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

ПОТЕНЦІАЛЬНЕ РОЗСІЮВАННЯ ЕЛЕКТРОНА НА АТОМІ ФОСФОРУ

Вперше теоретично досліджено пружне розсіювання електронів на атомах фосфору в області енергій зіткнень 0,01–200 еВ. Інтегральні і диференціальні перерізи розраховано у спін-поляризованому наближенні безпараметричного дійсного оптичного потенціалу. Повна та спінові електронні густини, електростатичний і спінові обмінні і кореляційно-поляризаційні потенціали атома фосфору знайдено у наближенні локальної спінової густини теорії функціонала густини. Застосовуючи різні наближення детально вивчено особливості низькоенергетичної, до 10 еВ, поведінки інтегральних перерізів, які порівняно з даними для сусідніх атомів сірки, хлору та аргону. Спінова обмінна асиметрія розсіювання електронів на атомі фосфору, з напівзаповненою валентною $3p^3$-підоболонкою, досліджена з врахуванням залежності від спіну обмінної та поляризаційної взаємодій.

Ключові слова: оптичний потенціал, спін-поляризований, асиметрія, диференціальний переріз, інтегральний переріз, фазовий зсув, парціальний переріз, критичний мінімум, мінімум Рамзауера–Таунсенда.

1. Вступ

При розсіюванні електронів легкими атомами з незаповненою валентною $3p$-підоболонкою певний інтерес становить виявлення та вивчення впливу поступового заповнення цієї підоболонки на поведінку характеристик розсіювання. Важливим також є порівняння такої поведінки з даними розсіювання на подібних багатоелектронних атомах. У даній роботі нами, використовуючи метод оптичного потенціалу, розраховано перерізи пружного розсіювання електрона атомом фосфору, електронна конфігурація основного стану якого є $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^3\ ^4$S. Перерізи порівнюються з відповідними розрахованими характеристиками: інтегральними та диференціальними (ДП) перерізами розсіювання електрона на основних станах атомів S($3p^4\ ^3$P) [1, 2], Cl($3p^5\ ^2$P) [3–5], Ar($3p^6\ ^1$S) [4]. Для атома Ar ми також надаємо експериментальні дані разом з теоретичними оцінками [4, 6–8] та розрахунками нашим методом. У роботах [1, 3] розрахунки проведені багатоконфігураційним методом Хартрі–Фока (від 109 до 170 конфігурацій для атома S, та від 130 до 167 для Cl) без врахування релятивістських ефектів. У роботі [2] використано нерелятивістське наближення сильного зв'язку (враховано 27 станів) модифікованого методу R-матриці з B-сплайновим представленням електронних орбіталей та врахуванням їх неортогональності. Цей метод у напіврелятивістському наближенні Брейта–Паулі з псевдостанами використано у [5]. У роботі [4] теоретично досліджується нерелятивістське пружне та непружне розсіювання електрона атомами аргону та хлору методом R-матриці з псевдостанами – 4 стани для Ar та 17 станів для Cl. Як і в роботі [5] ці псевдостани

© В.І. КЕЛЕМЕН, М.М. ДОВГАНИЧ, Є.Ю. РЕМЕТА, 2014

в [4] введено для врахування дипольної поляризації електронної оболонки мішені. У роботі [6] для розрахунків використано метод R-матриці також у нерелятивістському наближенні. Таке порівняльне зіставлення результатів розрахунків є важливим у випадках, коли проведення експериментального розсіювання частинок на хімічно активних атомах має великі труднощі. З результатів порівняння також стає ясною теоретична достовірність розрахованих характеристик.

Зауважимо, що подібне порівняння раніше було теоретично розглянуто у роботі [9] на прикладі пар атомів N, Ne та P, Ar. Було використано нерелятивістський опис з точною обмінною взаємодією та модельним врахуванням поляризаційної взаємодії.

Атомні системи з однією напівзаповненою підоболонкою описують у спін-поляризованному наближенні [10, 11], тобто з врахуванням спінової поляризації електронних підоболонок. Відповідно до правила Хунда [10] основний стан таких систем має максимальний спін, який визначається електронами напівзаповненої підоболонки. Вся електронна оболонка атома розбивається на дві заповнені спінові підоболонки. Для знаходження повної і спінових електронних густин та потенціалів розсіювання нами використовується наближення локальної спінової густини (ЛСГ) теорії функціонала густини (ТФГ) [11].

Обмінна взаємодія налітаючого електрона з фіксованим напрямком спіну зі спін-поляризованим атомом можлива лише з електронами відповідної спінової підоболонки. Отже, розсіювання електронів на атомі фосфору може бути розглянуто у двох випадках: коли напрямки спінів налітаючого електрона та атома збігаються – розсіювання з паралельними спінами та коли ці спіни мають протилежні напрямки – розсіювання з антипаралельними спінами.

Від спіну системи залежить також поляризаційна взаємодія налітаючого електрона з атомом. У внутрішній області атома поляризаційна взаємодія визначається кореляційною взаємодією налітаючого електрона з електронами мішені (див., наприклад, [12, 13]). Ця взаємодія в ТФГ описується кореляційним функціоналом, який у наближенні ЛСГ для неоднорідного спін-поляризованного електронного газу визначається густиною кореляційної енергії. В роботі [14] визначені залежні від спіну поляризаційні потенціали.

У даній роботі розрахунки характеристик розсіювання проводимо методом дійсного оптичного потенціалу (ОП). Отримані в результаті розрахунків перерізи паралельного та антипаралельного розсіювання дають змогу розрахувати спінову обмінну асиметрію розсіювання електронів [15] (див. також [14, 16]).

2. Теоретичний метод

Електронна конфігурація основного стану атома фосфору з напівзаповненою $3p^3$-підоболонкою має максимальний спін $3/2$, тобто електрони цієї підоболонки за правилом Хунда мають співнаправлені спіни. Це дозволяє зробити розбиття всієї електронної оболонки атома на дві заповнені спінові оболонки – 9 електронів умовного напрямку спіну уверх ($sp =\uparrow$) та 6 електронів з спіном униз ($sp =\downarrow$). З атомного розрахунку отримуємо дві електронні спінові $\rho_\uparrow(r)$ і $\rho_\downarrow(r)$ та повну $\rho(r) = \rho_\uparrow(r) + \rho_\downarrow(r)$ густини.

Розсіювання електрона на атомі фосфору може бути розглянуто для двох випадків. Коли напрямки спінів налітаючого електрона і атома збігаються – розсіювання з паралельними спінами ($\uparrow\uparrow$, загальний спін системи 2) та коли ці спіни мають протилежні напрямки – розсіювання з антипаралельними спінами ($\downarrow\uparrow$, загальний спін 1). При цьому, розсіювання електрона таким спін-поляризованим атомом описується двома дійсними спіновими оптичними потенціалами ($\lambda = \uparrow\uparrow, \downarrow\uparrow$):

$$V^\lambda_{\rm opt}(r,E) = V_{\rm S}(r) + V^\lambda_{\rm ex}(r,E) + V^\lambda_{\rm pol}(r) + \\ + V_{\rm R}(r,E) + V^\pm_{\rm so}(r). \qquad (1)$$

Залежний від спіну потенціал $V^\lambda_{\rm opt}(r,E)$ – це сума таких потенціалів взаємодії: статичного $V_{\rm S}(r)$, спінових обмінного $V^\lambda_{\rm ex}(r,E)$ і поляризаційного $V^\lambda_{\rm pol}(r)$, релятивістського $V_{\rm R}(r,E)$ та спін-орбітальної взаємодії $V^\pm_{\rm so}(r,E)$. Потенціал $V_{\rm R}(r,E)$ має вигляд (див. [17–19]):

$$V_{\rm R}(r,E) = -\frac{\alpha^2}{2}V_{\rm S}^2 + \frac{\chi}{4}\frac{d^2V_{\rm S}}{dr^2} + \frac{3\chi^2}{8}\left(\frac{dV_{\rm S}}{dr}\right)^2, \qquad (2)$$

де $\chi = \alpha^2/[2 + \alpha^2(E - V_{\rm S})]$, α – стала тонкої структури.

