

## АСИМЕТРІЯ У ПРУЖНОМУ РОЗСІЮВАННІ ЕЛЕКТРОНІВ АТОМАМИ ЗОЛОТА

В.І. КЕЛЕМЕН, М.М. ДОВГАНИЧ, Є.Ю. РЕМЕТА

Інститут електронної фізики НАН України

(Вул. Університетська, 21, Ужгород 88017; e-mail:

vlad.kelemen@gmail.com, remetov@inbox.ru)

УДК 539.184.01  
© 2010

У спіין-поляризованому наближенні методу оптичного потенціалу (ОП) досліджено куту залежність параметра спінової обмінної асиметрії у пружному розсіюванні електронів на атомах золота в діапазоні енергій зіткнення 0,2–400 еВ. Розрахунки проведено як у наближенні безпараметричної дійсної частини ОП, так і з використанням комплексного ОП для врахування ефектів поглинання. У ролі уявної частини ОП використано два типи потенціалу поглинання. Систематичні розрахунки асиметрії проведено з використанням емпіричного потенціалу поглинання. Енергетичну залежність параметра в цьому потенціалі знайдено з використанням неемпіричного потенціалу поглинання в наближенні квазівільного розсіювання електронів. Показано, що поведінка куту залежності параметра асиметрії в широкому інтервалі енергії визначається спіновою залежністю не тільки обмінної, але і поляризаційної взаємодії електрона з атомом. Відзначено великий вплив ефектів поглинання на поведінку параметра асиметрії. Показано, що навіть для енергій у декілька сот електрон-вольтів параметр асиметрії при малих кутах залежить від вибору того чи іншого потенціалу поглинання.

### 1. Вступ

Узгоджений опис процесу пружного потенціального розсіювання електрона на багатоелектронному атомі вимагає визначення модельних потенціалів взаємодії в однотипних наближеннях. Теоретичні наближення, що використовуються для знаходження цих потенціалів, мають враховувати особливості будови електронної структури мішені. Атомні системи з однією напівзаповненою електронною підоболонкою потрібно описувати у спіין-поляризованому наближенні [1, 2], тобто з урахуванням спінової поляризації цих підоболонок. Відповідно до правила Хунда [1] основний стан таких систем має максимальний спіין, який визначає-

ться сумарним спіном електронів напівзаповненої підоболонки. Тому вся електронна оболонка атома розбивається на дві заповнені спінові підоболонки.

Атом золота в основному стані має валентну напівзаповнену  $6s^1$ -підоболонку та у Періодичній таблиці передує атому ртуті, для якого в літературі є досить багато експериментальних даних з процесу пружного розсіювання електронів. Причому це не тільки різноманітні перерізи розсіювання (див., наприклад, [3] та посилання там), але й такі прецизійні характеристики, як параметри спінової поляризації розсіяних електронів (див., наприклад, [4] та посилання там).

На відміну від атома ртуті для пружного розсіювання електронів атомами золота експериментальних даних обмаль. Так, у роботі [5] диференціальні перерізи (ДП) пружного розсіювання електронів на атомах золота було виміряно лише для чотирьох значень енергії налітаючого електрона 30, 50, 100 та 200 еВ. У роботах [6, 7] виміряно перерізи іонізації атома золота.

У даній роботі розраховано куту залежність параметра спінової обмінної асиметрії в широкому діапазоні енергій 0,2–400 еВ. Це перші дані про таку характеристику пружного розсіювання електронів, що є достатньо чутливою до вибору як експериментальних методик, так і теоретичних наближень.

Для знаходження електронних орбіталей, повної і підоболонкових електронних густин та потенціалів розсіювання використовують наближення локальної спінової густини (ЛСГ) теорії функціонала густини (ТФГ) [2]. У цьому наближенні всю електронну оболонку атома Au із спіном  $1/2$  розбивають на дві заповнені спінові підоболонки: 40 електронів спіну вгору ( $sp=\uparrow$ ) та 39 електронів спіну вниз ( $sp=\downarrow$ ). У ре-

зультаті атомного розрахунку для цих підоболонки маємо дві електронні спінові густини  $\rho_{\uparrow}(r)$  та  $\rho_{\downarrow}(r)$ , які нижче позначено як  $\rho_{\text{sp}}(r)$ . Повна електронна густина атома дорівнює  $\rho(r) = \rho_{\uparrow}(r) + \rho_{\downarrow}(r)$ .

Обмінна взаємодія налітаючого електрона з фіксованим напрямком спіну зі спин-поляризованим атомом можлива лише з електронами відповідної спінової підоболонки. Отже, розсіювання електронів на атомі золота може бути розглянуто у випадках, коли напрямки спінів налітаючого електрона та атома збігаються – розсіювання з паралельними ( $\uparrow\uparrow$ ) спінами та, коли ці спіни мають протилежні напрямки – розсіювання з антипаралельними ( $\downarrow\uparrow$ ) спінами.

У даній роботі залежність від спіну враховується також і в поляризаційній взаємодії налітаючого електрона з атомом. Для цього використовують наближення, в якому у внутрішній області атома поляризаційна взаємодія визначається кореляційною взаємодією налітаючого електрона з електронами мішені (як це зроблено, наприклад, у [8, 9]). У ТФГ ця взаємодія описується кореляційним функціоналом, який у наближенні ЛСГ для неоднорідного спин-поляризованого електронного газу визначається густиною кореляційної енергії  $\varepsilon_c[\rho_{\uparrow}(r), \rho_{\downarrow}(r)]$ . Як і в нашій роботі (див. [10] та посилання там) нижче визначено та наведено залежні від спіну поляризаційні потенціали.

Для енергій, вищих за перший поріг збудження атома мішені, пружне розсіювання електронів супроводжується непружним розсіюванням. В оптичному потенціалі (ОП) для врахування цього поглинання енергії як уявну частину використовують певний потенціал поглинання. У цій роботі, як і в [10], розрахунки асиметрії проведено з використанням двох типів потенціалів поглинання: емпіричного потенціалу, запропонованого у роботах [11, 12] та неемпіричного потенціалу поглинання в наближенні квазі-вільного розсіювання електронів [13]. Обидва ці потенціали залежать від обмінного та поляризаційного потенціалів. Відповідно у спин-поляризованому наближенні опис поглинання залежить від орієнтації спіну налітаючого електрона. В результаті розрахунків у наближенні двох різних ОП отримуємо перебіги паралельного та антипаралельного розсіювання, що відрізняються одне від одного. Як наслідок, маємо функцію спінової обмінної асиметрії в розсіюванні.

У низці попередніх досліджень розсіювання електронів на атомах з незаповненою оболонкою (див., наприклад, [14, 15]) для врахування поляризаційної взаємодії використовували кореляційно-

поляризаційні потенціали з [8, 9], які були отримані для випадку, коли  $\rho_{\uparrow}(r) = \rho_{\downarrow}(r)$ .

Отже, для демонстрації необхідності врахування залежності від спіну поляризаційної взаємодії параметр асиметрії буде розрахований також і з використанням кореляційно-поляризаційного потенціалу, подібного до потенціалу в роботі [9].

## 2. Теоретичний метод

Для дослідження розсіювання електронів атомами золота у двох випадках, паралельної ( $\lambda = \uparrow\uparrow$ ) та антипаралельної ( $\lambda = \downarrow\uparrow$ ) орієнтації спінів, нами використано ОП у локальному спин-поляризованому наближенні (ЛСПН):

$$V_{\text{opt}}^{\lambda}(r, E) = V_R^{\lambda}(r, E) + iV_a^{\lambda}(r, E). \quad (1)$$

Дійсна частина  $V_R^{\lambda}(r, E)$  (1) є сумою потенціалів: статичного  $V_{\text{st}}(r)$ , обмінного  $V_{\text{ex}}^{\lambda}(r, E)$ , поляризаційного  $V_{\text{pol}}^{\lambda}(r)$  та спин-орбітальної взаємодії  $V_{\text{so}}^{\pm}(r)$ :

$$V_R^{\lambda}(r, E) = V_{\text{st}}(r) + V_{\text{ex}}^{\lambda}(r, E) + V_{\text{pol}}^{\lambda}(r) + V_{\text{so}}^{\pm}(r). \quad (2)$$

У (2) позначення ” $\pm$ ” відповідає величині повного кутового моменту електрона  $j = \ell \pm 1/2$ ,  $\ell$  – орбітальний момент електрона,  $E$  – енергія та  $k = (2E)^{1/2}$  – імпульс налітаючого електрона (у роботі використано атомну систему одиниць,  $e = m_e = \hbar = 1$ ). Уявна частина  $V_a^{\lambda}(r, E)$  в (1) – це потенціал поглинання.

