

ПРУЖНЕ РОЗСІЮВАННЯ ПОВІЛЬНИХ ЕЛЕКТРОНІВ АТОМАМИ НА КУТИ, ЗАЛЕЖНІ ВІД ЕНЕРГІЇ ЗІТКНЕННЯ

Ю.Ю.Білак

Ужгородський національний університет
вул.Волошина, 54, Ужгород, 88000
e-mail: yubill76@yahoo.com

В даній роботі для енергетичної залежності $S(E)$, що описує розсіювання електронів атомами, та яка отримується в експериментах з використанням гіпоциклоїдального електронного спектрометра (ГЕС), представлено розроблений аналітичний формалізм. Деталізовано різні аналітичні вирази $S(E)$ через прямі та інтерференційні, резонансні та нерезонансні складові, які застосовано до пояснення пружного розсіювання електронів атомами в передню та задню напівсфери кутів. Немонотонність поведінки $S(E)$ обумовлена наявністю 2D -резонансу, у випадку розсіювання на атомах Ca, Sr, Ba та Yb. Наведено узагальнення виразів $S(E)$ для опису потенціально-резонансного розсіювання електронів, розсіювання з урахуванням спин-орбітальної взаємодії та на мішенях з напівзаповненими підоболонками.

1. Особливий інтерес в електрон-атомних зіткненнях являє область низьких енергій, при яких можуть здійснюватися резонанси. Класичними характеристиками експериментів по розсіюванню є повний та диференціальний (ДП) перерізи. З експериментальної точки зору вимірювання повного перерізу є відносно простим, але ускладнюється в області малих ($\approx 0^\circ$) та великих ($\approx 180^\circ$) кутів. ДП є більш прецизійна характеристика розсіювання, але її дослідження набагато складніше, оскільки реєстрування електронів низьких енергій, розсіяних на певний кут, є досить складним завданням. Дослідження ж зворотного розсіювання традиційними методиками є ще складнішим.

Труднощі, притаманні експериментам по розсіюванню електронів низьких енергій ($E \leq 5$ eV) майже повністю усуваються використанням спектрометрів нових типів – трохоїдального та його модифікації – гіпоциклоїдального. У цих спектрометрах для формування та аналізу пучка електронів суттєво використовуються схрещені електричне та магнітне поля. З допомогою ГЕС вимірюють деяку

енергетичну залежність $S(E)$ розсіювання електронів в інтервал кутів, що залежать від E , та яка є “середньою” характеристикою між повним та ДП розсіювання. Це є перевагою методик з використанням ГЕС, оскільки $S(E)$ несе детальну інформацію про процес зіткнення (особливо резонансного). Ця інформація дещо затемнюється особливостями, які властиві експериментальній установці. Тому важливим є вивчення аналітичного вигляду $S(E)$, який дозволяє відділити її динамічні особливості (зв’язані з фазами розсіювання, а значить з потенціалом взаємодії) від кінематичних (зв’язаних з кутами розсіювання). Дуже важливою також є можливість отримання інформації про величину та поведінку ДП. Зауважимо, що дані методики дозволяють вимірювати також повний переріз розсіювання.

Вперше функція $S(E)$ була чисельно розрахована для пояснення пружного розсіювання електронів на атомах Ca [1, 2], однак в цій роботі не досліджувався її аналітичний вид. Тому детальна поведінка її складових частин теж не вивчалася. В останній час з ГЕС також проводяться експерименти по дослідженню розсіювання електронів у задню напівсферу

кутів на атомах [3], іонах [4] та тонких плівках [5].