Позначення $'\pm'$ в (1) відповідає величині повного кутового моменту електрона $j = \ell \pm 1/2$, ℓ – орбітальний момент електрона. У виразах (1) та (2)

E – енергія налітаючого електрона (використовується атомна система одиниць $e = m_e = \hbar = 1$).

Як і в наших попередніх роботах (див., наприклад, [17, 20–22] та посилання там), розрахунок з використанням дійсних потенціалів (1) нижче будемо називати RSEP-наближенням, а розрахунки з (1) без врахування потенціалу $V_{\rm R}(r, E)$ – SEPSo-наближенням.

Статичний потенціал $V_{\rm S}(r)$ та електронні густини $\rho(r)$ і $\rho_{\rm sp}(r)$ обчислені нами чисельно у самоузгодженому атомному розрахунку у рамках скалярно-релятивістського та ЛСГ наближень ТФГ з виключенням енергії самодії електронів (див., [23] та посилання там). Ці величини апроксимовані аналітичними виразами з [24] (див. рівняння (A1), (A2) та відповідні параметри в Додатку). Потенціал спін-орбітальної взаємодії $V_{\rm so}^{\pm}(r)$ ($\sim dV_{\rm S}(r)/dr$) використовуємо у вигляді виразу (5) з [17] (див. також [25] та посилання там).

Для врахування обмінної взаємодії ми використовуємо наближення вільного електронного газу (див., [23]). Використання двох значень імпульсу Фермі $k_{\rm F}^{sp}(r) = [6\pi^2\rho_{\rm sp}(r)]^{1/3}$ у спін-поляризованому наближенні розсіювання дає два обмінних потенціали $V_{\rm ex}^{\lambda}(r, E)$: $V_{\rm ex}^{\uparrow\uparrow}$ з $k_{\rm F}^{\uparrow}$ та $V_{\rm ex}^{\downarrow\uparrow}$ з $k_{\rm F}^{\downarrow}$. Потенціал іонізації атома фосфору $I = 10{,}4992$ еВ, необхідний для обмінного потенціалу, отримано нами у тому самому наближенні, що і статичний потенціал $V_{\rm S}$.

Поляризаційний потенціал складається із двох частин [12, 13] – на малих (SR) та великих (LR) відстанях:

$$V_{\rm pol}^{\lambda}(r) = \begin{cases} Vp_{\lambda}^{\rm SR}(r), & r \le r_c^{\lambda} \\ Vp^{\rm LR}(r), & r > r_c^{\lambda}, \end{cases} \tag{3}$$

де r_c^{λ} точки перетину двох частин потенціалу (див. нижче). Як було зазначено вище, у внутрішній області атома $V_{\rm pol}^{\lambda}(r)$ визначається кореляційною взаємодією налітаючого електрона з електронами мішені. В наближенні ЛСГ ТФГ функціонал цієї взаємодії є

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

Густина енергії $\varepsilon_c[\rho_{\uparrow}(r), \rho_{\downarrow}(r)] \equiv \varepsilon_c[r_s(r), \zeta(r)]$ визначається функцією спінової поляризації $\zeta(r) = [\rho_{\uparrow}(r) - \rho_{\downarrow}(r)]/\rho(r)$ і радіусом Вігнера $r_s(r) = \{3/[4\pi\rho(r)]\}^{1/3}$ та обчислюється за формулами з [14]. На відстанях $r \le r_c^{\lambda}$ поляризаційний потенціал, отриманий варіаційно з (4), має вигляд [14, 16]:

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

В (5) верхні знаки "+" та "−" відповідають випадку $\lambda = \uparrow\uparrow$, а нижні знаки "−" та "+" випадку $\lambda = \downarrow\uparrow$. Похідні $d\varepsilon_c/dr_s$ та $\partial\varepsilon_c/\partial\zeta$ в (5) визначені в [14] (див., також, Додаток B в [16]).

На відстанях $r > r_c^{\lambda}$ поляризаційний потенціал має відомий асимптотичний вигляд $Vp^{\rm LR}(r) = -\alpha_d(0)/2r^4$, де $\alpha_d(0)$ – дипольна статична поляризовність. Дві частини поляризаційного потенціалу, $Vp_{\lambda}^{\rm SR}(r)$ та $Vp^{\rm LR}(r)$ перетинаються перший раз в точках: $r_c^{\uparrow\uparrow} = 6{,}456\ a_0$ для паралельного $\lambda = \uparrow\uparrow$ та $r_c^{\downarrow\uparrow} = 3{,}980\ a_0$ для антипаралельного $\lambda = \downarrow\uparrow$ розсіювання (тут a_0 – атомна одиниця довжини, яка дорівнює першому радіусу Бора атома водню). Поляризовність атома фосфору $\alpha_d(0) = 30{,}65\ a_0^3$ отримана нами у локальному наближенні часозалежної ТФГ [23, 26] з релятивістським ефективним локальним потенціалом (див. [22, 27] та посилання там).

Відзначимо, що у роботах [14, 16, 28] на прикладі ряду атомів було продемонстровано, що при обчисленні асиметрії розсіювання електрона атомом, який має напівзаповнену валентну підоболонку, недостатньо враховувати спінову залежність тільки обмінної взаємодії, а потрібно також враховувати спінову залежність поляризаційної взаємодії.

Під час розрахунків перерізів розсіювання у широкому інтервалі енергій можливе використання усередненого оптичного потенціалу:

$$V_{\rm opt}^{\rm av}(r, E) = V_{\rm S}(r) + V_{\rm ex}^{\rm av}(r, E) + V_{\rm pol}^{\rm av}(r) + \\ + V_{\rm R}(r, E) + V_{\rm so}^{\pm}(r), \tag{6}$$

де $V_{\rm ex}^{\rm av} = (V_{\rm ex}^{\uparrow\uparrow} + V_{\rm ex}^{\downarrow\uparrow})/2$ та потенціал $V_{\rm pol}^{\rm av}$ має усереднену короткодійну частину $Vp_{\rm av}^{\rm SR} = (Vp_{\uparrow\uparrow}^{\rm SR} + Vp_{\downarrow\uparrow}^{\rm SR})/2$. Усереднений оптичний потенціал зручно використовувати у громіздких розрахунках для пошуку критичних мінімумів в ДП та точок повної спінової поляризації розсіяних електронів.

