

# РОЗРАХУНКИ ПЕРЕРІЗІВ РОЗСІЯННЯ ЕЛЕКТРОНІВ НА АТОМІ ВУГЛЕЦЮ

Л.О. Бандурин<sup>1</sup>, В.Ф. Гедеон<sup>2</sup>

<sup>1</sup>ІЕФ НАН України, вул. Університетська, 21, 88000, Ужгород

<sup>2</sup>Ужгородський національний університет, вул. Волошина, 54, 88000, Ужгород

Представлено перерізи розсіяння електронів на атомі вуглецю для енергій від порогу реакції до 65 еВ. Дослідження процесу розсіяння  $e+C$  здійснені методом  $R$ -матриці з  $B$ -сплайнами. Для точного представлення хвильових функцій мішені застосовувався багатоконфігураційний метод Хартрі-Фока з неортогональними орбіталями. Розклад сильного зв'язку включав 28 зв'язаних станів атома вуглецю. Розраховані нами перерізи задовільно узгоджуються з даними інших теоретичних розрахунків.

*Ключові слова:* електрон-атомні зіткнення, атом вуглецю, збудження з основного і метастабільних станів, метод  $R$ -матриці з  $B$ -сплайнами, інтегральні перерізи.

## Вступ

Вуглець є одним із найбільш розповсюджених елементів у природі. Він є невід'ємною складовою частиною багатьох важливих сполук, речовин та матеріалів: від здавна використовуваної сталі до не так давно відкритих фулеренів та нанотрубок, не кажучи вже про основу життя – органічні сполуки. Точні значення перерізів розсіяння електронів низьких енергій на атомах вуглецю мають практичне значення для реалізації програми керованого термоядерного синтезу: ефективний захист внутрішніх поверхонь стінок токамаків від ерозії можливий шляхом їх легування елементами з малим зарядом ядра, таких як берилій, бор, вуглець. Проте, експериментальні дані з розсіяння  $e + C$  наразі відсутні. З сучасних же теоретичних розрахунків вказаного процесу варто відзначити тільки результати праць [1, 2], отримані в різних версіях  $R$ -матричного наближення.

Так, у роботі Dunseath *et al.* [2] за допомогою пакету [3] у внутрішній області і пакету [4] у зовнішній були виконані два незалежні розрахунки з урахуванням 28 і 48 станів мішені у розкладі сильного зв'язку і вперше представлені систематичні дані з перерізів і ефективних сил зіткнення для найбільш важливих переходів. Однак, розраховані в [2] енергії вуглецю погано узгоджуються з експериментальними да-

ними, відрізняючись від останніх подекуди більше, ніж на  $\sim 1$  еВ.

У своїй попередній роботі [1] ми представили перерізи та швидкості збудження електронним ударом вуглецю із основного і метастабільних станів, розраховані методом  $R$ -матриці з  $B$ -сплайнами (BSR) [5], з використанням набагато більш прецизійних хвильових функцій мішені у порівнянні з [2].

При підготовці статті [1] до друку, автори [2] люб'язно надали нам електронний варіант [6] своїх даних. Він містить перерізи майже всіх переходів із чотирьох нижчих станів у 23 вище розташовані стани атома  $C$ . Більшість з цих перерізів не була наведена в статті [2] і не обговорювалася нами в [1]. У даній роботі ми представляємо результати додаткових BSR-розрахунків, здійснених нами з метою порівняння з даними [6].

## Методи розрахунку

Оскільки дана стаття є прямим продовженням роботи [1], ми не зупиняємося на деталях методики проведених нами розрахунків. Застосований розклад сильного зв'язку включав 28 спектроскопічних станів атома вуглецю, складених із конфігурацій  $1s^2 2s^2 2p^2$ ,  $1s^2 2s^2 2p^3 l$  ( $l = 1, 2, 3$ ),  $1s^2 2s^2 2p^4 s$ ,  $1s^2 2s^2 2p^3$  і  $1s^2 2p^4$ , та був доповнений вісьмома псевдостанами для повно-

го врахування поляризації основного стану атома вуглецю електроном, що налітає. Включені нами у розклад 28 спектроскопічних станів співпадають зі станами мішені, врахованими у [2], що дає можливість встановити вплив різних способів опису мішені на перерізи збудження.

На рис. 1 наведена схема розрахованих нами в [1] рівнів енергії атома С. Біля кожного рівня, крім спектроскопічного позначення, проставлений його порядковий номер по шкалі енергій. Суцільними лініями на рис. 1 позначені рівні для непарних станів, штрих-пунктирними – парних. Загальне узгодження між експериментом і теорією суттєво краще, ніж в [2], з відхиленнями по енергії не більше ~0.1 еВ для більшості станів. Нижче ми будемо використовувати для маркування переходів між станами як спектроскопічні позначення, так і «числові», згідно рис. 1.

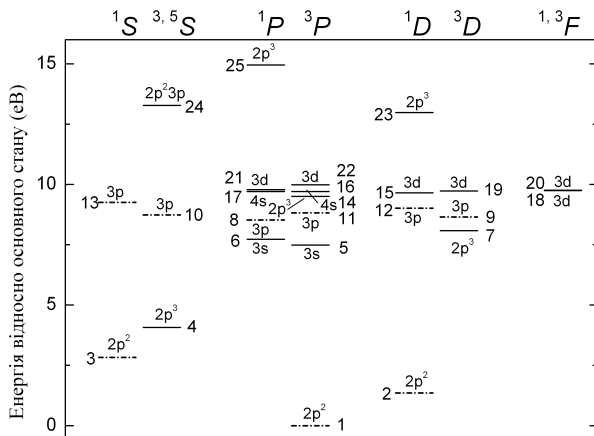


Рис. 1. Схема розрахованих нами рівнів енергії атома вуглецю.