2. Головною проблемою теоретичного опису електрон-атомного розсіювання при низьких енергіях є якомога точніше врахування обмінної, поляризаційної, спин-орбітальної, поглинальної частин взаємодії електрона з атомом. При цьому врахування поляризації електронної оболонки атома мішені, тобто опис спотворення атомного потенціалу налітаючим електроном є чи не найголовнішим. В останні роки з'явилося значне число робіт по розрахунку електрон-атомних зіткнень з допомогою модельного оптичного потенціалу (ОП), в якому це спотворення описується поляризаційним потенціалом, обчисленим у тому чи іншому наближенні. Для теоретичного дослідження функції $S(E)$ нами було розроблено загальний аналітичний формалізм для випадків комплексного та дійсного ОП.

Функція $S(E)$ так зв'язана з ДП:

$$S(E) = 2\pi \int_{x_1}^{x_2} dx \frac{d\sigma(E, \theta)}{d\theta}, x_{1,2} = \cos\theta_{2,1}(E). \quad (1)$$

Для випадку точкового вводу електронного пучка в область зіткнень кути мають вигляд $\theta_{1,2} = \arcsin\sqrt{a_{1,2}/E}$ для розсіювання в передню напівсферу та $\theta_{1,2}(E) = 180^\circ \mp \arcsin\sqrt{c/E}$ – в задню напівсферу, де $a_{1,2}$ та c – константи, що визначаються умовами експерименту [2, 3, 6]. Граничні кути є функціями енергії електронів, тому $S(E)$ несе на собі риси як тієї чи іншої установки, так і режимів її роботи.

- Використовуючи парціально-хвильовий розклад для амплітуди розсіювання, і її зв'язок з ДП маємо для функції $S(E)$ такий вираз через пряму S_d та інтерференційну S_i складові для дійсної моделі розсіювання (для енергій нижче порогу непружних процесів):

$$S(E) = S_d(E) + S_i(E) = \sum_{\ell} \sigma_{\ell}(E) Q_{\ell\ell}^{00}(E) + \frac{4\pi}{E} \sum_{\ell' > \ell, \ell' < \ell} \sqrt{(2\ell+1)(2\ell'+1)} \sin\delta_{\ell'} \sin\delta_{\ell} \cos\{\delta_{\ell'}(E) - \delta_{\ell}(E)\} Q_{\ell\ell'}^{00}(E). \quad (2)$$

Тут δ_{ℓ} – парціальна фаза розсіювання електрона в полі дійсного ОП, $\sigma_{\ell}(E) = \frac{2\pi}{E} (2\ell+1) \sin^2 \delta_{\ell}(E)$ – парціальний переріз пружного розсіювання електронів.

Функції $Q_{\ell\ell'}^{00}(E)$ в (2) зв'язані з поліномами Лежандра $P_{\ell}^0(x)$:

$$Q_{\ell\ell'}^{00}(E) = \frac{\sqrt{(2\ell+1)(2\ell'+1)}}{2} \int_{x_1}^{x_2} dx P_{\ell}^0(x) P_{\ell'}^0(x), \quad (3)$$

а їх аналітичні вирази наведено в [7]. Функції $Q_{\ell\ell'}^{00}(E)$ характеризують кутові властивості розсіювання (пов'язані з кінематикою розсіювання), що досліджуються ГЕС, а фази $\delta_{\ell}(E)$ описують динамічні властивості. Для стандартних

кутів $\theta_1=0, \theta_2=\pi$ $S(E)$ дорівнює повному перерізу розсіювання [6].

Завдяки резонансу функцію $S(E)$ можна представити у вигляді резонансної $S_R(E)$ і нерезонансної $S_{NR}(E)$ частин, які також можна розбити на прямі й інтерференційні складові, що дозволяє ширше досліджувати особливості резонансного розсіювання.

