -, p^3 -, d^5 -, f^7 -подоболочкой в

основном состоянии. Вещественная часть оптических потенциалов не имеет подгоночных параметров и вычисляется из первых принципов (*ab initio*) с использованием характеристик атома-мишени. На примере атомов Ag, Sb, Mn и Eu детально рассмотрены потенциальные составляющие оптических потенциалов, ответственные за электростатическое, обменное, поляризационное взаимодействие и эффекты поглощения. При этом характеристики рассеяния описаны в спин-поляризованном приближении, а атома-мишени — скалярно-релятивистском приближении и приближении локальной спиновой плотности теории функционала плотности. Для исследования процесса рассеяния в широком интервале промежуточных и больших энергий столкновения, вплоть до нескольких килоэлектрон-вольт, введен средний оптический потенциал, полученный усреднением спиновых обменных, поляризационных потенциалов и потенциалов поглощения.

Показана связь данного спин-поляризованного подхода с локальным спин-неполяризованным приближением. Детально рассмотрено поведение обменных потенциалов и потенциалов поглощения в этих приближениях для 10 eV. Потенциалы поглощения, обменный и поляризационный в локальном спин-неполяризованном приближении можно использовать для описания рассеяния на атомных мишенях с заполненными подоболочками.

Влияние спиновой структуры атома на составляющие оптического потенциала достаточно существенное. Для обменных потенциалов оно проявляется с расстояний $\sim 2a_0$ для атомов Ag, Sb с валентной полузаполненной подоболочкой и с $\sim 0.5a_0$ — для атомов Mn, Eu с субвалентной полузаполненной подоболочкой и сохраняется до больших расстояний. Соответственно спиновые поляризационные потенциалы существенно различаются с расстояний $\sim 1.3a_0$ для Ag, Sb и с $\sim 0.4a_0$ для Mn, Eu. Это различие сохраняется до больших расстояний ($\sim 10a_0$) для 1-й пары и до относительно малых расстояний ($\sim 4a_0$) — для 2-й пары атомов. Увеличение энергии столкновения приводит к некоторому уменьшению роли спиновой поляризации в обменном взаимодействии и потенциале поглощения. Наибольшее влияние эффектов поглощения на характеристики рассеяния будет для атома-мишени с небольшой поляризуемостью и, наоборот, их влияние будет малым при большом поляризационном взаимодействии.

Приведенные оптические потенциалы могут быть использованы для систематического вычисления дифференциальных и интегральных сечений, а также поляризационных параметров и параметра спиновой обменной асимметрии процесса потенциального рассеяния электронов на многоэлектронных атомных системах. Эти характеристики необходимы для многих прикладных разделов физики от плазмы до твердого тела и его поверхности.

