

## Упругое рассеяние электронов на атомах европия и иттербия

© В.И. Келемен, Е.Ю. Ремета

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

(Поступило в Редакцию 9 октября 2012 г.)

В рамках метода релятивистского оптического потенциала исследовано упругое рассеяние электронов на атомах европия и иттербия в широкой области энергий столкновений вплоть до 2 keV. Угловые зависимости дифференциальных сечений рассеяния и энергетические зависимости интегральных сечений рассеяния (полного, упругого, передачи импульса и вязкости) рассчитаны как в спин-поляризованном, так и в спин-неполяризованном приближениях. Показано, что для случая атома европия при расчете сечений рассеяния для энергий меньше 10 eV необходимо использовать спин-поляризованное приближение. Низкоэнергетическое рассеяние электрона на атоме европия характеризуется наличием  $P$ -,  $D$ - и  $F$ -резонансов формы. Для атома иттербия получено хорошее согласие сечений рассеяния с имеющимися экспериментальными данными и релятивистским расчетом в приближении метода сходящейся сильной связи.

### Введение

Среди лантаноидов периодической таблицы ряд элементов с конфигурацией  $[\text{Xe}]4f^n6s^2$  имеет заполняющуюся субвалентную  $4f$ -подоболочку ( $n = 3-7$  и  $9-14$ ). Ранее наибольший интерес был проявлен к исследованию процесса рассеяния электронов на двух атомах этого ряда:  $\text{Eu}(4f^76s^2)$  и  $\text{Yb}(4f^{14}6s^2)$ . Рассеяние электронов атомами  $\text{Yb}$  было достаточно полно исследовано в теоретических [1–7] и экспериментальных [8–10] работах.

Гораздо меньше опубликовано результатов по рассеянию электронов на атомах  $\text{Eu}$ . Экспериментальными методами наиболее полно были исследованы интегральные сечения возбуждения и ионизации атома европия [9] (см. также ссылки там). Что касается упругого рассеяния, то была измерена лишь энергетическая зависимость дифференциального сечения (ДС) на  $90^\circ$  в интервале энергий 1–10 eV в относительных единицах [11]. Ранее в сообщении [12] нами были представлены данные теоретического исследования сечений рассеяния для энергий 0.1–100 eV в методе оптического потенциала (ОП) с некоторым учетом зависимости обменного взаимодействия от ориентации спинов налетающего электрона и атома-мишени. В [13] в полурелятивистском приближении комплексного ОП были рассчитаны сечения рассеяния и параметры спиновой поляризации (функции  $S$ ,  $U$  и  $T$ ) в области энергий налетающих электронов 2–500 eV. Недавно в [6,14] были представлены результаты вычислений ДС упругого рассеяния электронов на некоторых атомах лантаноидов, в том числе на атоме  $\text{Eu}$  [14], при низких до 1 eV энергиях. Для вычислений там был использован потенциал рассеяния Томаса–Ферми-типа с двумя подгочными параметрами.

Следует отметить, что атом европия является единственным удобным элементом с полузаполненной  $f^7$ -подоболочкой для экспериментального исследования

рассеяния поляризованных электронов на поляризованной мишени, поскольку атом америция ( $Z = 95$ ) с такой подоболочкой ( $5f^7$ ) является искусственным элементом. Поэтому представляет определенный интерес теоретическое исследование рассеяния электрона на атоме  $\text{Eu}$  с учетом зависимости взаимодействия между ними от взаимной ориентации их спинов.

В работе авторов [15] спиновая обменная асимметрия  $A(E, \theta)$  и ДС упругого  $e$ - $\text{Eu}$  рассеяния были исследованы в спин-поляризованном приближении при 10 eV для оптических потенциалов с учетом зависимости от спина не только обменного, но и корреляционно-поляризационного взаимодействия. В сообщении [16] была представлена угловая зависимость функции асимметрии  $A(E, \theta)$  для этого процесса при нескольких энергиях налетающего электрона. В частности, там было продемонстрировано, что при энергиях  $D$ - и  $F$ -резонансов формы асимметрия достигает почти 100%.

В настоящей работе упругое  $e$ - $\text{Eu}$  рассеяние исследовано в широком интервале энергий 0.05–2000 eV и с более полным учетом релятивистских эффектов в рассеянии, чем это было сделано в [15,16]. Рассчитаны угловые зависимости ДС и энергетические зависимости интегральных сечений рассеяния: полного, упругого, передачи импульса и вязкости. Сравнение дифференциальных и интегральных сечений рассеяния, рассчитанных в спин-поляризованном и спин-неполяризованном приближениях, позволило для случая атома европия определить энергии столкновений, при которых в расчетах можно пренебречь зависимостью от ориентации спинов электрона и атома мишени. Получены положения низкоэнергетических резонансов формы. Проведено сравнение вычисленных нами сечений с теоретическими результатами из [13].

В [15] для 10 eV и здесь для энергий из интервала 10–200 eV получено существенное отличие наших сечений  $e$ - $\text{Eu}$  рассеяния от данных из [13]. Учитывая подобие электронных оболочек атомов европия и иттербия, в

настоящей работе авторы провели расчеты сечений рассеяния также и для атома иттербия. В отличие от наших предыдущих расчетов [4,5] для этого атома, здесь для учета релятивистских эффектов в рассеянии кроме потенциала спин-орбитального взаимодействия использована также и скалярная часть релятивистского дираковского потенциала [17–19]. Хорошее согласие полученных результатов для Yb с экспериментом [10] и релятивистским расчетом в приближении метода сходящейся сильной связи (RCCC) [7] позволило нам применить данный метод релятивистского оптического потенциала и для исследования упругого рассеяния электронов на атомах Eu.

## 1. Теоретический метод

### 1.1. Оптический потенциал в спин-поляризованном приближении (SPA) для рассеяния электрона на атоме европия

Электронная конфигурация основного состояния атома европия с полузаполненной  $4f^7$ -подоболочкой имеет максимальный спин  $7/2$ . Следовательно, электроны этой подоболочки имеют сонаправленные спины, например, условного направления вверх. Это дает возможность использовать разбиение всей электронной оболочки атома ( $N = 63$  электрона) на две заполненные спиновые оболочки — 35 электронов спина вверх ( $sp = \uparrow$ ) и 28 электронов спина вниз ( $sp = \downarrow$ ). В результате расчета атомных характеристик имеем электронные плотности: две спиновые  $\rho_{\uparrow}(r)$  и  $\rho_{\downarrow}(r)$  и полную  $\rho(r) = \rho_{\uparrow}(r) + \rho_{\downarrow}(r)$ .

Рассеяние электронов на атоме европия может быть рассмотрено для двух случаев взаимной ориентации спинов налетающего электрона и атома мишени. Во-первых, когда направления этих спинов совпадают — рассеяние с параллельными ( $\uparrow\uparrow$ ) спинами. И во-вторых, когда спины имеют противоположные направления — рассеяние с антипараллельными ( $\downarrow\uparrow$ ) спинами. Таким образом, рассеяние электрона спин-поляризованным атомом будет описываться двумя ОП ( $\lambda = \uparrow\uparrow, \downarrow\uparrow$ ) [15,20]

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

Используем атомную систему единиц (а.е.):  $\hbar = e = m_e = 1$ ,  $E = k^2/2$  — энергия и  $k$  — импульс налетающего электрона. Обозначение  $\pm$  подразумевает величину полного углового момента электрона  $j = \ell \pm 1/2$ , где  $\ell$  — угловой орбитальный момент электрона.

Вещественная часть  $V_R^{\lambda,\pm}(r, E)$  ОП — это сумма потенциалов: статического  $V_{\text{st}}(r)$ , обменного  $V_{\text{ex}}^{\lambda}(r, E)$ , поляризационного  $V_{\text{pol}}^{\lambda}(r)$ , спин-орбитального взаимодействия  $V_{\text{so}}^{\pm}(r, E)$  и скалярной части релятивистского

дираковского потенциала  $VRS(r, E)$

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

Мнимая часть  $V_a^{\lambda}(r, E)$  ОП в (1) — это потенциал поглощения.

Статический потенциал  $V_{\text{st}}(r)$ , электронные плотности (полная  $\rho(r)$  и спиновые  $\rho_{\text{sp}}(r)$ ) вычислены в самосогласованном атомном расчете в рамках скалярно-релятивистского и локальной спиновой плотности приближений теории функционала плотности (ТФП) с исключением энергии самодействия электронов (см., например, [1]). Эти величины рассчитываются по аналитическим выражениям того же типа, что и в [21] (см. уравнения (A1) и (A2) в Приложении А). Параметры для расчета электронных плотностей получены из наилучшего приближения к исходным таблицам плотностей и приведены в Приложениях А и В для европия и в Приложении С для иттербия. Поскольку выражение (A1) для  $V_{\text{st}}(r)$  связано с выражением (A2) для  $\rho(r)$  [21], то для расчета статического потенциала использованы те же параметры, что и для полной плотности.

