

ДИФЕРЕНЦІАЛЬНІ ПЕРЕРІЗИ ПРУЖНОГО РОЗСІЮВАННЯ ЕЛЕКТРОНІВ НА АТОМАХ Кr ТА Yb*

В.І.Келемен, М.М.Довганич, Є.Ю.Ремета

Інститут електронної фізики НАН України, 88017 Ужгород, вул. Університетська, 21
e-mail: kelemen@iep.uzhgorod.ua, remeta@iep.uzhgorod.ua

В рамках моделі феноменологічного оптичного потенціалу (ОП) з врахуванням спіно-орбітальної взаємодії досліджено розсіювання електронів атомами Кr та Yb в області середніх енергій $E \leq 500$ еВ. Значення вільних параметрів в поляризаційному потенціалі були знайдені з використанням відомих енергій мінімуму Рамзауера-Таундсена для Кr та спорідненості електрона до атома Yb. Залежні від енергії параметри в уявній частині ОП були знайдені з найкращого узгодження розрахованих перерізів з експериментом. Розрахунки проведені як з врахуванням, так і без врахування потенціалу поглинання. Одержані результати порівнюються з наявними експериментальними та теоретичними даними.

1. Вступ

Широке застосування в останні роки набуло використання модельних оптичних потенціалів (ОП) для опису процесу пружного розсіювання електронів, позитронів та атомів на багатоелектронних системах – атомах, молекулах, кластерах – при малих (десятки еВ) та середніх (декілька сотень еВ) енергіях зіткнення E . Складові ОП мають прозорий фізичний зміст, що відображає різні аспекти міжчастинкової взаємодії. Це такі потенціали, як електростатичний $V_s(r)$, обмінний $V_e(r, E)$, поляризаційний $V_p(r)$, спіно-орбітальної взаємодії $V_{so}^{\pm}(r)$, сума яких є дійсна частина ОП. Та потенціал поглинання $V_a(r, E)$, що є уявною частиною ОП. Для їх знаходження використовуються різні модельні уявлення про взаємодію налітаючої частинки з атомною системою. Важливим є використання однотипних наближень або таких, що дозволяють говорити про самоузгоджений опис розсіювання. Тому для знаходження на єдиній

основі як функціональних, так і простих величин в складових ОП нижче використовується локальне наближення теорії функціоналу густини. Доцільним також є порівняння отриманих у різних наближеннях таких прецизійних характеристик розсіювання, як диференціальні перерізи і параметри спінової поляризації. З цією метою нами розглядається розсіювання електронів атомами криптону та ітербію, які мають електронну оболонку різної ступені складності.

В роботі [1] в наближенні дійсної частини ОП було теоретично досліджено пружне розсіювання електронів атомами криптону в області енергій зіткнень $0 - 500$ еВ. Порівняння розрахованих там енергетичних залежностей парціальних фазових зсувів з даними нерелятивістського R -матричного розрахунку [2] та релятивістського розрахунку з ОП [3] показало, що використаний в [1] нерелятивістський локальний потенціал з врахуванням спіно-орбітальної взаємодії цілком задовільно описує процес пружного розсіювання електрона атомами криптону в широкій

* За матеріалами доповіді на семінарі, присвяченому пам'яті професора Ю.М. Ломсадзе, Ужгород, 21 лютого 2006 року.

області енергій. Розраховані в [1] енергетичні залежності кутових положень мінімумів диференціальних перерізів (ДП) пружного розсіювання електронів атомами кріптонію добре узгоджуються з наявними в літературі експериментальними та теоретичними даними.

В [4] було показано, що при розрахунках такого параметра спінової поляризації електронів, як функція Шермана $S(\theta)$, для пружного розсіювання спінополіаризованих електронів атомами кріптонію необхідно враховувати потенціал поглинання V_a . Було виявлено, що для енергій від 50 до 65 еВ при кутах розсіювання від 100° до 140° розрахунок з врахуванням V_a краще узгоджується з експериментом, ніж без врахування V_a . При цьому для 60 еВ в кутовому інтервалі 110° – 120° функція Шермана, розрахована без врахування поглинання, відрізняється від експеримента не тільки за формою, але і за знаком. Отже, порівняння параметрів спінової поляризації, розрахованих як з врахуванням, так і без врахування потенціалу V_a , може визначити для атому-мішені область енергій, де розрахунки тонких характеристик розсіювання необхідно проводити в наближенні комплексного ОП.

В роботі [5] методами електронної спектроскопії були виміряні диференціальні перерізи (ДП) пружного розсіювання електронів атомами ітербію в інтервалі кутів 10° – 150° для енергій зіткнення 10, 20, 40, 60 та 80 еВ. В кутовій залежності ДП була одержана структура типу мінімум-максимум. Для 80 еВ дещо несподівано, в порівнянні, наприклад, з розсіюванням на атомі кріптонію [6], мінімуми в перерізі при середніх кутах стали ледь помітними. Разом з тим, з раніше проведених теоретичних досліджень пружного e^-Yb розсіювання в [7] та [8] випливає, що в кутовій залежності ДП і для енергій >100 еВ структура має бути помітною. Наприклад, в [7] в енергетичній залежності ДП і функції Шермана для 135° і 137° були продемонстровані при 182 еВ критичний мінімум в перерізі і майже 100% поляризація розсіювання електронів. Нажаль, в [5] експериментальні ДП пружно-

го розсіювання не були порівняні з теоретичними розрахунками. Тому є доречним проведення розрахунків кутової залежності ДП пружного розсіювання електронів атомами ітербію при середніх енергіях та порівняння їх з експериментом. В роботі [9] в рамках моделі ОП були розраховані ДП пружного розсіювання лише в області низьких енергій 0.1–2.0 еВ. В області середніх енергій (≤ 200 еВ) там були розраховані тільки інтегральний пружний та повний перерізи розсіювання. В якості уявної частини ОП в [9] було взято безпараметричний потенціал поглинання V_{af} , одержаний в [10] в наближенні квазівільного розсіювання електронів. В недавній роботі [6] на прикладі пружного розсіювання електронів атомами кріптонію в області енергій 20–260 еВ було продемонстровано, що для кращого узгодження теоретичного розрахунку з експериментальними ДП необхідно використовувати V_{af} з підгоночним залежним від енергії параметром. Нижче ми досліджуємо вплив форми різних потенціалів поглинання на кутову залежність ДП. Крім потенціалів V_a з [10] та [6], ми також розглядаємо потенціал поглинання McCarthy-типу з [11, 12]. Для визначення феноменологічного параметру для потенціалу поглинання такого типу у випадку атома ітербію в області енергій зіткнення 10–80 еВ нами були використані експериментальні ДП із [5], а для енергій 80–300 еВ – інтегральні перерізи непружного розсіювання із [13, 14].

Метою даної роботи є розрахунок ДП пружного розсіювання атомами кріптонію та ітербію та визначення положень критичних мінімумів в області середніх енергій 10–300 еВ.

2. Теоретичний метод

Для розрахунку характеристик пружного розсіювання електронів атомами використовується той же теоретичний метод, що і в попередніх наших роботах [1, 6, 9, 15].

Як потенціал взаємодії електронів з атомами використовується модельний оптичний потенціал (*SEPASo*- наближення)

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

Розрахунок з дійсною частиною цього потенціалу

$$V_R^{\pm}(r, E) = V_s(r) + V_{so}^{\pm}(r) + V_e(r, E) + V_p(r) \quad (2)$$

будемо називати *SEPSO*-наближенням.