Так само, як і в наших попередніх роботах (див., наприклад, [15–17] та посилання там) розрахунок з використанням комплексного потенціалу (1) будемо називати нижче  $V_{\text{opt}}$ -наближенням, або наближенням з поглинанням. Відповідно, розрахунок з використанням дійсного потенціалу (2) будемо називати  $V_R$ -наближенням, або наближенням без поглинання.

Статичний потенціал  $V_{\text{st}}(r)$ , електронна орбіталь  $\varphi_{6s}(r)$  та густини  $\rho(r)$  і  $\rho_{\text{sp}}(r)$  знайдено чисельно у самоузгодженому атомному розрахунку у межах скалярно-релятивістського та ЛСГ наближень ТФГ з виключенням енергії самодії електронів (див., наприклад, розділ 2.2 в [18] та посилання там). Ці величини апроксимовані аналітичними виразами з [19] (див. рівняння (A.1), (A.2) та відповідні параметри в Додатку А). Потенціал спин-орбітальної взаємодії  $V_{\text{so}}^{\pm}(r)$  (пропорційний похідній  $dV_{\text{st}}/dr$ ) має такий же вигляд, що і рівняння (6) в [20] (див. також посилання там).

Для знаходження потенціалів обмінної взаємодії у даній роботі використано наближення вільного електронного газу (див., наприклад, вираз (2) в [21] та

посилання там). У ЛСПН маємо два спінові потенціали  $V_{\text{ex}}^{\lambda}(r, E)$ :  $V_{\text{ex}}^{\uparrow\uparrow}$  з  $k_{\text{F}}^{\uparrow}$  та  $V_{\text{ex}}^{\downarrow\downarrow}$  з  $k_{\text{F}}^{\downarrow}$ . Спінові імпульси Фермі дорівнюють:  $k_{\text{F}}^{\text{sp}}(r) = [6\pi^2\rho_{\text{sp}}(r)]^{1/3}$ . Необхідний для розрахунків  $V_{\text{ex}}^{\lambda}$  потенціал іонізації атома золота  $I = 9,2256$  еВ взято з роботи [22].

Поляризаційний потенціал, як і в роботах [8, 9], складається із двох частин на малих (SR) та великих (LR) відстанях:

$$V_{\text{pol}}^{\lambda}(r) = \begin{cases} Vp_{\lambda}^{\text{SR}}(r), & r \leq r_c^{\lambda}, \\ Vp_{\lambda}^{\text{LR}}(r), & r > r_c^{\lambda}. \end{cases} \quad (3)$$

У внутрішній області атома  $V_{\text{pol}}^{\lambda}$  визначається кореляційною взаємодією налітаючого електрона з електронами мішені. В наближенні ЛСГ ТФГ функціонал цієї взаємодії є

$$E_c^{\text{LSD}}[\rho_{\uparrow}, \rho_{\downarrow}] = \int d\mathbf{r} \rho(\mathbf{r}) \cdot \varepsilon_c[\rho_{\uparrow}(\mathbf{r}), \rho_{\downarrow}(\mathbf{r})]. \quad (4)$$

Густина енергії  $\varepsilon_c[\rho_{\uparrow}(r), \rho_{\downarrow}(r)] \equiv \varepsilon_c[r_s(r), \zeta(r)]$  визначається функціями  $r_s(r) = \{3/[4\pi\rho(r)]\}^{1/3}$  та спінової поляризації  $\zeta(r) = [\rho_{\uparrow}(r) - \rho_{\downarrow}(r)]/\rho(r)$ . Густина кореляційної енергії  $\varepsilon_c(r_s, \zeta)$  обчислюється за формулами (B.1)–(B.4) в Додатку В. Отже, на відстанях  $r \leq r_c^{\lambda}$  поляризаційний потенціал, отриманий варіаційно з (4), має вигляд [10]:

$$Vp_{\lambda}^{\text{SR}}(r) = \varepsilon_c(r_s, \zeta) - \frac{r_s}{3} \frac{\partial \varepsilon_c}{\partial r_s} \pm (1 \mp \zeta) \frac{\partial \varepsilon_c}{\partial \zeta}. \quad (5)$$

У (5) верхні знаки “+” та “–” відповідають випадку  $\lambda = \uparrow\uparrow$ , а нижні знаки “–” та “+” випадку  $\lambda = \downarrow\downarrow$ . Похідні  $\partial \varepsilon_c / \partial r_s$  та  $\partial \varepsilon_c / \partial \zeta$  в (5) визначаються за формулами (B.5)–(B.7) в Додатку В. На відстанях  $r > r_c^{\lambda}$  поляризаційний потенціал має добре відомий асимптотичний вираз  $Vp_{\lambda}^{\text{LR}}(r) = -\alpha_d(0)/2r^4$ , де  $\alpha_d(0)$  – дипольна статична поляризованість (див., наприклад, рівняння (12) в [8]). Дві частини поляризаційного потенціалу,  $Vp_{\lambda}^{\text{SR}}(r)$  та  $Vp_{\lambda}^{\text{LR}}(r)$ , перетинаються перший раз в точках:  $r_c^{\uparrow\uparrow} = 9,544a_0$  для випадку паралельного  $\lambda = \uparrow\uparrow$  та  $r_c^{\downarrow\downarrow} = 11,6a_0$  для випадку антипаралельного  $\lambda = \downarrow\downarrow$  розсіювання. Поляризованість атома золота  $\alpha_d(0) = 33,3a_0^3$  розрахована нами у локальному наближенні часозалежної ТФГ [23] з релятивістським ефективним локальним потенціалом.

При енергіях зіткнень більших за енергію першого непружного порога  $\Delta = 1,1358$  еВ [22] для врахування ефектів поглинання в розсіюванні розрахунки проведено в наближенні комплексного потенціалу  $V_{\text{opt}}^{\lambda}(r, E)$  (1). У ролі уявної частини  $V_a^{\lambda}(r, E)$  в (1)

використано два типи потенціалів поглинання. Розрахунки параметра асиметрії проведено з використанням емпіричного потенціалу, запропонованого у роботах [11, 12] та модифікованого в роботі [13] (див. там вираз (17)). У ЛСПН цей потенціал поглинання має вигляд

$$V_a M c_{\lambda}(r, E) = -W_{\lambda}(E) r^2 \rho_{6s}(r) / [T_{\text{loc}}^{\lambda}(r, E)]^2. \quad (6)$$

У (6)  $W_{\lambda}(E)$  – феноменологічний параметр,  $\rho_{6s}(r)$  електронна густина валентної 6s-підоболонки атома золота (див. (C.1) в Додатку С), а локальна кінетична енергія має вигляд  $T_{\text{loc}}^{\lambda} = E - V_{\text{st}} - V_{\text{ex}}^{\lambda} - V_{\text{pol}}^{\lambda}$ .

Для отримання енергетичної залежності параметра  $W(E)$  в потенціалах типу (6) можна використати експериментальні інтегральні перерізи непружного розсіювання електронів на атомах (як це було зроблено нами для випадку атома індію у роботі [15]). Оскільки для атома золота таких перерізів в літературі обмаль, то в даній роботі, як і в [17], ми використали теоретичні інтегральні перерізи непружного розсіювання  $\sigma_{\text{abs}}^{\lambda}(E)$ . Ці перерізи розраховані нами з використанням модифікованої версії 2 ( $Vaf2m(r, E)$ ) [24] неемпіричного потенціалу поглинання в наближенні квазівільного розсіювання електронів [13]. В спін-поляризованому наближенні цей потенціал буде визначатися потенціалами  $V_{\text{ex}}^{\lambda}(r, E)$  та  $V_{\text{pol}}^{\lambda}(r)$ . Це приводить до двох спінових потенціалів поглинання  $Vaf2m_{\lambda}(r, E)$ .