Для учета обменного взаимодействия используем потенциал в приближении свободного неоднородного электронного газа (см., например, выражение (2) в [1] и ссылки там). При рассеянии электрона с фиксированным направлением спина на спин-поляризованной системе обменное взаимодействие происходит только с соответствующей спиновой подоболочкой. Поэтому, как и в [15,20], используем два значения импульса Ферми  $k_F^{sp}(r) = [6\pi^2\rho_{sp}(r)]^{1/3}$  ( $sp = \uparrow, \downarrow$ ). В результате имеем два обменных потенциала

$$V_{\text{ex}}^{\lambda}(r, E) = -\frac{k_F^{sp}(r)}{\pi} \left( 1 + \frac{1 - \eta_{sp}^2}{2\eta_{sp}} \ln \left| \frac{1 + \eta_{sp}}{1 - \eta_{sp}} \right| \right). \quad (3)$$

Для случая рассеяния с параллельными спинами используется  $V_{\text{ex}}^{\uparrow\uparrow}$  с  $k_F^{\uparrow}$ , а для рассеяния с антипараллельными спинами —  $V_{\text{ex}}^{\downarrow\uparrow}$  с  $k_F^{\downarrow}$ . В (3)  $\eta_{sp}(r, E) = k_s^{sp}(r, E)/k_F^{sp}(r)$  и импульс рассеивающегося электрона на расстоянии  $r$  от атома  $k_s^{sp}(r, E)$  имеет вид (ср. с выражением (5) в [1])

$$[k_s^{sp}(r, E)]^2 = k^2 + [k_F^{sp}(r)]^2 + 2I / \left[ 1 + \frac{1}{2}(kr)^2 \right]. \quad (4)$$

Используемый при расчетах  $V_{\text{ex}}$  потенциал ионизации для атома Eu  $I = 5.67045$  eV взят из [22], а для атома Yb — потенциал  $I = 6.354$  eV был рассчитан в [1] в том же приближении, что и  $\rho(r)$ .

Поляризационный потенциал состоит из двух частей, описывающих взаимодействие на малых (SR) и больших (LR) расстояниях (см., например, [15,20] и ссылки там):

$$V_{\text{pol}}^{\lambda}(r) = \begin{cases} V_{\text{PSR}}^{\lambda}(r), & r \leq r_c^{\lambda}, \\ V_{\text{PLR}}^{\lambda}(r), & r > r_c^{\lambda}. \end{cases} \quad (5)$$

Во внутренней области атома при  $r \leq r_c^\lambda$  потенциал определяется корреляционным взаимодействием налетающего электрона с  $N$ -электронами мишени и имеет вид

$$V_{SR}^\lambda(r) = \varepsilon_c(r_s, \xi) - \frac{r_s}{3} \frac{\partial \varepsilon_c}{\partial r_s} \pm (1 \mp \xi) \frac{\partial \varepsilon_c}{\partial \xi}, \quad (6)$$

где верхний и нижний знаки соответствуют случаям  $\lambda = \uparrow\uparrow$  и  $\lambda = \downarrow\uparrow$ . В (6)  $\varepsilon_c[r_s(r), \xi(r)]$  — это плотность корреляционной энергии, зависящая от спиновой поляризации  $\xi(r) = [\rho_\uparrow(r) - \rho_\downarrow(r)]/\rho(r)$  и радиуса Вигнера  $r_s(r) = \{3/[4\pi\rho(r)]\}^{1/3}$  (см. Приложение в [15]).

На расстояниях  $r > r_c^\lambda$  потенциал (5) имеет хорошо известный асимптотический вид  $V_{PLR}(r) = -\alpha_d(0)/2r^4$  (см., например, уравнение (10) в [15] и ссылки там), где  $\alpha_d(0)$  — статическая дипольная поляризуемость атома-мишени. Величины поляризуемостей атомов европия и иттербия вычислены в локальном приближении время-зависящей ТФП с релятивистским эффективным локальным потенциалом и равны:  $\alpha_d = 204.4a_0^3$  [15] для Eu и  $\alpha_d = 167.84a_0^3$  [1] для Yb.

В случае рассеяния с параллельными спинами ( $\lambda = \uparrow\uparrow$ ) две части поляризационного потенциала (5), а именно  $V_{SR}^{\uparrow\uparrow}(r)$  и  $V_{PLR}(r)$  пересекаются первый раз в точке  $r_c^{\uparrow\uparrow} = 9.544a_0$ . В другом случае ( $\lambda = \downarrow\uparrow$ ) две части поляризационного потенциала  $V_{SR}^{\downarrow\uparrow}(r)$  и  $V_{PLR}(r)$  пересекаются первый раз в точке  $r_c^{\downarrow\uparrow} = 11.6a_0$ .

Спин-орбитальное взаимодействие налетающего электрона с атомом-мишенью, как и в [19], учтено с помощью потенциала

$$V_{so}^\pm(r, E) = \xi^\pm(j, \ell) \frac{\chi}{r} \frac{dV_{st}}{dr}, \quad \chi = \alpha^2/[2 + \alpha^2(E - V_{st})], \quad (7)$$

где  $\xi^+(j, \ell) = l/2$  для  $j = \ell + 1/2$  и  $\xi^-(j, \ell) = -(\ell + 1)/2$  для  $j = \ell - 1/2$ ,  $\alpha$  — постоянная тонкой структуры. Для учета скалярных релятивистских поправок используется потенциал Дирака [17–19]

$$VRS(r, E) = -\frac{\alpha^2}{2} V_{st}^2 + \frac{\chi}{4} \frac{d^2 V_{st}}{dr^2} + \frac{3\chi^2}{8} \left( \frac{dV_{st}}{dr} \right)^2. \quad (8)$$

Для энергий столкновения выше первого неупругого порога  $\Delta = 1.60235$  eV для европия и  $\Delta = 2.14351$  eV для иттербия [22], эффекты поглощения учтены мнимой частью  $V_a^\lambda(r, E)$  оптического потенциала (1). Как правило, в качестве потенциала  $V_a^\lambda$  используется модифицированная версия неэмпирического потенциала поглощения в модели квазисвободного рассеяния электронов (см. [23] и ссылки там). Этот потенциал пропорционален локальной скорости  $v_{loc}$  налетающего электрона. В спин-поляризованном приближении для двух спиновых потенциалов поглощения

$$Vaf2m_\lambda(r, E) = -v_{loc}^\lambda(r, E)\rho(r)\bar{\sigma}_b^\lambda(r, E)/2 \quad (9)$$

имеем две локальные скорости  $v_{loc}^\lambda = [2T_{loc}^\lambda]^{1/2}$ , где локальная кинетическая энергия равна  $T_{loc}^\lambda = E - V_{st}$

—  $V_{ex}^\lambda - V_{pol}^\lambda - VRS$ . Усредненное сечение бинарных столкновений  $\bar{\sigma}_b^\lambda(r, E)$  (см. выражение (5) в [23]) и, следовательно, соответствующая версия  $Vaf2m_\lambda$  определяются параметрами  $\alpha_\lambda(r, E)$  и  $\beta_\lambda(r, E)$  в виде (ср. с выражениями (21a) и (21b) в [23]):

$$\begin{aligned} \alpha_\lambda(r, E) &= k_F^2(r) + \Delta \\ &- 2[V_{st}(r) + V_{ex}^\lambda(r, E) + V_{pol}^\lambda(r) + VRS(r, E)]. \\ \beta_\lambda(r, E) &= \alpha_\lambda(r, E). \end{aligned} \quad (10)$$

Здесь локальный импульс Ферми  $k_F(r) = [3\pi^2\rho(r)]^{1/3}$  определяется полной электронной плотностью атома  $\rho(r)$ .

Как и в наших предыдущих работах [5,15], в определенных случаях в качестве потенциала  $V_a^\lambda$  в (1) используется одна из версий эмпирического потенциала поглощения McCarthy-типа [24] (см. также уравнение (17) в [23] и дискуссию там) в виде

$$Vamc_\lambda(r, E) = -W_\lambda(E)r^2\rho_H(r)/[T_{loc}^\lambda(r, E)]^2. \quad (11)$$

Здесь  $W_\lambda(E)$  — феноменологический параметр и  $\rho_H(r)$  — электронная плотность внешней заполненной оболочки. В качестве  $\rho_H$  взяли электронную плотность валентной  $6s^2$ -подоболочки  $\rho_{6s}$  атомов европия и иттербия. В результате аппроксимации исходных табличных данных по методу наименьших квадратов наилучшее приближение для  $\rho_{6s}$  получено в виде аналитических выражений (B1) и (B2) (см. Приложение В). Параметры для одноэлектронных орбиталей Слэтэра  $\phi_{6s}$  (B2) для Eu приведены в Приложении В и для Yb — в Приложении С. Значения параметров  $W_\lambda(E)$  в (11), так же как и в [5,15,19,25], получены из условия воспроизведения соответствующих сечений поглощения  $\sigma_{abs}^\lambda(E)$ , рассчитанных с использованием потенциала  $Vaf2m_\lambda$  (9).

