

ОПТИЧНІ ПОТЕНЦІАЛИ РОЗСІЮВАННЯ ЕЛЕКТРОНІВ ТА ПОЗИТРОНІВ БАГАТОЕЛЕКТРОННИМИ АТОМАМИ*

Е. Ремета, В. Келемен

Інститут електронної фізики, НАН України, Університетська 21, Ужгород, 88017

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

З єдиних позицій коротко розглянуті потенціальні складові оптичних потенціалів (ОП) взаємодії електрона або позитрона з атомною системою в процесі розсіювання. Для потенціалів використовується однотипний опис у локальному та локальному спіновому наближеннях теорії функціонала густини (ТФГ). Відмічено важливе значення безпараметричних виразів для складових ОП та аналітичних формул для статичного потенціала, повної і підоболонкових електронних густин і атомних орбіталей.

Вступ

Основною загальною проблемою в атомній і молекулярній фізиці, фізиці твердого тіла і поверхні є експериментальне дослідження та теоретичний опис прояву різних властивостей багатоелектронних систем. Важливим при цьому є вивчення як структурних характеристик таких систем (атоми, молекули, кластери та їх іони, електронні і різноманітні квазі-частинкові стани для конденсованої фази), так і їх пружної та непружної взаємодії з легкими і важкими частинками – фотонами, електронами, позитронами, атомами, іонами – в процесі розсіювання.

Для дослідження складного характеру потенціальної взаємодії (обмінної, поляризаційної, поглинання) при розсіюванні частинки атомною системою застосовуються різні модельні уявлення і наближення. Нами для цього використовується наближення оптичного потенціала. Модельні оптичні потенціали широко застосовуються для опису процесу розсіювання електронів і позитронів багатоелектронними атомними системами при малих та

середніх енергіях зіткнення. Потенціали можуть містити емпіричні параметри, які знаходять за допомогою експериментальних даних. Фундаментальне значення мають безпараметричні потенціали. З ОП треба обраховувати не тільки інтегральні характеристики розсіювання (повні і різноманітні інтегральні перерізи), але і більш детальні, тонкі, більш прямо зв'язані з амплітудою розсіювання – диференціальні перерізи, параметри спінової поляризації, параметр асиметрії. Застосування різних модельних уявлень про взаємодію налітаючої частинки з атомною системою визначається важливою вимогою використання, по можливості, однотипних наближень. Це дозволяє говорити про узгоджений (та навіть про самоузгоджений) опис процесу розсіювання. З цією метою функціональні і прості величини, необхідні в ОП для опису розсіювання електронів і позитронів атомами, ми знаходимо в локальних наближеннях стаціонарної [1] та нестаціонарної [2, 3] теорії функціонала густини.

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

Електронне розсіювання

Загальний вид оптичного потенціалу взаємодії налітаючого електрона енергії E з N -електронним атомом такий [4]

$$V_{opt}(r, E) = V_R(r, E) + iV_A(r, E), \quad (1)$$

$$V_R(r, E) = V_S(r) + V_X(r, E) + V_P(r).$$

ОП складається з таких відомих складових його дійсної $V_R(r, E)$ та уявної частин, як: статичний $V_S(r)$, обмінний $V_X(r, E)$ і поляризаційний $V_P(r)$ потенціали та потенціал поглинання $V_A(r, E)$. Отримання тих чи інших членів ОП визначає фізичний тип наближення та дозволяє вивчати їх роль при опису розсіювання.

Статичний потенціал $V_S(r)$ (тут та надалі в а.о.)

$$V_S(r) = V_n(r) + V_H(r) = -\frac{Z}{r} + \frac{1}{2} \int d\vec{r}' \frac{\rho(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|}, \quad (2)$$

де $V_n(r)$ – потенціал кулонівської взаємодії електрона з ядром та потенціал Хартрі $V_H(r)$ описує кулонівську взаємодію налітаючого електрона з N електронами атома-мішені, електронна густина якого є $\rho(r)$.