Нижче ми використовуємо атомну систему одиниць (а.о.): $e = m_e = \hbar = 1$, $E = k^2 / 2$ – енергія та k – імпульс налітаючого електрона (1 а.о. енергії = 27.2116 eВ = 2 Ry). Позначення "±" відповідає величині повного кутового моменту електрона

$$V_s(r) = -\frac{Z}{r} \left[\sum_{i=1}^n A_i \exp(-B_i r) + r \sum_{j=1}^m C_j \exp(-D_j r) \right] \quad (3)$$

та

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

де $Z=36$ заряд ядра атома кріптонію. Вирази (3) та (4) були використані для апроксимації за методом найменших квадратів $V_s(r)$ та $\rho(r)$ розрахованих в наближенні Хартрі-Фока [16]. Для $n=2$ та $m=3$ параметри A , B , C та D дорівнюють [16]: $A_1 = 1 - A_2$ та $A_2 = -0.9534$ – безрозмірні; $B_1 = 6.029$, $B_2 = 52.84$, $C_1 = -16.23$, $C_2 = -28.297$, $C_3 = 0.7832$, $D_1 = 14.032$, $D_2 = 38.138$ та $D_3 = 2.174$ – в одиницях a_0^{-1} , a_0 – перший борівський радіус.

Спін-орбітальна взаємодія враховується за допомогою потенціалу [17] (див., також, [15])

$$V_{so}^{\pm}(r) = \xi^{\pm}(j, \ell) \frac{1}{r} \frac{dV_s}{dr} \frac{\alpha^2}{2 + \alpha^2 [E - V_s(r)]}, \quad (5)$$

де $\xi^+(j, \ell) = \ell / 2$ для $j = \ell + 1 / 2$ та $\xi^-(j, \ell) = -(\ell + 1) / 2$ для $j = \ell - 1 / 2$, $\alpha = 1 / 137$ – постійна тонкої структури.

Як обмінний потенціал взято локальний потенціал, одержаний в [18] в наближенні вільного електронного газу

$j = \ell \pm 1 / 2$, ℓ – орбітальний момент електрона.

2.1 Потенціали взаємодії електронів з атомами кріптонію

Дійсна частина ОП для атома кріптонію V_R (2) співпадає з потенціалом $V^{\pm}(r, E)$, який використовувався нами в [1].

Статичний потенціал $V_s(r)$ та густина електронів атома кріптонію $\rho(r)$ обчислюється за допомогою аналітичних виразів:

$$V_e(r, E) = -\frac{2}{\pi} k_F(r) \left(\frac{1}{2} + \frac{1 - \xi^2}{4\xi} \ln \left| \frac{1 + \xi}{1 - \xi} \right| \right), \quad (6)$$

де $k_F(r) = (3\pi^2 \rho(r))^{1/3}$ – імпульс Фермі атомних електронів, $\xi = k_s(r) / k_F(r)$. В [19] для хвильового числа $k_s(r)$ електрона, що розсіюється на відстані r від ядра атома-мішені запропонований вираз

$$k_s^2(r) = k^2 + k_F^2(r) + 2I / (1 + k^2 r^2 / 2), \quad (7)$$

де потенціал іонізації атома кріптонію $I = 13.9997$ eВ [20]. Вираз (7) задовольняє наступним вимогам:

$$k_s^2 \xrightarrow{r \rightarrow \infty} k^2, \quad k_s^2 \xrightarrow{r \rightarrow 0} k^2 + k_F^2 + 2I. \quad (8)$$

Поляризаційний потенціал

$$V_p(r) = -\frac{\alpha_d}{2r^4} \left\{ 1 - \exp \left[- \left(\frac{r}{R_c} \right)^6 \right] \right\} \quad (9)$$

має вільний параметр $R_c = 3.2 a_0$, який знайдено в [1] з використанням енергії

мінімуму Рамзауера-Таундсена. Дипольну поляризованість атома криптому $\alpha_d = 16.74 a_0^3$ взято з [21].

В [9] для врахування непружних процесів використано потенціал $V_{af}(r, E)$, одержаний в наближенні квазівільного розсіювання електронів з Паулієвською блокіровкою [10]. Перевагою цього потенціалу є відсутність емпіричного параметру. Але, як було продемонстровано в [10] на прикладі пружного розсіювання електронів атомами аргону, розраховані ДП суттєво відрізнялися від експерименту починаючи з енергій $E \geq 100$ еВ та кутів $\theta \geq 40^\circ$. У випадку атома криптому таке погіршення узгодження з експериментом починається вже з $E \geq 50$ еВ.

В [1] показано, що в *SEPSO*-наближенні кутове положення мінімумів та їх кількість в ДП добре узгоджуються з експериментальними даними. Однак в середньокуткових максимумах розрахункові значення ДП в [1] більші за експеримент. Наприклад, для 100 еВ (див. рис. 4 в [1]) перевищення даних нашого розрахунку над експериментом [22] склало 200% при 65° та 167% при 120° . Нижче буде запропоновано такий потенціал поглинання, застосування якого дозволить без зміни форми ДП, наблизити розрахункові перерізи до експеримента хоча б в першому локальному максимумі.

В [23] для розрахунку повного перерізу розсіювання позитронів атомами інертних газів запропоновано використовувати потенціал поглинання V_{af} з множником $1/(pr)^a$, залежним від імпульсу налітаючого позитрона p та радіальної відстані r . В [23] запропоновані наступні значення параметру a : для He та Ne – $a=1$ і для Ar, Kr, Xe та Rn – $a=0.5$.

Проведені нами розрахунки ДП в широкій області енергій від 10 до 500 еВ показали, що добре узгодження з експериментом може бути одержане з використанням потенціалу поглинання схожого вигляду як у [23], але з залежним від енергії параметром $a(E)$

$$V_a = V_{af} / (kr)^{a(E)}. \quad (10)$$

Відмітимо, що на відміну від [10], ми, так як і в [23], у виразі для локальної швидкості налітаючого електрона включили поляризаційний потенціал V_p :

$$v_{loc} = \left\{ 2[E - V_s(r) - V_e(r, E) - V_p(r)] \right\}^{1/2}. \quad (11)$$

Значення параметру $a(E)$ знайдено з найкращого узгодження розрахованих ДП з експериментом в області малих та середніх кутів. Для цього використані експериментальні дані в інтервалі енергій 10–200 еВ з [22], для 400 еВ – з [24] та для 500 еВ – з [25]. Для $E \leq 30$ еВ було одержано, що в якості потенціалу поглинання можна взяти V_{af} , отже, для цих енергій $a=0$. Для більших енергій значення параметру $a(E)$ наведені в таблиці 1 (див. [6]).

