

01;02

# Теоретические исследования полной спиновой поляризации электронов упруго рассеянных атомами аргона в области энергий 0.5–500 eV

© В.И. Келемен

Институт электронной физики НАН Украины,  
88000 Ужгород, Украина  
e-mail: kelemen@ier.uzhgorod.ua

(Поступило в Редакцию 25 мая 20001 г. В окончательной редакции 29 декабря 2001 г.)

В рамках модели феноменологического вещественного оптического потенциала с учетом спин-орбитального взаимодействия исследовано упругое рассеяние электронов атомами аргона в области энергий 0.5–500 eV. Рассчитаны и сравниваются с экспериментом энергетические зависимости угловых положений минимумов в дифференциальных сечениях. Определены энергии и углы четырех критических точек, где сечения достигают своих наименьших значений. Получено, что из трех высокоугловых (углы  $> 90^\circ$ ) критических минимумов самый глубокий расположен при (38.25 eV, 140.67°). Для этих минимумов определены энергетические и угловые окрестности, в которых параметр спиновой поляризации, так называемая функция Шермана, достигает своих экстремальных значений: (+1) и (–1).

## Введение

Упругое рассеяние электронов атомами аргона в течение последних нескольких десятков лет было достаточно тщательно исследовано как экспериментальными, так и теоретическими методами (см., например, обзор работ в [1,2]). Гораздо меньше работ посвящено изучению поляризации электронов, возникшей в результате рассеяния изначально неполяризованного пучка электронов на атомах аргона в основном состоянии.

В работах [3–5] была измерена угловая зависимость параметра спиновой поляризации  $S(\Theta)$  так называемой функции Шермана для энергий налетающих электронов от 10 до 150 eV в области углов от 30 до 150°. А в теоретических работах [6–8] была рассчитана угловая зависимость параметра  $S(\Theta)$  в области энергий 3–300 eV. Наибольшее значение полученной в [3–8] спиновой поляризации не превысило 20%.

Вместе с тем известно (см., например, [9]), что в малых окрестностях наиболее глубоких минимумов дифференциальных сечений (ДС) так называемых „критических минимумов“ существуют энергии и углы, при которых пучок рассеянных электронов может быть полностью или почти полностью поляризованным. Знание таких энергий и углов, с одной стороны, могло бы помочь измерить на эксперименте экстремальные значения функции Шермана (+1 и –1), а с другой стороны, в таких точках можно было бы эффективнее проверять как экспериментальные методики, так и теоретические модели.

Целью данной работы является определение в широкой области энергий 0.5–500 eV критических минимумов в ДС упругого рассеяния электронов атомами аргона и расчет в окрестностях этих минимумов энергий и углов, при которых поляризация рассеянных электронов могла бы достичь 100%.

## Теоретический метод

Для расчета сечений рассеяния и параметров спиновой поляризации ниже используется метод фазовых функций [10,11], позволяющий рассчитать абсолютные значения фазовых сдвигов  $\delta_l^\pm \equiv \delta_l^{l\pm 1/2}$  парциальных амплитуд рассеяния как пределы фазовых функций  $\delta_l^\pm(r)$  при  $r \rightarrow \infty$ , полученных в результате интегрирования фазового уравнения

$$\frac{d\delta_l^\pm(r)}{dr} = -\frac{2V^\pm(r)}{k} \times [\cos \delta_l^\pm(r) j_l(kr) - \sin \delta_l^\pm(r) n_l(kr)]^2, \quad (1)$$

где  $j_l$  и  $n_l$  — функции Риккати–Бесселя (см., например, [10]),  $l$  — орбитальный момент,  $k = (2E)^{1/2}$  — импульс,  $E$  — энергия налетающего электрона (здесь и далее используется атомная система единиц,  $e = m_e = \hbar = 1$ ) и, наконец,  $V^\pm(r)$  — потенциал взаимодействия налетающего электрона с атомом-мишенью.

Имея фазовые сдвиги  $\delta_l^\pm$ , можно найти так называемые „прямую“ амплитуду рассеяния

$$f(\Theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} \left\{ (l+1) [\exp(2i\delta_l^+) - 1] + l [\exp(2i\delta_l^-) - 1] \right\} P_l(\cos \Theta) \quad (2)$$

и амплитуду рассеяния „с переворотом спина“

$$g(\Theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{l=1}^{\infty} [\exp(2i\delta_l^-) - \exp(2i\delta_l^+)] P_l^1(\cos \Theta), \quad (3)$$

где  $\Theta$  — угол рассеяния,  $P_l(\cos \Theta)$  — многочлены Лежандра,  $P_l^1(\cos \Theta)$  — присоединенные функции Лежандра первого рода (см., например, [12]).

Дифференциальное сечение упругого рассеяния и параметры спиновой поляризации рассеянных электронов выражаются через амплитуды  $f$  и  $g$  следующим образом [9]:

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma(\Theta)}{d\Omega} &= |f(\Theta)|^2 + |g(\Theta)|^2, \\ S(\Theta) &= i \frac{fg^* - f^*g}{|f|^2 + |g|^2}, \quad U(\Theta) = \frac{fg^* + f^*g}{|f|^2 + |g|^2}, \\ T(\Theta) &= \frac{|f|^2 - |g|^2}{|f|^2 + |g|^2}. \end{aligned} \quad (4)$$

Поскольку параметры поляризации связаны условием  $S^2 + U^2 + T^2 = 1$ , а в данной работе нас интересуют энергии и углы, при которых  $S^2 = 1$ , и, следовательно,  $U^2 = T^2 = 0$ , ниже мы ограничимся расчетами функции Шермана  $S(\Theta)$  и ДС.

В качестве потенциала взаимодействия налетающего электрона с атомом-мишенью здесь используется феноменологический вещественный оптический потенциал

$$V^\pm(r, E) = V_s(r) + V_{so}^\pm(r) + V_e(r, E) + V_p(r). \quad (5)$$

Электростатический потенциал  $V_s(r)$  и плотность электронов атома аргона, необходимая для расчета обменного потенциала  $V_e(r, E)$ , найдены по аналитическим выражениям из [13], где значения параметров были получены в рамках метода Хартри–Фока с использованием метода наименьших квадратов.