У результаті розрахунків з потенціалами $V_{\rm opt}^{\lambda}(r, E)$ (1) маємо чотири набори парціальних дійсних фазових зсувів $\delta_{\ell}^{\lambda,\pm}(E)$. Для розрахунків фаз, як і в наших попередніх роботах [20–23, 25,

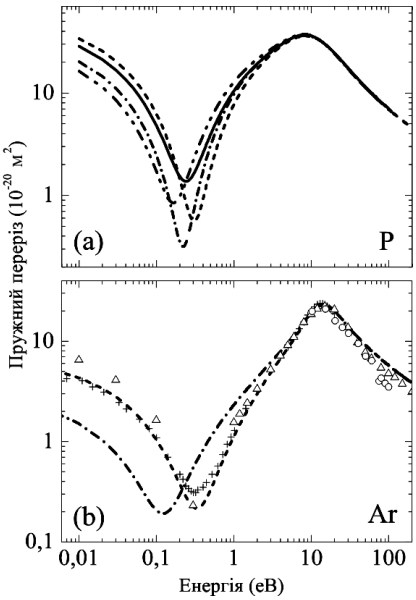

Рис. 1. Енергетична залежність перерізу пружного розсіювання (в одиницях 10^{-20} м^2) електронів атомами фосфору (a) та аргону (b). Розрахунки в релятивістському RSEP-наближенні: суцільна лінія – спін-поляризований (SPA) підхід; штрихова лінія – спін-неполяризований (LA) підхід. Розрахунки з врахуванням спін-орбітальної взаємодії в SEPSo-наближенні: пунктир з двома крапками – SPA підхід; пунктир з крапкою – LA підхід. Експериментальні дані: +, [7]; Δ, [33]; ○, [34]

27–30], використано метод фазових функцій [31, 32]. Опис чисельного розв'язку фазових рівнянь наведено в [20–23, 25]. Маючи фазові зсуви $\delta_\ell^{\lambda,\pm}$, можемо знайти "прямі" амплітуди розсіювання:

$$f^\lambda(E,\theta) = \frac{1}{2ik}\sum_{\ell=0}^{\infty}\Big\{(\ell+1)[\exp(2i\delta_\ell^{\lambda,+})-1] + \\ + \ell[\exp(2i\delta_\ell^{\lambda,-})-1]\Big\}P_\ell(\cos\theta) \quad (7)$$

та амплітуди розсіювання з "переворотом" спіна

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

де θ – кут розсіювання, $k=(2E)^{1/2}$ – імпульс налітаючого електрона, $P_\ell(\cos\theta)$ – многочлени Лежандра, $P_\ell^1(\cos\theta)$ – приєднані функції Лежандра першого роду. Спінові диференціальні перерізи паралельного $d\sigma^{\uparrow\uparrow}/d\theta$ та антипаралельного $d\sigma^{\downarrow\uparrow}/d\theta$ пружного розсіювання визначаються цими амплітудами за формулою

$$\frac{d\sigma^\lambda(E,\theta)}{d\theta} = |f^\lambda(E,\theta)|^2 + |g^\lambda(E,\theta)|^2. \quad (9)$$

Кутову залежність функції спінової обмінної асиметрії $A(E,\theta)$ в пружному розсіюванні визначаємо за виразом

$$A(E,\theta) = (d\sigma^{\downarrow\uparrow}/d\theta - d\sigma^{\uparrow\uparrow}/d\theta)/(d\sigma^{\downarrow\uparrow}/d\theta + d\sigma^{\uparrow\uparrow}/d\theta). \quad (10)$$

Усереднений диференціальний переріз пружного розсіювання знаходимо за формулою

$$\frac{d\sigma}{d\theta} = \frac{1}{2}\left(\frac{d\sigma^{\uparrow\uparrow}}{d\theta} + \frac{d\sigma^{\downarrow\uparrow}}{d\theta}\right). \quad (11)$$

Важливі для застосувань у фізиці плазми інтегральні перерізи розсіювання – пружний (σ_{el}), передачі імпульсу ($\sigma_{\rm mom}$) та в'язкості ($\sigma_{\rm vis}$) – визначаємо за загальною формулою як середні спінових ($\uparrow\uparrow$), ($\downarrow\uparrow$) перерізів:

$$\sigma(E) = (\sigma^{\uparrow\uparrow}(E) + \sigma^{\downarrow\uparrow}(E))/2. \quad (12)$$

Для розрахунків спінових інтегральних перерізів використовуємо вирази з [14].

3. Обговорення результатів

На рис. 1–3 наведено розраховані інтегральні перерізи потенціального розсіювання електрона атомом фосфору у напіврелятивістському (SEPSo) та релятивістському (RSEP) наближеннях з використанням локальних спін-неполяризованого (LA) та спін-поляризованого (SPA) підходів. Вони порівнюються з даними для атома аргону – експериментальними [7, 8, 33, 34] та розрахованими нами у RSEP та SEPSo наближеннях. Наші результати мають непогану узгодженість з даними роботи [9] – для атома фосфору вона якісна, а для атома аргону як якісна, так і кількісна.

Поведінка розрахованих для фосфору перерізів на рис. 1–3 є подібною – глибокий мінімум та досить великий максимум – та якісно збігається з експериментальною для перерізів розсіювання на атомі аргону [7, 8, 33, 34] (див. також [7, 8]). Відзначимо, що ці перерізи для аргону добре описуються нашими розрахунками у RSEP-наближенні. Нехтування в SEPSo наближенні потенціалом

$V_{\rm R}(r,E)$ (2) призводить до зсуву мінімумів у бік менших енергій та до менших значень перерізів для припорогових енергій (див. рис. 1, *b* – 3, *b*). Бачимо, що, незважаючи на те, що атоми фосфору та аргону є легкими, вплив релятивістських ефектів досить значний. У випадку фосфору цей вплив існує для обох наближень – спін-поляризованного та більш грубого спін-неполяризованного (рис. 1, *a*–3, *a*). При енергіях максимумів перерізів – 10 еВ для пружного, 6 еВ для передачі імпульсу і 4 еВ для в'язкості – вказані ефекти та різниця у локальному описі перестають впливати на поведінку характеристик. Для фосфору поведінка і величина пружного перерізу до 10 еВ, в основному, зобов'язана перерізу антипаралельного розсіювання.

Поведінка інтегральних перерізів пружного розсіювання та передачі імпульсу для атома фосфору подібна до тієї, що є для атомів сірки [1] та хлору [3]. При цьому, у випадку атома S сумарний переріз в основному складається з квартетного перерізу [1], а у випадку атома Cl з триплетного [3].

У роботі [2] переріз пружного розсіювання електрона на атомі сірки розраховано з використанням наближень 3-х, 15-ти та 27-ми станів розкладу сильного зв'язку модифікованого *R*-матричного методу. Поведінка перерізу у всіх випадках подібна до розсіювання на атомах P, S, Cl. Перше наближення значно відрізняється від 2-го та 3-го у всій області енергій зіткнень – від порога до 40 еВ. Ці два наближення дають результати близькі один до одного, але у припороговій області енергій, <1,5 еВ, кращим є наближення з врахуванням 27-ми станів – дає глибший мінімум та меншу величину його енергії. Це свідчить про важливість ефектів поляризації електронної оболонки атома електроном при розсіюванні.