Модифікація версії 2 потенціалу з [13] у ЛСПН полягає в такому. По-перше, локальна швидкість налітаючого електрона дорівнює  $v_{\text{loc}}^{\lambda} = [2(E - V_{\text{st}} - V_{\text{ex}}^{\lambda} - V_{\text{pol}}^{\lambda})]^{1/2}$ . По-друге, параметри  $\alpha_{\lambda}(r, E)$  та  $\beta_{\lambda}(r, E)$  мають такий вигляд:  $\alpha_{\lambda} = k_{\text{F}}^2 + \Delta - 2(V_{\text{st}} + V_{\text{ex}}^{\lambda} + V_{\text{pol}}^{\lambda})$  та  $\beta_{\lambda} = \alpha_{\lambda}$  (порівняй з виразами (21a) і (21b) в [13]). У даному випадку локальний імпульс Фермі  $k_{\text{F}}(r) = [3\pi^2\rho(r)]^{1/3}$  визначається повною густиною атомних електронів  $\rho(r)$ .

Безумовно, з використанням потенціалу поглинання  $Vaf2m_{\lambda}$ , крім перерізів  $\sigma_{\text{abs}}^{\lambda}(E)$ , можна розрахувати також і ДП розсіювання та параметр асиметрії. Але, як було продемонстровано нами в роботі [17], для  $E < 40$  еВ кутова залежність ДП пружного розсіювання електронів атомами ітербію розрахована з використанням потенціалу поглинання типу (6) краще узгоджується з експериментом, ніж у випадку використання неемпіричного потенціалу. Кутова ж залежність параметра асиметрії ще більш чутлива до вибору того чи іншого потенціалу поглинання (див. нижче).

Крім того, в даній роботі визначений внесок в асиметрію потенціалів  $V_{\text{ex}}^{\lambda}(r, E)$  та  $V_{\text{pol}}^{\lambda}(r)$ . Для цього в

наближенні без врахування ефектів поглинання крім розрахунків з потенціалом (2), ми також дослідили кутову залежність параметра асиметрії з використанням потенціалу розсіювання:

$$VR2_{\lambda}(r, E) = V_{st}(r) + V_{ex}^{\lambda}(r, E) + V_{pol}(r) + V_{so}^{\pm}(r). \quad (7)$$

Тут поляризаційний потенціал  $V_{pol}(r)$  на малих відстанях  $r \leq r_c$  дорівнює кореляційно-поляризаційному потенціалу  $Vp^{SR}(r)$  (5) для випадку  $\zeta(r) = 0$ , тобто коли  $\rho_{\uparrow}(r) = \rho_{\downarrow}(r)$ . Це відповідає локальному спин-неполяризованому наближенню в розсіюванні. Дві частини потенціалу  $V_{pol}(r)$ , а саме  $Vp^{SR}(r)$  та  $Vp^{LR}(r)$ , перетинаються перший раз у точці  $r_c = 5,346a_0$ . Отже, в розрахунках з  $VR2_{\lambda}(r, E)$  нехтуємо залежністю від спіна в поляризаційній взаємодії. Як буде показано нижче, при обчисленні параметра асиметрії в розсіюванні електрона атомом, який має напівзаповнену валентну підоболонку, недостатньо враховувати спинову залежність тільки обмінної взаємодії.

У результаті розрахунків з потенціалами  $V_{opt}^{\lambda}(r, E)$  (1) маємо чотири набори парціальних комплексних фазових зсувів  $\delta_{\ell}^{\lambda, \pm}(E) = \varepsilon_{\ell}^{\lambda, \pm}(E) + i\mu_{\ell}^{\lambda, \pm}(E)$ . Відповідно розрахунки з потенціалами (2) та (7) дадуть чотири набори дійсних фазових зсувів. Для розрахунків фаз, так як і в наших попередніх роботах [15–17, 20, 21, 24], використано метод фазових функцій [25, 26]. Опис чисельного розв'язку фазових рівнянь наведено в [15, 17, 20]. Маючи фазові зсуви  $\delta_{\ell}^{\lambda, \pm}$ , можемо знайти “прямі” амплітуди розсіювання

$$f^{\lambda}(E, \theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{\ell=0}^{\infty} \{(\ell+1)[\exp(2i\delta_{\ell}^{\lambda,+}) - 1] + \ell[\exp(2i\delta_{\ell}^{\lambda,-}) - 1]\} P_{\ell}(\cos \theta) \quad (8)$$

та амплітуди розсіювання з “переворотом” спіну

$$g^{\lambda}(E, \theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{\ell=0}^{\infty} \left[ \exp(2i\delta_{\ell}^{\lambda,-}) - \exp(2i\delta_{\ell}^{\lambda,+}) \right] P_{\ell}^1(\cos \theta), \quad (9)$$

де  $\theta$  – кут розсіювання;  $P_{\ell}(\cos \theta)$  – многочлени Лежандра;  $P_{\ell}^1(\cos \theta)$  – приєднані функції Лежандра першого роду.

Спинові ДП паралельного  $d\sigma^{\uparrow\uparrow}/d\theta$  та антипаралельного  $d\sigma^{\downarrow\downarrow}/d\theta$  пружного розсіювання визначаються цими амплітудами за формулою

$$\frac{d\sigma^{\lambda}(E, \theta)}{d\theta} = |f^{\lambda}(E, \theta)|^2 + |g^{\lambda}(E, \theta)|^2. \quad (10)$$

Параметр спінової обмінної асиметрії  $A(E, \theta)$  при розсіюванні повністю поляризованого пучка електронів на поляризованому атомі визначаємо за виразом [27]:

$$A(E, \theta) = (d\sigma^{\downarrow\downarrow}/d\theta - d\sigma^{\uparrow\uparrow}/d\theta)/(d\sigma^{\downarrow\downarrow}/d\theta + d\sigma^{\uparrow\uparrow}/d\theta). \quad (11)$$

Зазначимо, що у випадку розсіювання електронів на атомах з однією напівзаповненою  $s$ -підоболонкою має місце зв'язок перерізів  $d\sigma^{\uparrow\uparrow}/d\theta$  та  $d\sigma^{\downarrow\downarrow}/d\theta$  з відомими синглетним (S) та триплетним (T) перерізами:

$$\frac{d\sigma^S}{d\theta} = 2 \frac{d\sigma^{\downarrow\downarrow}}{d\theta} - \frac{d\sigma^{\uparrow\uparrow}}{d\theta}, \quad \frac{d\sigma^T}{d\theta} = \frac{d\sigma^{\uparrow\uparrow}}{d\theta}. \quad (12)$$

Тоді усереднений диференціальний переріз пружного розсіювання можемо знайти за формулою

$$\frac{d\sigma}{d\theta} = \frac{1}{2} \left( \frac{d\sigma^{\uparrow\uparrow}}{d\theta} + \frac{d\sigma^{\downarrow\downarrow}}{d\theta} \right). \quad (13)$$

Відповідно асиметрія (11) визначається через синглетний та триплетний перерізи як

$$A(E, \theta) = (d\sigma^S/d\theta - d\sigma^T/d\theta)/(d\sigma^S/d\theta + 3d\sigma^T/d\theta).$$

Переріз непружного розсіювання  $\sigma_{abs}^{\lambda}(E)$ , що описує загалом процеси збудження та іонізації з основного стану атома, розраховується за формулою

$$\sigma_{abs}^{\lambda}(E) = \frac{\pi}{2E} \sum_{\ell} \{(\ell+1)[1 - \exp(-4\mu_{\ell}^{\lambda,+})] + \ell[1 - \exp(-4\mu_{\ell}^{\lambda,-})]\}. \quad (14)$$

### 3. Обговорення результатів

Кутову залежність параметра асиметрії  $A(E, \theta)$  (11) у пружному розсіюванні електронів атомами золота в даній роботі розраховано при енергіях налітаючого електрона від 0,2 до 400 еВ. Розрахунки  $A(E, \theta)$  без врахування ефектів поглинання проведені як з потенціалом  $V_R^{\lambda}(r, E)$  (2), так і з потенціалом

Значення параметрів  $W_\lambda(E)$  (в а.о.) для потенціалу поглинання  $VaMc_\lambda$  (6)

$E$ (eV)	5	10	15	20	40	60	80	100	200	300	400
$W_{\uparrow\uparrow}$	0,1803	1,028	2,392	4,179	14,864	30,993	51,968	77,004	252,04	495,70	792,87
$W_{\downarrow\uparrow}$	0,1417	0,882	2,118	3,7343	13,225	27,328	45,748	67,70	221,29	435,76	698,10

$VR2_\lambda(r, E)$  (7), в якому залежність від спіну присутня лише в обмінній взаємодії  $V_{ex}^\lambda(r, E)$ . Розрахунки з врахуванням ефектів поглинання проведено з потенціалом  $VaMc_\lambda(r, E)$  (6). Як було зазначено вище, для розрахунку енергетичної залежності параметрів  $W_\lambda(E)$  для потенціалу (6) в даній роботі використано непружний переріз  $\sigma_{abs}^\lambda(E)$  (14), обчислений з використанням неемпіричного потенціалу поглинання  $Vaf2m_\lambda(r, E)$ . В таблиці наведено отримані тут значення параметрів  $W_\lambda(E)$ .

