

УДК 537.533.9, 537.533.74

PACS: 31.15.A-, 34.80.Bm

DOI 10.24144/2415-8038.2018.43.96-107

Ш.Ш. Демеш<sup>1,2</sup>, В.І. Келемен<sup>1</sup>, Є.Ю. Ремета<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Інститут електронної фізики, Національна академія наук України, вул. Університетська, 21, Ужгород, 88017, Україна, e-mail: remetoveyu@gmail.com

<sup>2</sup> Institute for Nuclear Research, Hungarian Academy of Sciences, Bem tér 18/c, Debrecen, 4026, Hungary, e-mail: demesh.shandor@gmail.com

## ПРУЖНЕ РОЗСІЮВАННЯ ЕЛЕКТРОНА МОЛЕКУЛАМИ $CF_2Cl$ ТА $CF_3$ У ПОТЕНЦІАЛЬНОМУ ПІДХОДІ

Пружне розсіювання електрона на  $CF_2Cl$  та  $CF_3$  молекулах досліджується у підході, що базується на моделі незалежних атомів та методі оптичного потенціала. Для рівноважних міжатомних відстаней у мішенях розраховано інтегральні і диференціальні перерізи, які порівняно з експериментальними та теоретичними даними.

**Ключові слова:** розсіювання, амплітуда, диференціальний переріз, інтегральний переріз, оптична теорема, оптичний потенціал.

### Вступ

Зіткнення електронів з молекулами відіграють важливу роль у багатьох областях наукової та технічної сфери, в т.ч. при описі взаємодій у різних плазмових середовищах. Взаємодія електрона з атомами та молекулами лежить в основі комплексних процесів у низькотемпературній плазмі [1].

Формісткі молекулярні радикали застосовують у багатьох газорозрядних і низькотемпературних плазмових середовищах (див. [1–7]). У виробництві мікроелектроніки, використовують молекулярні системи  $CF_4$ ,  $C_2F_6$ ,  $C_3F_8$ ,  $c-C_4F_8$  та їх послідовності  $CF_nCl_{4-n}$  ( $n=0-4$ ), які фрагментують у плазмі з утворенням іонів, нейтралів і радикалів, включаючи  $CF_n$  ( $n=1-3$ ),  $CF_2Cl$ .

У роботах [2,3] експериментально вивчається пружне розсіювання електрона на радикалі  $CF_3$  при енергіях зіткнень 7–50 еВ. Перерізи порівнюють з теоретичними розрахунками, проведеними різними методами. Ці теоретичні підходи не описують низькоенергетичної, <20 еВ, поведінки інтегральних перерізів (ІП), а для диференціальних перерізів (ДП) дають тільки якісну куту поведінку.

Простим і поширеним теоретичним підходом опису розсіювання електрона на молекулі є модель незалежних атомів (МНА, Independent Atom Model, IAM) [8]. Вона базується на використанні характеристик амплітуд розсіювання електрона окремими атомами молекули. Цю модель успішно використовують в сучасних теоретичних дослідженнях [9] для розрахунку ІП та ДП.

Більш послідовними є підходи, в яких потенціали взаємодії та амплітуди розсіювання на молекулах розраховують на основі характеристик молекули. Такими підходами є методи сферичних [10] та одноцентрових [11] потенціалів.

Дана робота присвячена теоретичному розгляду особливостей пружного розсіювання електрона на молекулах  $CF_2Cl$  та  $CF_3$  у двох наближеннях підходу незалежних атомів. Підхід базується на квантово-механічних амплітудах розсіювання електрона атомами молекули. Для знаходження цих амплітуд ми використовуємо метод оптичного потенціала (ОП). Для повноти картини поведінку розрахованих нами перерізів розсіювання на вказаних молекулах порівнюємо з розсіюванням

електрона на радикалі CF<sub>2</sub>. Проведено порівняння характеристик розсіювання з наявними експериментальними даними.

**Модель незалежних атомів розрахунку характеристик потенціального розсіювання електрона молекулою.**

*Перерізи та амплітуди розсіювання*

Розсіювання електрона з імпульсом *k* на кут  $\theta$  молекулою, яка містить *N* атомів та має певну орієнтацію у просторі, описується амплітудами – прямою  $F(\theta, k)$  та з перевертанням спіну (spin-flip)  $G(\theta, k)$ . Вони є сумами амплітуд розсіювання електрона атомами (індекс *i*) молекули у моделі незалежних атомів (МНА, IAM підхід [8,9,12,14]):

$$\frac{d\sigma_{el}^{IAM}}{d\Omega} = \langle |F(\theta, k)|^2 + |G(\theta, k)|^2 \rangle = \sum_{m=1}^N \sum_{n=1}^N [f_m(\theta, k)f_n^*(\theta, k) + g_m(\theta, k)g_n^*(\theta, k)] \frac{\sin(sr_{nm})}{sr_{nm}}. \quad (1)$$

Інакше ДП (1) можна представити у вигляді суми ДП розсіювання на кожному з атомів (прямий доданок) згідно правила сум (наближення “Additivity Rule”, IAM-

$$\frac{d\sigma_{el}^{IAM}}{d\Omega} = \frac{d\sigma_{el}^{AR}}{d\Omega} + \sum_{m,n \neq m} [f_m(\theta, k)f_n^*(\theta, k) + g_m(\theta, k)g_n^*(\theta, k)] \frac{\sin(sr_{nm})}{sr_{nm}}. \quad (2)$$

У виразах (1) та (2) величини  $\theta$ ,  $f_m$ ,  $g_m$  являють собою кут розсіювання, прямі та спин-повертаючі (“spin-flip”) амплітуди розсіювання на *m*-му атомі молекули,  $s = 2k \sin(\theta/2)$ ,  $k = \sqrt{2E}$ , де *E* – енергія електрона, що налітає;  $r_{nm}$  – відстань між *n*-м та *m*-м атомами в молекулі.

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma_{el}^{IAM}}{d\Omega} = & \frac{d\sigma_{el,C}}{d\Omega} + 2 \frac{d\sigma_{el,F}}{d\Omega} \left[ 1 + \frac{\sin(sr_{FF})}{sr_{FF}} \right] + \frac{d\sigma_{el,Cl}}{d\Omega} + 2 [f_C f_F^* + f_F f_C^* + g_C g_F^* + g_F g_C^*] \frac{\sin(sr_{CF})}{sr_{CF}} + \\ & + 2 [f_F f_{Cl}^* + f_{Cl} f_F^* + g_F g_{Cl}^* + g_{Cl} g_F^*] \frac{\sin(sr_{FCl})}{sr_{FCl}} + [f_C f_{Cl}^* + f_{Cl} f_C^* + g_C g_{Cl}^* + g_{Cl} g_C^*] \frac{\sin(sr_{CCl})}{sr_{CCl}} \end{aligned}$$

**CF<sub>3</sub>** (для випадку молекул з однаковими

$$\frac{d\sigma_{el}^{IAM}}{d\Omega} = \frac{d\sigma_{el,C}}{d\Omega} + 3 \frac{d\sigma_{el,F}}{d\Omega} \left[ 1 + 2 \frac{\sin(sr_{FF})}{sr_{FF}} \right] + 3 [f_C f_F^* + f_F f_C^* + g_C g_F^* + g_F g_C^*] \frac{\sin(sr_{CF})}{sr_{CF}}.$$

ДП розсіювання електрона на радикалі CF<sub>2</sub> є подібним виразу для CF<sub>3</sub>.