3. Формулу (2) можна представити у вигляді потенціальної та непотенціальної (резонансної) складових, що більш адекватно описує фізику резонансного розсіювання електронів. У випадку резонансу (з енергією E_r , шириною Γ_r та фоновою (потенціальною) частиною фазового зсуву $\delta_{\ell}^0(E)$) в ℓ -й парціальній хвилі зручно представити функцію $S(E)$ в області резонансу у вигляді потенціальної та структурної (резонансної) складових (див. також [8]):

$$S(E) = S^{pot}(E) + S'_\ell(E), \quad (4)$$

де

$$S^{pot}(E) = \frac{1}{2\pi} \sum_{s,t} (2s+1)(2t+1) \sin \delta_s \sin \delta_t \cos(\delta_s - \delta_t) Q_{st}^{00}(E), \quad (5)$$

$$S'_\ell(E) = \frac{\Gamma_\ell}{2} \frac{A_\ell(E)(E - E'_\ell) + B_\ell(E)\Gamma_\ell/2}{(E - E'_\ell)^2 + \Gamma_\ell^2/4}, \quad (6)$$

а амплітуди $A_\ell(E)$ та $B_\ell(E)$ мають вигляд:

$$A_\ell(E) = -\frac{\sqrt{2\ell+1}}{4\pi} \left[\sqrt{2\ell+1} \sin 2\delta_\ell^0 Q_{\ell\ell}^{00}(E) + 2 \sum_{s \neq \ell} \sqrt{2s+1} \sin \delta_s \cos(2\delta_\ell^0 - \delta_s) Q_{s\ell}^{00}(E) \right], \quad (7)$$

$$B_\ell(E) = \frac{\sqrt{2\ell+1}}{4\pi} \left[\sqrt{2\ell+1} \cos 2\delta_\ell^0 Q_{\ell\ell}^{00}(E) - 2 \sum_{s \neq \ell} \sqrt{2s+1} \sin \delta_s \sin(2\delta_\ell^0 - \delta_s) Q_{s\ell}^{00}(E) \right]. \quad (8)$$

З (4), (6) видно, що при будь-якому значенні $\delta_\ell^0(E)$ функція $S(E)$ має мінімум та максимум, як і ДП, на відміну від повного перерізу [8]. Положення та форма цих екстремумів, між якими знаходиться резонанс, залежить, завдяки функціям $Q_{\ell\ell}^{00}(E)$, від експериментальних умов, через константи $a_{1,2}$ та c (1)–(3). Енергію резонансу, його ширину, потенціальну частину енергетичної залежності в резонансній парціальній хвилі можна визначити з системи рівнянь, в яких використовуються експериментальні значення екстремумів та величина самої $S(E)$ в них. Це дозволяє також визначити фоновий (потенціальний) фазовий зсув $\delta_\ell^0(E)$.

4. Адекватний опис розсіювання електронів важкими атомами (іонами) має бути релятивістським. Найважливішою складовою релятивістської взаємодії налітаючого електрона з такими атомними системами є спін-орбітальна взаємодія. Якщо величина цієї взаємодії достатньо велика, то стає можливим проведення надійних експериментів з поляризованими пучками частинок з вимірюванням таких характеристик розсіювання, як їх поляризація, функції Шермана та асиметрії. Для розглядуваних новітніх методик такі експерименти були б дуже цікаві.

Врахування спін-орбітальної взаємодії завдяки потенціалу $V_{so}(r) = \xi(j, \ell) \cdot dV_s / dr$, який додається до ОП ($\xi(\ell + 1/2, \ell) = \ell/2$, $\xi(\ell - 1/2, \ell) = -(\ell + 1)/2$, $V_s(r)$ – статичний потенціал) дає вираз для $S(E)$:

