

УДК537.533.9, 537.533.74

Ш.Ш.Демеш

Інститут електронної фізики НАН України, вул. Університетська, 21, Ужгород, 88017  
e-mail: demesh.shandor@gmail.com

## МЕТОД ОПТИЧНОГО ПОТЕНЦІАЛУ ДЛЯ РОЗСІЮВАННЯ ЕЛЕКТРОНАМОЛЕКУЛОЮ

Метод релятивістського оптичного потенціалу запропоновано для вивчення потенціального розсіювання електрона молекулою у рамках моделі незалежних атомів. Для узгодженого опису процесу розсіювання електрона на атомах молекули, потенціали взаємодії і характеристики атомів визначено в локальному наближенні стаціонарної, з виключенням енергії самодії електронів, та нестаціонарної теорії функціоналу густини з урахуванням релятивістських ефектів.

**Ключові слова:** розсіювання, оптичний потенціал, переріз, амплітуда.

### Вступ

Зіткнення електронів з молекулами відіграють дуже важливу роль в широких областях наукової та технічної сфери, починаючи з досліджень дії іонізуючого випромінювання на тіло людини і молекул ДНК до опису взаємодій у різних плазмових середовищах, у т.ч. міжзоряного. Взаємодія електронів з атомами і молекулами також лежать в основі комплексних процесів у низькотемпературній молекулярній плазмі. Разом з цим, з різних причин експерименти не можуть адекватно відтворити характеристики процесів зіткнення і розсіювання частинок – виходячи із певних однозначних причин – але їх теоретичний опис може бути достатньо точним [1].

Процес потенціального розсіювання частинки молекулою характеризується різними перерізами. Перерізи містять всі важливі дані про процес розсіювання і тому вони є головними об'єктами наших досліджень. При цьому потрібно звернути значну увагу на вплив різних потенціальних складових взаємодії електрона з окремими атомами молекули, тому що ці складові визначають сумарну дію налітаючих електронів з молекулярною мішенню. Слід відмітити, що існує багато атомів, які важко спостерігати у вільному стані, а також експериментально їх досліджувати. Але разом з тим, такі атоми присутні у різних багатоатомних паро-фазних та твердотіль-

них сполуках. Також важко проводити експерименти з хімічно небезпечними атомами. Виходячи з цього, є велика потреба у теоретичних даних, які отримані для всіх таких атомів та знаходять своє застосування у вивченні процесу розсіювання різних частинок молекулами.

### Теоретичні підходи до опису потенціального розсіювання

Дуже поширеним і відносно простим теоретичним підходом при дослідженні динаміки розсіювання електрона молекулою є модель незалежних атомів (МНА, Independent Atom Model, IAM). Вона базується на використанні результатів розрахунку потенціалів взаємодії, фазових зсувів та амплітуд розсіювання на окремих атомах молекули. Цю модель розсіювання частинки на багатьох центрах, відому ще з 60-х років, було запропоновано Мотт і Мессі [2]. Разом з тим, вона успішно використовується і в сучасних теоретичних роботах [3,4] для визначення диференціальних та інтегральних перерізів. На сучасному етапі цю модель також використовують із поправкою на міжатомне екранування (IAM-SCAR, Screen Correction Additivity Rule) для повних [5] і диференціальних [6] перерізів, яка значно підвищує точність розрахунків при малих та середніх енергіях зіткнення. В рамках МНА молекулярна мішень розглядається, як проста сукупність окремих атомів (без симетрії),

які розташовані на певних відстанях один від одного. Ці відстані є єдиними параметрами, які визначають молекулярну природу мішені при розгляді розсіювання.

Існують також методи, в яких потенціалів взаємодії, фазові зсуви та амплітуди розсіювання на молекулах розраховують на основі характеристик молекул в цілому, наприклад використовуючи розподіл молекулярної електронної густини. Для того, щоб описати динаміку розсіювання, такий розподіл густини потрібно визначити в залежності від одного центра відліку, яким як правило є центр мас молекули. Для цього густину електронів знаходять у симетрично-адаптованому одноцентровому розкладі повної хвильової функції молекули-мішені, або зведенням центрів окремих молекулярних орбіталей (хвильових функцій) до центра мас самої молекули. Це дозволяє розглядати молекулу, як центрально-симетричну систему. Такими методами

$$\frac{d\sigma_{el}^{IAM}}{d\Omega} = \sum_{m=1}^N \sum_{n=1}^N [f_m(\theta, k) f_n^*(\theta, k) + g_m(\theta, k) g_n^*(\theta, k)] \frac{\sin(sr_{nm})}{sr_{nm}}. \quad (1)$$