Для кількісного опису релятивістських ефектів до $V_R(r, E)$ додають потенціал спин-орбітальної взаємодії електрона з атомом-мішенню [5,6] (це врахування найбільшої частини релятивістських ефектів при розсіюванні частинок)

$$V_{so}^{\pm}(r) = \xi^{\pm}(j, \ell) \cdot \frac{1}{r} \cdot \frac{dV_S}{dr}, \quad (3)$$

де $\xi^+(\ell + 1/2, \ell) = \ell/2$, $\xi^-(\ell - 1/2, \ell) = -(\ell + 1)/2$, ℓ – орбітальний момент; j – повний кутовий момент електрона. Сингулярну поведінку цього потенціалу на малих відстанях виправляють, записуючи його у вигляді [7]

$$V_{so}^{\pm}(r) = \xi^{\pm}(j, \ell) \cdot \frac{1}{r} \cdot \frac{dV_S}{dr} \cdot \frac{\alpha^2}{2 + \alpha^2[E - V_S(r)]}, \quad (4)$$

де α – стала тонкої структури. З (3) та (4) бачимо, що корисним при числових розрахунках є наявність аналітичного виразу для потенціалу $V_S(r)$.

З метою більш повного врахування релятивістських ефектів в роботі [8] (див., також [9]) введено еквівалентний ефектний потенціал. Його отримують у наближенні центрального поля, переходячи від опису розсіювання завдяки рівнянню Дірака до еквівалентного опису у рамках рівняння Шредінгера.

Локальний обмінний потенціал $V_X(r, E)$ у наближенні неоднорідного електронного газу [4,10] має вигляд

$$V_X(r, E) = -\frac{2k_F(r)}{\pi} \left(1 + \frac{1 - \xi^2}{2\xi} \ln \left| \frac{1 + \xi}{1 - \xi} \right| \right), \quad (5)$$

де $k_F(r) = [3\pi^2 \rho(r)]^{1/3}$, $k^2 = 2E$, $\xi(r, E) = k_s(r, E) / k_F(r)$, $k_s^2(r, E) = k^2 - V(r, k^2/2)$. В потенціальну функцію $V(r, k^2/2)$ у хвильовому векторі $k_s(r, E)$ налітаючого електрона, включають потенціали $V_S(r)$ та $V_P(r)$. Можна включити також і центробіжний член $(\ell + 1/2)^2 / 2r^2$ у квазікласичному наближенні. Важливо зауважити, що включення в цю функцію обмінного потенціалу дозволяє ітераційно уточнювати як $k_s(r, E)$, так і сам потенціал V_X .

Поляризаційний потенціал $V_P(r)$ визначається кореляційною взаємодією налітаючого електрона з N -електронами мішені. У локальному наближенні ТФГ для неоднорідного електронного газу, фізично виправдано використовувати наступний безпараметричний вираз для поляризаційного потенціалу $V_P(r)$ [11,12] (в роботах [13,14] цей потенціал використовується для опису розсіювання електронів на атомі кальцію)

$$V_P(r) = \begin{cases} 2\mathcal{E}_c(r_s) a b d \left(1 - \frac{r_s}{3} \cdot \frac{d}{dr} \right) \cdot 2\mathcal{E}_c(r_s), & r \leq r_c \\ -\frac{\alpha_d(0)}{2r^4} - \frac{\alpha_q(0)}{2r^6}, & r > r_c. \end{cases} \quad (6)$$

Вираз для густини кореляційної енергії $\varepsilon_c(r_s)$ в (6), яка характеризує міжелектронну взаємодію в залежності від елект-

ронної густини, має вид [11,12] (див. також інший вираз в [15])

$$2\varepsilon_c(r_s) = \begin{cases} 0.0622 \cdot \ln r_s - 0.096 + 0.018 \cdot r_s \cdot \ln r_s - 0.02 \cdot r_s, & r_s \leq 0.7 \\ -0.1231 + 0.03796 \cdot \ln r_s, & 0.7 < r_s \leq 10 \\ -0.87 \cdot r_s^{-1} + 2.65 \cdot r_s^{-3/2} - 2.8 \cdot r_s^{-2} - 0.8 \cdot r_s^{-5/2}, & 10 \leq r_s, \end{cases} \quad r_s(r) = \left[\frac{3}{4\pi \cdot \rho(r)} \right]^{1/3}.$$

Тут використано статичне (потенціал не залежить від енергії E) адіабатичне наближення. Поведінка поляризаційного потенціалу на великих відстанях відповідає наведеному налітаючою частинкою у електронній оболонці диполу та квадруполю з відповідними статичними поляризованостями $\alpha_d(0)$ і $\alpha_q(0)$. Величини поляризованостей можна знайти в локальному наближенні часозалежної ТФГ [2, 3]. Використання двох доповнюючих одне одного виразів при $r \leq r_c$ відображає два можливих підходи до застосування кореляційного потенціалу в $(N+1)$ -електронній компаунд системі.