Таблиця 1. Значення параметру $a(E)$ для потенціалу поглинання V_a (10)

E (eV)	a(E)	E (eV)	a(E)
40	0.21	100	0.98
50	0.55	150	1.04
60	0.77	200	1.10
70	0.87	300	1.20
80	0.93	400	1.30
90	0.96	500	1.40

2.2 Потенціали взаємодії електронів з атомами ітербію

Електростатичний потенціал $V_s(r)$, густина електронів $\rho(r)$ і потенціал іонізації $I = 6.354$ еВ атому ітербію були одержані в [2] в самоузгодженому розрахунку в рамках локального наближення теорії функціоналу густини з врахуванням скалярних релятивістських ефектів (див. табл. 2). Дипольна поляризованість атому Yb, $\alpha_d = 167.84 a_0^3$ [9], була розрахована в рамках часово-залежної теорії функціоналу густини. Як і для атома криптому потенціал спин-орбітальної взаємодії $V_{so}^\pm(r)$ має вигляд (5), обмінний потенціал $V_e(r, E)$ – (6) та поляризаційний потенціал $V_p(r)$ – (9). Вільний параметр в цьому потенціалі $R_c = 5.25 a_0$ було знайдено як і

в [9] з умови існування стабільного негатиного іона Yb^- в $6s^2 6p^2 P_{1/2}$ -стані. Розрахунок енергії спорідненості ε_A електрона до атома ітербію з використанням потенціалу $V_R^\pm (R_c = 5.25)$ дав значення $\varepsilon_A = 31$ меВ, що узгоджується з даними (54 ± 27 меВ) із роботи [26]. Відмітимо, що в експериментальній роботі [27] не було виявлено стабільного або метастабільного стану Yb^- з енергією більше, ніж 3 меВ. В теоретичній роботі [28] стверджується, що $6p^2 P_{1/2}$ -стан є квазізв'язаним станом при 20 меВ. Тому, ми розглянули випадок коли цей стан є припороговим резонансом форми. Розрахунок з використанням менш ефективного потенціалу $V_p(r)$ с $R_c = 5.45 a_0$ дав $2P_{1/2}$ -резонанс форми при 14 меВ. Оскільки в даній роботі нас цікавить ДП для енергій більше 10 еВ, то ми дослідили в якій мірі використання $V_p(r)$ з різними R_c впливає на величину перерізів. Виявилось, що при 10 еВ перерізи незначно відрізняються лише в мінімумах, наприклад, при 120° на $\sim 18\%$.

Із збільшенням енергії відмінність у двох розрахунках зменшується. Як буде продемонстровано нижче, положення першого критичного мінімуму при ~ 48 еВ відрізняється вже незначно. Тому вважаємо, що для досліджуваної в даній роботі області енергій зіткнення використаний метод знаходження поляризаційного потенціалу не залежить від того, яким є при порогових енергіях $6p^2 P_{1/2}$ -стан, стабільним чи метастабільним.

Для атома ітербію в якості уявної частини ОП (1) ми використали потенціал поглинання типу-МсCarthy [11, 12]

$$V_a(r, E) = -W(E)r^2\rho_H(r)T_{loc}^{-2}(r, E), \quad (12)$$

де $W(E)$ – емпіричний параметр, $T_{loc}(r, E)$ – локальна кінетична енергія і $\rho_H(r)$ – густина електронів найвищої заповненої орбіти. Нижче параметр $W(E)$ знайдений із найкращого узгодження розрахованих перерізів з експериментальни-

ми даними із [5, 13, 14]. Для розрахунку локальної кінетичної енергії використано вираз

$$T_{loc}(r, E) = E - V_s(r) - V_e(r, E) - V_p(r). \quad (13)$$

В даній роботі в якості густини електронів $\rho_H = \rho_{6s} + \rho_{4f}$ взято суму густин валентної $6s$ -підоболонки ρ_{6s} та субвалентної $4f$ -підоболонки ρ_{4f} (див. табл. 2).

Врахування в ρ_H $4f$ -підоболонки пояснюється тим, що $4f^{14}$ - та $6s^2$ -підоболонки суттєво перекриваються. З розрахунків структури атома ітербію випливає, що енергії зв'язку електронів на цих підоболонках $\varepsilon_{4f} = -1.08499$ Ry та $\varepsilon_{6s} = -0.45207$ Ry відрізняються одне від одного приблизно у два рази. Великий максимум радіальної електронної густини $4\pi r^2 \rho_{4f}(r)$ знаходиться при $0.4855 a_0$. На інтервалі відстаней $\sim 2 \div 3 a_0$ радіальні електронні густини цих підоболонк приблизно рівні, але поза цим інтервалом, на великих відстанях, густина $4f$ -підоболонки швидше спадає, ніж $6s$ -підоболонки. Крім того, як випливає з робіт [5, 13, 14], внесок від збудження $4f$ електрона у сумарний переріз збудження з основного стану складає, наприклад, при 20 еВ більше 10%. Ці аргументи дозволяють фізично обґрунтовано вважати, що в якості густини ρ_H в (12) можна взяти суму густин електронів $4f$ – та $6s$ – підоболонк. На рис.1 для 60 еВ продемонстровано, що внесок ρ_{4f} в потенціал поглинання (12) $V_a (W = 10.3)$ є основним на малих відстанях ($r < 2a_0$). Починаючи з $4a_0$, потенціал поглинання визначається внеском від ρ_{6s} . При $2.3 a_0$ внесок в V_a від обох густин співпадає. Як видно на рис.1, V_a має два максимуми, при $1.3 a_0$ та $3.1 a_0$. Величина потенціалу в першому максимумі всього в 1.4 рази більша, ніж в другому. Таким чином, множник r^2 разом з T_{loc} в знаменнику нівелюють внесок субвалент-

ної $4f^{14}$ - підоболонки в потенціал поглинання (12) на малих відстанях.

Таблиця 2. Електростатичний потенціал $V_s(r)$, повна густина електронів $\rho(r)$, густини електронів $\rho_{4f}(r)$ субвалентної $4f^{14}$ - та $\rho_{6s}(r)$ валентної $6s^2$ -підоболонки в (а.о.).

$r(a_0)$	$-V_s(r)$	$\rho(r)$	$\rho_{4f}(r)$	$\rho_{6s}(r)$
0.01	0.65447E+04	0.72842E+05	0.51989E-04	0.35893E+01
0.05	0.10612E+04	0.38170E+04	0.12154E+00	0.33350E+00
0.1	0.42871E+03	0.78024E+03	0.16353E+01	0.41123E-02
0.2	0.14954E+03	0.20797E+03	0.81161E+01	0.22221E-01
0.3	0.73814E+02	0.50195E+02	0.10558E+02	0.15697E-01
0.4	0.41322E+02	0.30564E+02	0.86494E+01	0.22604E-01
0.5	0.24921E+02	0.20170E+02	0.59311E+01	0.40655E-02
0.6	0.16080E+02	0.11293E+02	0.37840E+01	0.64728E-03
0.7	0.10989E+02	0.59000E+01	0.23545E+01	0.68228E-02
0.8	0.78354E+01	0.32621E+01	0.14639E+01	0.11595E-01
0.9	0.57523E+01	0.20226E+01	0.92082E+00	0.12234E-01
1.0	0.43112E+01	0.13624E+01	0.58887E+00	0.99921E-02
1.5	0.12935E+01	0.28181E+00	0.77439E-01	0.17887E-04
2.0	0.56498E+00	0.64424E-01	0.13742E-01	0.38747E-02
2.5	0.29333E+00	0.18242E-01	0.29886E-02	0.60748E-02
3.0	0.16531E+00	0.77210E-02	0.74018E-03	0.54697E-02
3.5	0.95833E-01	0.43751E-02	0.19958E-03	0.39776E-02
4.0	0.56058E-01	0.27319E-02	0.57158E-04	0.26105E-02
4.5	0.32883E-01	0.17178E-02	0.17135E-04	0.16245E-02
5.0	0.19306E-01	0.10315E-02	0.53230E-05	0.98349E-03
6.0	0.66589E-02	0.35306E-03	0.55460E-06	0.34967E-03
7.0	0.22970E-02	0.12454E-03	0.61722E-07	0.12441E-03
8.0	0.79238E-03	0.45208E-04	0.71382E-08	0.45200E-04
9.0	0.27334E-03	0.16862E-04	0.84517E-09	0.16861E-04
10.0	0.93181E-04	0.64558E-05	0.10164E-09	0.64557E-05