Спин-орбитальное взаимодействие учтено здесь с помощью потенциала [14]

$$V_{so}^\pm(r) = \xi^\pm(j, l) \frac{1}{r} \frac{dV_s}{dr} \frac{\alpha^2}{2 + \alpha^2[E - V_s(r)]}, \quad (6)$$

где  $\xi^+(j, l) = l/2$  для  $j = l + 1/2$  и  $\xi^-(j, l) = -(l + 1)/2$  для  $j = l - 1/2$ ,  $j$  — полный угловой момент электрона,  $\alpha$  — постоянная тонкой структуры.

В качестве обменного потенциала  $V_e(r, E)$  и поляризационного потенциала  $V_p(r)$ , так же как и в наших предыдущих работах [15,16], были взяты локальный обменный потенциал, полученный в [17,18] в рамках приближения свободного электронного газа, и дипольный поляризационный потенциал с подгоночным параметром (см. (2) в [15], либо (10) в [16]). Потенциал ионизации атома аргона, используемый при вычислении  $V_e$ , взят из [19]:  $I = 15.76$  eV, а дипольная поляризуемость атома аргона  $\alpha_d = 11.08 a_0^3$  из [20]. Здесь и далее  $a_0$  — первый боровский радиус атома водорода.

Поскольку потенциал (5) при  $r \rightarrow 0$  имеет сингулярное поведение  $r^2 V^\pm(r) \rightarrow r^2 V_{so}^\pm(r) \rightarrow \text{const} = \xi^\pm(j, l)$ , то начальное условие для фазового уравнения в начальной точке интегрирования  $r = \varepsilon$  имеет вид [11]

$$\begin{aligned} \delta_l^\pm(\varepsilon) &= -q_l^\pm \frac{(k\varepsilon)^{2l+1}}{(2l+1)!!(2l-1)!!}, \\ q_l^\pm &= 1 + \frac{(2l+1)^2}{2\xi^\pm} - \frac{(2l+1)^2}{2\xi^\pm} \sqrt{1 + \frac{4\xi^\pm}{(2l+1)^2}}. \end{aligned} \quad (7)$$

Величина  $q_l^\pm$  лежит в пределах  $-1 < q_l^\pm < 1$ , а в случае притягивающего потенциала  $V_{so}^-(r)$ , т.е. когда  $\xi^- = -(l + 1)/2$ , на величину  $\xi^-$  имеется ограничение, следующее из условия отсутствия падения частицы на центр,  $\xi^- > -(l + 1/2)^2$ . Легко видно, что для любого  $l \geq 1$  это условие выполняется.

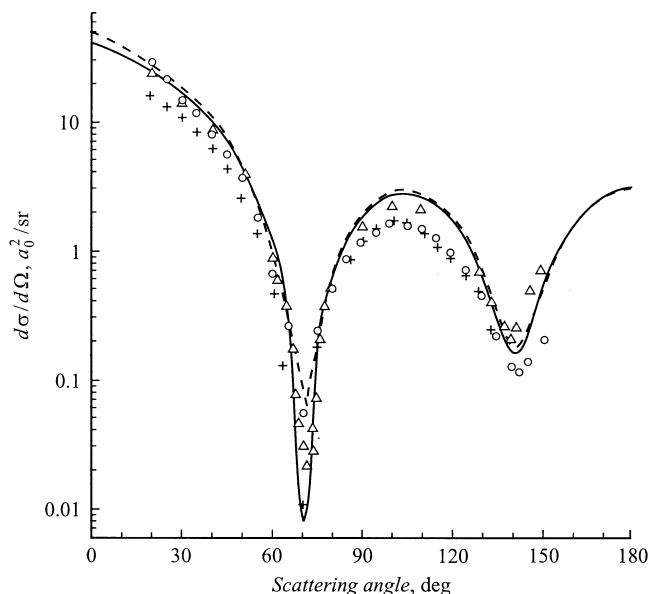
Для численного решения фазового уравнения здесь, так же как и в [15,16], использован метод четвертого порядка с предсказанием по Адамсу–Башфурту с коррекцией по Адамсу–Мултону и модификацией [12] и с автоматическим контролем величины шага. В зависимости от энергии  $E$  количество парциальных волн, рассчитанных с помощью фазового уравнения, было различным и составило, например, для 1 eV шесть волн, а для 500 eV — 26 волн. Для каждой энергии фазовые сдвиги  $\delta_l^+$  и  $\delta_l^-$  рассчитывались до таких  $l = L$ , начиная с которых  $|\delta_l^+ - \delta_l^-| < 0.01\%$ . Для  $l > L$  мы полагали, что  $\delta_l^+ = \delta_l^-$ . И наконец, для тех парциальных волн, для которых значение фазового сдвига было, как правило, уже меньше 0.01 rad, для расчета  $\delta_l$  была использована известная формула для асимптотических фаз, которая для случая, когда потенциал (5) на больших расстояниях  $r$  убывает как  $-\alpha_d/2r^4$ , имеет вид (см., например, [21])

$$\delta_l = \arctg \frac{\pi \alpha_d k^2}{(2l+3)(2l+1)(2l-1)}. \quad (8)$$

Для определения параметра в поляризационном потенциале  $V_p(r)$  был использован хорошо известный факт существования в низкоэнергетическом рассеянии электронов атомами аргона минимума Рамзауэра–Таундсена вблизи 0.3 eV (см., например, [22,23] и ссылки там). Для нескольких значений параметра был сделан расчет энергетической зависимости  $s$ -волнового фазового сдвига  $\delta_0$  при низких энергиях. Было получено, что для случая, когда параметр равен  $1.99 a_0$ , сначала с увеличением энергии значение фазового сдвига  $\delta_0$  увеличивалось от 9.436 rad при  $E = 0.001$  eV до 9.471 rad при  $E = 0.07$  eV, а затем уменьшалось, приобретая при  $E = 0.3$  eV значение 9.426 rad  $\approx 3\pi$ . Следовательно, для потенциала (5) с таким параметром мы получили в  $s$ -волновом парциальном сечении при 0.3 eV глубокий минимум, обусловивший наличие в полном сечении минимума Рамзауэра–Таундсена.