З наведених виразів та з (2) бачимо, що при описі розсіювання електрона на молекулах у МНА поведінка та

$$F(\theta, k) = \sum_i^N \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}_i) \cdot f_i(\theta, k),$$

$$G(\theta, k) = \sum_i^N \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}_i) \cdot g_i(\theta, k).$$

Для вивчення поведінки пружних ДП та ПП потенціального розсіювання електрона на молекулах нами застосовується метод ОП [12–18]. ДП пружного розсіювання електрона на *N*-атомній молекулі в рамках МНА, усереднений за всіма напрямками випадкової орієнтації молекули, задається виразом [8,12,14] (використовуємо атомні одиниці –  $\hbar = e = m_e = 1$ ):

AR підхід)  $d\sigma_{el}^{AR} / d\Omega = \sum_{m=1}^N d\sigma_{el,m} / d\Omega$ , та інтерференційного (непрямого) доданку:

Для розсіювання електрона на гетероядерних молекулах, XY<sub>*n*</sub>, ДП розсіювання в рамках МНА мають достатньо складний вигляд. Так, для розсіювання на молекулах CF<sub>2</sub>Cl та CF<sub>3</sub>, з (1)–(2) впливає формула для IAM перерізу – **CF<sub>2</sub>Cl**:

відстанями між атомами С і F та F і F):

особливості ДП  $d\sigma_{el}^{IAM} / d\Omega$  в цілому, визначаються кутовими і енергетичними залежностями та їх особливостями – мінімумами та максимумами – ДП розсіювання електрона на окремих атомах.

III розсіювання обчислюємо прямим інтегруванням ДП  $d\sigma_{el}/d\Omega$  по кутах

$$\sigma_{el}(E) = 2\pi \int_0^\pi d\theta \sin\theta \frac{d\sigma_{el}(E, \theta)}{d\theta}. \quad (3)$$

Зауважимо, що III пружного розсіювання  $\sigma_{el}^{AR}(E)$  можна також визначити за оптичною теоремою [8,15]. У МНА III за цією теоремою співпадає з III у IAM-AR підході [8,12,14]. Тому з вигляду ДП (1) та (2), а також використовуючи співвідношення  $\sin(sr_{nm})/sr_{nm}|_{\theta \rightarrow 0} \rightarrow 1$  та  $\sin(sr_{nm})/sr_{nm}|_{r_{nm} \rightarrow 0} \rightarrow 1$  маємо:

$$\sigma_{el}^{AR}(E) = \frac{4\pi}{k} \sum_{n=1}^N \text{Im}[f_n(\theta=0, k)] = \sum_{n=1}^N \sigma_{el, n}(E). \quad (4)$$

Аналогічно, у IAM-AR чи IAM підходах можна визначити перерізи передачі імпульсу  $\sigma_{mom}^{AR}(E)$ ,  $\sigma_{mom}^{IAM}(E)$  за ДП та ваговою функцією  $(1 - \cos\theta)$  [16]:

$$\sigma_{mom}^{IAM, AR}(E) = 2\pi \int_0^\pi d\theta \sin\theta \cdot (1 - \cos\theta) \times \frac{d\sigma_{el}^{IAM, AR}(E, \theta)}{d\theta}. \quad (5)$$

Ми вважаємо, що хороший опис розсіювання електрона на атомах молекули дозволить добре описати його розсіювання на молекулі у МНА.

Амплітуди розсіювання електрона на атомі знаходимо за дійсними  $\delta_\ell^\pm(E) = \varepsilon_\ell^\pm(E)$  (для дійсного ОП) [16] або за комплексними  $\delta_\ell^\pm(E) = \varepsilon_\ell^\pm(E) + i\mu_\ell^\pm(E)$  (для комплексного ОП, з врахуванням ефектів поглинання) парціальними фазовими зсувами [17].

Парціальні фазові зсуви, для початкових значень орбітального моменту налітаючого електрона,  $\ell \leq \ell_{min}$ , отримуємо з розв'язку фазових рівнянь – одного рівняння для ОП  $V_{opt}^\pm(r, E) = V^\pm(r, E)$  або двох для ОП  $V_{opt}^\pm(r, E) = V^\pm(r, E) + iV_A(r, E)$  (тут  $V_A$  потенціал поглинання) [16–18]. Асимптотичні, для  $\ell_{max} > \ell > \ell_{min}$ , значення фазових зсувів знаходимо за виразом [15]

$$\text{tg} \delta_\ell^{as} = \frac{\pi \alpha_d(0) k^2}{[(2\ell + 3)(2\ell + 1)(2\ell - 1)]}. \quad (10)$$

У цьому виразі  $\alpha_d(0)$  дипольна статична поляризованість атома (див. [19]).

Зауважимо, що наявність яких-небудь даних з парціальних фазових зсувів розсіювання частинок на різних атомах дозволяє їх використання для розрахунків у МНА характеристик розсіювання молекулами, що містять ці атоми.

*Потенціали взаємодії електрона з атомом*

Дійсна частина ОП взаємодії електрона з атомом є незалежною від параметрів [12,13] (Relativistic-Static-Exchange-Polarization, RSEP-наближення)

$$V^\pm(r, E) = V_S(r) + V_e(r, E) + V_p(r) + V_R(r, E) + V_{so}^\pm(r, E). \quad (11)$$

Потенціальні складові ОП –  $V_S(r)$ ,  $V_e(r, E)$ ,  $V_p(r)$ ,  $V_R(r, E)$ ,  $V_{so}^\pm(r, E)$  це потенціали: статичний; обмінний; поляризаційний, скалярно-релятивістський та спіно-орбітальної взаємодії. Ці складові визначаються повною та спіновими електронними густинами атомів. Знайдені електронні густини та  $V_S(r)$  апроксимують певними аналітичними виразами.

Наявність аналітичних виразів для  $V_S(r)$  та електронних густин є дуже зручним засобом у систематичних розрахунках. Зауважимо, що у підходах [10] та [11] потенціальні складові ОП визначаються електронною густиною всієї молекули.

Потенціал  $V_S(r)$  визначається потенціалами кулонівської взаємодії налітаючого електрона з ядром та електронами атома (див. [18]). Нами для атомів C, F та Cl, що складають молекули, використано параметри хартрі-фоківських електронних густин та  $V_S(r)$  [20].