Енергія мінімуму пружного перерізу розсіювання електрона атомом хлору у [5] має малу величину, ≈0,2 еВ. Вона є достатньо чутливою до моделі теоретичного опису процесу розсіювання. Це особливо стосується опису структури атома-мішені. Тільки з врахуванням поляризаційної взаємодії з'являється згаданий вище мінімум в перерізі. У роботі [5] переріз при дуже малій енергії 0,001 еВ дорівнює $\approx 7\cdot 10^{-20}$ м^2, що трохи більше за переріз при 0,01 еВ (див. таблицю) та значно менше перерізів в розрахунках [3, 4]. Поведінка інтегрального перерізу передачі імпульсу $\sigma_{\rm mom}$ по-

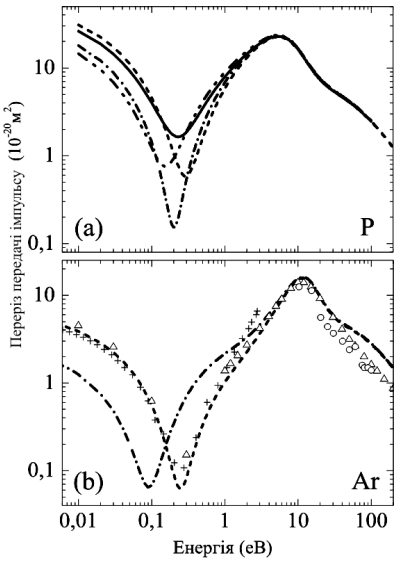

Рис. 2. Енергетична залежність перерізу передачі імпульсу (в одиницях 10^{-20} м^2) при пружному розсіюванні електронів атомами фосфору (*a*) та аргону (*b*). Розрахунки в релятивістському RSEP-наближенні: суцільна лінія – SPA підхід; штрихова лінія – LA підхід. Розрахунки в SEPSo-наближенні: пунктир з двома крапками – SPA підхід; пунктир з крапкою – LA підхід. Експериментальні дані: +, [8]; Δ, [33]; ∘, [34]

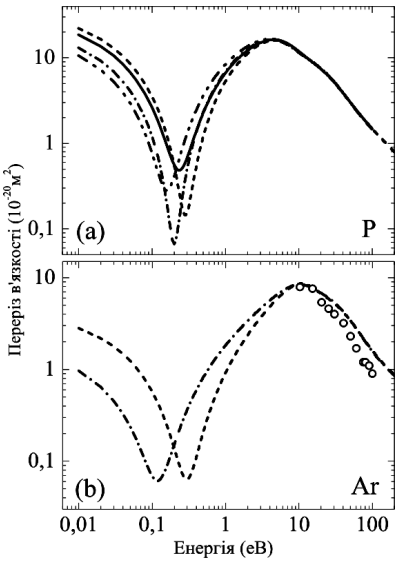

Рис. 3. Енергетична залежність перерізу в'язкості (в одиницях 10^{-20} м^2) при пружному розсіюванні електронів атомами фосфору (*a*) та аргону (*b*). Розрахунки в релятивістському RSEP-наближенні: суцільна лінія – SPA підхід; штрихова лінія – LA підхід. Розрахунки в SEPSo-наближенні: пунктир з двома крапками – SPA підхід; пунктир з крапкою – LA підхід. Експериментальні дані: ∘, [34]

Параметри особливостей інтегрального пружного перерізу розсіювання електрона на атомах P, S, Cl, Ar

Метод	a, a_0	σ (0,01 eB), 10^{-20} м^2	$E_{\rm RT}$, eB	$\sigma_{\rm RT}$, 10^{-20} м^2	$E_{\max}$, eB	$\sigma_{\max}$, 10^{-20} м^2
			P($3p^3$)			
RSEP_LSA	(p) –3,380 (a) –3,621	28,541	0,24	1,3715	8,2	36,976
RSEP_LA	–3,780	33,867	0,31	0,5591	8,45	36,079
SEPSo_LSA	(p) –2,745 (a) –2,750	16,318	0,17	0,8467	7,98	37,253
SEPSo_LA	–3,007	20,156	0,22	0,3163	8,2	36,313
			S($3p^4$)			
[1]	(q) –4,2558 (d) –1,6273	∼30	0,475	5,4439	8,50	30
[2]	–	∼40	∼0,5	∼5	∼8,4	∼25
			Cl($3p^5$)			
[3]	(t) –2,7072 (s) –1,4778	>30	0,9524	2,4483	10,20	30
[4]	–	∼25	∼0,7	∼2,1	11	26
[5]	(t) –1,495 (s) –1,035	5	≈0,2	2,5	∼13	23,2
			Ar($3p^6$)			
RSEP_LA	–1,308	4,309	0,33	0,2157	14,5	22,995
[7]	–1,365	4,04	0,3	0,31	13,02	23,80
[33]	–	6,5	0,3	0,23	15	22
[4]	–	2,5(∼0,04 eB)	∼0,27	∼0,3	∼22,5	13,75
[34]	–	–	–	–	15,3	21
[40]	–	–	–	–	15	22,28
[6]	–	–	–	–	14	23,661

П о з н а ч е н н я: p – паралельно, a – антипаралельно, q – квартет, d – дублет, t – триплет, s – синглет.

дібна до пружного перерізу – мінімум при 0,1 eB, $\sigma_{\rm mom} \approx 1{,}25{\cdot}10^{-20}$ м^2, максимум при 10 eB, $\sigma_{\rm mom} = 15{,}6{\cdot}10^{-20}$ м^2. При малих енергіях він дорівнює: $\sigma_{\rm mom}(0{,}001\ \text{eB}) = 3{,}75 \cdot 10^{-20}$ м^2, $\sigma_{\rm mom}(0{,}01\ \text{eB}) \approx 6 \cdot 10^{-20}$ м^2, що також значно менше перерізів з [3, 4].

Енергія мінімуму пружного перерізу розсіювання електрона атомом хлору у [4] має немалу величину, ≈0,7 eB. Енергія такого самого мінімуму для розсіювання електрона атомом аргону [4] має меншу величину, ≈0,27 eB. Ці енергії є достатньо чутливими до кількості врахованих псевдостанів, що пов'язані з описом поляризаційної взаємодії у розсіюванні. Поведінка інтегральних перерізів передачі імпульсу $\sigma_{\rm mom}$ подібна до пружних перерізів: для атома Cl – мінімум при 0,7 eB, переріз $1{,}8 \cdot 10^{-20}$ м^2, максимум при 9 eB, переріз $18 \cdot 10^{-20}$ м^2; для атома Ar – мінімум при 0,3 eB, $0{,}2{\cdot}10^{-20}$ м^2, максимум при 11,25 eB, $16{\cdot}10^{-20}$ м^2. При малих енергіях він дорівнює $\sigma_{\rm mom}(\sim 0\ \text{eB}) \approx 0{,}5 \cdot 10^{-20}$ м^2. Розраховані нами у наближенні RSEP перерізи $\sigma_{\rm mom}$ та $\sigma_{\rm vis}$ для енергії 0,001 eB відповідно дорівнюють (у 10^{-20} м^2): 5,7 (2,3 у SEPSo) та 3,9 (1,6 у SEPSo). В роботі [8] з використанням експериментальних даних з [7] отримано залежність $\sigma_{\rm mom}(E)$. Зокрема, для енергії 0,003 eB

переріз $\sigma_{\rm mom} = 4{,}7 \cdot 10^{-20}$ м^2. Як бачимо, це значення близьке до нашого. Отже, вплив релятивістських ефектів досить значний, тому нерелятивістські перерізи у [4] малі.