Інакше (1) можна записати у вигляді суми сумарного ДП розсіювання на кожному з

$$\frac{d\sigma_{el}^{IAM}}{d\Omega} = \sum_{m=1}^N \frac{d\sigma_{el,m}}{d\Omega} + \sum_{m,n \neq m} [f_m(\theta, k) f_n^*(\theta, k) + g_m(\theta, k) g_n^*(\theta, k)] \frac{\sin(sr_{nm})}{sr_{nm}}. \quad (2)$$

В (1) та (2)  $\theta$  кут розсіювання, який змінюється у межах від  $0^\circ$  до  $180^\circ$ ;  $f_m(\theta, k)$  і  $g_m(\theta, k)$  – комплексні прямі та спин-повертаючі (“spin-flip”) амплітуди розсіювання на  $m$ -му атомі молекули, відповідно; функція  $s(\theta, k) = 2k \sin(\theta/2)$  описує передачу імпульсу при зіткненні;  $k = \sqrt{2E}$ ,  $E$  енергія налітаючого електрона (використано атомні одиниці:  $\hbar = e = m_e = 1$ , атомна одиниця довжини рівна борівському радіусу  $1a_0 = 5.2918 \cdot 10^{-11}$  м). Величини  $r_{nm}$  в (1) являють собою відстані між  $n$ -им та  $m$ -им атомами в молекулі.

Такий підхід для визначення перерізів розсіювання на молекулах справедливий при умовах, що  $k(r_{nm}^{\min}) \gg 1$  та  $r_{nm}^{\min} \gg a^{\max}$ , де  $r_{nm}^{\min}$  – мінімальна міжато-

є наближення сферичних [7] та одноцентрових [8] потенціалів.

### Диференціальні та інтегральні перерізи розсіювання електрона молекулою у МНА

Для опису динаміки розсіювання електронів молекулою потрібно визначити її перерізи. Можливо відокремити два основні типи перерізів: диференціальні перерізи (ДП) – характеризують кутову залежність розсіювання при певній енергії або енергетичну залежність при даному куті; та інтегральні перерізи (повний, пружний, непружний або поглинання, передачі імпульсу, в'язкості) – характеризують розсіювання на всі кути в цілому при різних енергіях налітаючого електрона.

При пружному розсіюванні електрона на  $N$ -атомній молекулі ДП в рамках МНА визначається виразом (див. [2-4]):

атомів (прямий доданок) та інтерференційного (непрямого) доданку

мний відстань,  $a^{\max}$  – максимальний радіус взаємодії частинки з кожним атомом, [2]. Наприклад, для міжатомної відстані  $r_{nm}^{\min} = 4a_0$  ( $\sim 2.1 \text{ \AA}$ ) та  $k=1$  а.о. ( $\sim 14$  еВ) виконується тільки проста нерівність  $k(r_{nm}^{\min}) > 1$ . Але ми вважаємо, що хороший опис розсіювання електрона на атомах дозволить також добре описати його розсіювання на конкретній молекулі і у МНА. Говто у випадках, коли буде виконуватися проста нерівність  $k(r_{nm}^{\min}) > 1$ . Слід відмітити, що наближення IAM-SCAR [5,6] було запропоновано саме для того, щоб використовувати підхід МНА при малих, наприклад менше 10 еВ, та середніх енергіях зіткнень.

Амплітуди розсіювання електрона на атомах молекули визначають через парціа-

льні фазові зсуви  $\delta_\ell^\pm(E) = \varepsilon_\ell^\pm(E) + i\xi_\ell^\pm(E)$  за наступними формулами

$$f_m = \frac{1}{2ik} \sum_{\ell=0}^{\infty} \left\{ (\ell+1) \left[ \frac{\exp(2i\varepsilon_\ell^+)}{\exp(2\xi_\ell^+)} - 1 \right] + \ell \left[ \frac{\exp(2i\varepsilon_\ell^-)}{\exp(2\xi_\ell^-)} - 1 \right] \right\} P_\ell(\cos(\theta)), \quad (3)$$

$$g_m = \frac{1}{2ik} \sum_{\ell=1}^{\infty} \left[ \frac{\exp(2i\varepsilon_\ell^-)}{\exp(2\xi_\ell^-)} - \frac{\exp(2i\varepsilon_\ell^+)}{\exp(2\xi_\ell^+)} \right] P_\ell^1(\cos(\theta)), \quad (4)$$