$$\begin{aligned} S(E) = & \frac{16\pi}{(2k)^2} \sum_{\ell \neq \ell'} \frac{1}{\ell+1} \left[(\ell+1)^2 \sin^2 \delta_\ell^+ + \ell^2 \sin^2 \delta_\ell^- + 2\ell(\ell+1) \sin \delta_\ell^+ \cdot \sin \delta_\ell^- \cdot \cos(\delta_\ell^+ - \delta_\ell^-) \right] Q_{\ell\ell}^{00}(E) + \\ & + \frac{32\pi}{(2k)^2} \sum_{\ell, \ell' > \ell} \frac{1}{\sqrt{(2\ell+1)(2\ell'+1)}} \left[(\ell+1)(\ell'+1) \sin \delta_\ell^+ \cdot \sin \delta_{\ell'}^+ \cdot \cos(\delta_\ell^+ - \delta_{\ell'}^+) + \right. \\ & + \ell(\ell'+1) \sin \delta_\ell^+ \cdot \sin \delta_{\ell'}^- \cdot \cos(\delta_\ell^+ - \delta_{\ell'}^-) + \ell(\ell+1) \sin \delta_\ell^- \cdot \sin \delta_{\ell'}^+ \cdot \cos(\delta_\ell^- - \delta_{\ell'}^+) + \\ & \left. + \ell\ell' \sin \delta_\ell^- \cdot \sin \delta_{\ell'}^- \cdot \cos(\delta_\ell^- - \delta_{\ell'}^-) \right] Q_{\ell\ell'}^{00}(E) + \frac{16\pi}{(2k)^2} \sum_{\ell \neq \ell'} \frac{(\ell+1)!}{(2\ell+1)(\ell-1)!} \sin^2(\delta_\ell^+ - \delta_{\ell'}^-) Q_{\ell\ell'}^{11}(E) + \\ & + \frac{32\pi}{(2k)^2} \sum_{\ell, \ell' > \ell} \sqrt{\frac{(\ell+1)!(\ell'+1)!}{(2\ell+1)(2\ell'+1)(\ell-1)!(\ell'-1)!}} \cos[(\delta_\ell^+ - \delta_{\ell'}^+) + (\delta_\ell^- - \delta_{\ell'}^-)] \sin(\delta_\ell^+ - \delta_{\ell'}^-) \sin(\delta_\ell^- - \delta_{\ell'}^+) Q_{\ell\ell'}^{11}(E), \end{aligned} \quad (9)$$

де $\delta_\ell^\pm(E)$ – фази розсіювання (\pm відповідає $j = \ell \pm 1/2$). Функція асиметрії має

такий вираз через $S^\pm(E)$ або пряму $f(E, \theta)$ та обмінну $g(E, \theta)$ амплітуди:

$$A_s(E) = \frac{S^+ - S^-}{S^+ + S^-} = \left[i \int_{x_1}^{x_2} dx (f \cdot g^* - f^* \cdot g) \right] / S(E), \quad S^\pm = 2\pi \int_{x_1}^{x_2} dx \frac{d\sigma^\pm}{d\theta} \quad (10)$$

Функції $Q_{\ell\ell'}^{11}(E)$ в (9) та $Q_{\ell\ell'}^{01}(E)$, що містяться в $A_s(E)$ (10), зв'язані з поліномами Лежандра:

$$Q_{\ell\ell'}^{11}(E) = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{(2\ell+1)(2\ell'+1)(\ell-1)!(\ell'-1)!}{(\ell+1)!(\ell'+1)!}} \int_{x_1}^{x_2} dx P_\ell^1(x) P_{\ell'}^1(x), \quad Q_{\ell\ell'}^{01}(E) = \int_{x_1}^{x_2} dx P_\ell^0(x) P_{\ell'}^1(x). \quad (11)$$

Аналitичні вирази для цих функцій наведено в [9, 10] з їх графічним аналізом.

5. Для вивчення пружного розсіювання електронів атомами (іонами) з напівзаповненими підоболонками можна використовувати спин-поляризоване наближення. У ньому використовуються два різні обмінні потенціали [11–13], залежні від електронної спінової густини відповідної підоболонки. Експериментальне вивчення розсіювання електронів такими мішенями з використанням ГЕС має бути цікавим.