## 1.2. Оптический потенциал в спин-неполяризованном локальном приближении (LA) для рассеяния электронов на атомах европия и иттербия

В работах [13,25] для расчета сечений рассеяния электрона атомом с незаполненной оболочкой, так же как и в случае атомов Yb и Hg, имеющих заполненную оболочку, использован локальный ОП (см., например, [1,3–5,19]). Этот потенциал не зависит от взаимной ориентации спинов налетающего электрона и атома-мишени. Ниже, использование такого потенциала будем называть спин-неполяризованным приближением (LA):

$$V_{opt}^\pm(r, E) = V_R^\pm(r, E) + iV_a(r, E), \quad (12)$$

$$\begin{aligned} V_R^\pm(r, E) &= V_{st}(r) + V_{ex}(r, E) \\ &+ V_{pol}(r) + V_{so}^\pm(r, E) + VRS(r, E). \end{aligned} \quad (13)$$

Представляет определенный интерес сравнение результатов расчетов сечений рассеяния для европия,

проведенных в спин-поляризованном (SPA) и локальном (LA) приближениях. Ниже расчеты, проведенные в приближении релятивистских комплексных ОП (1) и (12), называются RSEPA-расчетами, а расчеты в приближении вещественных частей этих ОП (2) и (13) — RSEP-расчетами.

Для учета обменного взаимодействия ( $V_{ex}(r, E)$ ) в (13), так же как и в спиновом случае, используется приближение свободного неоднородного электронного газа, но с импульсом Ферми  $k_F(r)$ , зависящим от полной плотности электронов  $\rho(r)$ .

Так же как и выше (см. выражение (5)), поляризонный потенциал  $V_{pol}(r)$  в (13) состоит из двух частей: короткодействующей  $V_{pol}^{SR}(r)$  и дальнодействующей  $V_{pol}^{LR}(r)$ . Точка их первого пересечения для европия есть  $r_c = 10.447a_0$  и для иттербия —  $r_c = 10.573a_0$ . Потенциал  $V_{pol}^{SR}(r)$  равен потенциалу  $Vp_{SR}^{\lambda}(r)$  (6) для случая, когда функция спиновой поляризации  $\xi(r) = 0$ . Это приближение соответствует корреляционному взаимодействию в парамагнитном спин-неполяризованном электронном газе (см. дискуссию в [15]).

Потенциал поглощения  $V_a(r, E)$  в ОП (12) выбирается в виде либо потенциала  $Vaf2m(r, E)$ , либо потенциала  $VaMc(r, E)$ . Вид этих потенциалов такой же, как и выражения (9) и (11), но для спин-неполяризованного случая. Вспомогательные величины для потенциалов поглощения  $Vaf2m$  и  $VaMc$  определяются с использованием локальных потенциалов  $V_{ex}$  и  $V_{pol}$ .

### 1.3. Расчет парциальных фазовых сдвигов и характеристик рассеяния

В результате вычислений в приближении ОП (1) и (12) имеем наборы комплексных парциальных фазовых сдвигов:  $\delta_{\ell}^{\lambda, \pm}(E) = \varepsilon_{\ell}^{\lambda, \pm}(E) + i\mu_{\ell}^{\lambda, \pm}(E)$  и  $\delta_{\ell}^{\pm}(E) = \varepsilon_{\ell}^{\pm}(E) + i\mu_{\ell}^{\pm}(E)$  соответственно. Расчеты в приближении вещественных частей ОП (2) и (13) дают наборы вещественных парциальных фазовых сдвигов:  $\delta_{\ell}^{\lambda, \pm}(E)$  и  $\delta_{\ell}^{\pm}(E)$  соответственно. Для получения фазовых сдвигов рассеяния используется метод фазовых функций [26,27]. Для расчета комплексных фазовых сдвигов используется система двух связанных первого порядка нелинейных дифференциальных фазовых уравнений для двух фазовых функций  $\varepsilon_{\ell}^{\pm}(r, E)$  и  $\eta_{\ell}^{\pm}(r, E)$ . Абсолютные значения фазовых сдвигов получаем как пределы этих фазовых функций

$$\varepsilon_{\ell}^{\pm}(E) = \lim_{r \rightarrow \infty} \varepsilon_{\ell}^{\pm}(r, E),$$

$$\mu_{\ell}^{\pm}(E) = -\frac{1}{2} \ln \left[ \lim_{r \rightarrow \infty} \eta_{\ell}^{\pm}(r, E) \right].$$

При выборе граничных условий для интегрирования фазовых уравнений использовано поведение вещественной части оптического потенциала на малых расстояниях  $r \geq r_0$ :

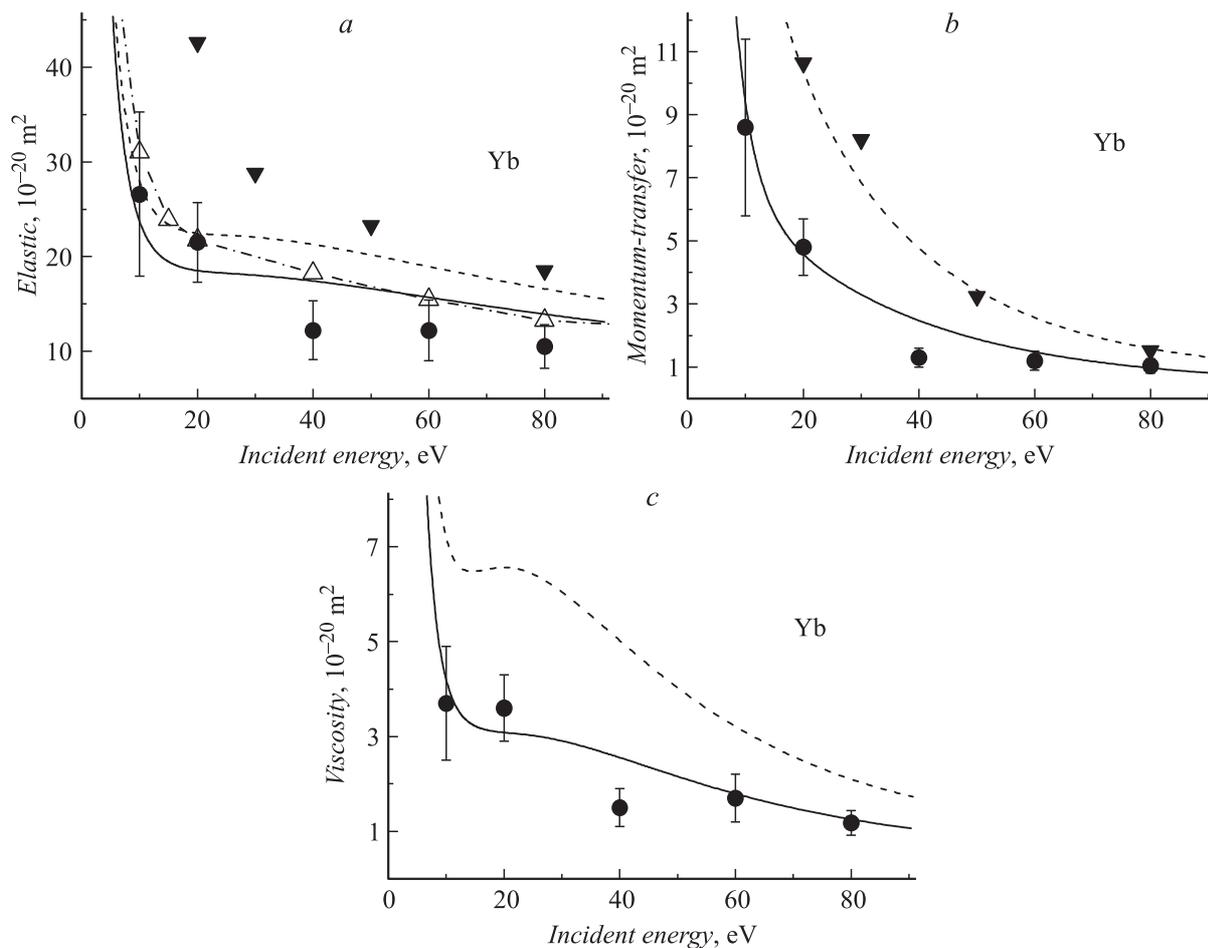
$$V_R^{\pm}(r) \approx V_0 r^p [1 + Ar^s], \quad p > -2, \quad s > 0.$$

Малость величины  $r_0$  для тяжелых атомов ограничивается тем условием, что кулоновское поведение потенциала  $V_{st}(r)$  на расстояниях  $r < Z/c^2$  может быть не справедливым [17]. В данном случае, например, для  $s$ -волны используем значение  $r_0 = 0.006a_0$ . Тогда начальное значение фазовой функции  $\varepsilon_{\ell}^{\pm}(r)$  находится по выражению (2.8) из [27]. Начальное значение для другой фазовой функции есть  $\eta_{\ell}^{\pm}(r) = 1$ . Численный метод получения парциальных фазовых сдвигов тот же, что и в наших предыдущих работах (см., например, [1,4,5,19]).