Низькоенергетичний мінімум у пружному перерізі $\sigma_{e\ell}$ для розглянутих атомів, це так званий мінімум Рамзауера–Таунсенда (RT) при $k_{\rm RT} = (2E_{\rm RT})^{1/2} = -3a/(\pi\alpha_d(0))$ [35]. Він зобов'язаний сумісній дії обмінного та поляризаційного потенціалів взаємодії електрона з атомом та відображає зменшення фазового зсуву s-хвилі з ростом енергії при від'ємних довжинах розсіювання a: $\delta_0(k) \approx 3\pi - ak - \pi\alpha_d(0)k^2/3$. Кратність π зобов'язана 3-м заповненим s-підоболонкам атомів у 3-му періоді Періодичної таблиці. Для атома фосфору мінімум у s-хвильовому парціальному перерізі дорівнює $\sigma_0 = 2{,}41 \cdot 10^{-23}$ м^2 при 0,31 еВ. Максимум у $\sigma_{e\ell}$ зобов'язаний внеску передусім p- і d-парціальних перерізів – $\sim$79%.

Порівняння розрахованих різними методами параметрів особливостей пружного перерізу розсіювання електрона спорідненими атомами P, S, Cl, Ar наведено у таблиці. Це довжини розсіювання a, припорогові величини перерізу σ(0,01 еВ), енергії $E_{\rm RT}$ та перерізи $\sigma_{\rm RT}$ мінімуму Рамзауера–Таунсенда, енергії $E_{\max}$ та перерізи $\sigma_{\max}$ максимумів. Бачимо, що у випадку Ar припороговий переріз σ(0,01 еВ) майже у 7 разів менший за перерізи для інших атомів, а $\sigma_{\rm RT}$ і $\sigma_{\max}$ є найменшими. Відзначимо, що статичні дипольні поляризовності для атомів P, S, Cl, Ar спадають з ростом заряду ядра Z та є такими (у a_0^3): 24,93, 19,37, 14,57, 11,07 [36] (див. також [37]). Така ж тенденція є і в наших розрахунках $\alpha_d(0)$. Зауважимо, що в цілому поведінка та величина перерізів зобов'язана розсіюванню з більшим сумарним спіном. Так, у випадку атома S переріз в основному складається з квартетного [1], а у випадку атома Cl з триплетного [3] перерізів.

Довжина розсіювання для всіх атомів є від'ємною та, по абсолютній величині, є максимальною для атома S і мінімальною для Ar. Відзначимо, що у роботі [38] експериментальна довжина розсіювання для атома Ar становить $a = -1{,}492a_0$, а у теоретичному розрахунку [39] отримано $a = -1{,}512a_0$ з використанням фазового рівняння з [31, 32] та модельного псевдопотенціалу (див. там також інші дані по довжинах розсіювання). Ці величини близькі до наведених у таблиці більш сучасних

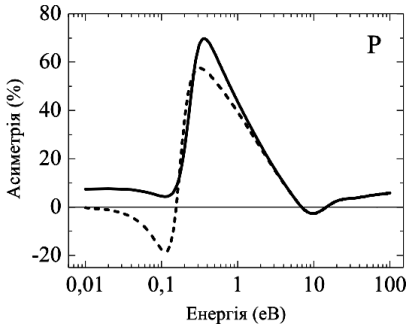

Рис. 4. Енергетична залежність функції спінової обмінної асиметрії $A_{e\ell}(E)$ (рівняння (13)) (в %) при пружному розсіюванні електронів атомами фосфору. Розрахунки в спін-поляризованому SPA підході: суцільна лінія – RSEP-наближення; штрихова лінія – SEPSo-наближення

даних [7] та нашого RSEP-розрахунку (див. також [8]). У випадку атома хлору напіврелятивістські значення довжини розсіювання, з роботи [5], $-1{,}541a_0$ для триплету (t) та $-0{,}857a_0$ для синглету (s) дещо відрізняються від наведених у таблиці нерелятивістських з [3].

Певний загальний інтерес становить поведінка енергетичної залежності асиметрії, розрахованій з використанням спінових інтегральних перерізів пружного розсіювання

$$A_{e\ell}(E) = (\sigma_{e\ell}^{\downarrow\uparrow} - \sigma_{e\ell}^{\uparrow\uparrow})/(\sigma_{e\ell}^{\downarrow\uparrow} + \sigma_{e\ell}^{\uparrow\uparrow}). \qquad (13)$$

На рис. 4 наведено розрахунки цих залежностей у RSEP- та SEPSo-наближеннях. Бачимо суттєвий вплив врахування релятивістських ефектів на величину асиметрії при малих, до 1 еВ, енергіях. При енергіях близьких до мінімуму Рамзауера–Таунсенда асиметрія розсіювання є максимальною – $\approx$70%. У припороговій області енергій та при енергіях більше 10 еВ величина асиметрії менше 10%. Загальна поведінка асиметрії схожа на енергетичну залежність для атома сурми [28], що була розрахована у SEPSo-наближенні – максимум $\approx$70% при 0,19 еВ та величина менше 10% при енергіях від 10 до 200 еВ. Таким чином, використання спін-поляризованого наближення є важливим у широкій області енергій зіткнень від порога до декількох сотень електронвольтів.

На рис. 5 для ряду малих енергій, 0,5, 1, 5 та 10 еВ, наведено ДП пружного розсіювання електронів на атомі фосфору у згаданих вище наближеннях. Також на цьому рисунку для порівняння