Потенціали спіно-орбітальної взаємодії  $V_{so}^\pm(r, E)$  та скалярно релятивістський  $V_R(r, E)$  наведено у [12,13].

Нерелятивістський обмінний потенціал використовуємо у наближенні вільного неоднорідного електронного газу (див. [18]) У випадку важких атомів можна ввести релятивістську поправку для нього [16] як множник.

Поляризаційний потенціал використовуємо у локальному спіно-неполяризованому наближенні неоднорідного електронного газу (див. [12,16]). На малих відстанях від атома, тобто у

внутрішній області, для нього використовуємо безпараметричний вираз потенціалу кореляційно-поляризаційної взаємодії електронів (див. [13]). На великих, асимптотичних, відстанях поляризаційний потенціал має відомий вигляд  $V_p^{LR}(r) = -\alpha_d(0)/2r^4$ , взаємодії електрона з наведеним диполем

Ефекти поглинання при пружному зіткненні електрона з атомом враховують уявною частиною  $V_A$  комплексного ОП (RSEPA наближення). Вони впливають на характеристики розсіювання починаючи з енергій зіткнень  $E > \Delta$ , де  $\Delta$  – енергія 1-го непружного порогу  $n$ -го атома. У випадку атомів вуглецю, фтору та хлору їх треба враховувати з енергій (eV)  $\Delta_C = 7.50$ ,  $\Delta_F = 12.6968$ ,  $\Delta_{Cl} = 9.229$  [19]. У якості  $V_A$  можна використати неемпіричні (типу Шашевської) або емпіричні потенціали [16]. Врахування поглинання при-зводить до певного зменшення величин перерізів.

У підходах сферичних [10] та одноцентрових [11] потенціалів ефекти поглинання обумовлюються молекулою.

#### *Міжатомні відстані у молекулах CF<sub>2</sub>, CF<sub>2</sub>Cl та CF<sub>3</sub>*

Рівноважні міжатомні відстані у досліджуваних молекулах, розраховані за обчислювальною програмою GAMESS з геометричною оптимізацією. Отримано наступні міжатомні відстані (Å): молекула CF<sub>2</sub>–  $r_{CF} = 1.3278$ ,  $r_{FF} = 2.0922$ ; CF<sub>3</sub>–  $r_{CF} = 1.3365$ ,  $r_{FF} = 2.2053$ ; CF<sub>2</sub>Cl–  $r_{CF} = 1.3364$ ,  $r_{FF} = 2.1892$ ,  $r_{CCl} = 1.7379$ ,  $r_{FCl} = 2.5857$ . Бачимо, що відстані  $r_{CF}$  та  $r_{FF}$  у молекулі CF<sub>2</sub> є найменшими серед відповідних відстаней даних молекул. Ці ж відстані у радикалі CF<sub>3</sub> майже співпадають з такими ж у CF<sub>2</sub>Cl. Тобто атом хлору не змінює відстані  $r_{CF}$  та  $r_{FF}$ . Однак, міжатомні відстані  $r_{CCl}$  та  $r_{FCl}$  у CF<sub>2</sub>Cl значно, по міркам хімічних зв'язків, перевищують відстані  $r_{CF}$  та  $r_{FF}$  у молекулах CF<sub>2</sub> та CF<sub>3</sub>. У роботі [4] наведено міжатомні відстані  $r_{CF}$  у радикалах CF<sub>2</sub> та CF<sub>3</sub> відповідно (Å): 1.3018, 1.3388. Бачимо, отримані нами значення добре співпадають з цими.

#### **Інтегральні перерізи пружного розсіювання електрона на молекулах CF<sub>2</sub>Cl та CF<sub>3</sub>**

На рис. 1,2 представлено ІІ процесів  $e+CF_2Cl$  та  $e+CF_n$  ( $n=2,3$ ), розраховані у ІАМ-АР підході – пружний (до 100 eV) і передачі імпульсу (до 1000 eV). Парціальні амплітуди розсіювання електрона на атомах для  $e+CF_3$  процесу було розраховано у RSEPA наближенні. Для  $e+CF_2Cl$  та  $e+CF_2$  процесів використовували RSEP наближення (без поглинання). Як було зазначено вище, врахування поглинання призводить до деякого зменшення величини ІІ не змінюючи якісної поведінки. Видно, що енергетичні залежності ІІ розсіювання на вказаних молекулах подібні.

Перерізи пружного розсіювання на рис. 1, порівнюємо з експериментальними для процесів  $e+CF_3$  [2,3] та  $e+CF_2$  [5,6] розсіювання та між собою. Зауважимо, що експериментальні дані мають достатньо великі похибки.

Наявність третього атома фтору у радикалі CF<sub>3</sub> призводить до деякого збільшення ІІ  $e+CF_3$  порівняно з розсіюванням на CF<sub>2</sub>. Бачимо, що поведінка експериментальних ІІ  $e+CF_3$  та  $e+CF_2$  розсіювання при енергіях менше 20 eV не відтворюється нашими розрахунками. Тобто, при  $E < 20$  eV величина розрахованих ІІ  $e+CF_2$  дещо більше експериментальних ІІ, а для  $e+CF_3$  значно менше. При  $E > 20$  eV теоретичні ІІ з  $e+CF_3$  та  $e+CF_2$  розсіювання наближаються до експериментальних.

Наявність атома хлору у молекулі CF<sub>2</sub>Cl призводить до більш сильного зростання ІІ  $e+CF_2Cl$  розсіювання в інтервалі енергій 10–20 eV порівняно з ІІ  $e+CF_3$  процесу. Цікаво, що ІІ  $e+CF_2Cl$  розсіювання більш наближений до експериментального з  $e+CF_3$  розсіювання починаючи з енергії 15 eV. Тобто, додавання до молекули CF<sub>2</sub> атому хлору призводить до більшого кількісного та якісного впливу на переріз – наявність більш чіткого максимуму – ніж додавання атома фтору, хімічно подібного хлору.

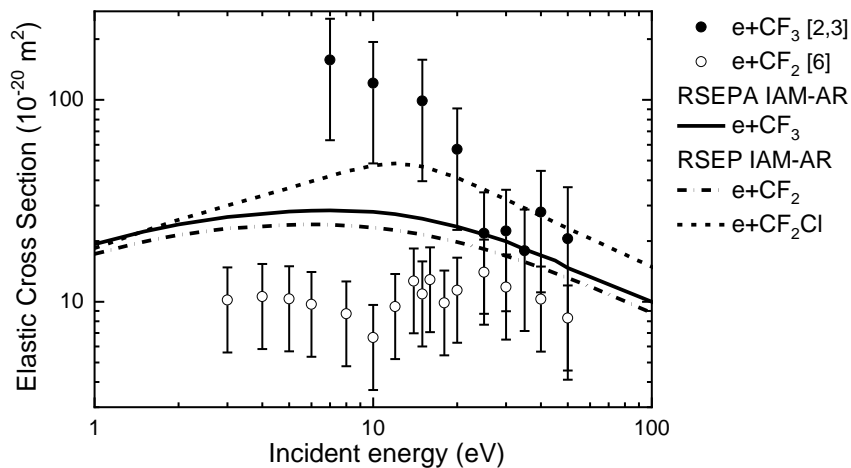


Рис.1. Інтегральні перерізи пружного розсіювання електрона молекулами CF<sub>2</sub>Cl, CF<sub>2</sub> та CF<sub>3</sub>.