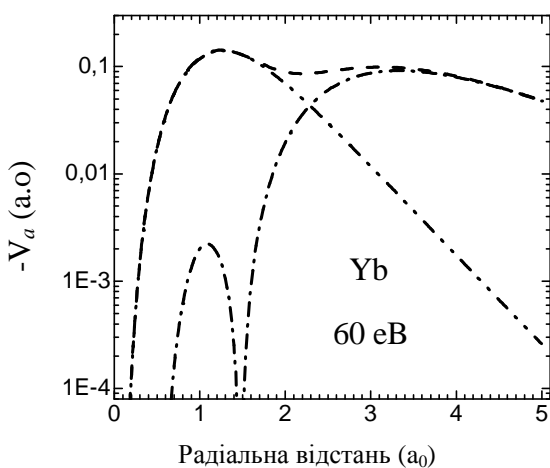


Рис. 1. – Потенціал поглинання $V_a(r)$ (12) для 60 eV з $W(E) = 10.3$, коли: $\rho_H = \rho_{6s}$ – пунктир з крапкою, $\rho_H = \rho_{4f}$ – пунктир з двома крапками та $\rho_H = \rho_{6s} + \rho_{4f}$ – пунктир

Для визначення величини $W(E)$ в (12) для енергій 10–80 eV були використані експериментальні дані ДП пружного розсіювання [5]. Як буде видно нижче, розрахунок ДП без врахування поглинання дав кутову залежність подібну до експерименту. Врахування поглинання дозволило наблизити розрахунок до експерименту в області середніх кутів. В табл. 3 наведені розраховані нами інтегральні перерізи пружного та непружного розсіювання.

Для визначення параметра $W(E)$ в інтервалі енергій 80–300 eV ми використали експериментальні інтегральні перерізи непружного розсіювання $S_{in} = S_{exc} + S_{ion}$ [13, 14]. В якості перері-

зу збудження $S_{exc} = \sigma_1^{exc} + \sigma_2^{exc}$ було взято суму перерізів одноелектронних переходів із основного стану для валентного $6s$ та субвалентного $4f$ електронів. Переріз σ_1^{exc} було одержано як сума чотирьох перерізів збудження $6s$ електрону: $4f^{14}6s^2\ ^1S_0 \rightarrow 4f^{14}6snp(n=6-8)\ ^1P_1^0$ та $6s6p\ ^3P_1^0$. σ_2^{exc} – переріз переходу $4f$ електрона: $4f^{14}6s^2\ ^1S_0 \rightarrow 4f^{13}5d6s^2\ ^7/2[3/2]_1^0$. Ці перерізи приведені в [13, 14] для енергій від порогу до 60 еВ на рисунках і для 100, 200 та 300 еВ в таблиці. Переріз іонізації S_{ion} наведено в [14, (рис. 5.3)] для енергій від порогу до 300 еВ. Як випливає із таблиці 3 для 60 еВ наш розрахунок σ_{in} перевищує експеримент S_{in} на $\sim 10\%$ і знаходиться в межах визначення абсолютних значень S_{in} (30% див. [13]). Тому ми нормували переріз S_{in} на наш переріз

σ_{in} при 60 еВ. Одержані значення S'_{in} (див. табл. 3) ми використали для знаходження значень $W(E)$ при 100, 200, 300 еВ. В таблиці 4 наведені знайдені нами значення параметрів $W(E)$.

2.3 Методика розрахунку

Для розрахунку перерізів розсіювання та параметрів спінової поляризації нижче використовується метод фазових функцій [29, 30]. Для енергій вищих за перший непружний поріг 9.915 еВ для атома кріптонію та 2.144 еВ для атому ітербію [20], коли уявна частина оптичного потенціалу $V_a \neq 0$, можна отримати комплексні фазові зсуви $\delta_\ell^\pm = \varepsilon_\ell^\pm + i\tau_\ell^\pm$ парціальних амплітуд розсіювання. Метод фазових функцій дає можливість розрахувати абсолютні значення фазових зсувів,

Таблиця 3. Інтегральні перерізи пружного (σ_{el}) та непружного (σ_{in}, S_{in}) розсіювання електронів атомами ітербію в (a_0^2). S'_{in} – масштабований при 60 еВ переріз S_{in} [13]

E (eV)	Розрахунок з поглинанням				Експеримент		
	Даний		[8]		[5]	[13]	S'_{in}
	σ_{el}	σ_{in}	σ_{el}	σ_{in}	σ_{el}	S_{in}	
10	137.1	98.3	204.8	13.2	95.0±31.1	43.3	–
20	107.6	69.6	152.2	18.5	76.8±15.0	63.0	–
30	93.0	66.5	102.8	17.0	–	64.2	–
40	81.2	68.8	–	–	43.6±11.1	60.1	–
50	73.2	64.0	83.0	15.4	–	56.4	–
60	66.5	60.2	–	–	43.6±11.1	53.2	60.2
80	56.0	54.4	66.1	12.8	37.5±8.2	–	–
100	48.5	50.0	58.1	11.5	–	44.3	50.1
200	30.7	31.3	37.4	7.71	–	27.7	31.3
300	24.5	16.1	28.5	5.86	–	14.3	16.1

Таблиця 4. Значення параметру $W(E)$ для потенціалу (12)

E(eV)	W(E)	E(eV)	W(E)
10	0.30	80	18.2
20	0.90	100	28.2
40	4.62	200	87.0
60	10.3	300	112.0

$$\varepsilon_\ell = \lim_{r \rightarrow \infty} \varepsilon_\ell(r), \tau_\ell = -\frac{1}{2} \ln \left[\lim_{r \rightarrow \infty} \eta_\ell(r) \right]. \quad (14)$$

Фазові функції $\varepsilon_\ell(r)$ та $\eta_\ell(r)$ задовольняють системі двох зв'язаних звичайних 1-го порядку нелінійних диференціальних фазових рівнянь [29]

$$\begin{aligned} \varepsilon_\ell'(r) = & -\frac{1}{4k\eta_\ell(r)} \widehat{D}_\ell^2(kr) \{V_R(r) [1 + \eta_\ell(r)]^2 \sin^2(\widehat{\delta}_\ell(kr) + \varepsilon_\ell(r)) - \\ & - [1 - \eta_\ell(r)]^2 \cos^2[\widehat{\delta}_\ell(kr) + \varepsilon_\ell(r)] - V_a(r) [1 - \eta_\ell^2(r)] \sin 2[\widehat{\delta}_\ell(kr) + \varepsilon_\ell(r)]\}, \end{aligned} \quad (15)$$

$$\begin{aligned} \eta_\ell'(r) = & \frac{1}{2k} \widehat{D}_\ell^2(kr) \{V_a(r) [1 + \eta_\ell(r)]^2 \sin^2(\widehat{\delta}_\ell(kr) + \varepsilon_\ell(r)) - \\ & - [1 - \eta_\ell(r)]^2 \cos^2[\widehat{\delta}_\ell(kr) + \varepsilon_\ell(r)] + V_R(r) [1 - \eta_\ell^2(r)] \sin 2[\widehat{\delta}_\ell(kr) + \varepsilon_\ell(r)]\}. \end{aligned} \quad (16)$$

Амплітуди та фази Ріккати-Бесселя \widehat{D}_ℓ і $\widehat{\delta}_\ell$ в (15)–(16) визначаються за формулами:

$$\begin{aligned} \widehat{D}_\ell(x) &= [j_\ell^2(x) + n_\ell^2(x)]^{1/2}, \\ \widehat{\delta}_\ell(x) &= -\arctg[j_\ell(x)/n_\ell(x)], \end{aligned} \quad (17)$$

де $j_\ell(x)$ і $n_\ell(x)$ – функції Ріккати-Бесселя (див. Додаток I в [29]).