На рис. 1 наведено енергетичні залежності перерізів  $\sigma_{abs}^{\uparrow\uparrow}$  і  $\sigma_{abs}^{\downarrow\uparrow}$  та експериментальні перерізи іонізації з [6, 28]. Як видно з рисунка, переріз  $\sigma_{abs}^{\uparrow\uparrow}$  перевищує  $\sigma_{abs}^{\downarrow\uparrow}$  на всьому енергетичному інтервалі. Зокрема, в максимумі при 10 eV в 1,1 раза. Оскільки в літературі з експериментальних перерізів непружного розсіювання є тільки перерізи іонізації  $\sigma_{ion}(E)$ , то на рис. 1 продемонстровані саме ці перерізи. Переріз повної іонізації  $\sigma_{ion}$  у [6] має максимум при 100 eV, що не узгоджується з результатами інших робіт. Так, в експериментальній роботі [7] було отримано положення максимуму перерізу повної іонізації при 70 eV, а для однократної іонізації при 50 eV. Напівемпіричний розрахунок в [29] дав максимальне значення перерізу однократної іонізації атома Au  $5,0 \cdot 10^{-20} \text{ м}^2$  при 70 eV. У роботі [6] для енергій від 50 до 180 eV було знайдено співвідношення між перерізами іонізації атомів золота та міді:  $\sigma_{ion}(Au)/\sigma_{ion}(Cu) = 2,0 \pm 0,2$ . У роботі [28] було виміряно переріз однократної іонізації атома міді. Значення цього перерізу для енергій 50–180 eV помножені на 2 наведено на рис. 1 як дані з роботи [28]. Зауважимо, що переріз  $\sigma_{ion}(Cu)$  там має максимум при 34 eV. Як видно з рисунка, наш розрахунок краще узгоджується із даними з роботи [28], ніж з [6].

Кутова залежність параметра асиметрії в інтервалі енергій 0,2–3 eV відзначається гладкою поведінкою. За абсолютним значенням функція  $A(E, \theta)$  не перевищує 0,2. Починаючи з 3 eV за формою ця функція подібна до відповідного розрахунку асиметрії при 5 eV (див. рис. 2,а).

На рис. 2 наведено кутові залежності параметра асиметрії, розраховані в трьох наближеннях. По-перше, це розрахунок з врахуванням ефектів поглинання з використанням комплексного потенціалу  $V_{opt}^\lambda(r, E)$  (1). По-друге, два розрахунки без врахування

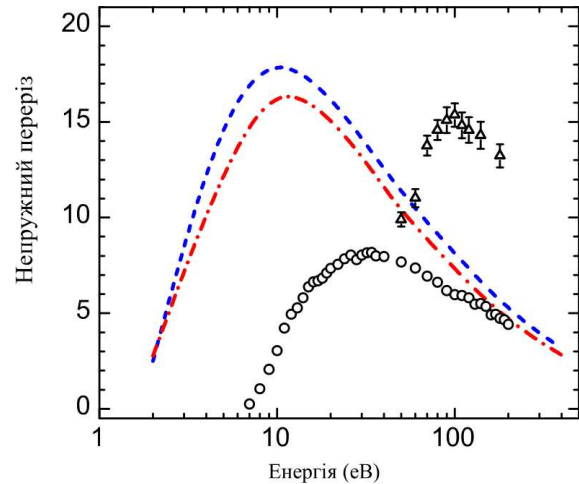


Рис. 1. Енергетична залежність перерізів непружного розсіювання електронів атомами золота  $\sigma_{abs}^\lambda(E)$  (в одиницях  $10^{-20} \text{ м}^2$ ), розрахованих в  $V_{opt}$ -наближенні (1) з модифікованим потенціалом поглинання  $Vaf2m_\lambda(r, E)$  з [13]. Переріз  $\sigma_{abs}^{\uparrow\uparrow}$  – пунктир, синій;  $\sigma_{abs}^{\downarrow\uparrow}$  – пунктир з крапкою, червоний. Експеримент:  $\Delta$  – переріз повної іонізації атома Au [6];  $\circ$  – переріз однократної іонізації атома міді з [28] помножений на 2

ення ефектів поглинання з використанням потенціалів  $V_R^\lambda(r, E)$  (2) та  $VR2_\lambda(r, E)$  (7). Нагадаємо, що в розрахунках з  $VR2_\lambda$  нехтується залежністю від спіну кореляційно-поляризаційної взаємодії.

Як видно з рис. 2,а, при 5 eV кутова залежність  $A(E, \theta)$  в розрахунках з врахуванням ефектів поглинання в основному узгоджується з  $V_R^\lambda$ -розрахунком. Тільки для кутів більших за  $120^\circ$  значення асиметрії відрізняються не тільки за величиною, але і за знаком. Навпаки,  $VR2_\lambda$ -розрахунок суттєво відрізняється від  $V_R^\lambda$ -розрахунку. А саме, наявністю у розрахунку з  $VR2_\lambda$  двох мінімумів при  $53^\circ$  і  $116^\circ$  та максимуму при  $99^\circ$ . Тоді як у розрахунках з  $V_R^\lambda$ , як і у випадку з  $V_{opt}^\lambda$ , маємо лише один мінімум при  $\sim 98^\circ$ . Зауважимо, що для енергій, менших за 5 eV, різниця у поведінці кутових залежностей параметра асиметрії отриманих з  $VR2_\lambda$  та  $V_R^\lambda$  потенціалами, збільшується з наближенням до порога пружного процесу.

Для 10 eV (рис. 2,б) розрахунок з  $V_{opt}^\lambda$  (1), на відміну від попереднього рисунка, має більш структуровану кутову залежність, а саме має три мінімуми та два максимуми замість одного мінімуму. Розрахунок без врахування поглинання з  $V_R^\lambda$  (2) при середніх та вели-