Енергетична поведінка ІІ передачі імпульсу перерізів на рис. 2 для різних процесів розсіювання теж є подібною. Максимум ІІ e+CF<sub>2</sub>Cl розсіювання при 10 еВ у півтора рази перевищує максимальний ІІ e+CF<sub>3</sub> процесу та майже у два рази ІІ e+CF<sub>2</sub> розсіювання. З рис.2 бачимо, що додавання до CF<sub>2</sub> атома хлору призводить до більшого кількісного впливу на ці перерізи – наявність більш чітких максимумів – ніж додавання атома

фтору. При малих енергіях зіткнень перерізи всіх процесів майже співпадають. Цікаво зазначити, що для процесів e+CF<sub>3</sub> та e+CF<sub>2</sub> розсіювання, починаючи з енергії ~30 еВ ІІ передачі імпульсу співпадають. Цей переріз для процесу e+CF<sub>2</sub>Cl розсіювання наближається до ІІ e+CF<sub>3</sub> та e+CF<sub>2</sub> розсіювання починаючи з великих енергій ~600 еВ. Всі ІІ на рис. 2 є передбачувальними.

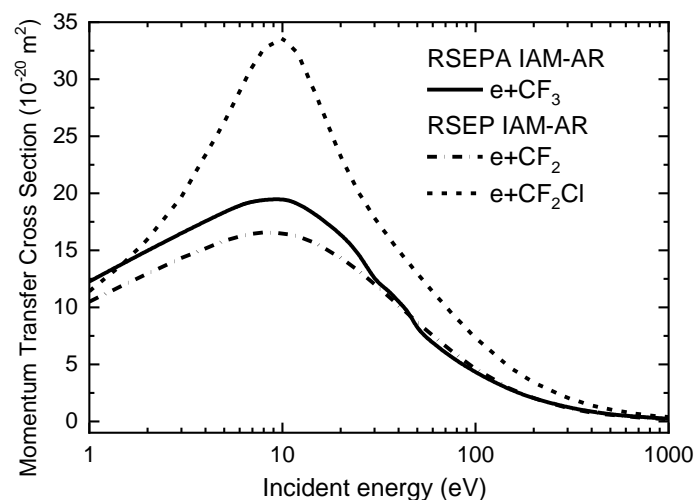


Рис.2. Інтегральні перерізи передачі імпульсу при розсіюванні електрона молекулами CF<sub>2</sub>Cl, CF<sub>2</sub> та CF<sub>3</sub>.

### Диференціальні перерізи пружного розсіювання електрона на молекулах CF<sub>2</sub>Cl та CF<sub>3</sub>

На рис.3-5 представлено розраховані нами у IAM підході кутові залежності ДП пружного e+CF<sub>2</sub>Cl та e+CF<sub>n</sub> (n=2,3) розсіювання при енергіях зіткнень 10, 15, 20, 25, 40 та 50 еВ. Саме у цьому підході

відтворюється кутова структура ДП, внаслідок врахування інтерференційних членів у (1), (2). Парціальні амплітуди розсіювання електрона на атомах було розраховано у RSEP та RSEPA (для процесів e+CF<sub>3</sub>) наближеннях метода ОП. В цілому, як і у випадку ІІ, врахування поглинання призводить до деякого

зменшення величини ДП, але не змінює якісної кутової поведінки.

Кутова залежність розрахованих ДП розсіювання на вказаних молекулах в цілому є подібною. При цьому більш подібними є перерізи  $e+CF_3$  та  $e+CF_2$  розсіювання – внаслідок майже однакового числа атомів фтору у радикалах. Перерізи  $e+CF_2Cl$  процесу зазвичай перевищують ДП  $e+CF_3$  та  $e+CF_2$  розсіювання. Так, при малих енергіях зіткнень, перерізи  $e+CF_2Cl$  розсіювання при малих та великих кутах більші ДП  $e+CF_3$  та  $e+CF_2$  розсіювання. Величина таких інтервалів кутів достатньо сильно залежить від енергії зіткнення.

У [4,7] до розрахунків ДП  $e+CF_x$  ( $x=1-3$ ) розсіювання при  $E < 10$  eV застосовували метод R-матриці. Зауважимо, що наш підхід при малих енергіях не дає хорошого кількісного опису кутової поведінки ДП. Для внутрішньої області у [4,7] використовували розклад сильного зв'язку з молекулярними хвильовими функціями. У зовнішній області розсіювання описували зв'язаними рівняннями одноцентрового

наближення. ДП при малих кутах мають великі значення, а в області від  $45^\circ$  до  $\sim 130^\circ$  розрахунки ДП [4] при енергії 7.5 eV показують структуру – 3 мінімуми та 2 максимуми. Розраховані нами ДП для  $e+CF_n$  ( $n=2,3$ ) розсіювання для всіх енергій мають вигляд кривої з однією ямою, а ДП для  $e+CF_2Cl$  процесу мають більш складну, залежну від енергії зіткнень структуру.

**10 eV.** При цій енергії зіткнень ДП  $e+CF_2Cl$  розсіювання перевищує ДП  $e+CF_3$  та  $e+CF_2$  розсіювання при малих –  $0^\circ-50^\circ$  та великих кутах  $120^\circ-180^\circ$  (див. рис.3.a). Теоретичні ДП для  $e+CF_3$  та  $e+CF_2$  процесів подібні, але дещо відрізняються та співпадають починаючи від кутів  $120^\circ$  до  $180^\circ$ . ДП  $e+CF_3$  розсіювання близький до експериментального ДП при кутах від  $40^\circ$  до  $75^\circ$ , а ДП процесу  $e+CF_2$  значно перевищує експериментальні до кутів  $90^\circ$ , співпадаючи з ними та перерізом процесу  $e+CF_3$  поблизу мінімуму при  $\sim 115^\circ$ . У мінімумі перерізи всіх трьох процесів майже співпадають.