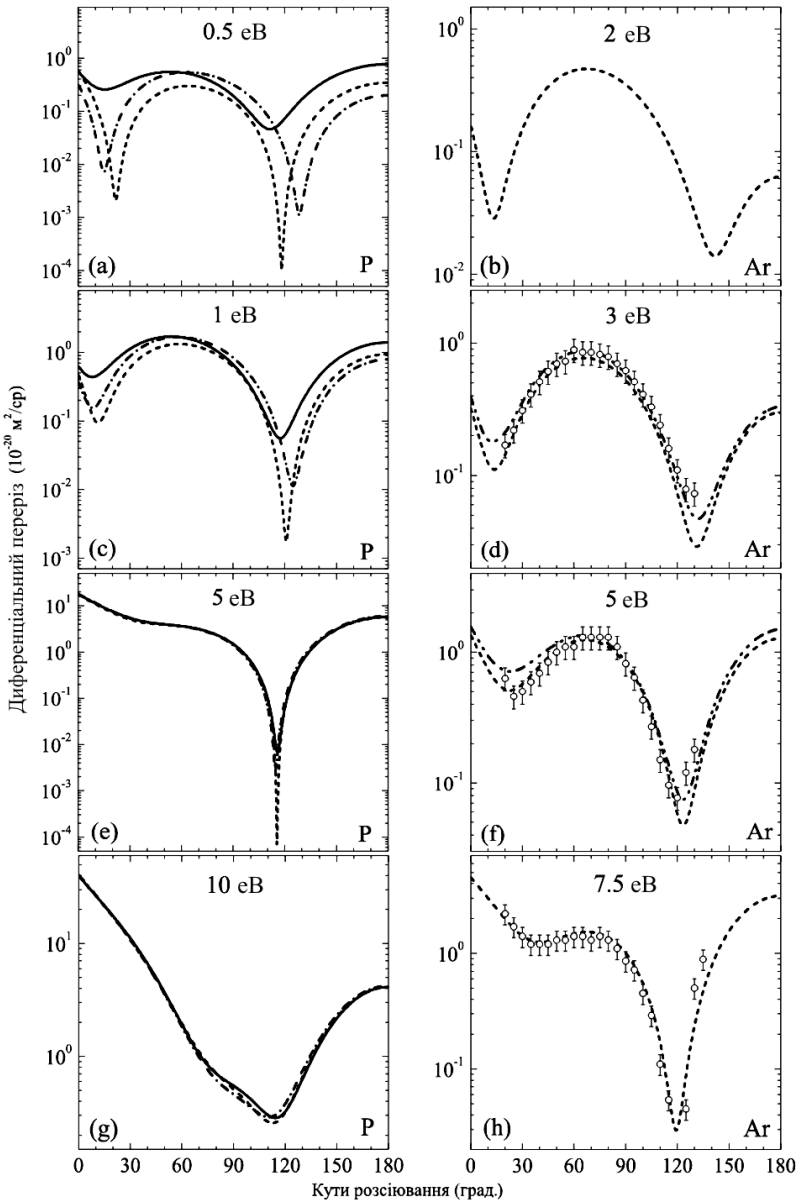

Рис. 5. Кутова залежність диференціальних перерізів (в одиницях 10^{-20} м$^2\cdot$ ср$^{-1}$) пружного розсіювання електронів на атомах фосфору та аргону. Енергії зіткнень: 0,5 еВ (a), 1 еВ (c), 5 еВ (e) і 10 еВ (g) для фосфору та 2 еВ (b), 3 еВ (d), 5 еВ (f) і 7,5 еВ (h) для аргону. Розрахунки в RSEP-наближенні: суцільна лінія – SPA підхід; штрихова лінія – LA підхід. Розрахунок в SEPSo-наближенні та LA підході – пунктир з крапкою. Нерелятивістський R-матричний розрахунок для арогону [6]: пунктир з двома крапками. Експериментальні дані: ∘, [40]

наведені ДП розсіювання на атомі аргону, розраховані нами у RSEP-наближенні для енергій 2, 3, 5 та 7,5 еВ та наявні експериментальні дані [40] і R-матричний розрахунок [6]. Для всіх енергій поведінка ДП для фосфору якісно не залежить від типу наближень. Тільки кількісно величина ДП суттєво залежить від наближень, що особливо проявляється у мінімумах. Для енергій 0,5 та 1 еВ

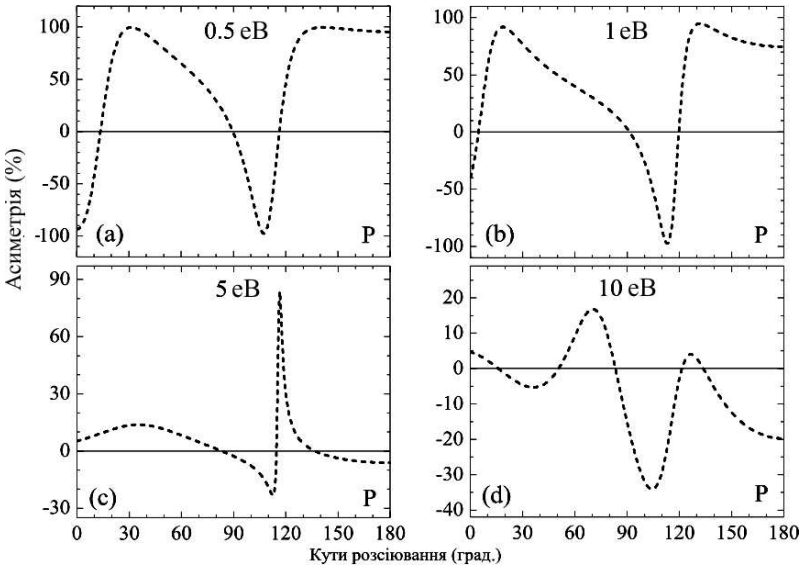

Рис. 6. Кутова залежність функції спінової обмінної асиметрії $A(E, \theta)$ (рівняння (10)) (в %) при пружному розсіюванні електронів на атомах фосфору. Розрахунок в спін-поляризованому RSEP-наближенні для енергії зіткнень 0,5 еВ (*a*), 1 еВ (*b*), 5 еВ (*c*) та 10 еВ (*d*)

ДП має 2 мінімуми при ∼12°–10° і ∼111°–∼118° та роль релятивістських ефектів і спінової поляризації ще значна (рис. 5, *a, c*).

Бачимо, що починаючи з енергії 5 еВ розраховані у вказаних наближеннях ДП збігаються при всіх кутах (рис. 5, *e*). При енергії 5 еВ вони відрізняються по величині тільки у вузькому кутовому околі мінімуму ДП при ∼116°. Цей мінімум належить до малого околу, так званого критичного мінімуму. Зауважимо, що в нашій роботі [25] для випадку атома аргону наявність в ДП подібного критичного мінімуму було передбачено в SEPSo-наближенні при [8,44 еВ; 119,89°]. Визначення енергетичних та кутових положень таких мінімумів є чутливим до точності використовуваних наближень. Так, для атома фосфору RSEP-розрахунок у спін-поляризованому наближенні з усередненим потенціалом $V_{\rm opt}^{\rm av}(r, E)$ (6) дав положення цього критичного мінімуму при [4,54 еВ; 116,49°] та у спін-неполяризованому наближенні – при [5,02 еВ; 115,57°]. Величина ДП (в одиницях 10^{-25} м^2/ср) у цьому мінімумі є 4,9 та 4,3, відповідно (див. також рис. 5, *e*).

При збільшенні енергії до 10 еВ мінімум ДП залишається в околі 115°, але стає широким і менш глибоким. Відзначимо, що цей висококутовий мінімум є присутнім на всіх ДП (див. також на рис. 5 перерізи для аргону).

У цілому поведінка і величина ДП для фосфору зобов'язана перерізу антипаралельного розсіювання. При малих енергіях, зокрема 0,5 та 1 еВ, величина ДП розсіювання вперед (0°) визначається перерізом паралельного розсіювання. Також відзначимо, що для цих енергій величина перерізу розсіювання на малі кути, близькі до 0°, менша за величини ДП при середніх кутах (див. рис. 5, *a, c*). Аналогічне співвідношення величин ДП є і для розсіювання на атомі аргону для енергій 2 та 3 еВ (див. теоретичні та експериментальні дані на рис. 5, *b, d*). Розрахунки показали, що при цих енергіях форма кутової залежності ДП задається виключно поведінкою дійсної частини прямої амплітуди розсіювання $\mathrm{Re}f(E, \theta)$. Зокрема, наявність в ДП низькокутового мінімуму при ∼10° є наслідком інтерференції багатьох (>10) парціальних хвиль та нетривіальною низькоенергетичною залежністю *s*- та *p*-парціальних фазових зсувів. Подібні міркування справедливі і для розсіювання на атомі фосфору.

У роботах [1, 3] розрахунки ДП розсіювання електронів атомами сірки та хлору, з незаповненою валентною 3*p*-підоболонкою, було проведено для 4-

х енергій (у ридбергах, 1Ry = 13,6058 еВ): 0,001, 0,01, 0,1 та 1. Кутові залежності ДП розсіювання на цих атомах якісно подібні – пологі та безструктурні – особливо при енергіях 0,1 та 1Ry. Вони визначаються ДП з більшим сумарним спіном системи – 3/2 (квартет) у випадку S та 1 (триплет) у випадку Cl.

Порівняння наших перерізів з даними для сірки та хлору показує, що для фосфору при розсіюванні на малі, до 30°, кути при енергіях до 5 еВ ДП за величиною на порядок менші. Крім того, на ДП для S та Cl немає виділеної поведінки з мінімумом у околі кута 115° такої, як у випадку атома фосфору. При 10 еВ якісно та майже кількісно кутова поведінка ДП на атомах P, S та Cl дуже схожа.