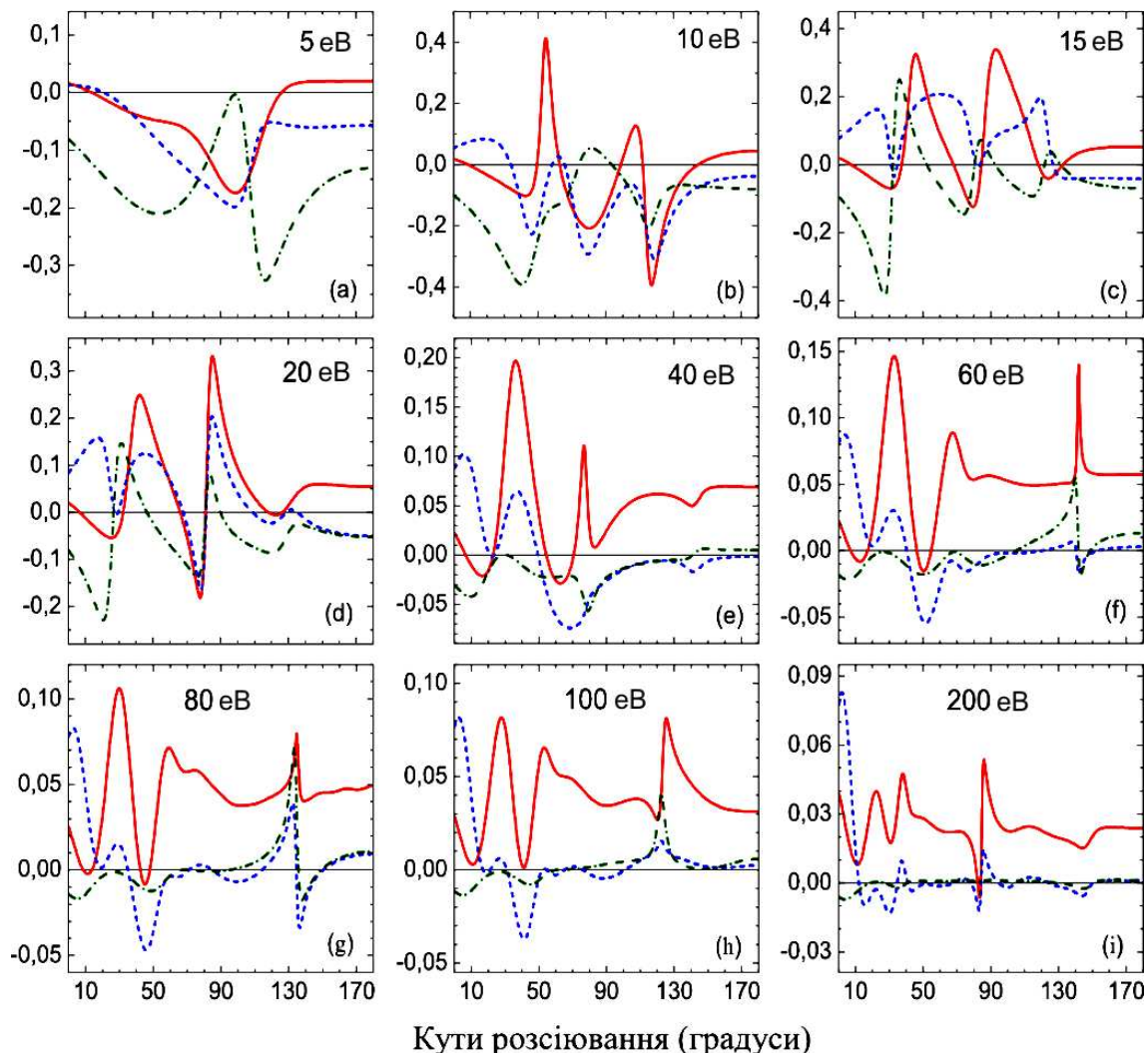


Рис. 2. Кутова залежність параметра асиметрії  $A(E, \theta)$  в пружному розсіюванні електронів атомами золота при енергіях 5 eV (a), 10 eV (b), 15 eV (c), 20 eV (d), 40 eV (e), 60 eV (f), 80 eV (g), 100 eV (h) та 200 eV (i). Розрахунок в  $V_{opt}^\lambda$ -наближенні (1) з потенціалом поглинання  $V_{aMc\lambda}(r, E)$  (6): суцільна, червона. Розрахунки без врахування ефектів поглинання: пунктир, синій – з потенціалом  $V_R^\lambda(r, E)$  (2); та пунктир з крапкою, зелений – з потенціалом  $VR2_\lambda(r, E)$  (7)

ких кутах розсіювання в цілому узгоджується з  $V_{opt}^\lambda$ -розрахунком: для кутів більших за  $40^\circ$  має таку ж кількість мінімумів і максимумів та майже однакове їх кутове положення. Лише при малих кутах, менших за  $40^\circ$ , ці розрахунки суттєво відрізняються один від одного. Розрахунок з  $VR2_\lambda$  в кутовому інтервалі  $0^\circ$ – $100^\circ$  значно відрізняється від  $V_R^\lambda$ -розрахунку. А саме, немає максимуму при  $60^\circ$ , а при  $80^\circ$  замість мінімуму в  $VR2_\lambda$ -розрахунку отримано максимум.

Для 15 eV (рис. 2, c), на відміну від попереднього рисунка, розрахунки з  $V_{opt}^\lambda$  і  $V_R^\lambda$  відрізняються одне від одного на всьому кутовому інтервалі. В свою чергу,  $VR2_\lambda$ -розрахунок ще більш якісно та кількісно

відрізняється від розрахунку з  $V_R^\lambda$  в області кутів  $0^\circ$ – $130^\circ$ .

Для 20 eV (рис. 2, d) в кутовому інтервалі  $30^\circ$ – $130^\circ$  розрахунки з  $V_{opt}^\lambda$  і  $V_R^\lambda$  якісно, а при деяких кутах, навіть, кількісно узгоджуються. На відміну від розрахунку з  $V_{opt}^\lambda$ -потенціалом для кутів менших від  $30^\circ$  розрахунок з  $V_R^\lambda$  дав у асиметрії додатний максимум при  $20^\circ$ , а при кутах більших за  $130^\circ$  – від'ємні значення параметра  $A(E, \theta)$ . Для кутів більших за  $70^\circ$  два розрахунки з  $VR2_\lambda$  та  $V_R^\lambda$  якісно узгоджуються. При менших кутах  $VR2_\lambda$ -розрахунок дав в асиметрії максимум при  $32^\circ$  та мінімум при  $21^\circ$  замість двох максимумів та мінімуму при  $28^\circ$  в розрахунку з  $V_R^\lambda$ .

Для 40 еВ (рис. 2, *e*), на відміну від  $V_R^\lambda$ - та  $VR2_\lambda$ -розрахунків, врахування ефектів поглинання дало в розрахунку асиметрії з  $V_{opt}^\lambda$  вузький максимум при  $76,5^\circ$ . В цілому майже на всьому кутовому інтервалі розрахунки з  $V_{opt}^\lambda$  та  $V_R^\lambda$  якісно узгоджуються. Розрахунок зі знехтуванням залежності від спіну кореляційно-поляризаційної взаємодії при малих кутах до  $80^\circ$  все ще суттєво відрізняється від  $V_R^\lambda$ -розрахунку. При більших кутах різницю між цими розрахунками маємо тільки в інтервалі  $130^\circ$ – $150^\circ$ , а саме, додатні значення асиметрії та відсутність від'ємного мінімуму в розрахунку з  $VR2_\lambda$ .

Як видно з рис. 2, *f*, для 60 еВ так як і для попередньої енергії розрахунки з  $V_{opt}^\lambda$  та  $V_R^\lambda$  майже у всьому кутовому інтервалі якісно узгоджуються. Основну відмінність в цих розрахунках маємо для кута  $142^\circ$ , де врахування ефектів поглинання привело до появи у параметра асиметрії вузького піка. Крім того,  $A(E, \theta)$  в  $V_{opt}^\lambda$ -розрахунку майже у всьому кутовому інтервалі має додатні та більші за модулем значення, ніж у розрахунку з  $V_R^\lambda$ . Кутів залежності параметра асиметрії в розрахунках з  $VR2_\lambda$  та  $V_R^\lambda$  при кутах  $140^\circ$ – $143^\circ$  мають однакову поведінку типу максимум-мінімум. Але  $A(E, \theta)$  в  $VR2_\lambda$ -розрахунку має максимум у  $\sim 8$  разів більший, ніж у більш точному розрахунку з  $V_R^\lambda$ . Це дає підставу вважати наявність певної взаємної компенсації спінових обмінної та поляризаційної взаємодій. Для кутів менших за  $105^\circ$  параметр асиметрії в  $VR2_\lambda$ -розрахунку має від'ємні значення, три локальних мінімуми та два максимуми. Для цих же кутів розрахунок з  $V_R^\lambda$  дав від'ємні значення лише в інтервалі  $40^\circ$ – $105^\circ$ , а для  $\theta < 40^\circ$  – додатні значення. І на закінчення, при кутах близьких до  $0^\circ$  параметр асиметрії в цьому розрахунку має значення майже в чотири рази більші, ніж у розрахунку з  $V_{opt}^\lambda$ .

Як видно з рис. 2, *g*, збільшення енергії налітаючого електрона на 20 еВ не привело, порівняно з попереднім рисунком, до суттєвої зміни в кутовій залежності параметра асиметрії для розрахунків у всіх трьох наближеннях. Найбільшу різницю між  $V_{opt}^\lambda$ -розрахунками маємо у максимумі при  $134,5^\circ$ , який для 80 еВ майже у два рази менший за максимум при  $142^\circ$  для 60 еВ. Для цих же кутів у  $V_R^\lambda$ -розрахунку різниця між екстремумами функції  $A(E, \theta)$  значно більша, ніж для 60 еВ. Максимальне значення параметра асиметрії при  $133^\circ$  в  $VR2_\lambda$ -розрахунку майже таке ж, як і в розрахунку з  $V_{opt}^\lambda$ .