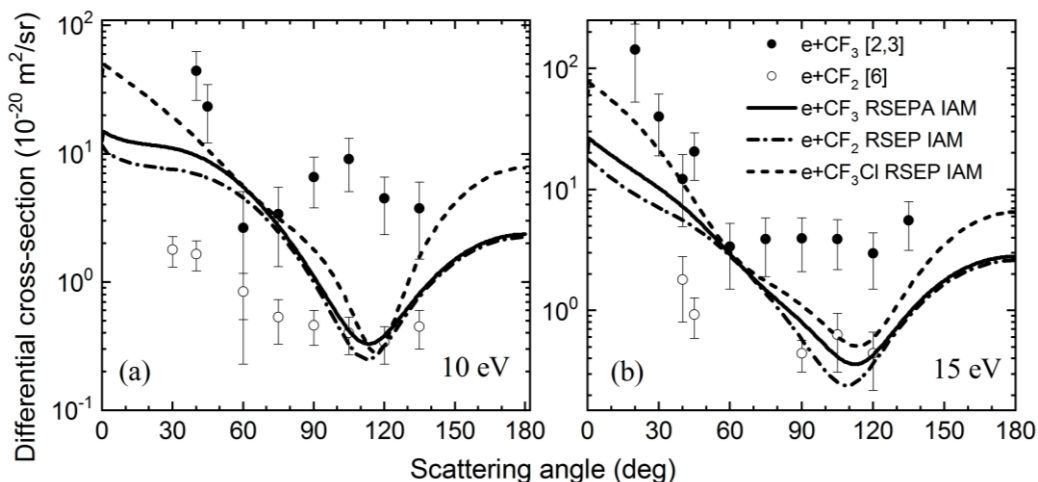


Рис.3. Кутова залежність диференціального перерізу пружного розсіювання електрона молекулами  $CF_2Cl$ ,  $CF_2$  та  $CF_3$  при енергії зіткнень 10 (a) та 15 (b) eV.

**15 eV.** При цій енергії зіткнень ДП  $e+CF_2Cl$  розсіювання наближений до експериментальних з  $e+CF_3$  розсіювання та перевищує перерізи  $e+CF_3$  та  $e+CF_2$  розсіювання у всьому інтервалі кутів (див. рис.3.b). Розрахований ДП процесу  $e+CF_2$  дещо перевищує експериментальні [6] при кутах  $40^\circ-45^\circ$  та близький до ДП процесу  $e+CF_3$  поблизу мінімуму при  $\sim 110^\circ$ . Переріз  $e+CF_2Cl$  розсіювання в мінімумі,

$\sim 113^\circ$ , дещо перевищує перерізи інших двох процесів. При великих кутах теоретичні ДП близькі у порівнянні із ДП при 10 eV. Переріз для  $e+CF_2Cl$  процесів у досить широкому інтервалі кутів, від  $30^\circ$  до  $75^\circ$ , співпадає (в межах похибки) з експериментальними ДП [2,3].

**20 eV.** При цій енергії зіткнень ДП  $e+CF_2Cl$  розсіювання наближений до експериментальних з  $e+CF_3$  розсіювання,

перевищує ДП  $e+CF_3$  та  $e+CF_2$  розсіювання у всьому інтервалі кутів та має майже сталий ( $\sim 1 \cdot 10^{-20} \text{ m}^2/\text{sr}$ ) мінімум в інтервалі кутів від  $80^\circ$  до  $130^\circ$  (див. рис.4.a). Навіть при малому куті  $20^\circ$  спостерігаємо добру узгодженість між нашим ДП для  $e+CF_2Cl$  розсіювання та експериментальними [2,3]. Кутові залежності ДП дозволяють стверджувати, що вплив атому хлору у молекулі  $CF_2Cl$  значно відрізняється від впливу атома фтору. Відносна різниця між нашими теоретичними ДП для різних процесів стала меншою, однак хід ДП  $e+CF_3$  та  $e+CF_2$  процесів майже не змінився, порівняно із ДП при 15 eV.

**25 eV.** При цій енергії зіткнень ДП  $e+CF_2Cl$  розсіювання перевищує експериментальні з  $e+CF_3$  розсіювання,

перевищує розраховані ДП  $e+CF_3$  та  $e+CF_2$  процесів у всьому інтервалі кутів до  $135^\circ$ , та має майже сталий ( $\sim 1 \cdot 10^{-20} \text{ m}^2/\text{sr}$ ) мінімум в інтервалі кутів від  $70^\circ$  до  $130^\circ$  (див. рис.4.b). Цей мінімум має двоямну, структуру при кутах  $\sim 80^\circ$  та  $120^\circ$ . Розраховані ДП для різних процесів значно зблизилися, невелику різницю між ними спостерігаємо тільки в області мінімуму та при малих кутах, до  $\sim 60^\circ$ . Всі перерізи добре, в межах похибки, узгоджуються із експериментальними ДП для  $e+CF_3$  розсіювання [2,3], та дещо перевищують ДП  $e+CF_2$  процесу [6] – більше при кутах  $40^\circ$ - $90^\circ$  і менше при  $105^\circ$ - $135^\circ$ .

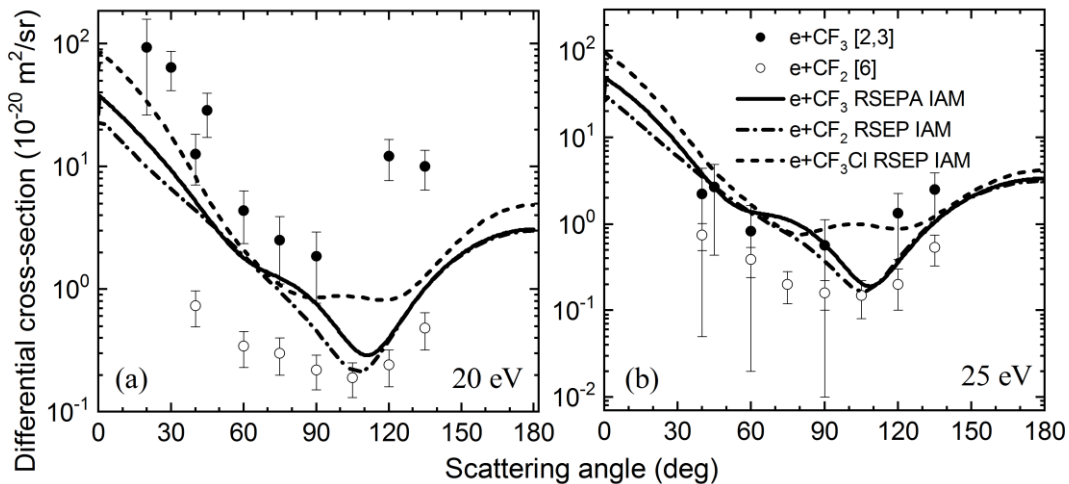


Рис.4. Кутова залежність диференціального перерізу пружного розсіювання електрона молекулами  $CF_2Cl$ ,  $CF_2$  та  $CF_3$  при енергії зіткнень 20 (a) та 25 (b) eV.