Потенціал поглинання $V_A(r, E)$ не дорівнює нулеві при $E > \Delta$, де Δ – енергія збудження 1-го рівня. В наближенні квазівільного розсіювання електронів з врахуванням принципу Паулі він має вид без параметрів [16]

$$V_a(r, E) = -\frac{1}{2} v_{loc}(r, E) \cdot \rho(r) \cdot \bar{\sigma}_b(r, E). \quad (7)$$

В (7) локальна швидкість налітаючого електрона $v_{loc}(r, E) = \sqrt{2E - V(r, E)}$ (див. вище подібний вираз для хвильового вектора $k_s(r, E)$), а $\bar{\sigma}_b(r, E)$ – повний переріз електрон-електронного зіткнення з врахуванням принципу Паулі (див. [16])

$$\bar{\sigma}_b(r, E) = [4\pi/5 \cdot E \cdot k_F^3(r)] \cdot f(r, E), \quad (8)$$

$$f = \begin{cases} f_1, & \Delta + k_F^2(r) \leq E \\ f_1 + f_2, & \Delta + k_F^2(r)/2 \leq E \leq \Delta + k_F^2(r), \\ 0, & E \leq \Delta + k_F^2(r)/2 \end{cases}$$

$$f_1 = 5k_F^3(r)/2\Delta - k_F^3(r)[10E - 3k_F^2(r)]/[2E - k_F^2(r)]^2,$$

$$f_2 = 2^{7/2} [k_F^2(r) + \Delta - E]^{5/2} / [2E - k_F^2(r)]^2.$$

Хвильовий вектор $k_s(r, E)$ в обмінному потенціалі $V_X(r, E)$ і локальну швидкість $v_{loc}(r, E)$ в потенціалі поглинання $V_A(r, E)$ необхідно обраховувати узгоджено, в однотипних наближеннях.

В якості потенціалу поглинання також використовують параметризовані потенціали [9, 17] (див., також [16]) у вигляді

$$V_A(r, E) = c(E) \cdot \rho(r) / T_{loc}^2. \quad (9)$$

Тут $T_{loc}(r, E) = E - V(r, E)$ локальна кінетична енергія налітаючого електрона, а $c(E)$ – параметр. В якості електронної густини можна використовувати повну густину атома-мішені або певну суму підоболонкових, починаючи з валентної $\rho_H(r)$ (іноді і у вигляді $r^2 \rho_H(r)$). Параметр $c(E)$ знаходять з співставлення теоретичних результатів та експериментальних перерізів збудження і іонізації, які описують сумарний внесок непружних процесів при розсіюванні електрона даним атомом.

В наближенні локальної спінової густини (НЛСГ) ТФГ [1, 15], використовуючи правило Хунда [6, 18] для атомної системи що містить напівзаповнену підоболонку – $(n\ell)^{2\ell+1}$ (s^1, p^3, d^5, f^7) – N -електронну оболонку цієї системи розбивають на дві спінові підоболонки умовно для спіна вгору (\uparrow) та спіна вниз (\downarrow). При цьому отримують електронні спінові гус-

тини $\rho^{\uparrow\downarrow}(r)$ підоболонки, а повна густина $\rho(r) = \rho^{\uparrow}(r) + \rho^{\downarrow}(r)$. Важливо зазначити, що при описі в НЛСГ розсіювання електрона з фіксованим напрямком спіну на такій системі обмінна взаємодія відбувається тільки з відповідною спіноюю підоболонкою. Вводячи два імпульси Фермі $k_F^{\uparrow\downarrow}(r) = [6\pi^2 \rho^{\uparrow\downarrow}(r)]^{1/3}$, що відповідають густинам $\rho^{\uparrow\downarrow}(r)$ знаходимо обмінні потенціали $V_X^{\uparrow\downarrow}(r, E)$ використовуючи вираз (5) [19-22]. Поляризаційний потенціал (6) в НЛСГ теж модифікується [15], тому що густина кореляційної енергії також визначається густинами електронів $\rho^{\uparrow\downarrow}(r)$. Потенціал поглинання можна використовувати у вигляді (7) або (9), але з врахуванням особливостей НЛСГ.