## Обсуждение результатов

Для дифференциальных сечений упругого рассеяния электронов атомами аргона в области энергий  $E = 3-140$  eV характерно наличие двух минимумов: низкоугловых при углах  $< 90^\circ$  и высокоугловых при углах  $> 90^\circ$  (см., например, рис. 1). Поскольку в нашем случае значения ДС практически для всех углов, за исключением критических точек, определяются значениями прямой амплитуды  $f(\Theta)$ , угловые положения минимумов в сечении обусловлены интерференцией



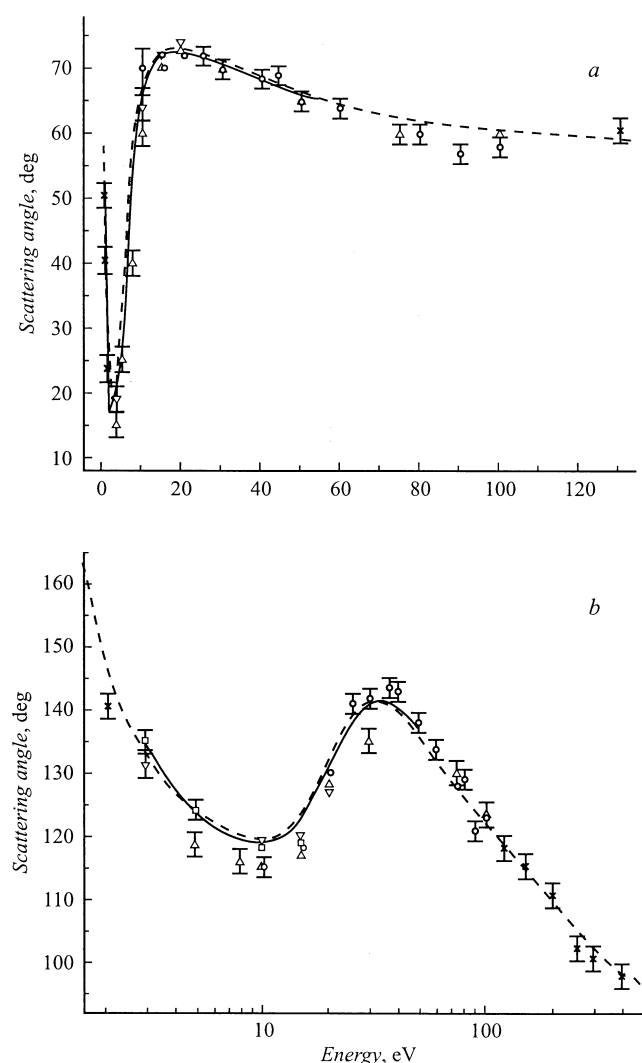
**Рис. 1.** Угловая зависимость дифференциального сечения упругого рассеяния электронов атомами аргона при 30 eV. Эксперимент:  $\circ$  — [2],  $+$  — [24],  $\Delta$  — [25]; теория: сплошная кривая — [26], штриховая — данный расчет.

парциально-волновых слагаемых в этой амплитуде. Причем, так как при этих энергиях основной вклад в амплитуду  $f$  вносят первые три волны (например, для 30 eV и  $40^\circ$  этот вклад составил более 90%, причем вклад  $d$ -волны более 36%), наличие у  $|f|^2$  двух минимумов, низкоуглового и высокоуглового, определяется нулевыми значениями полинома Лежандра  $P_2(\cos \Theta)$  при  $54.7^\circ$  и  $125.3^\circ$ . Сравнение на рис. 1 нашего ДС с расчетом из [26] и экспериментальными данными из [2], [24] и [25] показало, что в отличие от эксперимента два различных теоретических расчета практически при всех углах, за исключением низкоуглового минимума, совпадают.

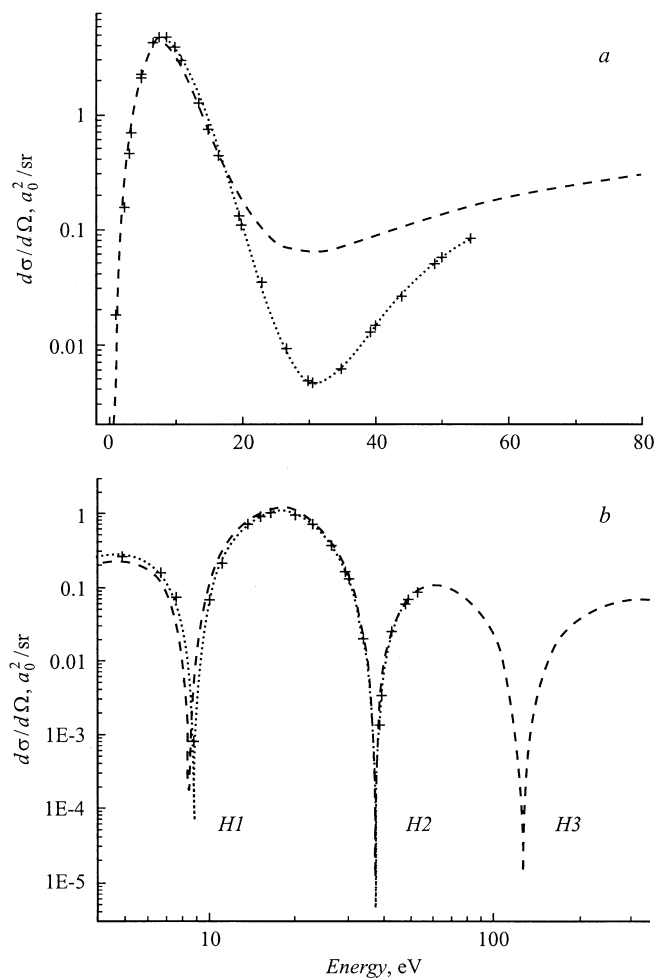
Заметим, что в [26] рассчитанные в области энергий 0–54.4 eV в нерелятивистском подходе парциальные фазовые сдвиги для  $l = 0-6$  приведены в таблице для 29 значений энергий налетающего электрона, а значения ДС приведены для 9 энергий и углов от 0 до  $180^\circ$  с шагом  $5^\circ$ . Поэтому, для того чтобы уточнить угловые положения минимумов и значения ДС в этих минимумах, мы рассчитали сечение с меньшим шагом по углу, причем для  $l \geq 7$  были использованы фазовые сдвиги, рассчитанные так же, как и в [26], по асимптотической формуле (8). Чтобы такие расчеты сделать для промежуточных энергий, мы аппроксимировали фазовые сдвиги из [26]. Таким образом, приведенные ниже энергетические зависимости угловых положений и минимальных значений ДС из [26] получены нами с использованием как табличных фазовых сдвигов, так и фазовых сдвигов, найденных с помощью аппроксимации.