Список литературы

- [1] *Werner W.S.M.* // Surf. Interface Anal. 2001. Vol. 32. P. 141–176.
- [2] *Jablonski A., Salvat F., Powell C.J.* // J. Phys. Chem. Ref. Data. 2004. Vol. 33. P. 409–451.
- [3] *Theory of the Inhomogeneous Electron Gas* / Eds S. Lundqvist, N.H. March. NY–London: Plenum Press, 1983. 400 p.
- [4] *Zangwill A., Soven P.* // Phys. Rev. A. 1980. Vol. 21. P. 1561–1572.
- [5] *Kelemen V., Remeta E., Sabad E.* // J. Phys. B. 1995. Vol. 28. P. 1527–1546.
- [6] *Келемен В.И.* // ЖТФ. 2002. Т. 72. Вып. 9. С. 13–20.
- [7] *Kelemen V.I., Dovahanych M.M., Remeta E.Yu.* // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 2008. Vol. 41. P. 125 202.
- [8] *Tosic S.D., Kelemen V.I., Sevic D., Pejcev V., Filipovic D.M., Remeta E.Yu., Marinkovic B.P.* // Nucl. Instr. Meth. B. 2009. Vol. 267. P. 283–287.
- [9] *Rabasovic M.S., Kelemen V.I., Tosic S.D., Sevic D., Dovahanych M.M., Pejcev V., Filipovic D.M., Remeta E.Yu., Marinkovic B.P.* // Phys. Rev. A. 2008. Vol. 77. P. 062 713.
- [10] *Kelemen V.I., Dovahanych M.M., Remeta E.Yu.* // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 2008. Vol. 41. P. 035 204.
- [11] *Kessler J.* // Adv. At. Mol. Opt. Phys. 1991. Vol. 27. P. 81–163.
- [12] *Von Barth U., Hedin L.* // J. Phys. C. 1972. Vol. 5. P. 1629–1642.
- [13] *Gunnarsson O., Lundqvist B.I.* // Phys. Rev. B 1976. Vol. 13. P. 4274–4298.
- [14] *Rajagopal A.K., Callaway J.* // Phys. Rev. B 1973. Vol. 7. P. 1912–1919.
- [15] *Slater J.C.* The self-consistent field for molecules and solids. New York: McGraw-Hill Company, 1974. 662 p.
- [16] *Амусья М.Я.* Атомный фотоэффект. М.: Наука, 1987. 272 с.
- [17] *Амусья М.Я., Долматов В.К.* // ЖЭТФ. 1990. Т. 97. Вып. 4. С. 1129–1139.
- [18] *Remeta E.Yu., Kelemen V.I.* // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 2010. Vol. 43. 045 202.
- [19] *Бабиков В.В.* Метод фазовых функций в квантовой механике. М.: Наука, 1988. 256 с.
- [20] *Perdew J.P., Zunger A.* // Phys. Rev. A. 1981. Vol. 23. P. 5048–5079.
- [21] *Strand T.G., Bonham R.A.* // J. Chem. Phys. 1964. Vol. 40. P. 1686–1691.
- [22] *Cowan R.* The Theory of Atomic Structure and Spectra. Berkeley, Los Angeles, London: University of California Press, 1981. 731 p.
- [23] *Lieberman D.A.* // Phys. Rev. 1968. Vol. 171. P. 1–3.
- [24] *Slater J.C., Wilson T.M., Wood J.H.* // Phys. Rev. 1969. Vol. 179. P. 28–38.
- [25] *Келемен В.И., Сабад Е.П., Довганич М.М.* // УФЖ. 1989. Т. 34. С. 345–349.
- [26] *Bransden B.H., McDowell M.R.C., Nesbet C.J., Scott T.* // J. Phys. B. 1976. Vol. 9. P. 1301–1317.
- [27] *Sur S., Ghosh A.S.* // Indian J. Phys. 1983. Vol. 57B. P. 67–70.
- [28] *Sur S., Ghosh A.S.* // J. Phys. B 1985. Vol. 18. P. 539–546.
- [29] *Немошкаленко В.В., Кучеренко Ю.Н.* Методы вычислительной физики в теории твердого тела. Электронные состояния в неидеальных кристаллах. Киев: Наукова думка, 1986. 296 с.
- [30] *O'Connell J.K., Lane N.F.* // Phys. Rev. A. 1983. Vol. 27. P. 1893–1903.
- [31] *Padial N.T., Norcross D.W.* // Phys. Rev. A. 1984. Vol. 29. P. 1742–1748.
- [32] *Furness J.B., McCarthy I.E.* // J. Phys. B: At. Mol. Phys. 1973. Vol. 6. P. 2280–2291.
- [33] *McCarthy I., Noble C., Phillips B., Turnbull A.* // Phys. Rev. A. 1977. Vol. 15. P. 2173–2185.
- [34] *Staszewska G., Schwenke D.W., Truhlar D.G.* // Phys. Rev. A. 1984. Vol. 29. P. 3078–3091.
- [35] *Келемен В.И., Ремета Е.Ю., Сабад Е.П.* // ЖТФ. 1991. Т. 61. Вып. 2. С. 46–50.
- [36] *Радициг А.А., Смирнов Б.М.* Параметры атомов и атомарных ионов. Справочник. М.: Энергоатомиздат, 1986. 340 с.
- [37] *Remeta E.Yu., Farberovich O.V.* // Proc. of the 18th Int. Conf. Phys. Electronic and Atomic Collisions / Eds T. Andersen, B. Fastrup, F. Folkman, H. Knudsen. Denmark, Aarhus, 1993. P. 58.
- [38] *Lengyel V., Zatsarinny O., Remeta E.* Electron Scattering on Complex Atoms (Ions). New York: Nova Science, 2000. 474 p.
- [39] *Miller T.M., Bederson B.* / Advances in Atomic and Molecular Physics. Vol. 13 / Eds D.R. Bates, B. Bederson. New York: Academic Press, 1977. P. 1–55.
- [40] *Remeta E.Yu.* // Proc. of the 18th Int. Conf. Phys. Electronic and Atomic Collisions / Eds T. Andersen, B. Fastrup, F. Folkman, H. Knudsen. Denmark, Aarhus, 1993. P. 60.
- [41] *Choe A.S., Byungduk Yoo, Jongmin Lee* // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 1993. Vol. 26. P. 4099–4107.