Оскільки потенціал $V_R^\pm(r)$ при $r \rightarrow 0$ має сингулярну поведінку $r^2 V_R^\pm(r) \rightarrow r^2 V_{so}^\pm(r) \rightarrow const$, (див. (5)), то початкова умова для (15) буде такою ж, як (7) в [15]. Початкова умова для (16) є $\eta_\ell(0) = 1$. Зауважимо, що в початкових точках інтегрування в рівняннях (15)–(16) $V_{af} = 0$ [9, 10]. Наприклад, у випадку атома крипто-ну $V_{af} = 0$ для $r \leq 0.7 a_0$ при $E = 500$ еВ та для $r \leq 1.9 a_0$ при $E = 50$ еВ. Таким чином, для малих радіальних відстаней, де $V_a = 0$, $\eta_\ell(r) = 1$ і розв'язок системи рівнянь (15)–(16) зводиться до інтегрування лише одного рівняння (15) для $\varepsilon_\ell(r)$. Як впливає з (12), такі початкові умови можуть бути використані і для випадку атома ітербію.

Як і в наших попередніх роботах [9, 15] для чисельного розв'язку системи (15)–(16) використовується метод 4-го порядку з передбаченням за Адамсом-Башфортом з корекцією за Адамсом-Мултоном та модифікацією [31] і з автоматичним контролем величини кроку, яка не перевищувала б $0.05 a_0$. Інтегруючи (15)–(16) до таких великих $r = r_0$, коли дією потенціалу V_{opt} (1) можна знехтувати, отримуємо значення дійсних та уявних частин фазових зсувів:

$$\varepsilon_\ell = \varepsilon_\ell(r_0) \text{ та } 2\tau_\ell = -\ln(\eta_\ell), \quad (18)$$

де $\eta_\ell = \eta_\ell(r_0)$.

Як і в [9], для визначення r_0 використовується умова $|2V_R(r_0)/[2V_R(r_0) - \ell(\ell+1)/r_0^2 - k^2]| \leq 4 \times 10^{-5}$.

Для $\ell \geq 1$ та кожного повного кутового моменту електрона $j = \ell \pm 1/2$ в залежності від енергії налітаючого електрона кількість пар комплексних фазових зсувів δ_ℓ^\pm , розрахованих за допомогою (15)–(16), була різною. Як і в [15], ці пари розраховувались до таких $\ell = L_1$, починаючи з яких

$$\begin{aligned} |\varepsilon_\ell^+ - \varepsilon_\ell^-| &< 10^{-4} \text{ рад} \quad \text{та} \\ |\tau_\ell^+ - \tau_\ell^-| &< 10^{-4} \text{ рад.} \end{aligned}$$

Для $\ell > L_1$ ми вважаємо, що $\delta_\ell^+ = \delta_\ell^-$. Наприклад у випадку атома крипто-ну, для 50 еВ $L_1 = 7$, а для 500 еВ $L_1 = 18$. Для $\ell > L_1$, коли дійсна частина фазового зсуву ε_ℓ набувала значення вже ≤ 0.02 рад, а уявна частина τ_ℓ ставала $\leq 10^{-4}$ рад, ми починали порівняння розрахованих ε_ℓ з асимптотичними значеннями фазового зсуву δ_ℓ^{as} , знайденими за формулою для асимптотичних фаз, яка для випадку коли потенціал (1) на великих відстанях r спадає як $-\alpha_d/2r^4$, має вигляд (див., наприклад, [32])

$$\delta_\ell^{as} = \arctg \frac{\pi \alpha_d k^2}{(2\ell + 3)(2\ell + 1)(2\ell - 1)}. \quad (19)$$

Коли різниця $|\varepsilon_\ell - \delta_\ell^{as}|$ стає найменшою, то розрахунок δ_ℓ за (15)–(16) припиняється та для $\ell > L_2$ вважаємо, що $\varepsilon_\ell = \delta_\ell^{as}$ та $\tau_\ell = 0$. Зауважимо, що кіль-

кість фаз, розрахованих в *SEPASo*-наближенні у випадку атома криптону, була така ж, як і в [1] для *SEPSo*-наближення. Наприклад, для 50 та 500 еВ $L_2 = 12$ і 31, відповідно. Для цих енергій і відповідних $\ell = L_2$ були отримані наступні значення фазових зсувів (в радіанах): $\delta_{12}(50) = 0.0125 + i2.21 \cdot 10^{-5}$ та $\delta_{31}(500) = 7.73 \cdot 10^{-3} + i7.97 \cdot 10^{-7}$. Відмітимо, що і для інших енергій та відповідних $\ell = L_2$ були

отримані значення уявної частини фазового зсуву $\tau_\ell < 10^{-4}$ рад. Такий же принцип розрахунку фазових зсувів було застосовано і у випадку атома ітербію.

Маючи фазові зсуви δ_ℓ^\pm , знаходимо, так звані, "пряму" $f(\theta)$ та "з перевертотом спіну" $g(\theta)$ амплітуди розсіювання

$$f(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{\ell=0}^{\infty} \left\{ (\ell+1) \left[\frac{\exp(2i\varepsilon_\ell^+)}{\exp(2\tau_\ell^+)} - 1 \right] + \ell \left[\frac{\exp(2i\varepsilon_\ell^-)}{\exp(2\tau_\ell^-)} - 1 \right] \right\} P_\ell(\cos \theta), \quad (20)$$

$$g(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{\ell=1}^{\infty} \left\{ \left[\frac{\exp(2i\varepsilon_\ell^-)}{\exp(2\tau_\ell^-)} - \frac{\exp(2i\varepsilon_\ell^+)}{\exp(2\tau_\ell^+)} \right] \right\} P_\ell^1(\cos \theta), \quad (21)$$

де θ – кут розсіювання, $P_\ell(\cos \theta)$ – многочлени Лежандра, $P_\ell^1(\cos \theta)$ – приєднані функції Лежандра 1-го роду (див., наприклад, [31]).

Оскільки у (20) та (21) уявна частина фазового зсуву τ_ℓ^\pm знаходиться лише в знаменнику, то з врахуванням достатньої точності розрахунку ДП будемо вважати, що для всіх $\ell > L_2$ (коли $\tau_\ell < 10^{-4}$ рад.) –

$\exp(2\tau_\ell) = 1$. Тому для таких ℓ вважаємо, що $\tau_\ell = 0$. Всього для розрахунку амплітуд розсіювання були використані фазові зсуви для $\ell \leq 300$.