Важливим є вивчення кутової залежності функції спінової обмінної асиметрії $A(E,\theta)$ (10) при розсіюванні електронів на атомах фосфору. На рис. 6 наведено ці залежності $A(E,\theta)$ при тих самих енергіях, 0,5, 1, 5 та 10 еВ, що і ДП на рис. 5. Вони характеризуються суттєво немонотонною поведінкою та досягають майже максимальних, 100%, значень при певних кутах для енергій 0,5, 1 та 5 еВ (рис. 6, *a, b, c*). Особливості для 0,5 та 1 еВ відповідають різному прояву спінової залежності обмінної та поляризаційної взаємодії при антипаралельному або паралельному розсіюванні електронів (див. [14, 16]).

Для енергії 5 еВ при куті 116,5° маємо дуже вузький пік, де функція $A(E,\theta) = 83{,}6\%$. При цьому куті ДП у паралельному розсіюванні має глибокий мінімум, де $d\sigma^{\uparrow\uparrow}/d\theta = 1{,}4 \cdot 10^{-23}$ м^2/ср, а в антипаралельному переріз становить $d\sigma^{\downarrow\uparrow}/d\theta = 1{,}5 \cdot 10^{-22}$ м^2/ср. Тобто $d\sigma^{\downarrow\uparrow}/d\theta$ на порядок більше, ніж $d\sigma^{\uparrow\uparrow}/d\theta$. В результаті функція асиметрії (10) набуває великого позитивного значення. Вище було зазначено, що при енергії 5 еВ ДП в різних наближеннях збігаються при всіх кутах та відрізняються по величині тільки у вузькому кутовому околі критичного мінімуму при ∼116° (див. рис. 5, *e*). Близькими одне до одного при 5 еВ є і спінові ДП. Наприклад, переріз в антипаралельному розсіюванні має глибокий мінімум при 115°, де $d\sigma^{\downarrow\uparrow}/d\theta = 9{,}85 \cdot 10^{-23}$ м^2/ср. Отже, різниця в кутових положеннях мінімумів спінових ДП становить лише 1,5°. Відповідно функція $A(E,\theta)$ в малому кутовому інтервалі 110°–120° набуває різкої немонотонної поведінки типу мінімум-максимум (див. рис. 6, *c*).

Зі збільшенням енергії налітаючого електрона величина асиметрії зменшується. Так, при 10 еВ (рис. 6, *d*) асиметрія значно менша по величині за асиметрію при малих енергіях. Кутова залежність функції $A(E,\theta)$ при 10 еВ якісно – 2 мінімуми та 2 максимуми, що лежать між 17 та 35% – подібна до поведінки асиметрії для атома сурми [14, 28].

4. Висновки

Потенціальне розсіювання електрона на атомі фосфору для енергій зіткнень 0,01–200 еВ теоретично розглянуто у напіврелятивістському та релятивістському наближеннях методу оптичного потенціалу з використанням локальних спін-неполяризованого та спін-поляризованого підходів. Виявлено особливості інтегрального пружного перерізу припорогового розсіювання – мінімум Рамзауера–Таунсенда, зобов'язаний дії притягуючої поляризаційної взаємодії та наступний максимум. Характеристики пружного розсіювання – довжина розсіювання, енергії мінімуму і максимуму та величина перерізу в них – порівнюються з даними розрахунків різними методами розсіювання електрона на сусідніх атомах сірки, хлору та аргону. Особливості пружного перерізу повторюються на інтегральних перерізах передачі імпульсу та в'язкості.

Виявлено, що кутова залежність диференціальних перерізів розсіювання електрона на атомі фосфору при певних енергіях зіткнень характеризується наявністю вузьких мінімумів подібних до тих, що притаманні перерізам розсіювання електрона на атомі аргону. Для низькоенергетичної області (<10 еВ) визначено енергію та кут критичного мінімуму. Показано, що характеристики таких мінімумів залежать від вибору типу наближення. Дослідження подібних мінімумів у диференціальних перерізах розсіювання електронів на атомах сірки та хлору відсутні. Встановлено, що величина диференціальних перерізів розсіювання електрона вперед на атомах фосфору та аргону при малих енергіях зіткнень є меншою за величину перерізів при середніх кутах.

Енергетична залежність спінової обмінної асиметрії є немонотонною – має позитивний максимум. Зі збільшенням енергії зіткнень асиметрія зменшується по величині. Енергетична поведінка асиметрії для атома фосфору подібна аналогічній

для атома сурми. Кутова поведінка асиметрії при різних енергіях зіткнень характеризується наявністю максимумів і мінімумів та пов'язана з кутовою поведінкою диференціальних перерізів. Ці особливості при малих енергіях майже досягають максимуму по величині. Амплітуда особливостей також зменшується зі збільшенням величини енергії зіткнень.

Автори висловлюють щиру вдячність науковому співробітнику Оксані Куделич за суттєву допомогу у оформленні результатів даної роботи.

ДОДАТОК А

Аналітичні вирази та значення параметрів для статичного потенціалу $V_{\rm S}(r)$, повної $\rho(r)$ і спінових $\rho_{\rm sp}(r)$ електронних густин для атома фосфору

Статичний потенціал $V_{\rm S}(r)$ та електронні густини $\rho(r)$ та $\rho_{\rm sp}(r)$ розраховуються з використанням аналітичних виразів з [24]:

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

$$\rho_{\rm sp}(r) = \frac{N_{\rm sp}}{4\pi r}\left[\sum_{i=1}^{n} A_i B_i^2 \exp(-B_i r) + \right.$$

$$\left. + \sum_{j=1}^{m} C_j D_j (D_j r - 2)\exp(-D_j r)\right], \quad \text{(A2)}$$

де Z заряд ядра атома-мішені.

В (A1) кількість доданків в першій сумі $n = 2$ та в другій $m = 3$. Параметри A, B, C та D мають такі значення: $A_1 = -0{,}09594$ та $A_2 = 1 - A_1$ – безрозмірні; $B_1 = 36{,}3$, $B_2 = 1{,}56$, $C_1 = -2{,}5738$, $C_2 = -4{,}0545$, $C_3 = 1{,}2231$, $D_1 = 3{,}5607$, $D_2 = 15{,}464$ та $D_3 = 7{,}9518$ – в одиницях a_0^{-1}.

Для розрахунку повної електронної густини $\rho(r)$ використовується вираз (A2), в якому $N_{\rm sp} = Z$ та параметри n, m, A, B, C та D мають ті самі значення, що і для розрахунку $V_{\rm S}(r)$ в (A1).

Кількість доданків у (A2) для густин $\rho_\uparrow(r)$ є $n = 3$ і $m = 3$ та для $\rho_\downarrow(r)$ є $n = 2$ і $m = 3$. Для $\rho_\uparrow(r)$ – кількість електронів $N_\uparrow = 9$, а параметри A, B, C і D мають такі значення: $A_1 = -0{,}07086$, $A_2 = 0{,}8928$ та $A_3 = 0{,}18106$ є безрозмірними; $B_1 = 37{,}64$, $B_2 = 12{,}076$, $B_3 = 1{,}375$, $C_1 = 1{,}0565$, $C_2 = -2{,}0148$, $C_3 = 6{,}1969$, $D_1 = 1{,}845$, $D_2 = 16{,}983$ і $D_3 = 7{,}6344$ – у одиницях a_0^{-1}.