Починаючи з 10 еВ, максимальні значення  $A(E, \theta)$  в  $V_{opt}^\lambda$ -розрахунку зі збільшенням енергії зменшуються. Для  $E \geq 40$  еВ це стосується, перш за все, низькокутового максимуму при  $\sim 30^\circ$ . Якщо вели-

чина параметра асиметрії в цьому максимумі для 80 еВ (рис. 2, *g*) дорівнювала 0,106, то для 100 еВ (рис. 2, *h*) – 0,082, а для 200 еВ (рис. 2, *i*) при  $22^\circ$  – вже лише 0,04. Щодо висококутового максимуму, то в розрахунках з  $V_{opt}^\lambda$  із збільшенням енергії його положення переміщується у бік менших кутів. Так, якщо для 60 еВ максимум маємо при  $142^\circ$ , то для 200 еВ вже при  $86^\circ$ . Крім того, поведінка функції  $A(E, \theta)$  в околі цього максимуму при збільшенні енергії змінюється з гострого максимуму для 60 еВ до кутової залежності типу мінімум-максимум для 200 еВ.

На відміну від 80 еВ, для 100 та 200 еВ абсолютна величина параметра асиметрії в наближенні без поглинання для кутів більших за  $12^\circ$  значно менша за розрахунок з врахуванням ефектів поглинання. Винятком можуть бути для 100 еВ (рис. 2, *h*) мінімум при  $42^\circ$  та максимум при  $122^\circ$  в розрахунках з  $V_R^\lambda$  та  $VR2_\lambda$  відповідно.

Насамкінець, щодо чутливості кутової залежності ДП, а значить і параметра асиметрії, до вибору того чи іншого потенціалу поглинання  $V_a^\lambda(r, E)$  в (1). На рис. 3 наведено розрахунки середніх ДП (13) та  $A(E, \theta)$  в  $V_R^\lambda$ -наближенні (2) та два  $V_{opt}^\lambda$ -розрахунки з використанням потенціалів поглинання  $VaMc_\lambda$  (6) і  $Vaf2m_\lambda$ . Як видно з рисунка, для енергії 400 еВ всі три розрахунки ДП вже майже збігаються одне з одним. Навпаки, при розрахунках кутових залежностей параметра асиметрії врахування ефектів поглинання є значним. В свою чергу, ці залежності в  $V_{opt}^\lambda$ -розрахунках з  $VaMc_\lambda$  та  $Vaf2m_\lambda$  відрізняються кількісно лише при кутах  $10^\circ$ – $50^\circ$ . Можна відзначити відсутність в  $Vaf2m_\lambda$ -розрахунку максимуму при  $39^\circ$  та наявність більш глибоких мінімумів при  $33^\circ$  та  $22^\circ$ , в яких, до того ж, значення функції  $A(E, \theta)$  є від'ємними.

#### 4. Висновки

Вперше розраховано та досліджено кутову залежність параметра спінової обмінної асиметрії  $A(E, \theta)$  пружного розсіювання електронів атомами золота в широкому інтервалі енергій зіткнення від 0,2 до 400 еВ. Зі збільшенням енергії зіткнення абсолютна величина асиметрії поступово зменшується.

Процес розсіювання електронів на атомі-мішені з однією напівзаповненою  $s^1$ -підоболонкою розглянуто у спін-поляризованому наближенні методу оптичного потенціалу. Це наближення дозволяє описати розсіювання електронів з напрямком спіну, паралельним та антипаралельним до спіну атома. Таким чином, взаємодія з атомами золота розглянута в наближенні

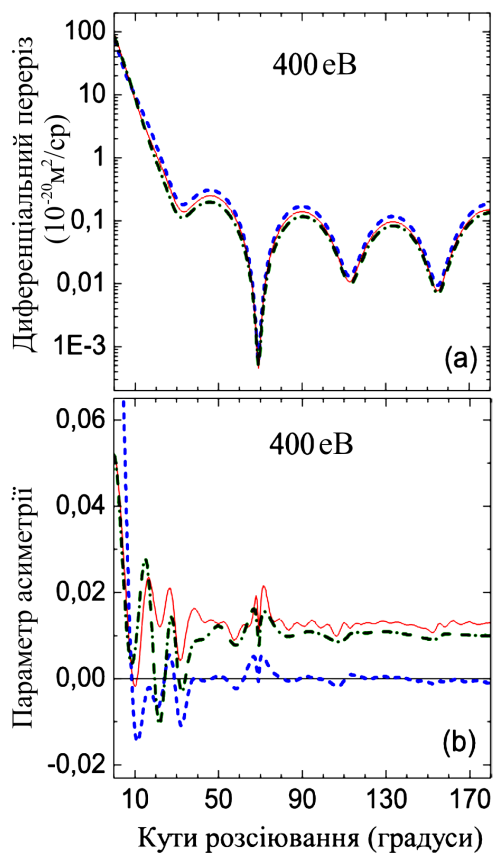


Рис. 3. Кутова залежність диференціального перерізу (а) в одиницях  $[10^{-20} \text{ м}^2 \text{ ср}^{-1}]$  та параметра асиметрії  $A(E, \theta)$  (б) в пружному розсіюванні електронів атомами золота при 400 еВ. Розрахунок в  $V_{\text{opt}}^\lambda$ -наближенні (1): з потенціалом поглинання  $VaMc\lambda(r, E)$  (6), суцільна, червона; з  $Vaf2m\lambda(r, E)$ , пунктир з крапкою, зелений. Розрахунок без врахування ефектів поглинання з  $V_R^\lambda$  (2), пунктир, синій

двох залежних від орієнтації спінів оптичних потенціалів. А саме, такі важливі для дослідження спінової асиметрії потенціали розсіювання, як обмінний, поляризаційний та поглинання є спіново-залежними. Аналітичні вирази для них наведено в роботі.

Атомні характеристики, які необхідні для визначення потенціальних складових оптичних потенціалів, розраховані самоузгоджено в наближеннях скалярно-релятивістському та локальної спінової густини теорії функціоналу густини. Для статичного потенціалу, повної та спінових електронних густин і валентної 6s-орбіталі наведено аналітичні вирази та визначено параметри апроксимації.

Розрахунки проведено як без врахування ефектів поглинання – наближення безпараметричної дійсної частини оптичного потенціалу, так і з їх врахуван-

ням – наближення комплексного оптичного потенціалу. Вплив ефектів поглинання на поведінку кутової залежності асиметрії є якісно та кількісно значним для всього інтервалу енергій зіткнення. Більше того, навіть при 400 еВ та кутах розсіювання  $10^\circ\text{--}50^\circ$  асиметрія є чутливою до вибору того чи іншого потенціалу поглинання.

Проведені дослідження показали достатньо великий вплив спінової залежності поляризаційної взаємодії на кутову поведінку асиметрії. Цей якісний та кількісний вплив для менших енергій зіткнення ( $\leq 5$  еВ) проявляється у всьому інтервалі кутів ( $0^\circ\text{--}180^\circ$ ), а зі збільшенням енергій цей інтервал звужується до  $0^\circ\text{--}50^\circ$  при 200 еВ. Кутове положення висококутової особливості, що починає проявлятися на асиметрії при куті  $142^\circ$  для енергії 60 еВ, зміщується до кута  $86^\circ$  при 200 еВ. При цьому вона проявляється як максимум та мінімум-максимум. В околі цієї особливості вплив спінової залежності поглинання, обмінної і поляризаційної взаємодії є досить значним.

Результати розрахунків параметра асиметрії, що були отримані в наближеннях різних оптичних потенціалів, показали, що дана характеристика розсіювання може слугувати чутливим тестом до вибору тих чи інших експериментальних та теоретичних методів.

#### ДОДАТОК А. Аналітичні вирази та значення параметрів для статичного потенціалу $V_{\text{st}}(r)$ , повної $\rho(r)$ та спінових $\rho_{\text{sp}}(r)$ електронних густин для атома золота

Статичний потенціал  $V_{\text{st}}(r)$  та електронні густини  $\rho(r)$  та  $\rho_{\text{sp}}(r)$  розраховуються з використанням аналітичних виразів, подібних до виразів у роботі [19]:

$$V_{\text{st}}(r) = -\frac{Z}{r} \left[ \sum_{i=1}^n A_i \exp(-B_i r) + r \sum_{j=1}^m C_j \exp(-D_j r) \right], \quad (A.1)$$

$$\rho_{\text{sp}}(r) = \frac{N_{\text{sp}}}{4\pi r} \left[ \sum_{i=1}^n A_i B_i^2 \exp(-B_i r) + \sum_{j=1}^m C_j D_j (D_j r - 2) \exp(-D_j r) \right], \quad (A.2)$$

де  $Z$  – заряд ядра атома-мішені. В (A.1) кількість доданків у першій сумі  $n = 5$  та в другій  $m = 5$ . Параметри  $A, B, C$  та  $D$  мають такі значення:  $A_1 = 0,1989, A_2 = 0,1823, A_3 = -14,9053, A_4 = -0,00596$  та  $A_5 = 1 - A_1 - A_2 - A_3 - A_4$  – безрозмірні;  $B_1 = 2,64, B_2 = 1,52, B_3 = 48,13, B_4 = 296, B_5 = 6,3112, C_1 = -22,022, C_2 = -317,41, C_3 = -163,33, C_4 = -71,104, C_5 = -54,129, D_1 = 66,016, D_2 = 35,87, D_3 = 18,974, D_4 = 12,544$  та  $D_5 = 7,764$  – в одиницях  $a_0^{-1}$ , де  $a_0$  – перший радіус Бора атома водню.