**40 eV.** При цій енергії зіткнень ДП  $e+CF_2Cl$  розсіювання співпадає з експериментальними ДП з  $e+CF_3$  розсіювання при кутах від  $20^\circ$  до  $75^\circ$  – при більших кутах він перевищує їх. Також він мінімально перевищує ДП з  $e+CF_3$  та  $e+CF_2$  розсіювання у всьому інтервалі кутів до  $130^\circ$  і має майже сталий (на рівні  $\sim 1 \cdot 10^{-20} \text{ m}^2/\text{sr}$ ) мінімум в інтервалі кутів від  $70^\circ$  до  $130^\circ$  (див. рис.5.a). Різниця між розрахованими нами ДП спостерігається тільки в цій останній області. На ДП  $e+CF_3$  та  $e+CF_2$  процесів формується додаткова яма поблизу  $\sim 45^\circ$ , яку не видно на  $e+CF_2Cl$  ДП, однак невеликий мінімум на останньому формується в районі кута  $\sim 75^\circ$ , де ДП попередніх двох процесів

характеризуються невеликим максимумом.

**50 eV.** При цій енергії зіткнень ДП  $e+CF_2Cl$  розсіювання співпадає з експериментальними ДП з  $e+CF_3$  розсіювання при кутах від  $20^\circ$  до  $60^\circ$ . Також цей ДП трохи перевищує ДП  $e+CF_3$  та  $e+CF_2$  розсіювання у інтервалах кутів від  $0^\circ$  до  $70^\circ$  і від  $125^\circ$  до  $180^\circ$ . Він має майже сталий (на рівні  $\sim 0.6 \cdot 10^{-20} \text{ m}^2/\text{sr}$ ) мінімум в інтервалі від  $60^\circ$  до  $130^\circ$  (див. рис.5.b), і в цій області він значно перевищує інші теоретичні ДП. Попередня тенденція повторюється: невелика яма на  $e+CF_2Cl$  ДП спостерігається при  $\sim 75^\circ$ , де  $e+CF_3$  та  $e+CF_2$  мають малий максимум.

В цілому про роль атома хлору на ДП можна сказати таке. Вплив атома хлору, у

молекулі  $\text{CF}_2\text{Cl}$ , на ДП розсіювання нею електрона, при збільшенні енергії налітаючого електрона якісно та кількісно більший, ніж вплив атома фтору у молекулі  $\text{CF}_3$ . Так, кутова поведінка ДП розсіювання електрона на  $\text{CF}_2\text{Cl}$ , при малих  $0^\circ$ - $45^\circ$  і великих  $130^\circ$ - $180^\circ$  кутах та при малих енергіях до 20 еВ, суттєво відрізняється від такої для молекул  $\text{CF}_2$  та  $\text{CF}_3$ . Ця відмінність між ДП розсіювання

на різних молекулах у вказаних інтервалах кутів швидко спадає з ростом енергії зіткнень – перерізи розсіювання електрона на цих трьох молекулах зближуються. Починаючи з енергії 15 еВ вузький мінімум ДП при  $\sim 115^\circ$  у  $e+\text{CF}_2\text{Cl}$  розсіювання, на відміну від  $e+\text{CF}_2$  та  $e+\text{CF}_3$  зіткнень, збільшується у 2-5 разів, стає більш пологим та розширюється.

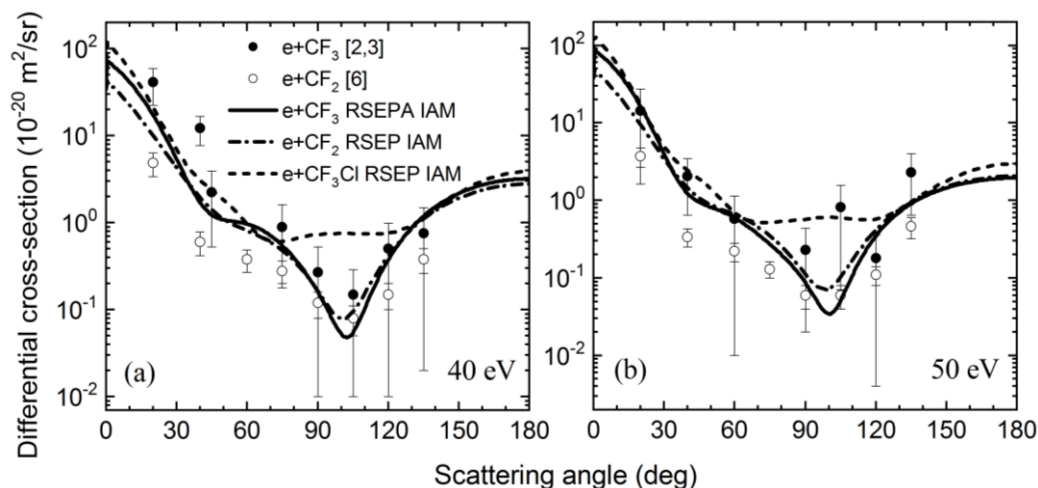


Рис.5. Кутова залежність диференціального перерізу пружного розсіювання електрона молекулами  $\text{CF}_2\text{Cl}$ ,  $\text{CF}_2$  та  $\text{CF}_3$  при енергії зіткнень 40 (а) та 50 (б) еВ.

### Висновки

Представлено опис потенціального розсіювання електрона молекулами у рамках моделі незалежних атомів з використанням метода безпараметричного дійсного локального оптичного потенціала взаємодії електрона з атомами молекули. Особливості розсіювання електрона на молекулах у даній моделі визначаються, в цілому, особливостями поведінки перерізів розсіювання на її окремих атомах.

Розраховано інтегральні (у IAM-AR наближенні) та диференціальні (у IAM наближенні) перерізи для випадку розсіювання електрона на фтор- та хлормістких молекулярних системах  $\text{CF}_2\text{Cl}$  та  $\text{CF}_3$ , які порівняно з відповідними перерізами  $e+\text{CF}_2$  процесу. Парціальні фазові зсуви розраховано у релятивістському локальному стат-обмінно-поляризаційному оптичному потенціалі за хартрі-фоківськими електронними густинами як без (безпараметричне RSEP-наближення), так і з урахуванням ефектів поглинання

(RSEPA-наближення).

Порівняння теоретичних перерізів з експериментальними даними для радикалів  $\text{CF}_3$  та  $\text{CF}_2$  свідчить, що опис розсіювання може бути достатньо хорошим, починаючи з енергій зіткнень 15-20 еВ для  $\text{CF}_3$  та 10 еВ для  $\text{CF}_2$ . Це дозволяє вважати розрахунки перерізів розсіювання на молекулі  $\text{CF}_2\text{Cl}$ , для таких енергій зіткнень, в достатній мірі достовірними та передбачувальними.

Порівняльний розгляд перерізів розсіювання на молекулі  $\text{CF}_2$  свідчить, що вплив атома хлору у молекулі  $\text{CF}_2\text{Cl}$  якісно та кількісно відрізняється від впливу хімічно подібного йому атому фтору у молекулі  $\text{CF}_3$ . Його наявність у молекулі значно збільшує величину інтегральних перерізів – збільшення максимуму – та сильно впливає на кутову поведінку та величину диференціальних перерізів розсіювання. Останній у області мінімуму стає пологим та майже сталим, в інтервалах кутів  $80^\circ$ - $125^\circ$  при 20 еВ до  $60^\circ$ - $125^\circ$  при 50 еВ.