де  $P_\ell(\cos(\theta))$  та  $P_\ell^1(\cos(\theta))$  це відомі поліноми Лежандра. Комплексні парціальні фазові зсуви можуть бути знайдені, розв'язуючи фазові рівняння (при орбітальних моментах  $\ell < \ell_{\min}$ ) з комплексним оптичним потенціалом (ОП) [9,10]:

$$V_{\text{opt}}^\pm(r, E) = V^\pm(r, E) + iV_A(r, E), \quad (5)$$

де знак "±" відповідає повному кутовому моменту налітаючого електрона  $j = \ell \pm 1/2$ . Аналогічно, дійсні парціальні фазові зсуви можуть бути знайдені при розв'язку фазових рівнянь з дійсним ОП  $V_{\text{opt}}^\pm(r, E) = V^\pm(r, E)$  [9,10].

Асимптотичні значення фазових зсувів (для  $\ell_{\max} > \ell > \ell_{\min}$ ) розраховуються за асимптотичним виразом

$$\text{tg} \delta_\ell^{\text{as}} = \frac{\pi \alpha_d(0) k^2}{[(2\ell+3)(2\ell+1)(2\ell-1)]}, \quad (6)$$

Аналогічно у наближеннях "Ad" чи "ІАМ" перерізи передачі імпульсу  $\sigma_{\text{mom}}^{\text{Ad}}(E)$ ,  $\sigma_{\text{mom}}^{\text{ІАМ}}(E)$  та в'язкості  $\sigma_{\text{vis}}^{\text{Ad}}(E)$ ,  $\sigma_{\text{vis}}^{\text{ІАМ}}(E)$  визначаються за наступними формулами (з відповідними ДП, див. (2))

$$\begin{aligned} \sigma_{\text{mom}}^{\text{Ad}}(E) &= 2\pi \int_0^\pi d\theta \sin \theta (1 - \cos \theta) d\sigma_{\text{el}}^{\text{Ad}}(E, \theta) / d\Omega, \\ \sigma_{\text{mom}}^{\text{ІАМ}}(E) &= 2\pi \int_0^\pi d\theta \sin \theta (1 - \cos \theta) d\sigma_{\text{el}}^{\text{ІАМ}}(E, \theta) / d\Omega, \\ \sigma_{\text{vis}}^{\text{Ad}}(E) &= 2\pi \int_0^\pi d\theta \sin^3 \theta d\sigma_{\text{el}}^{\text{Ad}}(E, \theta) / d\Omega, \\ \sigma_{\text{vis}}^{\text{ІАМ}}(E) &= 2\pi \int_0^\pi d\theta \sin^3 \theta d\sigma_{\text{el}}^{\text{ІАМ}}(E, \theta) / d\Omega. \quad (9) \end{aligned}$$

де  $\alpha_d(0)$  – дипольна статична поляризованість  $n$ -го атома.

Інтегральний переріз пружного розсіювання можна визначити за оптичною теоремою – він є пропорційним сумі уявних частин прямих амплітуд розсіювання на атомах вперед, при  $\theta = 0$ . Для МНА ця теорема співпадає з т. зв. "additive rule" (Ad) [3-6], тому з вигляду ДП (1), а також використовуючи співвідношення  $\sin(sr_{nm})/sr_{nm}|_{\theta \rightarrow 0} \rightarrow 1$  та  $\sin(sr_{nm})/sr_{nm}|_{r_{nm} \rightarrow 0} \rightarrow 1$  маємо для перерізу:

$$\sigma_{\text{el}}^{\text{Ad}}(E) = \frac{4\pi}{k} \sum_n \text{Im} f_n(\theta = 0, k) = \sum_n \sigma_{\text{el},n}(E). \quad (7)$$

Тут  $\sigma_{\text{el},n}$  пружні перерізи розсіювання на  $n$ -ому атомі. Амплітуда "spin-flip" не вносить свого вкладу –  $g_n(\theta = 0, k) = 0$ .