Для энергий столкновения  $E < \Delta$  потенциалы поглощения по определению равны нулю. Также эти потенциалы равны нулю и на малых радиальных расстояниях. Так, потенциал квазисвободного рассеяния  $Vaf2m$  (9) равен нулю на расстояниях, где сечение  $\bar{\sigma}_b(r, E) = 0$  для  $k^2 < \alpha + \beta - k_F^2$  (см. [23] и ссылки там). Потенциал McCarthy-типа (11) на малых расстояниях пренебрежимо мал по сравнению с вещественной частью ОП. Например, для случая атома иттербия для  $E = 10$  eV и  $r = 0.1a_0$  потенциал  $V_R = -4.4 \cdot 10^2$  (а. у.), а мнимая часть ОП потенциал  $VaMc = -4.9 \cdot 10^{-11}$  (а. у.). Поэтому, для расстояний  $r < 0.1a_0$  полагаем, что  $VaMc = 0$ . Для всех случаев, когда мнимая часть ОП равна нулю, система фазовых уравнений сводится к одному фазовому уравнению [26,27] (см. также уравнение (42) в [1]). Оно используется также и в RSEP-приближении для расчета вещественных парциальных фазовых сдвигов.

Спин-орбитальное расщепление между фазами  $\delta_{\ell}^{+}$  и  $\delta_{\ell}^{-}$  учитывается до такого значения орбитального момента  $\ell = L_1$ , начиная с которого  $|\varepsilon_{\ell}^{+} - \varepsilon_{\ell}^{-}| < 0.005\%$  и  $|\mu_{\ell}^{+} - \mu_{\ell}^{-}| < 0.005\%$ . Для  $\ell > L_1$  полагаем, что  $\delta_{\ell}^{+} = \delta_{\ell}^{-}$ . Например, для случая атома иттербия для энергии 1000 eV получили, что  $L_1 = 56$ .

Максимальное количество комплексных парциальных фазовых сдвигов, вычисляемых с помощью системы фазовых уравнений, определялось из двух условий. Во-первых, необходимо, чтобы для данной энергии и орбитального момента  $\ell = L_2$  мнимая часть фазового сдвига  $\mu_{\ell}$  должна быть настолько малой, чтобы знаменатель  $\exp(2\mu_{\ell})$  в парциально-волновом разложении „прямой“  $f(E, \theta)$  и „с переворотом спина“  $g(E, \theta)$  амплитуд рассеяния с учетом точности расчета ДС, можно было положить равным 1. Полагаем, что такому требованию вполне удовлетворяют значения  $\mu_{\ell} < 10^{-4}$  rad. Во-вторых, для  $\ell = L_2$  разница вещественной части фазового сдвига  $\varepsilon_{\ell}$  и асимптотического значения фазы  $\delta_{\ell}^{as}$  должна удовлетворять неравенству:  $|\varepsilon_{\ell} - \delta_{\ell}^{as}| < |\varepsilon_{\ell-1} - \delta_{\ell-1}^{as}|$ . Фазовый сдвиг  $\delta_{\ell}^{as}$  рассчитывается по хорошо известной формуле (см., например, уравнение (56) в [1] и ссылки там). В зависимости от значения энергии величина  $L_2$  различна. Так, для случая атома иттербия для 1000 eV мы получили, что  $L_2 = 88$ , а соответствующее значение фазового сдвига (в радианах)  $\delta_{88}(1000) = 6.70 \cdot 10^{-3} + i1.36 \cdot 10^{-5}$ . Тогда для  $\ell > L_2$  полагаем, что  $\varepsilon_{\ell} = \delta_{\ell}^{as}$  и  $\mu_{\ell} = 0$ .



**Рис. 1.** Энергетическая зависимость упругого (a), передачи импульса (b) и вязкости (c) сечений  $e$ -Yb рассеяния (в  $10^{-20} \text{ m}^2$ ). Сплошная линия соответствует RSEPA-расчетам (12) с потенциалом поглощения  $Vaf2m$ , штриховая — RSEP-расчетам (13) без учета поглощения. Другие теоретические данные:  $\blacktriangledown$  — расчеты с комплексным ОП [3],  $\triangle$  — RCCC [7]. Экспериментальные данные:  $\bullet$  — [10].

Поскольку в RSEP-расчетах  $\delta_\ell^\pm(E) \equiv \varepsilon_\ell^\pm(E)$ , то значения  $L_1$  и  $L_2$  определяются по тем же условиям, что и для  $\varepsilon_\ell$ . Всего при расчетах амплитуды  $f(E, \theta)$  учитывался вклад до 300 парциальных волн.

Дифференциальное сечение упругого рассеяния определяем как среднее двух спиновых сечений параллельного  $d\sigma^{\uparrow\uparrow}/d\theta$  и антипараллельного  $d\sigma^{\downarrow\downarrow}/d\theta$  рассеяния (см. уравнение (12) в [15]). Спиновые сечения  $d\sigma^\lambda/d\theta$  определены через соответствующие  $f^\lambda(E, \theta)$  и  $g^\lambda(E, \theta)$  амплитуды (см. выражения (13) и (14) в [15]), которые рассчитаны с использованием спиновых фазовых сдвигов  $\delta_\ell^{\lambda,\pm}(E)$ .

Интегральные сечения — упругое ( $\sigma_{\text{el}}$ ), поглощения ( $\sigma_{\text{abs}}$ ), передачи импульса ( $\sigma_{\text{mom}}$ ) и вязкости ( $\sigma_{\text{vis}}$ ) — определяем как среднее соответствующих спиновых сечений рассеяния  $\sigma(E) = (\sigma^{\uparrow\uparrow}(E) + \sigma^{\downarrow\downarrow}(E))/2$ . Для расчета спиновых сечений  $\sigma^\lambda(E)$  используем те же формулы, что и в [15]. Полное сечение рассеяния найдено как сумма  $\sigma_{\text{tot}} = \sigma_{\text{el}} + \sigma_{\text{abs}}$ .

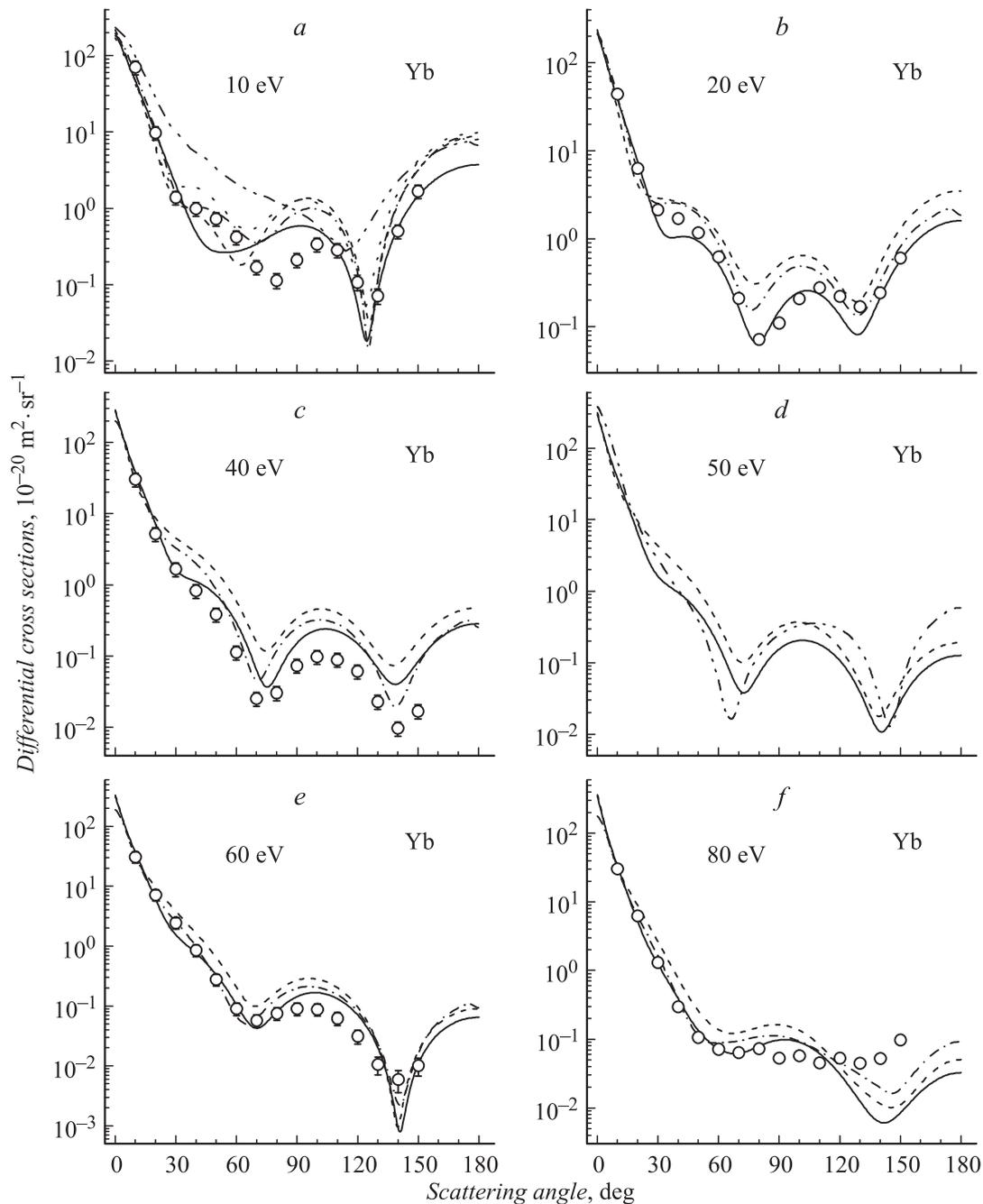
Для спин-неполяризованного приближения при расчете амплитуд и сечений рассеяния используются те