Позитронне розсіювання

На відміну від електронного позитронне розсіювання додатково визначається певними особливостями, пов'язаними з можливістю зв'язування позитрона атомом-мішенню (A). Наявність зв'язаних [23] однопозитронних (e^+A) та однопозитронієвих (PsA^+) станів може вплинути на процес розсіювання позитронів, а переріз утворення позитронію буде скінченим навіть в порозі процесу при нульових енергіях зіткнення E . Крім того, статичний потенціал в даному випадку буде відштовхуючим. Отже роль потенціалів поляризаційного та поглинання стає більш вагомим, а опис процесу розсіювання позитронів стає більш чутливим до якості наближень [14, 24-28].

Оптичний потенціал має вид подібний до (1)

$$V_{opt}^P(r, E) = V_R^P(r) + iV_A^P(r, E), \quad (10)$$

де дійсна частина не містить обмінної взаємодії

$$V_R^P(r) = V_S^P(r) + V_P^P(r). \quad (11)$$

Статичний потенціал $V_S^P(r)$ взаємодії позитрона з атомом має протилежний знак до потенціалу (2)

$$V_S^P(r) = -V_S(r). \quad (12)$$

При розсіюванні позитрон сильно відштовхується ядром і слабо притягується електронною оболонкою атома-мішені. Тому розсіювання визначається середніми та великими відстанями, на яких, таким чином, особливу роль відіграє точність наближення поляризаційного потенціалу $V_P^P(r)$. Для цього потенціалу, як і вище для потенціалу (6), також застосовується статичне адіабатичне наближення і фізично виправдано використання такого безпараметричного виразу [25]

$$V_P^P(r) = \begin{cases} \left(1 - \frac{r_s}{3} \cdot \frac{d}{dr_s}\right) 2\mathcal{E}_{corr}(r_s), & r \leq r_c \\ -\alpha_d / 2r^4 - \alpha_q / 2r^6, & r > r_c \end{cases}, \quad (13)$$

$$r_s(r) = \left[\frac{3}{4\pi \cdot \rho(r)}\right]^{1/3}.$$

Тут $\mathcal{E}_{corr}(r_s)$ – густина кореляційної енергії, що характеризує взаємодію розміщеного в N -електронній системі [28-30] одного позитрону. Цю енергію можна виразити через незбурену електронну густина $\rho(r)$ атома-мішені [25,29,30]

$$2\mathcal{E}_{corr}(r_s) = \begin{cases} -1.56/\sqrt{r_s} + (0.051 \ln r_s - 0.081) \ln r_s + 1.14, & r_s \leq 0.302, \\ -0.92305 - 0.05459/(r_s)^2, & 0.302 \leq r_s \leq 0.56, \\ 13.15111/(r_s + 2.5)^2 + 2.8655/(r_s + 2.5) - 0.6298, & 0.56 \leq r_s \leq 8.0, \\ -179856.2768n(r_s)^2 + 186.4207n(r_s) - 0.524, & 8.0 \leq r_s \leq \infty, \end{cases} \quad (14)$$

тут $n(r_s)$ – електронна густина залежна від функції $r_s(r)$. При $\rho(r) \rightarrow 0$ (тобто коли $r_s(r) \rightarrow \infty$) величина $\varepsilon_{corr}(r_s) \rightarrow -0.262$ а.о., що дорівнює повній енергії негативного іона позитронію Ps^- .

Потенціал поглинання $V_A^p(r, E)$ беруть рівним подвійному потенціалу поглинання для випадку розсіювання електрона [25,27]

$$V_A^p(r, E) = 2V_A(r, E). \quad (15)$$

Наявність множника 2 відповідає відсутності обміну налітаючого позитрону з електронною оболонкою атому-мішені [25,27]. “Середня енергія збудження” атому Δ налітаючим позитроном повинна визначатися всіма видами можливих втрат енергії в компаунд-системі ($e^+ + A$) – e^+A^- та PsA^+ -стани і спектром атому. Позитивна різниця між енергією іонізації атому та повною енергією позитронію Ps (0.25 а.е.=6.8029 eV) означає

$$V_S(r) = -\frac{Z}{r} \cdot \sum_i^{n_i} A_i \cdot \exp(-B_i \cdot r) + r \cdot \sum_k^{n_k} C_k \cdot \exp(-D_k \cdot r),$$

$$\rho(r) = \frac{Z}{4\pi r} \left[\sum_i^{n_i} A_i \cdot B_i^2 \cdot \exp(-B_i r) + \sum_k^{n_k} C_k \cdot D_k \cdot (D_k r - 2) \cdot \exp(-D_k r) \right]. \quad (16)$$

При цьому множники-параметри в 1-х доданках (16) задовільняють умові $A_1 + A_2 + \dots + A_{n_i} = 1$, що є наслідком поведінки $V_S(r)$ на малих відстанях r .