На рис. 2, *a* и *b* продемонстрированы энергетические зависимости угловых положений низкоугловых и высокоугловых минимумов ДС. Экспериментальные значения углов минимумов для энергий 3–100 eV взяты из таблиц и рисунков в [2] и из табл. 1 в [27], а для энергий меньше 3 eV и больше 100 eV — из [28], где на рисунках представлена компиляция данных из шестнадцати экспериментов.

Как видно на рис. 2, *a* и *b*, наш расчет вполне удовлетворительно согласуется с большинством экспериментальных данных. Так, кривая низкоугловых минимумов (рис. 2, *a*) достигает минимального значения угла  $19.4^\circ$  при 2.1 eV, максимального значения угла  $73.2^\circ$  при 18.1 eV и затем плавно спадает до  $59.4^\circ$  при 133 eV. Расчет с фазовыми сдвигами из [26] дал минимальное значение угла  $17^\circ$  при 2.2 eV, а максимальное значение



**Рис. 2.** Энергетическая зависимость угловых положений низкоугловых (*a*) и высокоугловых (*b*) минимумов дифференциальных сечений упругого рассеяния электронов атомами аргона. Эксперимент:  $\circ$  — [2],  $\Delta$  — [24],  $\square$  — [27],  $\times$  — [28],  $\nabla$  — [31]; теория: сплошная кривая — [26], штриховая — данный расчет.



**Рис. 3.** Энергетическая зависимость низкоугловых (а) и высокоугловых (б) минимальных значений дифференциальных сечений упругого рассеяния электронов атомами аргона. Данный расчет — штриховая кривая с критическими точками:  $H1 = (8.44 \text{ eV}, 119.89^\circ)$ ,  $H2 = (38.25 \text{ eV}, 140.67^\circ)$  и  $H3 = (126.33 \text{ eV}, 118.12^\circ)$ . Расчет с использованием табличных (+) и аппроксимированных (точки) фазовых сдвигов из [26].

угла  $72.4^\circ$  при  $16.5 \text{ eV}$ . Для остальных энергий два расчета практически совпадают. Для энергий больше  $133 \text{ eV}$  низкоугловые минимумы становятся пологими и значения ДС при  $90^\circ$  уже не превышают значений ДС при меньших углах.

На рис. 2, б наш расчет повторяет тенденцию экспериментальных данных: кривая высокоугловых минимумов ДС с ростом энергии сначала плавно падает до  $119.7^\circ$  при  $9.6 \text{ eV}$ , затем достигает максимального значения угла  $141.7^\circ$  при  $32.1 \text{ eV}$  и снова плавно падает до значения угла  $96.6^\circ$  при  $500 \text{ eV}$ . Начиная с  $3.5 \text{ eV}$ , наш расчет вполне удовлетворительно согласуется и с теоретическими результатами из [26].

Для того чтобы среди этих минимумов найти критические, удобно изобразить энергетическую зависимость минимальных значений ДС. На рис. 3, а и б пред-

ставлены рассчитанные в данной работе такие зависимости. На рис. 3, а из всех низкоугловых минимумов самый глубокий расположен при  $(30.25 \text{ eV}, 71.05^\circ)$ , где  $|f|^2 = 6.5 \cdot 10^{-2}(a_0^2)$  и  $|g|^2 = 7.4 \cdot 10^{-5}(a_0^2)$ .

На рис. 3, б из всех высокоугловых минимумов три наименьших значения ДС в критических точках  $H1 = (8.44 \text{ eV}, 119.89^\circ)$ ,  $H2 = (38.25 \text{ eV}, 140.67^\circ)$  и  $H3 = (126.33 \text{ eV}, 118.12^\circ)$  мы определяем, как высокоугловые критические минимумы. В  $H1$ :  $|f|^2 = 5.9 \cdot 10^{-7}(a_0^2)$  и  $|g|^2 = 1.7 \cdot 10^{-4}(a_0^2)$ , в  $H2$ :  $|f|^2 = 1.8 \cdot 10^{-8}(a_0^2)$  и  $|g|^2 = 1.05 \cdot 10^{-5}(a_0^2)$  и, наконец, в  $H3$ :  $|f|^2 = 9.7 \cdot 10^{-9}(a_0^2)$  и  $|g|^2 = 1.45 \cdot 10^{-5}(a_0^2)$ . Как видно, самый глубокий минимум расположен в  $H2$ .

Для сравнения полученных значений критических точек мы смогли воспользоваться результатами лишь двух экспериментальных работ (табл. 1), посвященных измерениям положений критических минимумов в ДС упругого рассеяния электронов атомами аргона в области средних энергий. В [29] для энергий налетающих электронов выше  $30 \text{ eV}$  найдены значения трех критических точек. В [2] для определения точного положения критических точек особенно тщательно была исследована область энергий столкновений от  $30$  до  $60 \text{ eV}$  и область углов рассеяния от  $60$  до  $150^\circ$ . В результате они определили две критические точки. Сравнивая данные из [2] и [29], видим, что положение низкоуглового критического минимума отличается как по углу (на  $3^\circ$ ), так и по энергии (на  $15 \text{ eV}$ ), а положение высокоуглового критического минимума совпадает по углу, но отличается по энергии на  $5 \text{ eV}$ .