же выражения, что и для спинового случая, но без индекса „ $\lambda$ “.

## 2. Обсуждение результатов

### 2.1. Сечения рассеяния для Yb

Поскольку в литературе для случая атома иттербия имеются экспериментальные данные [10] и результаты недавних релятивистских расчетов в приближении метода сходящейся сильной связи (RCCC) [7], то сначала представим наши расчеты сечений рассеяния электрона на этом атоме. Как было указано выше, в расчетах с учетом эффектов поглощения (RSEPA-приближение) в качестве мнимой части ОП (12) нами, как правило, используется неэмпирический потенциал поглощения  $Vaf2m$  (9). Проведенный с использованием этого потенциала поглощения RSEPA-расчет интегральных сечений рассеяния упругого  $\sigma_{\text{el}}(E)$ , передачи импульса  $\sigma_{\text{mom}}(E)$  и вязкости  $\sigma_{\text{vis}}(E)$  хорошо согласуется с экспериментом [10] (рис. 1).



**Рис. 2.** Угловая зависимость дифференциальных сечений (в  $10^{-20} \text{ m}^2 \text{ sr}^{-1}$ ) упругого  $e\text{-Yb}$  рассеяния при энергиях налетающего электрона 10 (a), 20 (b), 40 (c), 50 (d), 60 (e) и 80 (f) eV. Сплошная линия соответствует RSEPA-расчетам (12) с потенциалами поглощения  $VaMc$  для 10 eV и  $Vaf2m$  для  $E > 10$  eV, штриховая — RSEP-расчетам (13) без учета поглощения. Другие теоретические данные: пунктир — [2], штриховая линия с двумя точками — [3], штрихпунктир — [7]. Экспериментальные данные:  $\circ$  — [10].

Как видно на рис. 1, a, наш RSEPA-расчет  $\sigma_{el}$  хорошо согласуется с RCCC-расчетом [7]. Расчет из работы [3] дал существенно завышенные значения  $\sigma_{el}$  для всех энергий. Сравнение на рис. 1, b и c RSEP- и RSEPA-расчетов сечений  $\sigma_{\text{mom}}$  и  $\sigma_{\text{vis}}$  наглядно демонстрирует, что учет поглощения заметно улучшил согласие наших данных с экспериментом. Отметим, что расчет  $\sigma_{\text{mom}}$

из [3] хорошо согласуется с нашим RSEP-расчетом, хотя и был проведен в приближении комплексного ОП.

На рис. 2 приведены угловые зависимости ДС при энергиях налетающего электрона 10, 20, 40, 50, 60 и 80 eV. При этих энергиях имеются экспериментальные [10] и теоретические [2,3,7] данные. В нашей предыдущей работе [5] было продемонстрировано, что

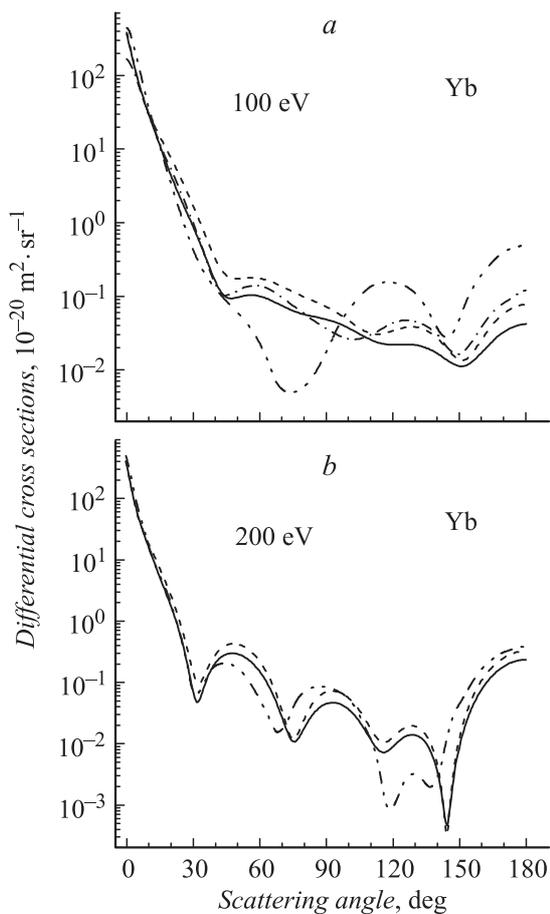


Рис. 3. То же, что и на рис. 2, но для энергий 100 (a) и 200 (b) eV.

при расчете ДС для 10 eV предпочтительнее использовать потенциал поглощения  $VaMc$  (11). Как видно на рис. 2, a, экспериментальное сечение для 10 eV имеет два локальных минимума. Подобное поведение ДС было получено в расчетах: релятивистском без учета поглощения [2], RCCC [7] и данном RSEP. В RSEPA-расчете с использованием потенциала поглощения  $VaMc[W(10) = 0.2424 \text{ а.у.}]$  мы получили хорошее согласие с экспериментом для углов рассеяния меньше  $40^\circ$  и больше  $100^\circ$ . Учет поглощения дал низкоугловой минимум при  $50^\circ$  более широкий, чем в RSEP-расчете. Все эти расчеты дали положение высокоуглового минимума при  $\sim 125^\circ$ . Отметим, что ДС в [3] имеет один минимум при  $115^\circ$  и не воспроизводит форму экспериментальной угловой зависимости ДС.

Для  $E \geq 20 \text{ eV}$  RSEPA-расчеты ДС мы провели с использованием потенциала поглощения  $Vaf2m$  (9). Как видно на рис. 2, b, c, e, f, эти расчеты хорошо согласуются с экспериментом и RCCC-расчетами.

Как видно на рис. 2, d для 50 eV, есть некоторое качественное согласие между нашими расчетами и ДС из [3]. Однако для 100 eV (рис. 3, a) расчет из [3] для углов больше  $45^\circ$  сильно отличается от нашего

и RCCC-расчета. Для 200 eV отличие между нашим расчетом и ДС из [3] при средних углах остается, особенно в интервале углов  $110\text{--}150^\circ$ .

Приведенное выше сравнение наших расчетов для иттербия в приближении релятивистского оптического потенциала с экспериментом [10] и RCCC-расчетами [7] позволяет нам использовать данное приближение и для исследования упругого рассеяния электрона на атоме европия.