Якщо ж інтегральний переріз пружного розсіювання отримувати через інтегрування по кутах ДП(1) (ІАМ), то будемо мати переріз, що більше (7) на непрямі члени (внаслідок інтерференції амплітуд):

$$\sigma_{\text{el}}^{\text{ІАМ}}(E) = \sum_n \sigma_{\text{el},n}(E) + \sum_{n,m} \sigma_{\text{el}(nm)}(E) = \sigma_{\text{el}}^{\text{Ad}}(E) + \sigma_{\text{el}}^{\text{Ind}}(E). \quad (8)$$

Таким чином, істинний, експериментальний, переріз знаходиться між перерізами з наближень "Ad" чи "ІАМ".

Зауважимо тут також, що наявність у літературі добре розрахованих парціальних фазових зсувів розсіювання електрона на різних атомів дає змогу їх прямого застосування до розрахунків розсіювання на молекулах, які містять такі атоми.

### Метод оптичного потенціалу

Дійсна частина оптичного потенціалу [9] визначається з перших принципів і

описується виразом із наступними складовими

$$V^{\pm}(r, E) = V_s(r) + V_e^R(r, E) + V_p(r) + V_R(r, E) + V_{so}^{\pm}(r, E) \quad (10)$$

Компоненти ОП –  $V_s$ ,  $V_e^R$ ,  $V_p$ ,  $V_R$ ,  $V_{so}^{\pm}$  в (11) це потенціали: статичний, обмінний, поляризаційний, скалярно-релятивістський, спіно-орбітальної взаємодії, відповідно. Ці складові в цілому визначаються повною та спіновими електронними густинами атомів молекули. Електронні густини можна розрахувати у різних теоретичних наближеннях, наприклад у різних наближеннях теорій Томаса-Фермі, Хартрі-Фока, функціоналу густини (ТФГ). У багатьох випадках можна використати параметризовані аналітичні вирази для таких потенціалів, що дуже зручно у подальших розрахунках. Такі аналітичні вирази часто можуть бути знайдені та вже визначено для різних атомів. Наприклад, значення параметрів для аналітичного опису електронних густин для атома Р, розрахованих у локальному наближенні ТФГ, наведено у [11]. Слід відмітити, що у більш послідовних підходах [7] та [8] потенціальні складові ОП визначаються електронною густиною молекули.

Скалярний релятивістський

$$V_R(r, E) = -\frac{1}{2}\alpha^2 V_s^2 + \frac{\chi}{4} \cdot \frac{d^2 V_s}{dr^2} + \frac{3}{8}\chi^2 \cdot \left(\frac{dV_s}{dr}\right)^2$$

і спіно-орбітальний потенціал

$$V_{so}^{\pm}(r, E) = \zeta^{\pm}(j, \ell) \cdot \frac{\chi}{r} \cdot \frac{dV_s}{dr} \quad (12)$$

Описують релятивістські ефекти розсіювання. Тут функції

$$\chi = \frac{\alpha^2}{[2 + \alpha^2(E - V_s)]}; \quad \zeta^+(j, \ell) = \ell/2, \quad j = \ell + 1/2$$

$$\text{і } \zeta^-(j, \ell) = -(\ell + 1)/2, \quad j = \ell - 1/2; \quad \alpha = 1/137036$$

стала тонкої структури.

Для визначення релятивістського обмінного потенціалу  $V_e^R$  спочатку потрібно знаходити нерелятивістський обмінний потенціал  $V_e^{NR}$ . Такий потенціал у наближенні вільного неоднорідного електронного газу описується так

$$V_e^{NR}(r, E) = -\frac{k_F(r)}{\pi} \left( 1 + \frac{1 - \kappa^2}{2\kappa} \ln \left| \frac{1 + \kappa}{1 - \kappa} \right| \right) \quad (13)$$

Тут  $k_F(r) = [3\pi^2 \rho_n(r)]^{1/3}$  – імпульс Фермі для  $n$ -го атома молекули, виражений через повну електронну густину  $\rho_n(r)$ ;  $\kappa(r, E) = k_s(r, E) / k_F(r)$ ,  $[k_s(r, E)]^2 = k^2 + V(r, k^2/2)$ . Функція  $V(r, k^2/2)$  пов'язана з потенціалами взаємодії системи. Одним із простих модельних виразів для неї є  $V(r, k^2/2) = [k_F(r)]^2 + 2I / [1 + (kr)^2/2]$ , де  $I$  – потенціал іонізації атома.