В [30] в релятивистском приближении с точным учетом обмена между налетающим электроном и электронами атома-мишени и с использованием ab initio поляризованного потенциала, найденного с помощью релятивистского метода поляризованных орбит, были рассчитаны угловые зависимости ДС для энергий и углов лишь из окрестности двух критических точек, найденных в [2]. Полученные в [30] положения критических минимумов хорошо согласуются с экспериментом [2], тем не менее для высокоуглового минимума отличие есть и по энергии, и по углу —  $2 \text{ eV}$  и  $2^\circ$ .

Как видно из табл. 1, теоретические расчеты подтверждают полученные в [2] угловое положение низкоуглового критического минимума и энергетическое положение высокоуглового критического минимума. Что касается различий в энергетическом положении низкоуглового минимума, то, как видно на рис. 2, а, в нашем расчете угловые положения минимумов ДС для энергии  $30\text{--}40 \text{ eV}$  плавно изменяются от  $71.1$  до  $68.5^\circ$  и находятся в пределах экспериментальной ошибки по углу.

Как следует из табл. 1, во всех трех теоретических работах получено угловое положение высокоуглового минимума  $H2$  вблизи  $141^\circ$ , тогда как в экспериментальных работах получено  $143.5^\circ$ . Энергетическое же положение этого минимума, по-видимому, находится

**Таблица 1.** Энергетические и угловые положения низкоугловых ( $E_L, \Theta_L$ ) и высокоугловых ( $E_H, \Theta_H$ ) критических минимумов

$E_L, \text{eV}$	$\Theta_L, \text{deg}$	$E_H, \text{eV}$	$\Theta_H, \text{deg}$	Ссылки
$56.1 \pm 0.7$	$65.73 \pm 0.05$	$42.3 \pm 0.9$ $132.3 \pm 0.3$ 126.1	$143.8 \pm 0.20$ $120.90 \pm 0.05$ 118.9	[29]
$41.3 \pm 0.02$	$68.5 \pm 0.3$	$37.3 \pm 0.02$	$143.5 \pm 0.3$	[2]
30.25	71.05	8.44 38.25 126.33	119.89 140.67 118.12	Данный расчет
31	70.4	8.76 38.29	119.22 140.83	Фазовые сдвиги из [26]
39.3	68.5	39.5	141	[30]

между 37 и 39 eV. По крайней мере из табл. 5 в [2] следует, что минимальные значения при  $143.5^\circ$  экспериментальные ДС имеют для энергий 37.3–39.3 eV.

Что касается критической точки  $H1$ , то необходимо отметить, что ярко выраженный глубокий минимум в ДС при 10 eV и вблизи  $120^\circ$  хорошо известен в литературе. Например, в данной работе угловое положение этого минимума равно  $119.68^\circ$ , в экспериментальных работах [2] и [24] — это  $115^\circ$ , в [27] и [31] —  $118$  и  $119^\circ$  соответственно, в теоретических работах [1] и [26] — это  $115$  и  $120^\circ$  соответственно. С учетом того что в ряде работ значения ДС приводятся с шагом в  $5^\circ$ , можно утверждать, что минимум при 10 eV находится между  $115$  и  $120^\circ$ . На рис. 3, *b* видно, что расчет с использованием фазовых сдвигов из [26] дает низкоэнергетическую зависимость минимальных значений ДС такого же вида, что и у нас. Различие же теоретических положений критического минимума  $H1$  составило всего 0.3 eV и  $0.7^\circ$ .

Поскольку энергетическое положение критической точки  $H3$  больше 100 eV, то мы можем сравнить положение этой точки с экспериментальными данными лишь из [29]. Отметим, во-первых, что энергетическое положение  $H3$  совпадает с теоретическим результатом (126.1 eV) из [29], и, во-вторых, что угловое положение  $H3$  всего лишь на  $0.8^\circ$  меньше теоретического и на  $1.8^\circ$  меньше экспериментального из [29].

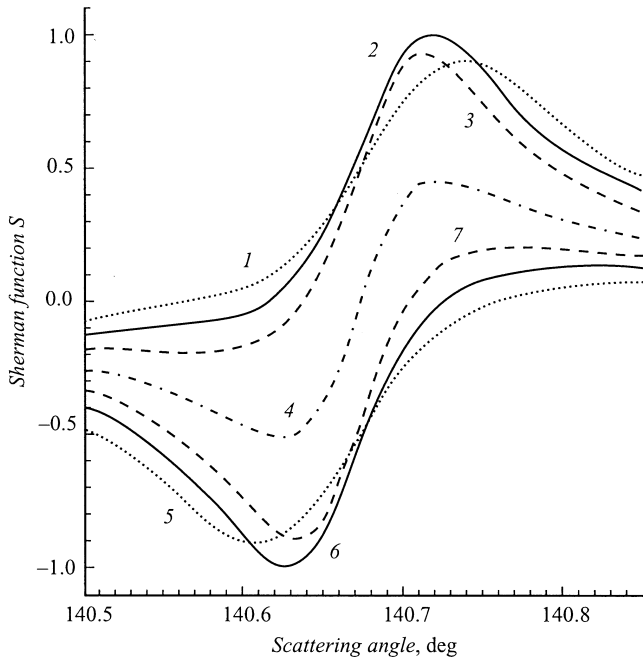
Для того чтобы найти энергии и углы, при которых функция Шермана  $S(E, \Theta)$  может достичь своих экстремальных значений, мы провели расчеты в малых окрестностях трех высокоугловых критических точек, где  $|g|^2 \geq |f|^2$ . Измерение параметров спиновой поляризации, как было отмечено в [9], задача достаточно трудная и наиболее тщательные экспериментальные анализы дают для функции Шермана неопределенность не менее  $\pm 5\%$ . Поэтому в табл. 2 приведены значения энергий и углов, при которых функция  $S(E, \Theta)$  приобретает свои экстремальные значения:  $S \approx 1$ , когда  $S \in [0.90, 1]$ , и  $S \approx -1$ , когда  $S \in [-1, -0.90]$ .