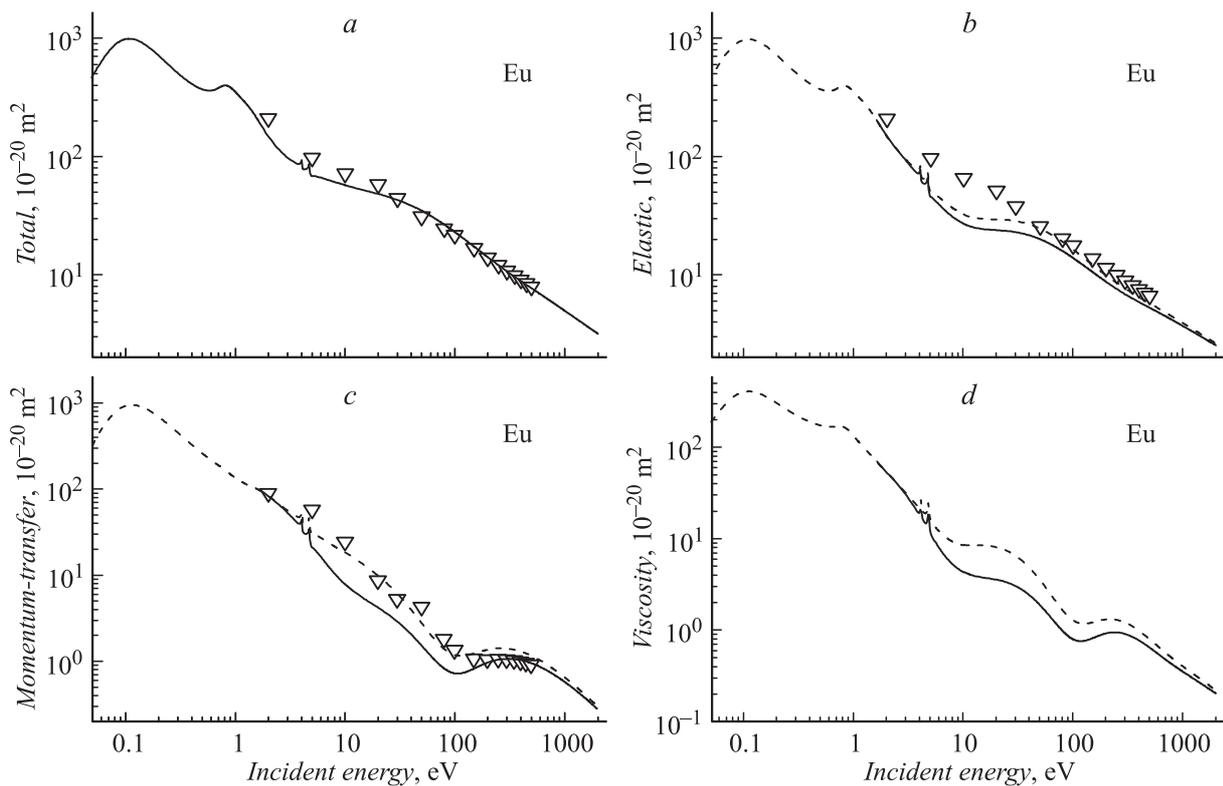
## 2.2. Сечения рассеяния для Eu

На рис. 4 приведены RSEP- и RSEPA-расчеты интегральных сечений рассеяния электрона на атоме европия в широкой области энергий столкновения вплоть до 2 keV. В качестве потенциала поглощения использован неэмпирический потенциал  $Vaf2m_\lambda$  (9). Расчеты показали, что для  $E < 10 \text{ eV}$  необходимо использовать спин-поляризованное (SPA) приближение с потенциалами (1) и (2). Таким образом, для  $E \geq 10 \text{ eV}$  расчеты сечений можно провести в более простом спин-неполяризованном локальном приближении (LA) с потенциалами (12) и (13). В таблице приведены энергии и ширины резонансов формы, рассчитанные в этих приближениях. Основное различие между SPA- и LA-расчетами получено для положения  $F$ -резонанса формы. В результате в интегральных сечениях структура при 4 eV будет только в спин-поляризованном приближении (рис. 4). Низкоэнергетические максимумы в сечениях при  $\sim 0.1$  и  $\sim 1 \text{ eV}$  обусловлены вкладом  $P$ - и  $D$ -резонансов формы соответственно.

На рис. 4 наши расчеты сравнены с расчетом в приближении комплексного ОП из [13]. Как видно на рис. 4, a, эти расчеты полного сечения  $\sigma_{\text{tot}}(E)$  начиная с 30 eV согласуются друг с другом. Для упругого сечения  $\sigma_{\text{el}}(E)$  начиная с 50 eV имеется качественное согласие наших расчетов с данными из [13] (рис. 4, b). Как видно на рис. 4, c, начиная с 200 eV наш RSEPA-расчет сечения передачи импульса  $\sigma_{\text{mom}}(E)$  согласуется с сечением из [13]. Наш расчет сечения вязкости  $\sigma_{\text{vis}}(E)$  представлен на рис. 4, d. Отметим нерегулярное спадание этого сечения в интервале энергий 10–300 eV. Наш расчет  $\sigma_{\text{vis}}$  носит предсказательный характер, в связи

Энергии  $E_r$  и ширины  $\Gamma$  резонансов формы в упругом  $e$ -Eu-рассеянии, рассчитанные в спин-поляризованном (SPA) и спин-неполяризованном (LA) приближениях

$\ell$	$j$	SPA, $\lambda = \uparrow\uparrow$		SPA, $\lambda = \downarrow\uparrow$		LA	
		$E_r, \text{ eV}$	$\Gamma, \text{ eV}$	$E_r, \text{ eV}$	$\Gamma, \text{ eV}$	$E_r, \text{ eV}$	$\Gamma, \text{ eV}$
1	1/2	0.077	0.085	0.078	0.129	0.079	0.108
	3/2	0.072	0.159	0.077	0.222	0.076	0.197
	3/2	0.80	0.32	1.17	0.91	0.99	0.57
2	5/2	0.91	0.48	1.24	1.10	1.09	0.75
	5/2	0.351	0.001	4.04	0.10	1.02	0.01
3	7/2	0.403	0.001	4.75	0.17	1.64	0.02



**Рис. 4.** Энергетические зависимости полного (a), упругого (b), передачи импульса (c) и вязкости (d) сечений  $e$ -Eu рассеяния (в  $10^{-20} \text{ m}^2$ ). Для  $E \leq 10 \text{ eV}$  расчеты проведены в SPA-приближении (потенциалы (1) и (2)). Для  $E > 10 \text{ eV}$  расчеты проведены в LA-приближении (потенциалы (12) и (13)). Сплошная линия соответствует RSEPA-расчетам с потенциалом поглощения  $Vaf2m$ , штриховая — RSEP-расчетам без учета поглощения. Другие теоретические данные:  $\nabla$  — расчеты с комплексным ОП [13].

с чем заметим, что в литературе имеются экспериментальные измерения этого сечения для ряда атомов (см., например, данные для Yb [10], Hg [19] и In [25]).

На рис. 5 сравнены наши расчеты угловой зависимости ДС в LA-приближении с сечениями, рассчитанными в [13] с использованием комплексного ОП. Данные RSEPA-расчеты, так же как и для атома Yb, для 10 eV проведены с использованием потенциала поглощения  $VaMc[W(10) = 0.2931 \text{ а.у.}]$ , а для больших энергий с потенциалом  $Vaf2m$ .

Так же как и в случае атома Yb, для 10 eV (рис. 5, a) имеется существенное качественное отличие нашего расчета от данных из [13]. Для 50 и 100 eV (рис. 5, b и c) имеется как качественное, так и количественное различие наших ДС для углов больше  $50^\circ$  и  $30^\circ$  соответственно. И наконец, для 200 eV (рис. 5, d) наши расчеты и ДС из [13] в основном согласуются друг с другом, а различия имеются лишь в окрестностях локальных минимумов и максимума при  $90^\circ$ .