Диференціальні перерізи пружного розсіювання та параметри спінової поляризації розсіяних електронів розраховуються за формулами [33]:

$$\frac{d\sigma(\theta)}{d\Omega} = |f(\theta)|^2 + |g(\theta)|^2, \quad S(\theta) = i \frac{fg^* - f^*g}{d\sigma/d\Omega}, \quad U(\theta) = \frac{fg^* + f^*g}{d\sigma/d\Omega}, \quad T(\theta) = \frac{|f|^2 - |g|^2}{d\sigma/d\Omega}. \quad (22)$$

Параметри спінової поляризації пов'язані умовою $S^2 + U^2 + T^2 = 1$. Інтегральні перерізи пружного та непружного розсію-

вання розраховуються відповідно за формулами:

$$\sigma_{el} = \frac{2\pi}{k^2} \sum_{\ell} \left\{ (\ell+1) \exp(-2\tau_\ell^+) [\cosh 2\tau_\ell^+ - \cos 2\varepsilon_\ell^+] + \ell \exp(-2\tau_\ell^-) [\cosh 2\tau_\ell^- - \cos 2\varepsilon_\ell^-] \right\} \quad (23)$$

та

$$\sigma_{in} = \frac{\pi}{k^2} \sum_{\ell} \left\{ (\ell+1) [1 - \exp(-4\tau_\ell^+)] + \ell [1 - \exp(-4\tau_\ell^-)] \right\}. \quad (24)$$

3. Обговорення результатів

На рис. 2 ДП розраховані в *SEPASo*-наближенні з врахуванням як V_a (10), так і V_{af} , порівняні з експериментальними [6,

22, 24, 25] та теоретичними [1, 11, 34] даними. На рисунках видно, що розрахунок з V_{af} дає занижене значення ДП для 60 еВ починаючи з 50°, а для 200 еВ – починаючи з 35°. Навпаки, розрахунок з V_a (10)

добре узгоджується з експериментом у всій кутовій області. Для 60 еВ наш розрахунок ближче до експерименту, ніж розрахунок [34] при кутах 50° - 100° . Як видно на рис. 2а всі розрахунки з врахуванням поглинання не мають глибокого мінімуму при 116° . Для 200 еВ наш розрахунок з V_a (10) краще узгоджується з експериментальними даними з [24, 25, 6], ніж з [22], а при середніх і великих кутах добре узгоджується з розрахунками [11] та [34], за виключенням мінімуму при 80° .

Вище згадувалось, що в [4] було вказано на необхідність врахування потенціалу поглинання при розрахунках функції Шермана $S(\theta)$.

На рис. 3 для 60 еВ та 200 еВ наші розрахунки $S(\theta)$ як з врахуванням потенціалів поглинання V_{af} та V_a (10), так і без врахування поглинання, ми порівнюємо з експериментальними даними та розрахунком з врахуванням поглинання з [4].

Як видно на рис. 3а для 60 еВ принципова відміна *SEPSO*-розрахунку від експерименту та від розрахунків з врахуванням поглинання отримана у вузькому інтервалі кутів 107° - 118° , в околі висококутового мінімуму в ДП при 116° . На рис. 3а максимальне значення в *SEPSO*-розрахунку функція Шермана досягає при 115.8° , де $S = 0.998$. В інтервалі кутів 45° - 50° , так як і на рис. 2а, розрахунок з

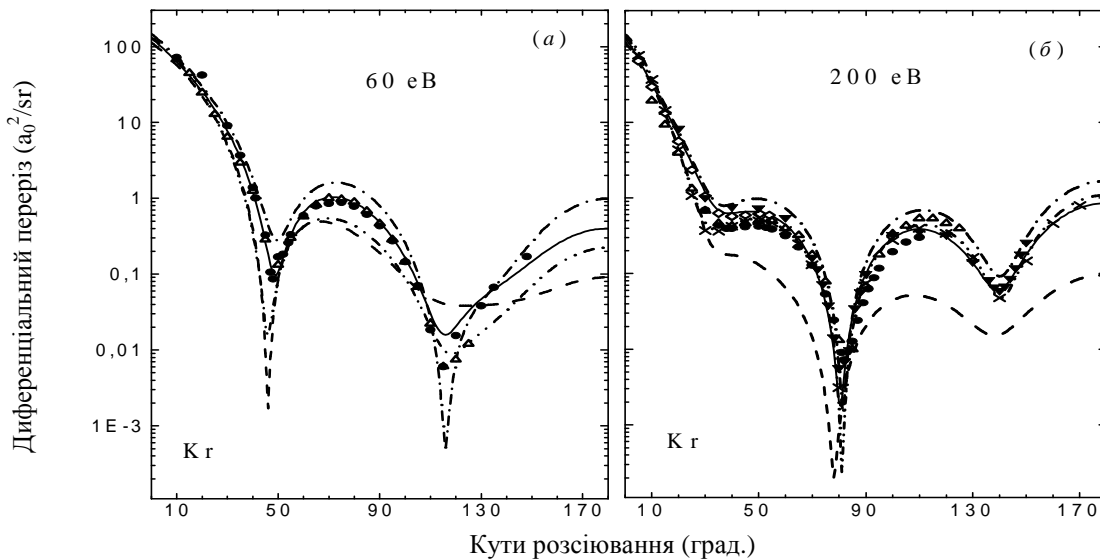


Рис. 2. – Кутова залежність диференціальних перерізів пружного розсіювання електронів атомами кріптону для 60 еВ (а) та 200 еВ (б). Експеримент: Δ – [22], \blacktriangledown – [24], \diamond – [25], \bullet – [6]. Теорія: пунктир з одною крапкою – [1], суцільна – даний розрахунок з V_a (10), пунктир – даний розрахунок з V_{af} [10], х – [11], пунктир з двома крапками – [34]

V_a (10) краще узгоджується з експериментом, ніж розрахунки в [4] та дані з V_{af} , де $S(46^\circ) = -0.62$.

На рис. 3б для 200 еВ розрахунок з V_a (10) краще узгоджується з експериментом, ніж розрахунок в [4] та дані розрахунки без врахування поглинання та з V_{af} . Розрахунок з V_{af} перетинає нульову вісь при 77° , тоді як інші розрахунки майже там, де і експеримент. На відміну від розрахунку з V_a (10), розрахунки *SEPSO* та [4] в екстремумах в декілька раз перевищують експеримент.

В цілому якісне узгодження *SEPSO*-наближення з експериментом та збіг положень мінімумів в ДП дозволяє використовувати потенціал (2) для отримання вірогідного уявлення про кутову залежність ДП та параметрів спінової поляризації пружного розсіювання в широкій області енергій зіткнень електронів з атомами кріптону.

Разом з тим, як видно на рис. 3а, нехтування поглинанням при розрахунках такої тонкої характеристики розсіювання, як функція Шермана, може дати неправильні результати, особливо в мало-

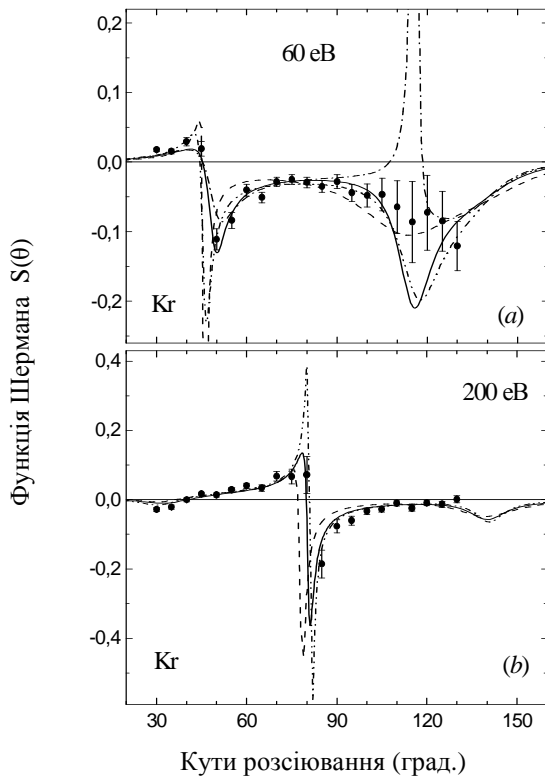


Рис. 3. – Кутова залежність функції Шермана $S(\theta)$ пружного розсіювання електронів атомами криптону для 60 еВ (а) та 200 еВ (б). Експеримент: ● – [4]. Теорія: пунктир з двома крапками – [4]. Даний розрахунок: пунктир з однією крапкою – без врахування поглинання, суцільна – з $V_a(10)$, пунктир – з V_{af} [10]

му околі енергій та кутів глибоких міні-

мумів в ДП. Запропонована модифікація потенціалу поглинання для *SEPASo*-наближення може бути використана для розрахунку параметрів спінової поляризації та ДП пружного розсіювання електронів атомами криптону в широкій області енергій зіткнень.