Проведені дослідження підтверджують важливість питання розробки та впровадження більш послідовного опису розсіювання електрона на молекулах, у якому використовують

молекулярні характеристики мішені – електронні орбіталі, електронні густини, потенціали, поляризованості, дипольні моменти.

#### СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1. Yoon J-S., Song M-Y., Kato H., Hoshino M., Tanaka H., Brunger M.J., Buckman S.J., Cho H.J. Elastic Cross Sections for Electron Collisions with Molecules Relevant to Plasma Processing // *Phys. Chem. Ref. Data.* – V.39. – 2010. – P.033106.
2. Brunton J.R., Hargreaves L.R., Buckman S.J., García G., Blanco F., Zatsarinny O., Bartschat K., Brunger M.J. Anomalously large low-energy elastic cross sections for electron scattering from the CF<sub>3</sub> radical // *Chem. Phys. Lett.* – V.568-569. – 2013. – P.55-8.
3. Brunton J R, Hargreaves L.R., Maddern T.M., Buckman S.J. García G., Blanco F., Zatsarinny O., Bartschat K., Jones D.B., da Silva G.B., Brunger M.J. Differential cross sections for low-energy elastic electron scattering from the CF<sub>3</sub> radical // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* – V.46. – 2013. – P.245203-11.
4. Rozum I., Tennyson J. Elastic differential cross sections for the CF<sub>x</sub> (x=1,2,3) radicals // *J. Phys. B* – V.37. – 2004. – P.957–966.
5. Maddern T.M., Hargreaves L.R., Francis-Staite J.R., Brunger M.J., Buckman S.J., Winstead C., McKoy V. Absolute Electron Scattering Cross Sections for the CF<sub>2</sub> Radical // *Phys. Rev. Lett.* –V.100. – 2008. – P.063202.
6. Francis-Staite J.R., Maddern T.M., Brunger M.J., Buckman S.J., Winstead C., McKoy V., Bolorizadeh M.A., Cho H. Differential and integral cross sections for elastic electron scattering from CF<sub>2</sub> // *Phys. Rev. A* – V.79. – 2009. – P.052705.
7. Rozum I., Mason N.J., Tennyson J. Electron collisions with the CF<sub>2</sub> radicals using the R-matrix method // *J. Phys. B* – V.35. –2002. – P.1583.
8. Мотт Р., Мессі Г. Теорія атомних столкновень. – М.: Мир, 1969. – 756 с.
9. Blanco F., García G. Screening corrections for calculation of electron scattering from polyatomic molecules // *Phys. Lett.* – V.A317. – 2003. – P.458-462.
10. Jain A., Baluja K.L. Total (elastic plus inelastic) cross sections for electron scattering from diatomic and polyatomic molecules at 10–5000 eV: H<sub>2</sub>, Li<sub>2</sub>, HF, CH<sub>4</sub>, N<sub>2</sub>, CO, C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>, HCN, O<sub>2</sub>, HCl, H<sub>2</sub>S, PH<sub>3</sub>, SiH<sub>4</sub>, and CO<sub>2</sub> // *Phys. Rev. A* – V.45. – 1992. – P.202–218.
11. Gianturco F.A., Rodriguez-Ruiz J.A., Sanna N. Elastic scattering of electrons by methane molecules // *Phys. Rev. A* – V.52. – 1995. – P.1257.
12. Demesh Sh.Sh., Kelemen V.I., Remeta E.Yu. Elastic electron scattering by the CF<sub>3</sub> radical in the 1–1000 eV energy range // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* – V.50. – 2017. – P.135201-11.
13. Kelemen V.I., Dovhanych M.M., Remeta E.Yu. Potential electron scattering by phosphorus atom // *Ukr. J. Phys.* – V.59, N.6. – 2014. – C.569.
14. Demesh Sh.Sh., Kelemen V.I., Remeta E.Yu. Potential electron scattering by the phosphorous systems P<sub>n</sub> (n = 1÷3) // *J. Phys. Conf. Series* – V.635. – 2015. – P.072020.
15. Бэрк Ф.Дж. Потенциальное рассеяние в атомной физике. – М.: Атомиздат, 1980. –101 с.
16. Kelemen V.I., Remeta E.Yu. Critical minima and spin polarization in the elastic electron scattering by the mercury atoms // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* V.45. – 2012. – P.185202.
17. Remeta E.Yu., Kelemen V.I. Potential elastic electron scattering by atoms in the spin-polarized approach // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* V.43. – 2010. – P.045202.
18. 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 // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. –V.28. – 1995. – P.1527.

19. Радциг А.А., Смирнов Б.М. Справочник по атомной и молекулярной физике. – М.:

Атомиздат, 1980. – 240 с.

20. Strand T.G., Bonham R.A. Analytical expressions for the Hartree-Fock potential of neutral atoms and for the corresponding scattering factors for the X rays and electrons // J. Chem. Phys. – V.40. – 1964. – P.1686.

Стаття надійшла до редакції 30.04.2018.

Ш.Ш. Демеш<sup>1,2</sup>, В.І. Келемен<sup>1</sup>, Е.Ю. Ремета<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Інститут електронної фізики, Національна академія наук України, ул.Університетська, 21, Ужгород, 88017, Україна, e-mail: demesh.shandor@gmail.com

<sup>2</sup> Institute for Nuclear Research, Hungarian Academy of Sciences, Bem tér 18/c, Debrecen, 4026, Hungary, e-mail: remetoveyu@gmail.com

## УПРУГОЕ РАССЕЯНИЕ ЭЛЕКТРОНА МОЛЕКУЛАМИ CF<sub>2</sub>Cl И CF<sub>3</sub> В ПОТЕНЦИАЛЬНОМ ПОДХОДЕ

Упругое рассеяние электрона на CF<sub>2</sub>Cl и CF<sub>3</sub> молекулах исследуется в подходе, который базируется на модели независимых атомов и методе оптического потенциала. Вычислены интегральные и дифференциальные сечения, для равновесных межатомных расстояний в мишенях, которые сравниваются с экспериментальными и теоретическими данными.

**Ключевые слова:** рассеяние, амплитуда, дифференциальное сечение, интегральное сечение, оптическая теорема, оптический потенциал.