Как следует из табл. 2, функция Шермана достигает своих максимальных и минимальных значений в некоей, назовем ее экстремальной, окрестности критических точек. Для  $H1$  имеем, что при  $119.78^\circ S \approx 1$  в интервале энергий [8.41, 8.44 eV] и при  $119.99^\circ S \approx -1$  в интервале энергий [8.45, 8.48 eV]. Следовательно, размеры этой окрестности будут равны ( $0.07 \text{ eV}, 0.21^\circ$ ). Аналогично получим, что размеры экстремальной окрестности точки  $H3$  будут равны ( $1.37 \text{ eV}, 0.43^\circ$ ).

В отличие от этих критических точек энергия точки  $H2$  (38.25 eV) не принадлежит ее экстремальной окрестности. Как видно на рис. 4, для любого угла из окрестности  $H2$   $|S(38.25 \text{ eV}, \Theta)| \leq 0.5$  (кривая 4). Экстремальных же значений функция Шермана достигает при других энергиях из этой окрестности, а именно  $S \approx 1$  в интервале энергий 38.12–38.20 eV и углов  $140.71$ – $140.74^\circ$  (кривые 1–3) и  $S \approx -1$  в интервалах 38.29–38.17 eV и углов  $140.61$ – $140.63^\circ$  (кривые 5–7). Следовательно, возможны случаи, когда, для того чтобы найти энергии и углы полной спиновой поляризации, недостаточно, зная положения критических минимумов, исследовать лишь угловые окрестности этих минимумов, но необходимо также определять и их экстремальные энергетические окрестности.

**Таблица 2.** Экстремальные значения функции  $S(E, \Theta)$  в окрестностях критических точек:  $H1 = (8.44 \text{ eV}, 119.89^\circ)$ ,  $H2 = (38.25 \text{ eV}, 140.67^\circ)$  и  $H3 = (126.33 \text{ eV}, 118.12^\circ)$ 

	$E, \text{eV}$	$\Theta, \text{deg}$	$S$	$E, \text{eV}$	$\Theta, \text{deg}$	$S$
	$H1$	8.41	119.78	0.93	8.45	119.99
	8.43	119.78	1.0	8.46	119.99	-0.99
	8.44	119.78	0.99	8.48	119.99	-0.91
$H2$	38.12	140.74	0.90	38.29	140.63	-0.90
	38.17	140.72	1.0	38.32	140.63	-1.0
	38.20	140.71	0.93	38.37	140.61	-0.92
$H3$	125.63	118.34	-0.90	126.32	118.01	0.96
	126.07	118.26	-1.0	126.58	117.98	1.0
	126.31	118.23	-0.96	127.0	117.91	0.90



**Рис. 4.** Угловые зависимости функции Шермана  $S(E, \Theta)$  в окрестности критической точки  $H2$  для энергий  $E$  (eV). 1 — 38.12, 2 — 38.17, 3 — 38.20, 4 — 38.25, 5 — 38.37, 6 — 38.32, 7 — 38.29.

Поскольку предсказание размеров экстремальных окрестностей является предметом теоретического исследования, возникает вопрос, в какой мере эти размеры зависят от выбора того или иного потенциала. Для того чтобы ответить на этот вопрос, выразим функцию Шермана через вещественные и мнимые части амплитуд  $f$  и  $g$

$$S = \frac{2(\operatorname{Re} f \operatorname{Im} g - \operatorname{Im} f \operatorname{Re} g)}{(\operatorname{Re} f)^2 + (\operatorname{Im} f)^2 + (\operatorname{Re} g)^2 + (\operatorname{Im} g)^2}. \quad (9)$$

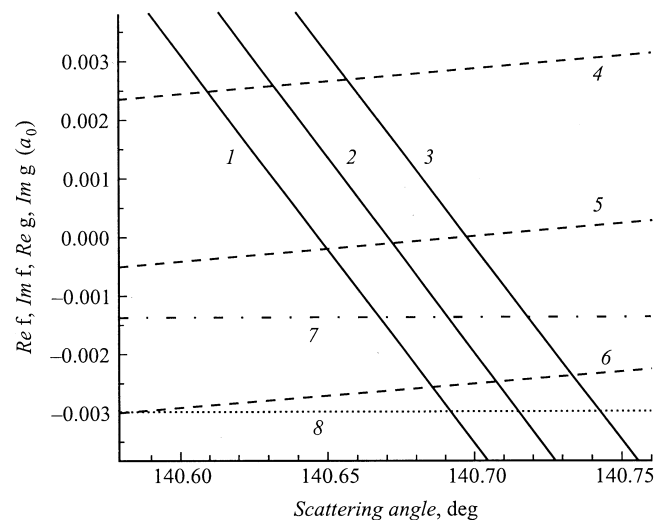
Как видно из (9)  $S = 1$ , когда  $\operatorname{Re} f = \operatorname{Im} g$  и  $\operatorname{Im} f = -\operatorname{Re} g$ , и  $S = -1$ , когда  $\operatorname{Re} f = -\operatorname{Im} g$  и  $\operatorname{Im} f = \operatorname{Re} g$ . Эти два случая продемонстрированы на рис. 5 на примере критической точки  $H2$ , в экстремальной окрестности которой (как видно из табл. 2)  $S = 1$  при 38.17 eV и  $140.72^\circ$  и  $S = -1$  при 38.32 eV и  $140.63^\circ$ .