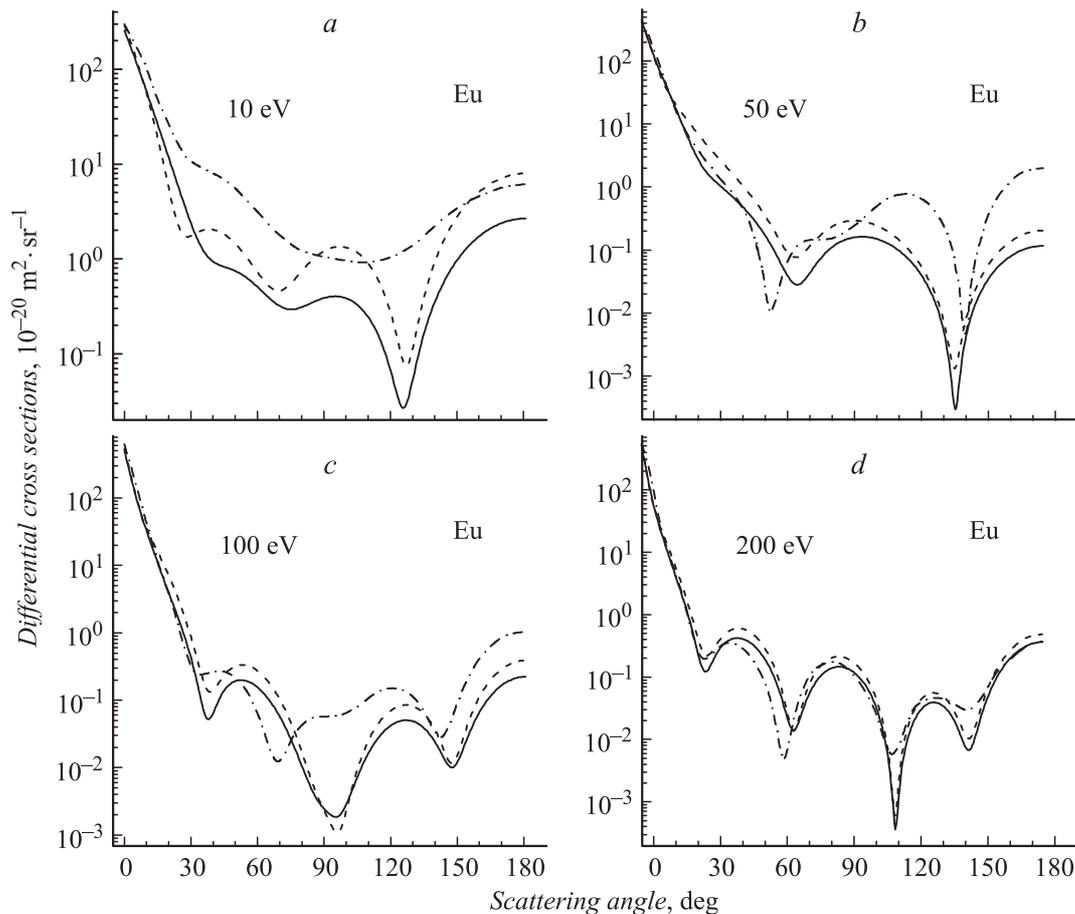
## Заключение

В методе релятивистского оптического потенциала исследовано упругое рассеяние электронов на тяжелых атомах европия и иттербия. Используются два

приближения в рамках теории функционала плотности — спин-поляризованное и спин-неполяризованное. Для атома иттербия получено хорошее согласие сечений рассеяния с имеющимися в литературе экспериментальными данными и недавним релятивистским расчетом в приближении метода сходящейся сильной связи. Это позволило применить данный метод релятивистского ОП для случая атома европия, учитывая подобие их электронных оболочек.

Упругое рассеяние электронов на атомах европия исследовано в широкой области энергий столкновений 0.05–2000 eV. Расчеты проведены в двух приближениях: спин-поляризованном и спин-неполяризованном. Рассчитаны угловые зависимости дифференциальных сечений рассеяния и энергетические зависимости интегральных сечений рассеяния: полного, упругого, передачи импульса и вязкости. Показано, что при расчете сечений рассеяния для энергий меньше 10 eV необходимо использовать спин-поляризованное приближение. Для больших энергий может быть использовано более простое спин-неполяризованное приближение.

Для энергий выше неупругого порога расчеты характеристик рассеяния проведены как в приближении комплексного ОП (с учетом эффектов поглощения), так и в приближении действительной части ОП (без учета эффектов поглощения). В качестве потенциалов



**Рис. 5.** Угловая зависимость дифференциальных сечений (в  $10^{-20} \text{ m}^2 \text{ sr}^{-1}$ ) упругого  $e$ -Eu рассеяния при энергиях налетающего электрона 10 (a), 50 (b), 100 (c) и 200 (d) eV. Сплошная линия соответствует RSEPA-расчетам (12) с потенциалами поглощения  $VaMc$  для 10 eV и  $Vaf2m$  для  $E > 10$  eV. Штриховая линия соответствует RSEP-расчетам (13) без учета поглощения. Другие теоретические данные: штрихпунктир — [13].

поглощения используется, как правило, неэмпирический потенциал. При расчете ДС для 10 eV использован феноменологический потенциал. В целом учет эффектов поглощения приводит к уменьшению значений ДС практически для всего интервала углов рассеяния в области энергий вплоть до 500 eV, а для интегральных сечений передачи импульса и вязкости к значительному уменьшению их величины для энергий от неупругого порога и до 400 eV.

Низкоэнергетическое рассеяние электрона на атоме европия характеризуется наличием  $P$ -,  $D$ - и  $F$ -резонансов формы. Наибольшая разница между энергиями резонансов для случаев параллельного и антипараллельного рассеяния получена для  $F$ -резонансов. Два максимума в интегральных сечениях в окрестности 4 eV обусловлены вкладом  $F$ -резонансов для антипараллельного случая при 4.04 и 4.75 eV для значений полных угловых моментов электрона  $5/2$  и  $7/2$  соответственно.

Проведено сравнение наших результатов для европия с имеющимися в литературе теоретическими данными. Некоторое согласие наших ДС с этими данными имеется

лишь для энергии 200 eV. Для интегральных сечений даже при 500 eV отличие нашего упругого сечения от другого расчета является существенным и составило больше 20%. Полученные в настоящей работе результаты, а также отличие их от других теоретических данных могли бы стимулировать экспериментальные и новые теоретические исследования процесса упругого рассеяния электронов на атомах европия в широкой области энергий столкновений.

Авторы весьма признательны проф. A.N. Tripathi за предоставление копии своей статьи по европию [13].

#### **Приложение А. Аналитические выражения и значения параметров для статического потенциала $V_{st}(r)$ , полной $\rho(r)$ и спиновых электронных плотностей $\rho_{sp}(r)$ для атома Eu**

Статический потенциал  $V_{st}(r)$  и полная электронная плотность  $\rho(r)$  вычисляются с использованием аналити-

ческих выражений, подобных выражениям в [21]:

$$V_{st}(r) = -\frac{Z}{r} \left[ \sum_{i=1}^n A_i \exp(-B_i r) + r \sum_{j=1}^m C_j \exp(-D_j r) \right], \quad (A1)$$

$$\rho(r) = \frac{N}{4\pi r} \left[ \sum_{i=1}^n A_i B_i^2 \exp(-B_i r) + \sum_{j=1}^m C_j D_j (D_j r - 2) \exp(-D_j r) \right], \quad (A2)$$

где  $Z$  — это заряд ядра атома-мишени и  $N$  — количество электронов в атомной оболочке.

В выражениях (A1) и (A2) суммирование проводится до  $n=6$  и  $m=6$ . Параметры  $A$ ,  $B$ ,  $C$  и  $D$  имеют следующие значения:  $A_1 = 2.42676$ ,  $A_2 = -10.382$ ,  $A_3 = 8.719$ ,  $A_4 = -4.5297$ ,  $A_5 = 4.7816$  и  $A_6 = 1 - A_1 - A_2 - A_3 - A_4 - A_5$  являются безразмерными;  $B_1 = 3.4819$ ,  $B_2 = 35.953$ ,  $B_3 = 10.376$ ,  $B_4 = 1.265$ ,  $B_5 = 1.43$ ,  $B_6 = 285.81$ ,  $C_1 = -10.679$ ,  $C_2 = -88.801$ ,  $C_3 = -176.09$ ,  $C_4 = -7.9359$ ,  $C_5 = 0.6589$ ,  $C_6 = -1.5666$ ,  $D_1 = 58.798$ ,  $D_2 = 13.152$ ,  $D_3 = 26.536$ ,  $D_4 = 5.0605$ ,  $D_5 = 1.261$  и  $D_6 = 233.02$  — в единицах  $a_0^{-1}$ ;  $a_0$  — первый радиус Бора атома водорода.

Для расчета спиновых плотностей  $\rho_{sp}(r)$  также используем выражение (A2), но с заменой  $N \rightarrow N_{sp}$ , суммирование в этих случаях проводится также до  $n=6$  и  $m=6$ . Для  $\rho_{\uparrow}(r)$  число электронов в  $sp=\uparrow$  подоболочке  $N_{\uparrow} = 35$  и параметры  $A$ ,  $B$ ,  $C$  и  $D$  имеют следующие значения:  $A_1 = 3.1302$ ,  $A_2 = -9.4059$ ,  $A_3 = 6.53$ ,  $A_4 = -0.01447$ ,  $A_5 = -0.274$  и  $A_6 = 1.0342$  — безразмерные;  $B_1 = 4.9232$ ,  $B_2 = 35.82$ ,  $B_3 = 11.371$ ,  $B_4 = 282.84$ ,  $B_5 = 1.119$ ,  $B_6 = 2.19$ ,  $C_1 = -1.4242$ ,  $C_2 = -9.4333$ ,  $C_3 = -76.936$ ,  $C_4 = -158.801$ ,  $C_5 = -9.1644$ ,  $C_6 = 0.1941$ ,  $D_1 = 230.72$ ,  $D_2 = 59.148$ ,  $D_3 = 13.181$ ,  $D_4 = 26.482$ ,  $D_5 = 5.7358$  и  $D_6 = 1.2025$  — в единицах  $a_0^{-1}$ .