Для аналітичної апроксимації одноелектронних орбіталей використовуємо їх вираз через слетерівські орбіталі [32]

$$\varphi_{nl}(r) = \sum_{i=1}^k a_i \cdot r^{b_i} \cdot \exp(-c_i \cdot r). \quad (17)$$

Вказані вирази (16) і (17) використовують, по можливості, для апроксимації по всьому інтервалу відстаней. Однак можлива апроксимація і на окремих інтервалах з подальшою процедурою зшивання.

Для наступних атомних систем (в широкому діапазоні зміни Z) нами визна-

існування стабільного зв'язаного стану (PsA^+). Внаслідок цього мабуть реальне значення Δ має бути менше, ніж для електронного розсіювання і більш складно залежати від E . В найпростішому наближенні можна використовувати Δ рівною енергії першого збудженого рівня атому.

Аналітична апроксимація електронних густин та орбіталей атомних систем

З наведених вище виразів видно, що важливими функціональними складовими ОП є повна $\rho(r) = \sum \rho_{nl}(r) = \sum N_{nl} |\varphi_{nl}(r)|^2$, підоболонкові $\rho_{nl}(r)$ електронні густини та одноелектронні радіальні орбіталі $\varphi_{nl}(r)$.

Для апроксимації статпотенціалу $V_S(r)$ і $\rho(r)$ нами використовуються зв'язані між собою загальними параметрами наступні аналітичні вирази [31]

чені параметри аналітичної апроксимації електронної густини (16) конфігурацій основного стану [33,34]: F^- , Na^+ , K , Ca^+ , Ca , Kr , Xe , Yb (для цього атома, завдяки його складній електронній структурі, апроксимація проведена в 4-х інтервалах: $r < 0.02a_0$, $0.02a_0 \leq r < 0.718a_0$, $0.718a_0 \leq r < 4.45a_0$, $r \geq 4.45a_0$), Rn (пробні розрахунки). Також отримані параметри виразу (16) для таких пар атомів і ізоелектронних їм позитивних іонів основних станів: Ne , Na^+ ; Na , Mg^+ ; Ar , K^+ ; Kr , Rb^+ ; Rb , Sr^+ та пар ізоелектронних позитивних іонів: Ne^+ , Na^{2+} ; Ar^+ , K^{2+} ; Kr^+ , Rb^{2+} . Знайдено параметри для збуджених конфігурацій, що містять дірки (nl^{-1}), пар ізоелектронних позитивних іонів (для задачі пружного розсіювання такими збудженими системами [35]): Ne^+ , Na^{2+} (дірки $1s^{-1}$, $2s^{-1}$, $2p^{-1}$); Ar^+ ,

$K^{2+} (1s^{-1}, 2s^{-1}, 2p^{-1}, 3s^{-1}, 3p^{-1}); Kr^+, Rb^{2+} (1s^{-1}, 2s^{-1}, 2p^{-1}, 3s^{-1}, 3p^{-1}, 3d^{-1}, 4s^{-1}, 4p^{-1}).$

Отримані також параметри у виразі (17) для одноелектронних радіальних орбіталей основних конфігурацій атомів: $Kr(4p)$, $In(5s)$, $In(5p)$, $Xe(5p)$, $Yb(6s)$, $Yb(4f)$, $Rn(6p)$.

Використання вказаних аналітичних виразів дуже важливе для швидкого розрахунку характеристик розсіювання. В

нашій роботі [36], наведені в даній статті потенціали взаємодії електрона, що розсіюється атомом, застосовуються для обчислення диференціальних перерізів і дослідження їх енергетичної і кутової поведінки при малих і середніх енергіях зіткнення.

Автори вдячні М.М.Довганич за різноманітну допомогу.