Для розрахунку повної електронної густини  $\rho(r)$  використовується вираз (A.2), в якому  $n = 5$  та  $m = 5, N_{\text{sp}} = Z$  та параметри  $A, B, C$  та  $D$  мають ті ж значення, що і для розрахунку в  $V_{\text{st}}(r)$  (A.1).



Для розрахунку  $\rho_{\uparrow}(r)$  та  $\rho_{\downarrow}(r)$  в (A.2) кількість доданків у першій сумі  $n = 4$  та в другій  $m = 5$ . Для  $\rho_{\uparrow}(r)$  – кількість електронів атома золота з напрямком спіна вгору  $N_{\uparrow} = 40$  та параметри  $A, B, C$  та  $D$  мають такі значення:  $A_1 = 0, 26002$ ,  $A_2 = -14, 0214$ ,  $A_3 = -0, 00684$  та  $A_4 = 14, 769$  – безрозмірні;  $B_1 = 1, 487$ ,  $B_2 = 48, 179$ ,  $B_3 = 279, 6$ ,  $B_4 = 6, 1463$ ,  $C_1 = -19, 772$ ,  $C_2 = -299, 13$ ,  $C_3 = -145, 53$ ,  $C_4 = -73, 954$ ,  $C_5 = -55, 479$ ,  $D_1 = 67, 627$ ,  $D_2 = 35, 986$ ,  $D_3 = 19, 255$ ,  $D_4 = 13, 089$  та  $D_5 = 7, 7651$  – в одиницях  $a_0^{-1}$ .

Для  $\rho_{\downarrow}(r)$  – кількість електронів атома золота з напрямком спіна вниз  $N_{\downarrow} = 39$  та параметри  $A, B, C$  та  $D$  мають такі значення:  $A_1 = 0, 26431$ ,  $A_2 = -14, 189$ ,  $A_3 = -0, 00815$  та  $A_4 = 14, 933$  безрозмірні;  $B_1 = 1, 87$ ,  $B_2 = 46, 111$ ,  $B_3 = 267, 8$ ,  $B_4 = 5, 4371$ ,  $C_1 = -13, 506$ ,  $C_2 = -292, 07$ ,  $C_3 = -172, 95$ ,  $C_4 = -62, 015$ ,  $C_5 = -41, 988$ ,  $D_1 = 72, 742$ ,  $D_2 = 34, 964$ ,  $D_3 = 17, 834$ ,  $D_4 = 10, 321$  та  $D_5 = 6, 695$  – в одиницях  $a_0^{-1}$ .

#### ДОДАТОК В. Допоміжні вирази для обчислення поляризаційного потенціалу (5)

У нерелятивістському наближенні густину кореляційної енергії записують у вигляді [30, 31] (в а.о.):

$$\varepsilon_c(r_s, \zeta) = \varepsilon_c^P(r_s) + \Delta\varepsilon_c(r_s, \zeta), \quad (\text{B.1})$$

де  $\varepsilon_c^P(r_s) = \varepsilon_c(r_s, 0)$  (див. також вираз (24) в [18]) та  $\Delta\varepsilon_c(r_s, 0) = 0$ . Для спин-залежної частини  $\Delta\varepsilon_c(r_s, \zeta)$  використано такий вираз [30, 31]:

$$\Delta\varepsilon_c(r_s, \zeta) = \alpha_c(r_s) \frac{f(\zeta)}{f''(0)} [1 + \beta_c(r_s)\zeta^4]. \quad (\text{B.2})$$

У формулі (B.2)

$$\beta_c(r_s) = f''(0) \Delta\varepsilon_c(r_s, 1) / \alpha_c(r_s) - 1,$$

$$\Delta\varepsilon_c(r_s, 1) = \varepsilon_c^F(r_s) - \varepsilon_c^P(r_s),$$

$$\varepsilon_c^F(r_s) = \varepsilon_c(r_s, 1),$$

$$f(\zeta) = \frac{(1 + \zeta)^{4/3} + (1 - \zeta)^{4/3} - 2}{2(2^{1/3} - 1)}, \quad (\text{B.3})$$

$$f'(\zeta) = \frac{2[(1 + \zeta)^{1/3} - (1 - \zeta)^{1/3}]}{3(2^{1/3} - 1)},$$

$$f''(\zeta) = \frac{2[(1 + \zeta)^{-2/3} + (1 - \zeta)^{-2/3}]}{9(2^{1/3} - 1)},$$

$$f''(0) = \frac{4}{9(2^{1/3} - 1)},$$

$$f(0) = 0, \quad f(1) = 1.$$

Кореляційна частина  $\alpha_c(r_s)$  функції спінового зміщення у (B.2) та густини  $\varepsilon_c^P(r_s)$  і  $\varepsilon_c^F(r_s)$  у (B.1) та (B.3) апроксимовані єдиним виразом [32]:

$$g(x(r_s)) = A \left\{ \ln \frac{x^2}{X(x)} + \frac{2B}{Q} \arctan \frac{Q}{2x+B} - \frac{Bx_0}{X(x_0)} \left[ \ln \frac{(x-x_0)^2}{X(x)} + \frac{2(B+2x_0)}{Q} \arctan \frac{Q}{2x+B} \right] \right\}, \quad (\text{B.4})$$

де  $x = (r_s)^{1/2}$ ,  $X = x^2 + Bx + C$ ,  $Q = [4C - B^2]^{1/2}$ . Коефіцієнти  $A, B, C, x_0$  у (B.4) дорівнюють – для  $\alpha_c(r_s)$ :  $-0, 01688685$ ,  $1, 13107$ ,  $13, 0045$ ,  $-0, 00475840$ ; для  $\varepsilon_c^P(r_s)$ :  $0, 0310907$ ,  $3, 72744$ ,

$12, 9352$ ,  $-0, 10498$ ; для  $\varepsilon_c^F(r_s)$ :  $0, 01554535$ ,  $7, 06042$ ,  $18, 0578$ ,  $-0, 32500$ .

Похідні по  $r_s$  в (5) дорівнюють

$$\frac{\partial \varepsilon_c}{\partial r_s} = \frac{1}{2\sqrt{r_s}} \frac{\partial \varepsilon_c}{\partial x},$$

$$\frac{\partial \varepsilon_c}{\partial x} = [1 - f(\zeta)\zeta^4] \frac{d\varepsilon_c^P}{dx} + f(\zeta)\zeta^4 \frac{d\varepsilon_c^F}{dx} + \frac{f(\zeta)}{f''(0)} (1 - \zeta^4) \frac{\partial \alpha_c}{\partial x}. \quad (\text{B.5})$$

Похідні  $\frac{d\varepsilon_c^P}{dx}$ ,  $\frac{d\varepsilon_c^F}{dx}$  і  $\frac{\partial \alpha_c}{\partial x}$  у (B.5) апроксимовані єдиним виразом [32]:

$$\frac{dg}{dx} = A \left\{ \frac{2}{x} - \frac{(2x+B)(C+x_0^2)}{X(x)X(x_0)} - \frac{2Bx_0}{(x-x_0)X(x_0)} - \frac{B}{X(x)} \frac{(C-x_0^2)}{X(x_0)} \right\}. \quad (\text{B.6})$$

Похідна  $\frac{\partial \varepsilon_c}{\partial \zeta}$  у (5) визначається за формулою

$$\frac{\partial \varepsilon_c}{\partial \zeta} = \left[ \varepsilon_c^F(x) - \varepsilon_c^P(x) - \frac{\alpha_c(x)}{f''(0)} \right] \times [4f(\zeta) + f'(\zeta) \cdot \zeta] \zeta^3 + \alpha_c(x) \frac{f'(\zeta)}{f''(0)}. \quad (\text{B.7})$$