Як видно на рисунку 4, для випадку розсіювання електронів атомами ітербію розрахунок в *SEPSo*-наближенні також дає добре якісне узгодження з експериментом. Врахування потенціалу поглинання суттєво покращує узгодження нашого розрахунку з експериментом при середніх і великих кутах розсіювання.

Відмітимо, що наш розрахунок підтверджує монотонну кутову залежність ДП для 80 еВ, яка була отримана в експерименті. Як видно на рис. 4 в кутовій залежності ДП для енергій >80 еВ знову появляється чітка структура типу мінімум-максимум.

Причому, для енергій >200 еВ ДП вже має чотири мінімуми. На рис. 4 наведено розрахунок ДП [8] із застосуванням інших модельних потенціалів. Зокрема, в якості потенціалу поглинання в [8] було використано версію 3 потенціалу V_{af} з

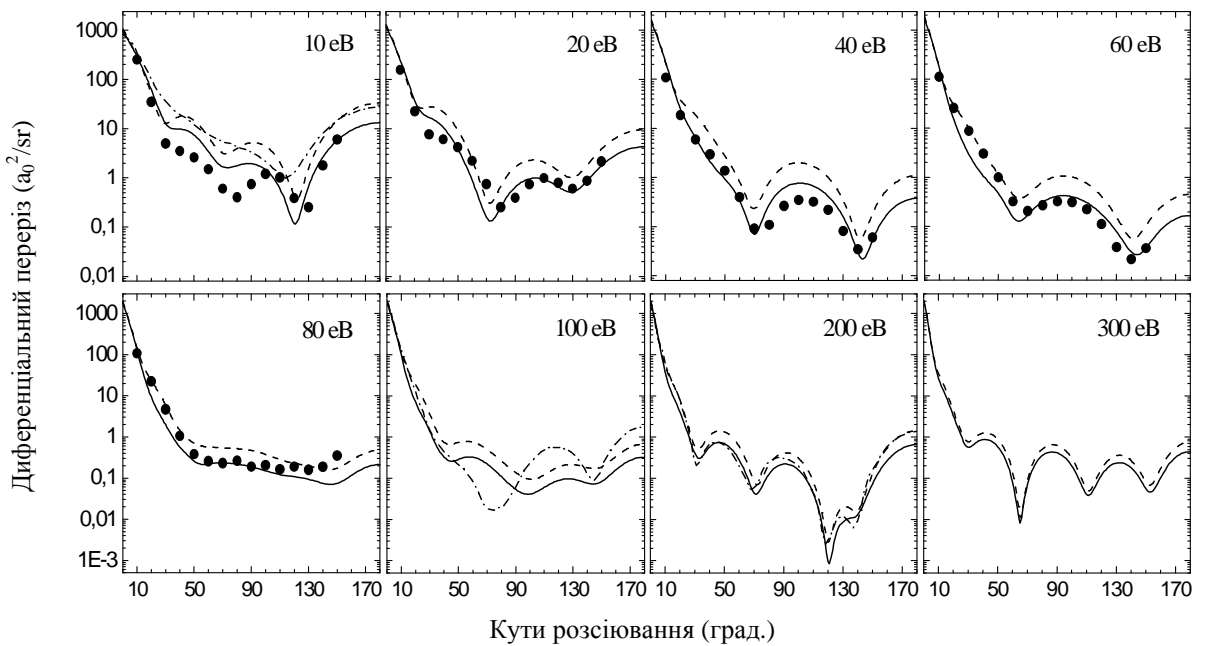


Рис. 4. – Кутова залежність диференціальних перерізів пружного розсіювання електронів атомами ітербію. Експеримент: ● – [6]. Теорія: пунктир з одною крапкою – [8], суцільна – *SEPASo*-розрахунок з $V_a(12)$, пунктир – *SEPSo*-розрахунок

[12]. Як видно на рис. 4 при 10 eV цей розрахунок досить суттєво відрізняється від експерименту та нашого розрахунку. Відмінність в розрахунках зберігається і при 100 eV для середніх та великих кутів розсіювання. Тільки для 200 eV відмінність в розрахунках з використанням різних модельних потенціалів нівелювалася. Отже при таких енергіях основний вплив на величину та форму ДП мають тільки статичні потенціали, Хартри-Фоківський в [8] та функціоналу густини, які, очевидно, добре узгоджуються одне з одним, та далекодючі частини поляризаційного потенціалу. Як видно в табл. 3 інтегральні перерізи непружного розсіювання отримані в [8] у декілька разів менші за експеримент [13] та наш розрахунок. Наприклад, для 20 eV переріз σ_{in} в [8] більше ніж в три рази менший за експеримент. Разом з тим, інтегральний переріз пружного розсіювання σ_{el} , отриманий в [8], для всіх енергій більший за експеримент [5]. Наприклад, для 20 eV – в ≈ 2 рази. Отже, потенціал поглинання використаний в [8] занадто слабкий порівняно з дійсною частиною і таким чином, недостатньо ефективно враховує вплив непружних процесів на пружний канал розсіювання.

В таблиці 5 наведені положення критичних мінімумів в ДП пружного розсіювання електронів атомами ітербію, знайдених як з врахуванням поглинання, так і без врахування поглинання.

Таблиця 5. Енергії E_c (eV) та кути θ_c (град) критичних мінімумів в пружному розсіюванні електронів атомами ітербію

SEPS ₀		SEPAS ₀	
E_c	θ_c	E_c	θ_c
47.7	142.4	47.3	143.9
123.8	91.3	120.5	90.5
181.1	138.3	177.6	135.8
208.3	119.3	199.1	120.9

Вище було відмічено, що ДП, які були розраховані в SEPS₀-наближенні з використанням двох значень параметру R_c поляризаційного потенціалу $V_p(r)$ ($5.25 a_0$

та $5.45 a_0$), для енергій більше 10 eV незначно відрізняються одне від одного. Відомо, що положення критичних мінімумів в ДП є одним з найбільш чутливих тестів теоретичної моделі. Тому ми розраховали в SEPS₀-наближенні з $R_c=5.45 a_0$ положення першого критичного мінімуму і отримали значення [47.8 eV; 142.3°]. Як випливає із табл. 5 відмінність між двома розрахунками справді незначна: 0.1 eV та 0.1°.

Енергетичні залежності ДП розсіювання на кути близькі до θ_c характеризуються наявністю глибоких мінімумів при енергіях, близьких до E_c . На рис. 5 наведені такі залежності ДП для чотирьох кутів розсіювання, отримані у двох наближеннях: з врахуванням та без врахування поглинання.