Релятивістський обмінний потенціал  $V_e^R$  визначається на основі нерелятивістського  $V_e^{NR}$  та функції  $\bar{\psi}_R(r_s)$  за виразом:

$$V_e^R(r, E) = V_e^{NR}(r, E) + \bar{\psi}_R(r_s) V_e^{NR}(r, E), \quad (14)$$

$$\bar{\psi}_R(r_s) = \frac{3}{2} \left[ \frac{\ln \xi}{\beta \eta} - 1 \right], \quad \bar{\psi}_R = \psi_R - 1 \quad (15)$$

де  $\xi(r_s) = \beta(r_s) + \eta(r_s)$ ,  $\beta(r_s) = [3\pi^2 \rho_n(r)]^{1/3} / c$ ,  $\eta(r_s) = [1 + \beta(r_s)^2]^{1/2}$ ,  $r_s(r) = [3 / 4\pi \rho_n(r)]^{1/3}$  і  $c = 137.036$  (швидкість світла у а.о.).

Поляризаційний потенціал складається з двох частин, які описують взаємодію на малих (SR, Short Range)  $V_p^{SR}(r)$ , та на великих (LR, Long Range)  $V_p^{LR}(r)$  відстанях. Потенціал  $V_p^{SR}(r)$  виражено через локальний потенціал кореляційно-поляризаційної взаємодії електронів в неоднорідному електронному газі із функціоналом:

$$E_c^{LDA}[\rho] = \int d\vec{r} \rho(\vec{r}) \cdot \varepsilon_c[\rho(\vec{r})], \quad (16)$$

де  $\varepsilon_c[\rho(r)] \equiv \varepsilon_c[r_s(r)]$  густина кореляційної енергії. На основі цього,  $V_p^{SR}(r)$  визначається за наступною формулою

$$V_p^{SR}(r) = \varepsilon_c(r_s) - \frac{r_s}{3} \frac{d\varepsilon_c}{dr_s}. \quad (17)$$

Потенціал  $V_p^{LR}(r)$  описується так на асимптотичних відстанях:

$$V_p^{LR}(r) = -\alpha_d(0)/2r^4. \quad (18)$$

Потенціали  $V_p^{SR}$  та  $V_p^{LR}$  пересікаються у деякій точці  $r_c$ . Поляризовність атомів  $\alpha_d(0)$  розраховується у локальному наближенні нестационарної теорії функціоналу густини.

Ефекти поглинання враховують у наближенні комплексного оптичного потенціалу(5)

$$V_{opt}^{\pm}(r, E) = V^{\pm}(r, E) + iV_A(r, E).$$

Вони проявляються починаючи з енергій  $E > \Delta_n$ , де  $\Delta_n$  – енергія першого непружного порогу  $n$ -го атома, та можуть

$$\alpha = k_F^2 + \Delta - 2[V_S(r) + V_e^R(r, E) + V_p(r) + V_R(r, E)]. \quad (21)$$

Параметри  $W(E)$  у (19) можуть бути визначені з порівняння перерізів поглинання, отриманих за вище наведеними потенціалами або з експериментальних даних. Для густин  $\rho_n(r)$ ,  $\rho_{H,n}$  та статичного потенціалу  $V_s(r)$  можуть бути застосовані параметризовані аналітичні вирази.

Таким чином, характеристики розсіювання можна розрахувати в різних підходах: у спіно-неполяризованому [9]; у спіно-поляризованому [10]; у повному релятивістському (з  $V_R$  і  $V_{so}^{\pm}$ ), а також у напіврелятивістському (тільки з  $V_R$  або тільки з  $V_{so}^{\pm}$ ).

Зауважимо, що наявність у літературі параметризованих виразів для електронних густин для різних атомів дозволяє їх застосування для розрахунку оптичних потенціалів та парціальних фазових зсувів для дослідження розсіювання на молекулах, які складаються з таких атомів.

бути описані двома потенціалами поглинання – емпіричним та неемпіричним. Емпіричний потенціал типу Мак-Карті

$$V_A^{Mc}(r, E) = -W(E) r^2 \rho_{H,n}(r) / [T_{loc}(r, E)]^2, \quad (19)$$

де  $T_{loc} = E - V_S - V_e^R - V_p$  являє собою локальну кінетичну енергію,  $\rho_{H,n}$  – густина електронів валентної підоболонки  $n$ -го атома.

Для широкого діапазону енергій використовують неемпіричний потенціал типу Сташевської

$$V_A^{St}(r, E) = -v_{loc}(r, E) \rho_n(r) \bar{\sigma}_b(r, E) / 2 \quad (20)$$

у моделі квазівільного розсіювання.