#### ДОДАТОК С. Аналітичні вирази та значення параметрів для 6s-валентної електронної густини $\rho_{6s}(r)$ атома золота

Аналітичні вирази для електронної густини валентної 6s-підоболонки мають такий вигляд:

$$\rho_{6s}(r) = \varphi_{6s}^2(r), \quad (\text{C.1})$$

де слетерівська електронна орбіталь [22]

$$\varphi_{6s}(r) = \sum_{i=1}^5 K_i r^{M_i} \exp(-N_i r). \quad (\text{C.2})$$

Параметри в рівнянні (C.2) мають такі значення:  $K_1 = 27, 095$ ,  $K_2 = -61, 702$ ,  $K_3 = 4, 112$ ,  $K_4 = -12, 582$ ,  $K_5 = -2, 3943$ ;  $M_1 = -0, 4595$ ,  $M_2 = 0, 09875$ ,  $M_3 = -1, 0185$ ,  $M_4 = -0, 6954$ ,  $M_5 = -1, 0648$ ;  $N_1 = 8, 979$ ,  $N_2 = 19, 9103$ ,  $N_3 = 1, 1216$ ,  $N_4 = 5, 1693$  та  $N_5 = 0, 66234$ . Величини параметрів  $M_i$  – безрозмірні, а параметрів  $N_i$  – в одиницях  $a_0^{-1}$ . Розмірність параметрів  $K_i$  визначається нормуванням густини  $\rho_{6s}$ .

1. J.C. Slater, *The Self-Consistent Field for Molecules and Solids* (McGraw-Hill, New York, 1974).
2. *Theory of the Inhomogeneous Electron Gas*, edited by S. Lundqvist and N.H. March (Plenum Press, New York, 1983).
3. M. Zubek, A. Danjo, and G.C. King, *J. Phys. B* **28**, 4117 (1995).
4. O. Berger and J. Kessler, *J. Phys. B* **19**, 3539 (1986).
5. S. Holst, W. Legler, R. Newjoto, and J. Peters, *J. Phys. B* **23**, 2977 (1990).

6. J.M. Schroerer, D.H. Gündüz, and S. Livingston, *J. Chem. Phys.* **58**, 5135 (1973).
7. H. Mahide, M. Nagasu, H. Takahashi, and T. Nagata, in *Proceedings of the 24th International Conference on Photonic, Electronic and Atomic Collisions*, edited by F.D. Colavecchia *et al.* (Rosario, Argentina, 2005), p. Mo039.
8. J.K. O'Connell and N.F. Lane, *Phys. Rev. A* **27**, 1893 (1983).
9. N.T. Padiyal and D.W. Norcross, *Phys. Rev. A* **29**, 1742 (1984).
10. E.Yu. Remeta and V.I. Kelemen, *J. Phys. B* **43**, 045202 (2010).
11. J.B. Furness and I.E. McCarthy, *J. Phys. B* **6**, 2280 (1973).
12. I. McCarthy, C. Noble, B. Phillips, and A. Turnbull, *Phys. Rev. A* **15**, 2173 (1977).
13. G. Staszewska, D.W. Schwenke, and D.G. Truhlar, *Phys. Rev. A* **29**, 3078 (1984).
14. S.D. Tošić, M.S. Rabasović, D. Šević, V. Pejćev, D.M. Filipović, L. Sharma, A.N. Tripathi, R. Srivastava, and B.P. Marinković, *Phys. Rev. A* **77**, 012725 (2008).
15. M.S. Rabasović, V.I. Kelemen, S.D. Tošić, D. Šević, M.M. Dovahnych, V. Pejćev, D.M. Filipović, E.Yu. Remeta, and B.P. Marinković, *Phys. Rev. A* **77**, 062713 (2008).
16. V.I. Kelemen, M.M. Dovahnych, and E.Yu. Remeta, *J. Phys. B* **41**, 035204 (2008).
17. V.I. Kelemen, M.M. Dovahnych, and E.Yu. Remeta, *J. Phys. B* **41**, 125202 (2008).
18. V. Kelemen, E. Remeta, and E. Sabad, *J. Phys. B* **28**, 1527 (1995).
19. T.G. Strand and R.A. Bonham, *J. Chem. Phys.* **40**, 1686 (1964).
20. В.И. Келемен, *ЖТФ* **72**, Вып. 9, 13 (2002).
21. В.И. Келемен, Е.П. Сабад, М.М. Довганич, *УФЖ* **34**, №3, 345 (1989).
22. А.А. Радциг, Б.М. Смирнов, *Параметры атомов и атомных ионов. Справочник* (Энергоатомиздат, Москва, 1986).
23. A. Zangwill and P. Soven, *Phys. Rev. A* **21**, 1561 (1980).
24. S.D. Tošić, V.I. Kelemen, D. Šević, V. Pejćev, D.M. Filipović, E.Yu. Remeta, and B.P. Marinković, *Nucl. Instrum. Methods B* **267**, 283 (2009).
25. Ф. Калоджеро, *Метод фазовых функций в теории потенциального рассеяния*, пер. с англ. (Мир, Москва, 1972).
26. В.В. Бабилов, *Метод фазовых функций в квантовой механике* (Наука, Москва, 1988).
27. J. Kessler, *Adv. At. Mol. Opt. Phys.* **27**, 81 (1991).

28. R.S. Freund, R.C. Wetzel, R.J. Shul, and T.R. Hayes, *Phys. Rev. A* **41**, 3575 (1990).
29. W. Lotz, *Z. Physik* **232**, 101 (1970).
30. S.H. Vosko, L. Wilk, and M. Nusair, *Can. J. Phys.* **58**, 1200 (1980).
31. D.M. Ceperly and B.J. Alder, *Phys. Rev. Lett.* **45**, 566 (1980).
32. G.S. Painter, *Phys. Rev. B* **24**, 4264 (1981).

Одержано 17.02.10

АСИММЕТРИЯ В УПРУГОМ РАССЕЯНИИ ЭЛЕКТРОНОВ АТОМАМИ ЗОЛУТА

*В.И. Келемен, М.М. Довганич, Е.Ю. Ремета*

Резюме

В спин-поляризованном приближении метода оптического потенциала (ОП) исследована угловая зависимость параметра спиновой обменной асимметрии в упругом рассеянии электронов на атомах золота в интервале энергий столкновения 0,2–400 эВ. Расчеты проведены как в приближении безпараметрической вещественной части ОП, так и с использованием комплексного ОП для учета эффектов поглощения. В качестве мнимой части ОП использованы потенциалы поглощения двух типов. Систематические расчеты асимметрии проведены с использованием эмпирического потенциала поглощения. Зависимость от энергии параметра в этом потенциале найдена, используя неэмпирический потенциал поглощения в приближении квазисвободного рассеяния электронов. Показано, что поведение угловой зависимости параметра асимметрии в широком интервале энергий определяется спиновой зависимостью не только обменного, но и поляризационного взаимодействия электрона с атомом. Отмечено большое влияние эффектов поглощения на поведение параметра асимметрии. Показано, что даже для энергий в несколько сот электрон-вольт параметр асимметрии при малых углах зависит от выбора того или иного потенциала поглощения.

ASYMMETRY IN THE ELASTIC ELECTRON SCATTERING BY GOLD ATOM

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

Institute of Electron Physics, Nat. Acad. of Sci. of Ukraine  
(21, Universitetska Str., Uzhgorod 88017;  
e-mail: vlad.kelemen@gmail.com, remetov@inbox.ru)

Summary

The angular dependence of the spin-exchange asymmetry parameter for the elastic electron scattering by gold atoms within a collision energy range of 0.2–400 eV has been studied in the spin-polarized approximation of the optical potential (OP) method. The calculations are carried out both in the approximation of a parameter-free real OP part and with the use of a complex-valued OP to take absorption effects into account.

Two types of the absorption potential were used as the imaginary part of OP. The systematic calculations of the asymmetry were carried out with the use of an empiric absorption potential. An energy-dependent parameter in this potential was determined in the approximation of quasifree electron scattering with the use of a non-empiric absorption potential. The angular dependence of the asymmetry parameter in a wide en-

ergy range is shown to be governed by the spin dependences of both exchange and polarization interactions between an electron and an atom. A large influence of absorption effects on the asymmetry parameter behavior is revealed. It is shown that the asymmetry parameter at small scattering angles depends on the choice of the absorption potential even at energies of several hundred eV.