Література

1. Теория неоднородного электронного газа (Под ред. С. Лундквиста, Н. Марча. Мир, Москва, 1987).
2. A. Zangwill, P.Soven, Phys. Rev. A21, 1561 (1980).
3. М.М. Герман, В.Я. Купершмидт, Е.Ю. Ремета, О.В. Фарберович, Оптич. свойства атомов и ионов в нестационар. теории функционала локаль. плотности. Деп. ВИНТИ №4124-B88 (1988).
4. V. Kelemen, E. Remeta, E. Sabad, J. Phys. B: At. Mol. Phys. 28, 1527 (1995).
5. Л. Шифф, Квантовая механика (Иностран. литер., Москва, 1957).
6. И.И. Собельман. Введение в теорию атомных спектров (Наука, Москва, 1963).
7. R. Cowan, The Theory of Atomic Structure and Spectra (University of California Press, Berkeley, Los Angeles, London, 1981).
8. S.N. Nahar, J.M. Wadehra, Phys. Rev. A43, 1275 (1991).
9. I. McCarthy, C. Noble, B. Phillips, A. Turnbull, Phys. Rev. A15, 2173 (1977).
10. S. Raimes, Many-Electron Theory (North-Holland, Amsterdam, 1972).
11. J.K. O'Connell, N.F. Lane, Phys. Rev. A27, 1893 (1983).
12. N.T. Padiyal, D.W. Norcross, Phys. Rev. A29, 1742 (1984).
13. В. Келемен, В. Стойка, Е. Ремета, Вісник Львів. універ. Сер. фіз. 39, 60 (2006).
14. V. Kelemen, E. Remeta, 24 ICPEAC (Rosario, Argentina, 2005) We038.
15. О.В. Фарберович, С.В. Власов, Г.П. Нижникова, Программа самосоглас. релятив. расчета атом. и ион. структур в прил. локаль. спин. плот. 1. Числен. методы и опис. программы. Деп. ВИНТИ №2953-83 (1983).
16. G. Staszewska, D.W. Schwenke, D.G. Truhlar, Int. J. Quant. Chem.: Quant. Chem Symp. 17, 163 (1983).
17. J.V. Furness, I.E. McCarthy, J. Phys. B: At. Mol. Phys. 6, 2280 (1973).
18. Дж. Слэтер, Методы самосогласованного поля для молекул и твердых тел (Мир, Москва, 1978).
19. V.Kelemen, E. Remeta, E. Sabad, 16 ICPEAC (New York, USA, 1989) 867.
20. E. Sabad, V. Kelemen, E. Remeta, 18 ICPEAC (Aarhus, Denmark, 1993) 134.
21. Е. Сабад, В. Келемен, Е. Ремета, Наукові праці ІЕФ (Ужгород, 1996) 249.
22. V.I. Kelemen, E.Yu. Remeta, E.P. Sabad, 19 ICPEAC (Whistler, British Columbia, Canada, 1995) 200.
23. J. Mitroy, M.W. Bromley, G.G. Ryzhikh, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 35, R81 (2002).
24. M. McAlinden, A. Kernoghan, H. Walters, J. Phys. B: At. Mol. Phys. 29, 555 (1996).
25. A.J. Jain, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 23, 863 (1990).
26. М.Я. Amusia, N.A. Cherepkov, L.V. Chernysheva, ЖЭТФ, 124, 39 (2003).
27. S.N. Nahar, Phys. Rev. A43, 2223 (1991).
28. R.M. Nieminen, E. Boronski, L.J. Lantto, Phys. Rev. B32, 1377 (1985).
29. E. Boronski, R.M. Nieminen, Phys. Rev. B34, 3820 (1986).
30. J. Arponen, E. Pajanne, Ann. Phys. (N.Y.) 121, 343 (1979).
31. T.G. Strand, R.A. Bonham, J. Chem. Phys. 40, 1686 (1964).
32. А.А. Радциг, Б.М. Смирнов, Параметры атомов и атомных ионов. Справочник (Энергоатомиздат, Москва, 1986).
33. В.Стойка, Е. Ремета, Вісник Львів. університету. Сер. фіз. 39, 216 (2006).
34. E.Yu. Remeta, 24 ICPEAC, (Rosario, Argentina, 2005) Fr136.
35. S.Y. Yousif Al-Mulla, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 37, 305 (2004).
36. В.І. Келемен, М.М. Довганич, Е.Ю. Ремета, Науковий вісник Ужгородського університету. Сер. фіз. вип. 19, 105 (2006).

OPTICAL POTENTIALS OF ELECTRONS AND POSITRONS SCATTERING BY MANY-ELECTRON ATOMS

E. Remeta, V. Kelemen

Institute of Electron Physics, NAS of Ukraine, Universitetska str. 21, Uzhgorod, 88017

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

Based on the common positions, the potential components of the optical potentials (OP) for electron and positron interactions with atomic systems in the process of scattering are briefly described. A unified description both in local and local spin approximations of the density functional theory is used. The significance of non-parameterized expressions for OP components and that of analytical formulae for static potential, total and subshell electron densities and atomic orbitals is emphasized.