Для  $\rho_{\downarrow}(r)$  число электронов в  $sp=\downarrow$  подоболочке  $N_{\downarrow} = 28$  и параметры  $A$ ,  $B$ ,  $C$  и  $D$  имеют значения:  $A_1 = 2.0314$ ,  $A_2 = -11.4461$ ,  $A_3 = 10.2483$ ,  $A_4 = -0.01769$ ,  $A_5 = -11.829$  и  $A_6 = 12.013$  — безразмерные;  $B_1 = 3.2291$ ,  $B_2 = 36.053$ ,  $B_3 = 9.962$ ,  $B_4 = 285.26$ ,  $B_5 = 1.2626$ ,  $B_6 = 1.3426$ ,  $C_1 = -12.066$ ,  $C_2 = -99.967$ ,  $C_3 = -195.268$ ,  $C_4 = -7.0444$ ,  $C_5 = 0.8908$ ,  $C_6 = -1.7633$ ,  $D_1 = 58.776$ ,  $D_2 = 13.091$ ,  $D_3 = 26.559$ ,  $D_4 = 4.9105$ ,  $D_5 = 1.245$  и  $D_6 = 232.58$  — в единицах  $a_0^{-1}$ .

## Приложение В. Аналитические выражения и значения параметров для плотности $\rho_{6s}(r)$ и орбитали $\phi_{6s}(r)$ валентной $6s^2$ -подоболочки атома Eu

Аналитическое выражение для плотности валентной  $6s^2$ -подоболочки имеет вид

$$\rho_{6s}(r) = 2\phi_{6s}^2(r), \quad (B1)$$

где слэтэровская одноэлектронная орбиталь (см., например, [22] и ссылки там) рассчитывается по формуле

$$\phi_{6s}(r) = \sum_{i=1}^5 K_i r^{M_i} \exp(-N_i r). \quad (B2)$$

Параметры в уравнении (B2) имеют следующие значения:  $K_1 = 12.005$ ,  $K_2 = -44.855$ ,  $K_3 = -11.179$ ,  $K_4 = -6.383$ ,  $K_5 = 12.266$ ;  $M_1 = -0.3199$ ,  $M_2 = 0.4018$ ,  $M_3 = -0.86615$ ,  $M_4 = -0.5477$ ,  $M_5 = -0.8584$ ;  $N_1 = 6.4126$ ,  $N_2 = 17.969$ ,  $N_3 = 0.572$ ,  $N_4 = 3.4907$ ,  $N_5 = 0.6268$ . Значения параметров  $M_i$  — безразмерные, а  $N_i$  — в единицах  $a_0^{-1}$ . Размерность параметров  $K_i$  определяется нормировкой плотности  $\rho_{6s}$ .

## Приложение С. Значения параметров для статического потенциала $V_{st}(r)$ , полной электронной плотности $\rho(r)$ и плотности валентной $6s^2$ -подоболочки $\rho_{6s}(r)$ для атома Yb

Для атома иттербия статический потенциал  $V_{st}(r)$ , полная электронная плотность  $\rho(r)$  и плотность валентной  $6s^2$ -подоболочки рассчитаны с использованием аналитических выражений (A1), (A2) и (B1) соответственно. Суммирование в выражениях (A1) и (A2), так же как и для случая атома европия, проводится до  $n=6$  и  $m=6$ . Параметры  $A$ ,  $B$ ,  $C$  и  $D$  имеют следующие значения:  $A_1 = -0.8471$ ,  $A_2 = -9.7784$ ,  $A_3 = 10.751$ ,  $A_4 = -0.13473$ ,  $A_5 = 1.0121$ ,  $A_6 = 1 - A_1 - A_2 - A_3 - A_4 - A_5$  являются безразмерными;  $B_1 = 4.3997$ ,  $B_2 = 40.546$ ,  $B_3 = 9.2425$ ,  $B_4 = 1.176$ ,  $B_5 = 2.65$ ,  $B_6 = 300$ ,  $C_1 = -10.51$ ,  $C_2 = -103.01$ ,  $C_3 = -185.95$ ,  $C_4 = -9.2274$ ,  $C_5 = 0.14928$ ,  $C_6 = 2.3618$ ,  $D_1 = 72.511$ ,  $D_2 = 14.773$ ,  $D_3 = 30.19$ ,  $D_4 = 9.7994$ ,  $D_5 = 1.261$ ,  $D_6 = 109.03$  — в единицах  $a_0^{-1}$ .

Для расчета одноэлектронной орбитали  $\phi_{6s}(r)$  атома Yb использовано уравнение (B2) с параметрами:  $K_1 = 13.918$ ,  $K_2 = -50.875$ ,  $K_3 = 3.2264$ ,  $K_4 = -4.0087$ ,  $K_5 = -1.9392$ ;  $M_1 = -0.28581$ ,  $M_2 = 0.2727$ ,  $M_3 = -0.96418$ ,  $M_4 = -0.71864$ ,  $M_5 = -1.0068$ ;  $N_1 = 9.0491$ ,  $N_2 = 18.767$ ,  $N_3 = 0.80842$ ,  $N_4 = 3.1507$ ,  $N_5 = 0.48222$ . Значения параметров  $M_i$  — безразмерные, а  $N_i$  — в единицах  $a_0^{-1}$ . Размерность параметров  $K_i$  определяется нормировкой плотности  $\rho_{6s}$ .

## Список литературы

- [1] Kelemen V.I., Remeta E.Yu., Sabad E.P. // J. Phys. B. 1995. Vol. 28. P. 1527–1546.
- [2] Yuan J. // Phys. Rev. A. 1995. Vol. 52. P. 4647–4655.
- [3] Neerja, Tripathi A.N., Jain A.K. // Phys. Rev. A. 2000. Vol. 61. P. 032 713.
- [4] Kelemen V.I., Dovhanych M.M., Remeta E.Yu. // J. Phys. B. 2008. Vol. 41. P. 035 204.

- [5] Kelemen V.I., Dovhanych M.M., Remeta E.Yu. // J. Phys. B. 2008. Vol. 41. P. 125 202.
- [6] Felfli Z., Msezane A.Z., Sokolovski D. // Phys. Rev. A. 2009. Vol. 79. P. 02 714.
- [7] Bostock C.J., Fursa D.V., Bray I. // Phys. Rev. A. 2011. Vol. 83. P. 052 710.
- [8] Казаков С.М., Христофоров О.В. // Опт. и спектр. 1983. Т. 54. С. 750–752.
- [9] Шимон Л.Л. Эффективные сечения возбуждения и ионизации атомов редкоземельных элементов. М.: Энергоатомиздат, 1994. 144 с.
- [10] Predojević B., Šević D., Pejčev V., Marinković B.P., Filipović D.M. // J. Phys. B. 2005. Vol. 38. P. 1329–1340, 3489–3501.
- [11] Казаков С.М., Христофоров О.В. // ЖЭТФ. 1984. Т. 86. С. 835–846.
- [12] Sabad E., Kelemen V., Remeta E. // Proc. XVIII Intern. Conf. on Phys. Electronic and Atomic Collisions. Denmark: Aarhus, 1993. P. 134.
- [13] Neerja, Tripathi A.N. // Eur. Phys. J. D. 2001. Vol. 13. P. 5–10.
- [14] Felfli Z., Msezane A.Z., Sokolovski D. // Phys. Rev. A. 2009. Vol. 79. P. 062 709.
- [15] Remeta E.Yu., Kelemen V.I. // J. Phys. B. 2010. Vol. 43. P. 045 202.
- [16] Kelemen V.I., Remeta E.Yu. // Proc. 5<sup>th</sup> Conf. on Elementary Process in Atomic Systems. Belgrad. Serbia, 2011. P. W9.
- [17] Фок В.А. Начала квантовой механики. М.: Наука, 1976. 376 с.
- [18] Sin Fai Lam L.T. // J. Phys. B. 1982. Vol. 15. P. 119–142.
- [19] Kelemen V.I., Remeta E.Yu. // J. Phys. B. 2012. Vol. 45. P. 185 202.
- [20] Ремета Е.Ю., Келемен В.И. // ЖТФ. 2010. Т. 80. Вып. 12. С. 18–26.
- [21] Strand T.G., Bonham R.A. // J. Chem. Phys. 1964. Vol. 40. P. 1686–1691.
- [22] Радциг А.А., Смирнов Б.М. Параметры атомов и атомных ионов. Справочник. М, 1986. 344 с.
- [23] Staszewska G., Schwenke D.W., Truhlar D.G. // Phys. Rev. A. 1984. Vol. 29. P. 3078–3091.
- [24] McCarthy I., Noble C., Phillips B., Turnbull A. // Phys. Rev. A. 1977. Vol. 15. P. 2173–2185.
- [25] Rabasović M.S., Kelemen V.I., Tošić S.D., Šević D., Dovhanych M.M., Pejčev V., Filipović D.M., Remeta E.Yu., Marinković B.P. // Phys. Rev. A. 2008. Vol. 77. P. 062 713.
- [26] Калоджеро Ф. Метод фазовых функций в теории потенциального рассеяния / Пер. с англ. М.: Мир, 1972. 292 с.
- [27] Бабииков В.В. Метод фазовых функций в квантовой механике. М.: Наука, 1988. 256 с.