Дві амплітуди розсіювання та два ДП відповідають паралельній (\uparrow) і антипаралельній (\downarrow) орієнтаціям спінів налітаючого електрона та атома. Енергетична залежність $S(E)$ буде [14]:

$$S(E) = 2\pi \int_{\alpha_1}^{\alpha_2} d\theta \sin\theta \frac{d\sigma(E, \theta)}{d\theta} = S^\uparrow(E) + S^\downarrow(E) = \pi \int_{\alpha_1}^{\alpha_2} d\theta \sin\theta \left(\frac{d\sigma^\uparrow}{d\theta} + \frac{d\sigma^\downarrow}{d\theta} \right) \quad (12)$$

Функція асиметрії в даному випадку визначається таким чином

$$A_s(E) = [S^\uparrow(E) - S^\downarrow(E)] / 2S(E). \quad (13)$$

6. В експерименті [2] розсіювання електронів на атомах Са досліджувалося в режимі виміру енергетичної залежності, в якому потенціал аналізатора підтримувався постійним $U_A = 0,55$ В, $\alpha_1 = 0,482$ еВ, $\alpha_2 = 0,508$ еВ. Для теоретичного пояснення пружного розсіювання електронів атомами Са в передню напівсферу кутів у [1, 2, 6] фази було знайдено в ОП, в якому

існує стабільний негативний іон Са у стані $4s^2 4p$, при цьому d -фаза має резонансну поведінку. Розрахунок фаз показав наявність 2D -резонансу форми з параметрами: енергія $E_2^r = 0,87$ еВ, ширина $\Gamma_2 = 0,98$ еВ. Залежність $S(E)$ від кількості врахованих парціальних хвиль (5 хвиль) підтвердила наявність 2D -резонансу форми – тільки з врахуванням d -хвилі з'являється структура у вигляді чіткого мінімуму та максимуму. Тобто така немонотонність $S(E)$ є ознакою наявності резонансу. Порівняння $S(E)$ з повним та диференціальним перерізами, показує суттєву відмінність від них. Отже, особливості вимірної функції $S(E)$ визначаються 2D -резонансом форми, який проявляється як у прямій, так і в інтерференційній частинах даної функції.

Наведений вище формалізм було також застосовано до теоретичного обчислення по п'яти (та трьох) парціальних хвилях, значень функції $S(E)$ процесу пружного розсіювання електронів атомами Ве, Mg, Sr, Ba, Yb [15–18] в передню та задню напівсфери кутів. При цьому, було використано значення констант $\alpha_1 = 0,482$ еВ і $\alpha_2 = 0,508$ еВ, які відповідають єдиному експерименту низькоенергетичного (0,6–2,0 еВ) розсіювання електронів атомами Са з використанням ГЕС [2]. Резонанс електронного розсіювання на атомі Ва знаходиться при малій енергії, тому розрахунок $S(E)$ було проведено ще й з константами $\alpha_1 = 0,09487$ еВ і $\alpha_2 = 0,1546$ еВ. Немонотонність поведінки $S(E)$ обумовлена наявністю 2D -резонансу форми, як і у випадку атома Са.

У [14] було представлено графічне зображення функцій $S^{\uparrow,\downarrow}(E)$, $S(E)$, $A_S(E)$ і $A(E, \theta)$ разом з диференціальним та повним перерізами для атома Au в околі P-резонансів ($E_1^{\uparrow,\downarrow}=0,27$ еВ, $\Gamma_1^{\uparrow}=0,606$ еВ, $\Gamma_1^{\downarrow}=1$ еВ) для розсіювання електронів у передню та задню напівсфери кутів, розраховані по трьох парціальних хвилях.

Порівняння вимірених $S(E)$ з їх теоретичними розрахунками та перерізами

пружного розсіювання дозволяє зробити висновки про особливості цього процесу. Використання спектрометрів "нових" типів дає змогу досліджувати потенціальні, резонансні, поляризаційні (пов'язані зі спінами частинок) риси низькоенергетичного розсіювання, а ГЕС може бути розглянутий як пристрій, який дозволяє виявляти роль різних парціальних хвиль пружного розсіювання електронів у передню та задню напівсфери кутів.