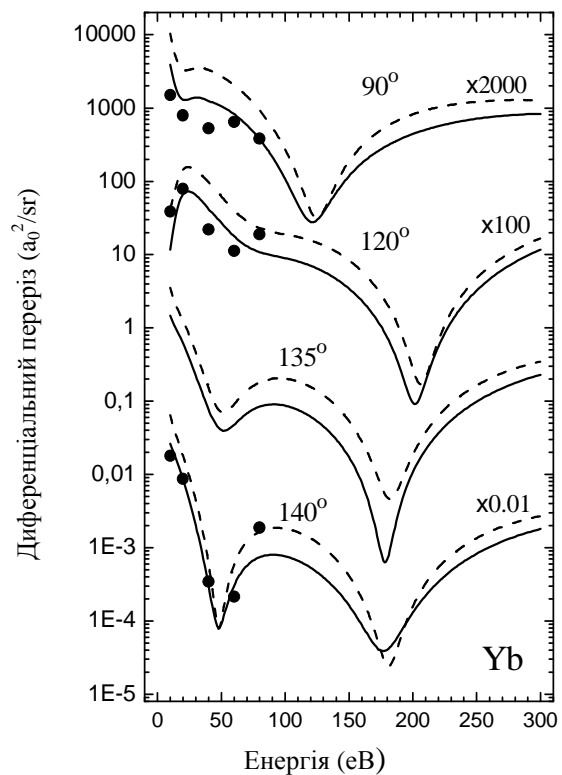


Рис. 5. – Енергетична залежність диференціальних перерізів пружного розсіювання електронів атомами ітербію для фіксованих кутів 90°, 120°, 135° та 140°. Експеримент: ● – [6]. Теорія: суцільна – SEPAS₀-розрахунок з V_a (12), пунктир – SEPS₀-розрахунок

Як видно на рисунку краще всього узгоджується з експериментом [5] розра-

хунок в *SEPASo*–наближенні. Розрахунки в *SEPSo*–наближенні дають таку ж форму енергетичної залежності ДП і більші за величиною ніж розрахунок з врахуванням поглинання.

Для 140° мінімум в ДП при 181 еВ в *SEPSo*–наближенні більш глибокий ніж в *SEPASo*–наближенні, оскільки в першому

випадку θ_c ближче до 140° , ніж у другому випадку (див. табл. 5).

Отже, і у випадку атома ітербію запропонований оптичний потенціал дозволяє отримати цілком задовільні кутові та енергетичні залежності ДП пружного розсіювання в широкій області середніх енергій.

Література

1. В.И.Келемен, *ЖТФ* 74, вып. 6, 1 (2004).
2. W.C.Fon, K.A.Berrington, A.Hibbert, *J. Phys. B.* 17, 3279 (1984).
3. J.E.Sienkiewicz, W.E.Baylis, *J. Phys. B.* 24, 1739 (1991).
4. M.R.Went, R.P.McEachran, B.Lohmann, W.R.MacGillivray, *J. Phys. B.* 35, 4885 (2002).
5. B.Predojević, D.Šević, V.Pejčev, B.P.Marinković, D.M.Filipović, *J. Phys. B* 38, 1329 (a); 3489 (b) (2005).
6. A.R.Milosavljević, V.I.Kelemen, D.M.Filipović, S.M.Kazakov, V.Pejčev, D.Šević, B.P.Marinković, *J. Phys. B* 38, 2195 (2005).
7. V.I.Kelemen, *Proc. Second Europhysics Study Conf. on Photon and Electron Collisions with Atoms and Molecules PECAM II (The Queen's University of Belfast)*, Abstracts of Contributed Papers (1996) p.75.
8. Neerja, A.N.Tripathi, A.K.Jain, *Phys. Rev. A* 61, 032713-1 (2000).
9. V.I.Kelemen, E.Yu.Remeta, E.P.Sabad *J. Phys. B* 28, 1527 (1995).
10. G.Staszewska, D.W.Schwenke, D.G.Truhlar, *Int. J. Quantum Chem.: Quantum Chem Symp.* 17, 163 (1983).
11. I.E.McCarthy, C.J.Noble, B.A.Phillips, A.D.Turnbull, *Phys. Rev. A* 15, 2173 (1977).
12. G.Staszewska, D.W.Schwenke, D.G.Truhlar, *Phys.Rev.A* 29, 3078 (1984).
13. L.L.Shimon, N.V.Golovchak, I.I.Garga, I.V.Kurta, *Opt. Spectrosk.* 50, 1037 (1981).
14. L.L.Shimon, *Эффективные сечения возбуждения и ионизации атомов редкоземельных элементов* (Энергоатомиздат, Москва, 1994).
15. В.И.Келемен, *ЖТФ* 72, 13 (2002).
16. T.G.Strand, R.A.Vonham, *J. Chem. Phys.* 40, 1686 (1964).
17. R.Cowan, *The Theory of Atomic Structure and Spectra* (University of California Press, Berkeley – Los Angeles – London, 1981).
18. S.Hara, *J. Phys. Soc. Jap.* 22, 710 (1967).
19. В.Келемен, Е.Сабад, М.Довганич, *УФЖ* 34, 345 (1989).
20. А.А.Радциг, Б.М.Смирнов, *Параметры атомов и атомных ионов. Справочник* (Энергоатомиздат, Москва, 1986).
21. T.M.Miller, B.Bederson, *Advances in Atomic and Molecular Physics* (Ed. Bates D.R., Bederson B., Academ. Press, N.Y.) 13, 1 (1977).
22. A.Danjo, *J. Phys. B* 21, 3759 (1988).
23. L.Baluja, A.Jain, *Phys. Rev. A* 46, 1279 (1992).
24. J.F.Williams, A.Crowe, *J. Phys. B* 8, 2233 (1975).
25. R.H.J.Jansen, F.J.de Heer, *J. Phys. B* 9, 213 (1976).
26. S.H.Vosko, J.A.Chevary, I.L.Mayer *J. Phys. B* 24, L225 (1991).
27. H.H.Andersen, T.Andersen, U.V.Pedersen, *J. Phys. B* 31, 2239 (1998).
28. V.A.Dzuba, G.F.Gribakin, *J. Phys. B* 31, L483 (1998).
29. Ф.Калоджеро, *Метод фазовых функций в теории потенциального рассеяния* (Мир, Москва, 1972).
30. В.В.Бабилов, *Метод фазовых функций в квантовой механике* (Наука, Москва, 1988).
31. Г.Корн, Т.Корн, *Справочник по математике* (Наука, Москва, 1977).
32. Ф.Дж.Бэрк, *Потенциальное рассеяние в атомной физике* (Атомиздат, Москва, 1980).
33. J.Kessler, *Adv. At. Mol. and Opt. Phys* 27, 81 (1991).
34. R.P.McEachran, A.D.Stauffer, *J. Phys. B* 36, 3977 (2003).

DIFFERENTIAL CROSS SECTIONS FOR ELASTIC ELECTRON SCATTERING FROM ATOMS Kr AND Yb

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

Institute of Electron Physics, Ukr. Nat. Acad. Sci., 21 Universitetska street, 88017, Uzhgorod

e-mail: kelemen@iep.uzhgorod.ua, remeta@iep.uzhgorod.ua

Electron scattering by Kr and Yb atoms in the intermediate energy range $E \leq 500$ eV has been studied within a framework of the phenomenological optical potential (OP) model. The values of the free parameters in the polarization potential were obtained using known energies of the Ramsauer-Townsend minimum for Kr and electron affinity for Yb atoms. The energy-dependent parameters in the imaginary part of the OP were found from the best agreement of calculated cross section with experimental ones. Calculations were carried out both with and without the inclusion of absorption potential. The results are compared with available experimental and theoretical data.