Тут  $v_{loc} = [2T_{loc}]^{1/2}$  є локальна швидкість налітаючого електрона в мішені. Узагальнений переріз подвійного зіткнення  $\bar{\sigma}_b(r, E)$  зв'язаний із функціями  $\alpha(r, E)$  та  $\beta(r, E)$ . При  $\beta = \alpha$  для другого типу цих функцій маємо:

### Розсіювання електронів молекулами фосфору (P2, P3) у МНА

У наближенні МНА нами були розраховані інтегральні перерізи розсіювання на дво- P<sub>2</sub> та трьохатомних P<sub>3</sub> молекулах фосфору.

Диференціальні та інтегральні перерізи розсіювання електронів на атомі фосфору були розраховані у роботі [11] в спіно-поляризованому наближенні з безпараметричним дійсним оптичним потенціалом. Повна і спінові електронні густини були визначені в рамках ТФГ в локальному наближенні. В розрахунках значна увага приділялася визначенню інтегральних перерізів при малих енергіях до 10 еВ.

Відмітимо, що при розсіюванні електрона на гомоядерних молекулах ДП пружного розсіювання (1) в рамках МНА значно прості. Наприклад, у випадку дво- та триатомних молекул вони мають наступний вигляд:

$$\frac{d\sigma_{el}^{IAM}}{d\Omega} = 2 \frac{d\sigma_A}{d\Omega} \left[ 1 + \frac{\sin(sr_{12})}{sr_{12}} \right], \quad (22)$$

$$\frac{d\sigma_{el}^{IAM}}{d\Omega} = \frac{d\sigma_A}{d\Omega} \left[ 3 + 2 \frac{\sin(sr_{12})}{sr_{12}} + 2 \frac{\sin(sr_{13})}{sr_{13}} + 2 \frac{\sin(sr_{23})}{sr_{23}} \right]. \quad (23)$$

Тут  $d\sigma_A/d\Omega$  ДП розсіювання на одному з однотипних атомів. Звідси бачимо, при розсіюванні електрона на такій молекулі поведінка та особливості ДП, у МНА, головним чином будуть визначатися особливостями ДП розсіювання електрона на атомі. Тому величина та положення мінімумів та максимумів ДП розсіювання на атомах будуть відображатися і на ДП розсіювання на таких молекулах. Вкажемо тут, що для перерізів (22) та (23) оптична теорема (див. (7)), дає для інтегральних перерізів такі вирази –  $\sigma_{el,A}^{Ad}(E) = 2\sigma_{el,A}(E)$  та  $\sigma_{el}^{Ad}(E) = 3\sigma_{el,A}(E)$ , відповідно.

Структуру молекул  $P_2$  та  $P_3$  розраховували за допомогою програмного комплексу GAMESS [12] на потужному Linux-кластері ІЕФ НАН України, з високим рівнем паралелізації програм. Для визначення початкової матриці електронної густини в усіх випадках були виконані самоузгоджені ітераційні розрахунки за методом необмеженого Хартрі-Фока, без врахування кореляційної взаємодії електронів. Ця процедура виконувалася до досягнення узгодженості у зміні величини повної електронної густини, на рівні  $10^{-8}$  а.о. Для врахування кореляційної взаємодії електронів подальші обчислення були проведені методом зв'язаного кластера з одиночним і подвійним збудженням. Для всіх розрахунків було застосовано розширений гаусовий базисний набір «потрійне- $\zeta$ » з поляризаційними та кореляційними поправками із додатковими дифузійними функціями. Рівноважна структура молекул  $P_2$  та  $P_3$  була отримана в результаті геометричної оптимізації за алгоритмом квадратичного наближення. Для початкової молекулярної геометрії при цьому були задані мінімальні міжатомні відстані, без врахування типу симетрії молекули.

Отримані нами рівноважні відстані між атомами у випадку молекули  $P_2$  –  $r_{12} = 3.610 a_0$  – добре узгоджується з

найвищим значенням  $r_{12} = 3.579 a_0$  [13]. Для молекули  $P_3$  отримали наступні міжатомні відстані –  $r_{12} = 3.7403 a_0$ ,  $r_{13} = 3.7148 a_0$ ,  $r_{23} = 7.4552 a_0$ . Подальші *ab initio* розрахунки молекул теж будуть базуватися на програмі GAMESS.

На рис.1 наведено інтегральні перерізи пружного розсіювання  $\sigma_{el}^{IAM}(E)$  та  $\sigma_{el}^{Ad}(E)$  електрона на молекулах фосфору  $P_2$  та  $P_3$ .