Для всех энергий из этой окрестности значения амплитуды  $g$  практически совпадают со значениями для 38.25 eV, и, следовательно, будем считать, что для всей окрестности  $\operatorname{Re} g = -2.95 \cdot 10^{-3}(a_0)$  и  $\operatorname{Im} g = -1.36 \cdot 10^{-3}(a_0)$ . Для энергии 38.17 eV и угла  $140.72^\circ$  имеем, что  $\operatorname{Re} f = -1.47 \cdot 10^{-3}(a_0)$  и  $\operatorname{Im} f = 2.97 \cdot 10^{-3}(a_0)$ , т.е., действительно,  $\operatorname{Re} f \approx \operatorname{Im} g$  и  $\operatorname{Im} f \approx -\operatorname{Re} g$ . А для энергии 38.32 eV имеем, что для угла  $140.63^\circ$   $\operatorname{Re} f = 1.17 \cdot 10^{-3}(a_0)$  и  $\operatorname{Im} f = -2.78 \cdot 10^{-3}(a_0)$ , т.е., действительно,  $\operatorname{Re} f \approx -\operatorname{Im} g$  и  $\operatorname{Im} f \approx \operatorname{Re} g$ . Для промежуточных же энергий из этой окрестности, например для 38.25 eV, имеем,

что для любого угла из окрестности  $|\operatorname{Re} g| > |\operatorname{Re} f|$  и  $|\operatorname{Im} g| > |\operatorname{Im} f|$ , следовательно,  $|g|^2 > |f|^2$ . Таким образом, размеры экстремальной окрестности зависят как от величины  $|g|^2$ , так и от ширины минимума  $|f|^2$  на границах окрестности, где  $|f|^2 \approx |g|^2 = 1.1 \cdot 10^{-5}(a_0^2)$ .

Из (3) следует, что величина амплитуды  $g$  зависит от величины спин-орбитального расщепления фазовых сдвигов  $\Delta_l = \delta_l^- - \delta_l^+$ . Поскольку в данной работе из всех релятивистских поправок мы ограничились учетом лишь спин-орбитального взаимодействия (так называемый „полурелятивистский подход“), сравним наш расчет с полностью релятивистским, например, для энергии и угла, близких к критической точке  $H2$ , а именно для 40 eV и  $141^\circ$ . Используя фазы из [6] для  $l = 1, 2, 3$ , имеем, что  $\Delta_1 = 0.0110$  rad,  $\Delta_2 = 0.0017$  rad,  $\Delta_3 = -2 \cdot 10^{-4}$  rad и  $|g|^2 = 8.5 \cdot 10^{-6}(a_0^2)$ , а у нас  $\Delta_1 = 0.0119$  rad,  $\Delta_2 = 0.0016$  rad,  $\Delta_3 = 7 \cdot 10^{-5}$  rad и  $|g|^2 = 1 \cdot 10^{-5}(a_0^2)$ . Как видим, полурелятивистский подход дал почти такие же значения  $\Delta_l$  и  $|g|^2$ , что и релятивистский. Следовательно, использованные здесь потенциалы вполне удовлетворительно описывают взаимодействие налетающего электрона с атомом аргона на малых расстояниях от ядра и позволяют с большой долей достоверности рассчитать амплитуду  $g$ .

Что касается амплитуды  $f$ , то, как видно на рис. 5, в окрестности минимума  $H2$   $\operatorname{Im} f$  в отличие от  $\operatorname{Re} f$  имеет меньший наклон и для некоторых энергий вообще не пересекает нулевую ось. Таким образом, положение минимума  $|f|^2$  определяется прежде всего точкой пересечения  $\operatorname{Re} f$  нулевой оси, а минимальное значение  $|f|^2$  определяется в основном величиной  $\operatorname{Im} f$ .



**Рис. 5.** Угловые зависимости вещественных и мнимых частей амплитуд  $f$  и  $g$  в окрестности критической точки  $H2$ . Энергии  $E$ , eV:  $\operatorname{Re} f$ : 1 — 38.32, 2 — 38.25, 3 — 38.17;  $\operatorname{Im} f$ : 4 — 38.17, 5 — 38.25, 6 — 38.32;  $\operatorname{Im} g$ : 7 — 38.25;  $\operatorname{Re} g$ : 8 — 38.25.

Очевидно, что использование в расчетах иного оптического потенциала и прежде всего иного поляризационного потенциала даст другую энергетическую зависимость фазовых сдвигов, что приведет к иному положению критического минимума в ДС. Вместе с тем расчет  $\text{Re } f$  и  $\text{Im } f$  с использованием аппроксимированных фазовых сдвигов из [26] в малой окрестности критического минимума (38.29 eV, 140.83°) дал такое же поведение  $\text{Re } f$  и  $\text{Im } f$ , что и на рис. 5. А именно  $\text{Re } f$  круто пересекают нулевую ось, причем угол пересечения, а следовательно, и угол минимума ДС с увеличением энергии сдвигается в сторону меньших углов (см. также рис. 2, b), а  $\text{Im } f$ , имея существенно меньший наклон, чем  $\text{Re } f$ , с ростом энергии из области положительных переходят в область отрицательных значений. Ширина минимума ДС, где  $|f|^2 \approx 1.1 \cdot 10^{-5}(a_0^2)$ , для 38.29 eV составила 0.1°, как и у нас для 38.25 eV.

Для высокоуглового критического минимума  $H1$  расчеты с аппроксимированными фазовыми сдвигами из [26] дали в малой окрестности минимума такое же поведение  $\text{Re } f$  и  $\text{Im } f$ , как и у нас, а ширина минимума ДС, где для 8.76 eV  $|f|^2 \approx |g|^2 = 1.7 \cdot 10^{-4}(a_0^2)$ , составила 0.05°, как и у нас для 8.44 eV.

Что касается низкоуглового критического минимума, то поскольку в его малой окрестности  $\text{Im } f$ , так же как и  $\text{Re } f$ , круто пересекают нулевую ось, минимальные значения  $|f|^2$  в одинаковой мере определяются как  $\text{Im } f$ , так и  $\text{Re } f$ . Как видно из рис. 1 и 2, a, полученные нами угловые положения низкоугловых минимумов ДС для энергий от 20 до 50 eV превосходно согласуются с результатами из [26]. Однако, как видно на рис. 3, a, при этих энергиях низкоугловые минимальные значения ДС оказались более чувствительными в точках пересечения  $\text{Re } f$  и  $\text{Im } f$  к небольшим различиям в энергетических зависимостях фазовых сдвигов, рассчитанных в [26] и в данной работе, чем в случае высокоугловых минимумов (рис. 3, b). Поэтому для экспериментального обнаружения полной спиновой поляризации электронов упруго рассеянных атомами аргона мы предлагаем использовать значения экстремальных окрестностей высокоугловых критических точек.