Література

1. В.И.Келемен, Е.Ю.Ремета, Е.П.Сабад, В сб.: *Физика электронных. и атомных столкновений* **12**, 152 (1991).
2. М.І.Романюк, О.Б.Шпеник, Ф.Ф.Папп і ін., *УФЖ* **37**, 1639 (1992).
3. О.Б.Шпеник, Н.М.Эрдеви, Н.И.Романюк и др., *ПТЭ* **41**, 109 (1998).
4. I.Chernyshova, A.Imre, J.Kontros et al, *In: Proc. 20th ICPEAC* (Vienna, 1997) p. MO156.
5. Т.Ю.Попик, В.М.Феєр, М.М.Ердеви і ін., *УФЖ* **46**, 456 (2001).
6. Е.Ю.Ремета, О.Б.Шпеник, Ю.Ю.Билак, *ЖТФ* **71**, В.4, 13 (2001).
7. Ю.Ю.Билак, *Науковий вісник Ужг. унів. Сер. Фіз.* **5**, 186 (1999).
8. С.Ю.Медведев, И.Ю.Кривский, *Препринт КИЯИ-82-16* (Киев, 1982).
9. Е.Ю.Ремета, Yu.Yu.Bilak, *In: Proc. 22nd ICPEAC* (Santa Fe, USA 2001) p. TU030.
10. Ю.Ю.Билак, Л.Л.Шимон, С.Ю.Ремета, *Наук. вісник Ужг. унів. Сер. Фіз.* (буде опубліковано).
11. V.I.Kelemen, E.Yu.Remeta, E.P.Sabad, *In: Proc 19th ICPEAC*, (Whistler, British Columbia, Canada 1995) p. 200.
12. E.Sabad, V.Kelemen, E.Remeta, *In: Proc 18th ICPEAC*, (Aarhus, Denmark 1993) p. 134.
13. Е.Сабад, В.Келемен, Е.Ремета, В: *Наукові праці ІЕФ '96* (Ужгород, 1996) с. 249.
14. Е.Ю.Ремета, Yu.Yu.Bilak, *In: Proc. 22nd ICPEAC* (Santa Fe, USA 2001) p. WE026.
15. С.Ю.Ремета, Ю.Ю.Билак, Л.Л.Шимон, *УФЖ* **46**, 627 (2001).
16. Yu.Yu.Bilak, E.Yu.Remeta, *In: Proc. 6 ECAMP* (Siena, Italy 1998) p. 4-23.
17. E.Yu.Remeta, V.I.Kelemen, Yu.Yu.Bilak, L.L.Shimon *In: Proc. CEPAS'2000* (Uzhhorod, 2000) p. 123.
18. E. Remeta, V. Kelemen, Yu. Bilak, *In: Proc. 22nd ICPEAC* (Santa Fe, USA 2001) p. TU029.

ELASTIC SCATTERING OF SLOW ELECTRONS BY ATOMS AT ANGLES, DEPENDING ON THE COLLISION ENERGY

Yu.Yu.Bilak

Uzhhorod National University, Voloshyna str. 54, Uzhhorod, 88000
e-mail: yubill76@yahoo.com

An analytical formalism is worked out for the energy dependence $S(E)$, describing electron scattering by atoms obtained experimentally using with a hypocycloidal electron spectrometer. Detailed various analytical expressions through direct and interference, resonance and non-resonance components, which are used to explain of electron elastic scattering by the atoms in forward and backward hemispheres of angles, are given. Non-monotonous behaviour of $S(E)$ is caused by the presence of 3D -resonance, in the case of scattering by the Ca, Sr, Ba and Yb atoms. A generalization of $S(E)$ expression for the potential-resonance electron scattering, scattering with the account of spin-orbit interaction, and on the targets with half-filled subshells is described.