Для $\rho_\downarrow(r)$ – кількість електронів $N_\downarrow = 6$, а параметри A, B, C і D мають такі значення: $A_1 = -0{,}08497$ та $A_2 = 1{,}0875$ є безрозмірними; $B_1 = 39{,}1$, $B_2 = 2{,}036$, $C_1 = -2{,}846$, $C_2 = -4{,}7759$, $C_3 = 2{,}1211$, $D_1 = 3{,}7272$, $D_2 = 14{,}535$ та $D_3 = 8{,}1556$ – у одиницях a_0^{-1}.

1. H.P. Saha and Dong Lin, Phys. Rev. A **56**, 1897 (1997).
2. O.Zatsarinny and S.S. Tayal, J. Phys. B: At. Mol. Opt.Phys. **34**, 3383 (2001).
3. H.P. Saha, Phys. Rev. A **53**, 1553 (1996).
4. D.C. Griffin, M.S. Pindzola, T.W. Gorczyca, and N.R. Badnell, Phys. Rev. A **51**, 2265 (1995).
5. Y. Wang, O. Zatsarinny, K. Bartschat, and J-P. Booth, Phys. Rev. A **87** 022703 (2013).
6. W.C. Fon, K.A. Berrington, P.G. Burke, and A. Hibbert, J. Phys. B: At. Mol. Phys. **16**, 307 (1983).
7. M. Kurokawa, M. Kitajima, K. Toyoshima, T. Kishino, T. Odagiri, H. Kato, M. Hoshino, H. Tanaka, and K. Ito, Phys. Rev. A **84**, 062717 (2011).
8. M. Kitajima, M. Kurokawa, T. Kishino, K. Toyoshima, T. Odagiri, H. Kato, K. Anzai, M. Hoshino, H. Tanaka, and K. Ito, Eur. Phys. J. D **66**, 130 (2012).
9. D.G. Thompson, J. Phys. B: At. Mol. Phys. **4**, 468 (1971).
10. J.C. Slater, *The self-consistent field for molecules and solids* (McGraw-Hill Company, New York, 1974).
11. *Theory of the Inhomogeneous Electron Gas*, edited by S. Lundqvist and N.H. March (Plenum Press, New York and London,1983).
12. J.K. O'Connell and N.F. Lane, Phys. Rev. A **27**, 1893 (1983).
13. N.T. Padial and D.W. Norcross, Phys. Rev. A **29**, 1742 (1984).
14. E.Yu. Remeta and V.I. Kelemen, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **43**, 045202 (2010).
15. J. Kessler, Adv. At. Mol. and Opt. Phys **27**, 81 (1991).
16. В.І. Келемен, М.М. Довганич, Є.Ю. Ремета, УФЖ **55**, № 10, 1061 (2010).
17. В.И. Келемен, Е.Ю. Ремета, Доп. НАН України № 1, 65 (2013).
18. В.А. Фок, *Начала квантовой механики* (Наука, Москва, 1976).
19. L.T. Sin Fai Lam, J. Phys. B: At. Mol. Phys. **15**, 119 (1982).
20. M.S. Rabasović, V.I. Kelemen, S.D. Tošić, D. Šević, M.M. Dovhanych, V. Pejčev, D.M. Filipović, E.Yu. Remeta, and B.P. Marinković, Phys. Rev. A **77**, 062713 (2008).
21. V.I. Kelemen, M.M. Dovhanych, and E.Yu. Remeta, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **41**, 035204 (2008).
22. V.I. Kelemen and E.Yu. Remeta, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **45**, 185202 (2012).
23. V. Kelemen, E. Remeta, and E. Sabad, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **28**, 1527 (1995).
24. T.G. Strand and R.A. Bonham, J. Chem. Phys. **40**, 1686 (1964).
25. В.И. Келемен, ЖТФ **72**, 13 (2002).
26. A. Zangwill and P. Soven, Phys. Rev. A **121**, 1561 (1980).
27. Е.Ю. Ремета, В.И. Келемен, Доп. НАН України № 11, 84 (2011).
28. V. Kelemen and E. Remeta, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **43**, 235204 (2010).
29. В.И. Келемен, Е.П. Сабад, М.М. Довганич, УФЖ **34**, 345 (1989).

30. S.D. Tošić, V.I. Kelemen, D. Šević, V. Pejčev, D.M. Filipović, E.Yu. Remeta, and B.P. Marinković, Nucl. Instr. and Meth. B **267**, 283 (2009).
31. Ф. Калоджеро, *Метод фазовых функций в теории потенциального рассеяния* (Мир, Москва, 1972).
32. В.В. Бабиков, *Метод фазовых функций в квантовой механике* (Наука, Москва, 1988).
33. I. Shimamura, Scient. Papers of the Institute of Phys. and Chem. Research **82** 1 (1989).
34. R. Panajotović, D. Filipović, B. Marinković, V Pejćev, M.Kurepa, and L. Vuškoviv, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **30**, 5877 (1997).
35. Ф.Дж. Бэрк, *Потенциальное рассеяние в атомной физике* (Атомиздат, Москва, 1980).
36. http://ctcp.massey.ac.nz/dipole-polarizabilities
37. А.А. Радциг, Б.М. Смирнов, *Параметры атомов и атомных ионов. Справочник* (Энергоатомиздат, Москва, 1986).
38. G.N. Haddad and T.F. O'Malley, Aust. J. Phys. **35**, 35 (1985).
39. R. Szmytkowski, Fizika **22**, 481 (1990).
40. S.K. Srivastava, H. Tanaka, A. Chutjian, and S. Trajmar, Phys. Rev. A **23**, 2156 (1981).

Одержано 27.06.13

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

ПОТЕНЦИАЛЬНОЕ РАССЕЯНИЕ
ЭЛЕКТРОНА НА АТОМЕ ФОСФОРА

Р е з ю м е

Впервые теоретически исследовано упругое рассеяние электронов на атомах фосфора в области энергий столкновений 0,01–200 эВ. Интегральные и дифференциальные сечения вычислены в спин-поляризованном приближении безпараметрического действительного оптического потенциала. Полная и спиновые электронные плотности, электростатический и спиновые обменные и корреляционно-поляризационные потенциалы атома фосфора найдены в приближении локальной спиновой плотности теории функционала плотности. С использованием различных приближений детально изучены особенности низкоэнергетического, до 10 эВ, поведения интегральных сечений, которые сопоставляются с данными для соседних атомов серы, хлора и аргона. Спиновая обменная асимметрия рассеяния электронов на атоме фосфора, с полузаполненной валентной $3p^3$-подоболочкой, исследована с учетом зависимости от спина обменного и поляризационного взаимодействий.

V.I. Kelemen, M.M. Dovhanych, E.Yu. Remeta

POTENTIAL ELECTRON
SCATTERING BY PHOSPHORUS ATOM

S u m m a r y

Elastic scattering of electrons by phosphorus atoms within the collision energy range of 0.01–200 eV has been studied theoretically for the first time. The integral and differential cross sections are calculated in the spin-polarized approximation for a parameter-free real optical potential. The total and spin electron densities, the electrostatic potential, and the spin exchange and correlation-polarization potentials are found for the phosphorus atom in the local spin density approximation of the density functional theory. The features of the integral cross section at energies lower than 10 eV are studied in detail in various approximations and compared with the data for neighbor sulfur, chlorine, and argon atoms. The spin exchange asymmetry in the electron scattering by the phosphorus atom with a half-filled valence $3p^3$-subshell was studied with regard for the spin dependence of the exchange and polarization interactions.