В заключение отметим, что рассчитанные в данной работе положения минимумов дифференциальных сечений хорошо согласуются с экспериментом. Получено превосходное согласие энергетических и угловых положений минимума  $H2$  с экспериментом [2] и минимумов  $H1$  и  $H3$  с другими теоретическими расчетами. Рассчитанные нами значения энергий и углов полной спиновой поляризации рассеянных электронов в окрестности высокоугловых минимумов могут быть рекомендованы при постановке новых поляризационных экспериментов. Если же в последующих исследованиях будут уточнены положения критических минимумов в ДС, то тем не менее найденные здесь экстремальные окрестности критических точек по-прежнему могут быть использованы для оценки значений энергий и углов

полной спиновой поляризации рассеянных электронов при выполнении в окрестностях этих минимумов условий  $|g|^2 \geq |f|^2$ .

Автор признателен Б. Маринковичу (Белград) за проявленный интерес к работе и Е. Ремета за полезные дискуссии.

## Список литературы

- [1] Nahar S.N., Wadehra J.M. // Phys. Rev. A. 1987. Vol. 35. N 5. P. 2051–2064.
- [2] Panajotović R., Filipović D., Marinković B. et al. // J. Phys. B. 1997. Vol. 30. P. 5877–5894.
- [3] Mehr J. // Z. Phys. 1967. Vol. 198. P. 345–350.
- [4] Schackert K. // Z. Phys. 1968. Vol. 213. P. 316–322.
- [5] Beerlage M.J.M., Zhou Qing, Van der Wiel M.J. // J. Phys. B. 1981. Vol. 14. P. 4627–4635.
- [6] Sienkiewicz J.E., Baylis W.E. // J. Phys. B. 1988. Vol. 21. N 5. P. 885–894.
- [7] Nahar S.N., Wadehra J.M. // Phys. Rev. A. 1991. Vol. 43. N 3. P. 1275–1289.
- [8] Khare S.P., Raj D. // J. Phys. B. 1993. Vol. 26. P. 4807–4814.
- [9] Kessler J. // Adv. At. Mol. and Opt. Phys. 1991. Vol. 27. P. 81–163.
- [10] Калоджеро Ф. Метод фазовых функций в теории потенциального рассеяния. Пер. с англ. М.: Мир, 1972. 292 с.
- [11] Бабинов В.В. Метод фазовых функций в квантовой механике. М.: Наука, 1988. 256 с.
- [12] Корн Г., Корн Т. Справочник по математике. Пер. с англ. М.: Наука, 1977. 831 с.
- [13] Strand T.G., Bonham R.A. // J. Chem. Phys. 1964. Vol. 40. N 6. P. 1686–1691.
- [14] Cowan R. The Theory of Atomic Structure and Spectra, University of California Press (Berkeley, Los Angeles, London), 1981. 731 p.
- [15] Келемен В.И., Ремета Е.Ю., Сабад Е.П. // ЖТФ. 1991. Т. 61. Вып. 2. С. 46–50.
- [16] Kelemen V.I., Remeta E.Yu., Sabad E.P. // J. Phys. B. 1995. Vol. 28. P. 1527–1546.
- [17] Hara S. // J. Phys. Soc. Jap. 1967. Vol. 22. N 3. P. 710–718.
- [18] Sur S., Ghosh A.S. // Indian. J. Phys. B. 1983. Vol. 57. N 1. P. 67–70.
- [19] Радциг А.А., Смирнов Б.М. Параметры атомов и атомных ионов. Справочник. М., 1986. 344 с.
- [20] Miller T.M., Bederson B. // Advances in Atomic and Molecular Physics / Ed. D.R. Bates, B. Bederson. New York: Academic Press, 1977. Vol. 13. P. 1–55.
- [21] Бэрк Ф.Дж. Потенциальное рассеяние в атомной физике. М.: Атомиздат, 1980. 101 с.
- [22] Frost L.S., Phelps A.V. // Phys. Rev. 1964. Vol. 136. N 6A. P. A1538–A1545.
- [23] Гуськов Ю.К., Саввов П.В., Слободянюк В.А. // ЖТФ. 1978. Т. 48. Вып. 2. С. 277–284.
- [24] Srivastava S.K., Tanaka H., Chutjian A. et al. // Phys. Rev. A. 1981. Vol. 23. P. 2156–2166.
- [25] Williams J.F., Willis B.A. // J. Phys. B. 1975. Vol. 8. P. 1670–1682.
- [26] McEachran R.P., Stauffer A.D. // J. Phys. B. 1983. Vol. 16. P. 4023–4038.

- [27] *Furst J.E., Golden D.E.* et al. // Phys. Rev. A. 1989. Vol. 40. P. 5592–5600.
- [28] *Filipović D.M., Marinković B.* // Proc. XX Intern. Conf. on Phys. Electronic and Atomic Collisions. Vienna, 1997. P. TH005.
- [29] *Kessler J., Liedtke J., Lukas C.B.* // Physics of Ionized Gases (Dubrovnik) / Ed. B. Navinšek. Ljubljana: J. Stefan Institute, 1976. P. 61.
- [30] *Sienkiewicz J.E., Telega S., Konopińska V.* // Proc. 7<sup>th</sup> European Conf. on Atomic and Molecular Physics (ECAMP). Berlin, 2001. P. 68; *Sienkiewicz J.E., Konopińska V., Telega S., Syty P.* // J. Phys. B. 2001. Vol. 34. P. L409–L418.
- [31] *Williams J.F.* // J. Phys. B. 1979. Vol. 12. P. 265–282.