Sh.Sh. Demesh<sup>1,2</sup>, V.I. Kelemen<sup>1</sup>, E.Yu. Remeta<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Institute of electron physics, National academy of sciences of Ukraine, Universitetska str. 21, Uzhhorod, 88017, Ukraine, remetoveyu@gmail.com

<sup>2</sup> Institute for Nuclear Research, Hungarian Academy of Sciences, Bem tér 18/c, Debrecen, 4026, Hungary, e-mail: demesh.shandor@gmail.com

## ELASTIC ELECTRON SCATTERING BY THE CF<sub>2</sub>Cl AND CF<sub>3</sub> MOLECULES IN THE POTENTIAL APPROACH

**Purpose:** Studying the electron scattering by fluorocarbon CF<sub>n</sub> and chlorofluorocarbon CF<sub>n</sub>Cl<sub>4-n</sub> (n = 1–4) molecules is of high importance in plasma (gas-discharge, low-temperature and industrial), gaseous laser and semiconductor processing technologies, as well as in atmospheric sciences and ecology. The cross sections of these processes are very important for modelling the mechanisms in low-temperature plasma. Such plasma processes are widely used in industry.

**Methods:** The independent atom model approach with the optical potential method are used to study the elastic scattering of electrons by CF<sub>3</sub>, CF<sub>2</sub>Cl and CF<sub>2</sub> molecules. The scattering cross section are calculated in two approximation of this model – the IAM approach is used for the differential, while the IAM-AR is used for the integral cross sections. The amplitudes of

electron scattering by the carbon, fluorine and chlorine atoms of the target molecules are obtained from the corresponding phase shifts, using the parameter-free real and complex optical potentials.

**Results:** The integral and differential cross sections are calculated at the ground-state equilibrium geometry of the target molecules and compared with the available experimental data. The differential cross sections are analysed at 10, 15, 20, 25, 40 and 50 eV collision energies. The elastic integral cross sections are obtained in the 1–100 eV energy range, while the momentum transfer cross sections are calculated from 1 eV up to 1000 eV.

**Conclusions:** The comparison of the cross sections for the CF<sub>2</sub>Cl and CF<sub>3</sub> target molecules shows a rather strong dependence on the chlorine atom, which increases the amplitude and the angular behaviour of the cross section. Our cross sections are in a rather good qualitative agreement with the measured ones above 10–20 eV energies, depending on the target type.

**Keywords:** scattering, amplitude, differential cross section, integral cross section, optical theorem, optical potential.

**PACS:** 31.15.A-, 34.80.Bm

## REFERENCES

1. Yoon J-S., Song M-Y., Kato H., Hoshino M., Tanaka H., Brunger M.J., Buckman S.J., Cho H.J. Elastic Cross Sections for Electron Collisions with Molecules Relevant to Plasma Processing // *Phys. Chem. Ref. Data.* – V.39. – 2010. – P.033106.
2. Brunton J.R., Hargreaves L.R., Buckman S.J., García G., Blanco F., Zatsarinny O., Bartschat K., Brunger M.J. Anomalously large low-energy elastic cross sections for electron scattering from the CF<sub>3</sub> radical // *Chem. Phys. Lett.* – V.568-569. – 2013. – P.55-8.
3. Brunton J R, Hargreaves L.R., Maddern T.M., Buckman S.J. García G., Blanco F., Zatsarinny O., Bartschat K., Jones D.B., da Silva G.B., Brunger M.J. Differential cross sections for low-energy elastic electron scattering from the CF<sub>3</sub> radical // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* – V.46. – 2013. – P.245203-11.
4. Rozum I., Tennyson J. Elastic differential cross sections for the CF<sub>x</sub> (x=1,2,3) radicals // *J. Phys. B* – V.37. – 2004. – P.957–966.
5. Maddern T.M., Hargreaves L.R., Francis-Staite J.R., Brunger M.J., Buckman S.J., Winstead C., McKoy V. Absolute Electron Scattering Cross Sections for the CF<sub>2</sub> Radical // *Phys. Rev. Lett.* –V.100. – 2008. – P.063202.
6. Francis-Staite J.R., Maddern T.M., Brunger M.J., Buckman S.J., Winstead C., McKoy V., Bolorizadeh M.A., Cho H. Differential and integral cross sections for elastic electron scattering from CF<sub>2</sub> // *Phys. Rev. A* – V.79. – 2009. – P.052705.
7. Rozum I., Mason N.J., Tennyson J. Electron collisions with the CF<sub>2</sub> radicals using the R-matrix method // *J. Phys. B* – V.35. –2002. – P.1583.
8. Mott N.F., Massey H.S.W. The theory of atomic collisions, 3rd ed. – Oxford: Clarendon Press, 1965. – 858 p.
9. Blanco F., García G. Screening corrections for calculation of electron scattering from polyatomic molecules // *Phys. Lett.* – V.A317. – 2003. – P.458-462.
10. Jain A., Baluja K.L. Total (elastic plus inelastic) cross sections for electron scattering from diatomic and polyatomic molecules at 10–5000 eV: H<sub>2</sub>, Li<sub>2</sub>, HF, CH<sub>4</sub>, N<sub>2</sub>, CO, C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>, HCN, O<sub>2</sub>, HCl, H<sub>2</sub>S, PH<sub>3</sub>, SiH<sub>4</sub>, and CO<sub>2</sub> // *Phys. Rev. A* – V.45. – 1992. – P.202–218.
11. Gianturco F.A., Rodriguez-Ruiz J.A., Sanna N. Elastic scattering of electrons by methane molecules // *Phys. Rev. A* – V.52. – 1995. – P.1257.
12. Demesh Sh.Sh., Kelemen V.I., Remeta E.Yu. Elastic electron scattering by the CF<sub>3</sub> radical in the 1–1000 eV energy range // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* – V.50. – 2017. – P.135201-11.
13. Kelemen V.I., Dovhanych M.M., Remeta E.Yu. Potential electron scattering by

- phosphorus atom // Ukr. J. Phys. – V.59, N.6. – 2014. – C.569.
14. Demesh Sh.Sh., Kelemen V.I., Remeta E.Yu. Potential electron scattering by the phosphorous systems  $P_n$  ( $n = 1\div 3$ ) // J. Phys. Conf. Series – V.635. – 2015. – P.072020.
  15. Burke F.G. Potential scattering in atomic physics. – New York: Plenum Publishing Corporation, 1977. – 138 p.
  16. Kelemen V.I., Remeta E.Yu. Critical minima and spin polarization in the elastic electron scattering by the mercury atoms // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. V.45. – 2012. – P.185202.
  17. Remeta E.Yu., Kelemen V.I. Potential elastic electron scattering by atoms in the spin-polarized approach // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. V.43. – 2010. – P.045202.
  18. 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 // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. –V.28. – 1995. – P.1527.
  19. Radtsig A.A., Smirnov B.M. Handbook on atomic and molecular physics [Spravochnik po atomnoi i molekulyarnoi fizike. M.: Atomizdat]. – Moscow: Atomizdat, 1980. – 240 p.
  20. Strand T.G., Bonham R.A. Analytical expressions for the Hartree-Fock potential of neutral atoms and for the corresponding scattering factors for the X rays and electrons // J. Chem. Phys. – V.40. – 1964. – P.1686.

© Ужгородський національний університет