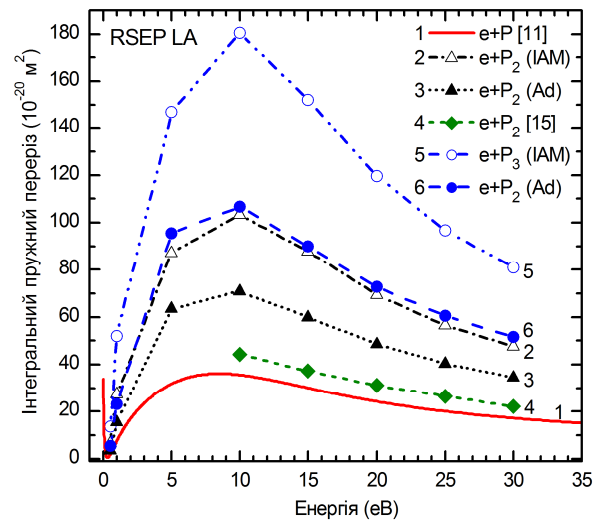


Рис. 1. Інтегральні перерізи пружного розсіювання

Переріз  $\sigma_{el}^{IAM}(E)$  обчислювався чисельним інтегруванням диференціальних перерізів по формулах (22), (23), по всіх кутах розсіювання. Перерізи були визначені в діапазоні енергії 0.5÷30 еВ. Якісна поведінка всіх перерізів схожа та подібна. Бачимо, що переріз  $\sigma_{el}^{IAM}(E)$  значно перевищує  $\sigma_{el}^{Ad}(E)$ , особливо у максимумі при 10 еВ. Тобто роль інтерференційного (непрямого) доданку достатньо велика. Переріз з роботи [14], розрахований у статобмінному наближенні, проходить близько до перерізу  $e+P$  розсіювання [11], тобто він є достатньо невеликим. У роботі [3] чисельно показано, що з ростом енергії зіткнення (починаючи з 100 еВ) для перерізів передачі імпульсу справедливою стає рівність  $\sigma_{mom}^{IAM}(E) \approx \sigma_{mom}^{Ad}(E)$ . Тобто, внесок у ДП (див. (2)) від суми

$$\sum_{m,n \neq m} [f_m(\theta, k) f_n^*(\theta, k) + g_m(\theta, k) g_n^*(\theta, k)] \left[ \frac{\sin(sr_{nm})}{sr_{nm}} \right]$$

у випадку негомоядерних молекул з ростом енергії є малим – внаслідок можливих протилежних знаків цих амплітуд та завдяки функції  $s(\theta, k)$ . У випадку однакових атомів амплітуди співпадають, тому саме функція  $s(\theta, k)$  обумовлює енергетичну поведінку інтерференційних членів (див. (22), (23)). Зближення перерізів  $\sigma_{el}^{Ad}(E)$  та  $\sigma_{el}^{IAM}(E)$  з ростом енергій також видно з рис. 1.

### Висновки

В роботі представлено метод оптичного потенціалу розрахунку диференціальних та інтегральних перерізів розсію-

вання електрона молекулою у рамках моделі незалежних атомів. Модель базується на амплітудах розсіювання електронів окремими атомами молекули. Коротко описано потенціальні складові релятивістського оптичного потенціалу, який було застосований для визначення характеристик розсіювання на атомах фосфору. Коротко вказується на теоретичні підходи для опису потенціального розсіювання електрона молекулою.

Автор щиро вдячний Реметі Є.Ю. за постійну допомогу та обговоренні отриманих результатів.

### СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1. Brigg W. Electron molecule collisions using Quantemol in Electron Collision Processes in Atomic and Molecular Physics / W. Brigg, J. Tennyson // New Delhi: Narosa – 2014. – 230 p.
2. Mott N.F. The theory of atomic collisions, 3rd ed. / N.F. Mott, H.S.W. Massey // Oxford: Clarendon Press – 1965. – 858 p.
3. Raj D. A note on the use of the additivity rule for electron-molecule elastic scattering // Phys. Lett. A – 1991. – V. 169 – P. 571-574.
4. Mozejko P. Elastic cross section calculations for electron scattering on polyatomic molecular targets:  $XY_4$  ( $X=C, Si, Ge$ ;  $Y=H, F, Cl$ ),  $XF_6$  ( $X=S, W, U$ ),  $C_2F_6$  and  $C_6Y_6$  ( $Y=H, F$ ) / P. Mozejko, B. Zywicka-Mozejko, Cz. Szmytkowski // Uzhhorod Univ. Sci. Herald, Ser. Phys. – 2000. – V. 8, I. 1 – P. 108-111.
5. Blanco F. Screening corrections for calculation of electron scattering from polyatomic molecules / F. Blanco, G. García // Phys. Lett. – 2003. – A317. – P.458-462.
6. Blanco F. Screening corrections for calculation of electron scattering differential cross sections from polyatomic molecules / F. Blanco, G. García // Phys. Lett. – 2004. – A330. – P.230–237.
7. Jain A. Total (elastic plus inelastic) cross sections for electron scattering from diatomic and polyatomic molecules at 10–5000 eV:  $H_2, Li_2, HF, CH_4, N_2, CO, C_2H_2, HCN, O_2, HCl, H_2S, PH_3, SiH_4,$  and  $CO_2$ / A. Jain, K.L. Baluja // Phys. Rev. A – 1992. – V. 45. – P.202–218.
8. Gianturco F.A. Elastic scattering of electrons by methane molecules / F.A. Gianturco, J.A. Rodriguez-Ruiz, N. Sanna // Phys. Rev. A – 1995. – V. 52. – P.1257-1265.
9. Kelemen V.I. Critical minima and spin polarization in the elastic electron scattering by the mercury atoms / V.I. Kelemen, E.YuRemeta // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. – 2012. – V. 45. – P. 185202 (11)
10. Remeta E.Yu. Potential elastic electron scattering by atoms in the spin-polarized approach / E.YuRemeta, V.I. Kelemen // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. – 2010. – V. 43. – P. 045202 (10)
11. Kelemen V.I. Potential electron scattering by phosphorous atom / V.I. Kelemen, M.M. Dovhanych, E.Yu. Remeta // Ukr. J. Phys. – 2014. – V. 59, N.6. – P.569-580.
12. Schmidt M.W. General Atomic and Molecular Electronic Structure System / [M.W. Schmidt, K.K. Baldridge, J.A. Boatz, S.T. Elbert, M.S. Gordon, J.H. Jensen, S. Koseki, N. Matsunaga, K.A. Nguyen, S. Su, T.L. Windus, M. Dupuis, J.A. Montgomery] // J. Comput. Chem. – 1993. – V. 14. – P. 1347-1363.

13. Radtsig A.A. Reference Data on Atoms, Molecules, and Ions / A.A. Radtsig, B.M. Smirnov // Berlin: Springer-Verlag–1985. – 463 p.
14. Bettega M.H.F. Low-energy electron scattering by N<sub>2</sub>, P<sub>2</sub>, As<sub>2</sub> and Sb<sub>2</sub>/ M.H.F. Bettega, M.A.P. Lima, L.G. Ferreira// J. Phys. B. – 1998. – V. 31. – P.2091-2099.

Стаття надійшла до редакції 20.08.2015.

Sh.Sh.Demesh

Institute of Electron Physics NAS Ukraine, University str., 21, Uzhhorod, 88017

## OPTICAL POTENTIAL METHOD FOR ELECTRON SCATTERING BY MOLECULE

The relativistic optical potential method has been proposed for the study potential electron scattering by molecules in framework of independent atom model. For the consistent description of electron scattering process on the atoms of molecules, the interaction potentials and atomic characteristics are determined in the local approximation of the stationary, excluding the self-action energy correction, and non-stationary density functional theories with the account of relativistic effects.

**Keywords:** scattering, optical potential, cross section, amplitude.

Ш.Ш.Демеш

Институт электронной физики НАН Украины, Университетская ул. 21, Ужгород, 88017

## МЕТОД ОПТИЧЕСКОГО ПОТЕНЦИАЛА ДЛЯ РАССЕЯНИЯ ЭЛЕКТРОНА МОЛЕКУЛОЙ

Метод релятивистского оптического потенциала предложен для изучения потенциального рассеяния электрона молекулой в рамках модели независимых атомов. Для согласованного описания процесса рассеяния электрона на атомах молекулы, потенциалы взаимодействия и характеристики атомов определены в локальном приближении стационарной, с исключением энергии самодействия электронов, и нестационарной теории функционала плотности с учетом релятивистских эффектов.

**Ключевые слова:** рассеяние, оптический потенциал, сечение, амплитуда.