### Результати і обговорення

На рис. 2 представлені залежності перерізів від енергії для найбільш важливих переходів із основного  $^3P$  і метастабільних  $^1D$  та  $^1S$ -станів:  $2s^2 2p^2 \ ^3P - 2s^2 2p 3s \ ^3P^o$ ,  $2s 2p^3 \ ^3D^o$ ,  $2s 2p^3 \ ^3P^o$ ,  $2s^2 2p 3d \ ^3D^o$ ,  $2s^2 2p 3d \ ^3P^o$ ,  $2p^4 \ ^3P$  (переходи 1–5, 7, 14, 19, 22, 26, відповідно);  $2s^2 2p^2 \ ^1D - 2s^2 2p 3s \ ^1P^o$ ,  $2s 2p^3 \ ^3D^o$ ,  $2s^2 2p 3p \ ^1D$ ,  $2s^2 2p 3d \ ^1F^o$ ,  $2s 2p^3 \ ^1D^o$ ,  $2s 2p^3 \ ^1P^o$  (переходи 2–6, 7, 12, 20, 23, 25);  $2s^2 2p^2 \ ^1S - 2s^2 2p 3s \ ^1P^o$ ,  $2s^2 2p 3p \ ^1S$ ,  $2s 2p^3 \ ^3P^o$ ,  $2s^2 2p 3d \ ^1P^o$ ,  $2s^2 2p 3d \ ^3P^o$ ,  $2s 2p^3 \ ^1P^o$  (переходи 3–6, 13, 14, 21, 22, 25). Порівняння BSR28-перерізів деяких із цих переходів з результатами [2] були представлені нами в роботі [1].

На рис. 3-10 наведено порівняння енергетичних залежностей перерізів BSR28 з даними [6] для всіх переходів із основного  $2p^2 \ ^3P$  і метастабільних  $2p^2 \ ^1D$ ,  $^1S$ -станів, результати по яких не були відображені в роботах [1] і [2]. На рис. 3-5 ми акцентуємо увагу на припороговій поведінці перерізів, де є багата резонансна структура. На рис. 6-10 порівнюється загальний хід енергетичних залежностей, отриманих за допомогою різних варіантів  $R$ -матричного методу в області до 65 еВ.

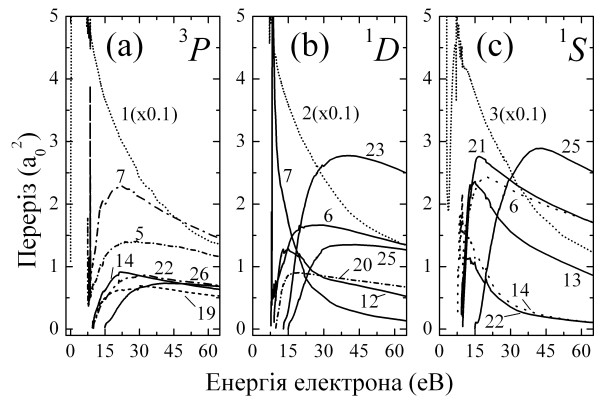


Рис. 2. Залежності BSR28-перерізів від енергії для найбільш важливих переходів із основного  $^3P$  (а) і метастабільних  $^1D$  (б) та  $^1S$ -станів (с).

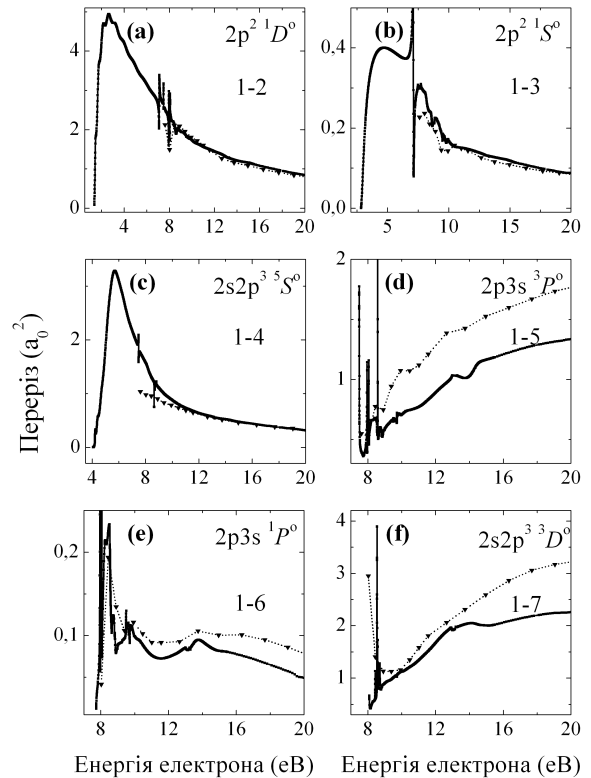


Рис. 3. Залежності перерізів збудження від енергії для переходів із основного  $^3P$  стану вуглецю: (—■—) – BSR28, через щільне розташування розрахункові точки можуть зливатися у суцільну лінію; (···▼···) –  $R$ -матричний розрахунок [6].

Зауважимо, що в наданому нам авторами [2] електронному варіанті [6] своїх даних містяться значення перерізів у 26 точках по енергії в діапазоні від  $\sim 7.62$  до 150 еВ. У той же час, у наших розрахунках BSR28 використано до  $\sim 1800$  точок по енергії у діапазоні від  $\sim 0.01361$  до 68 еВ.

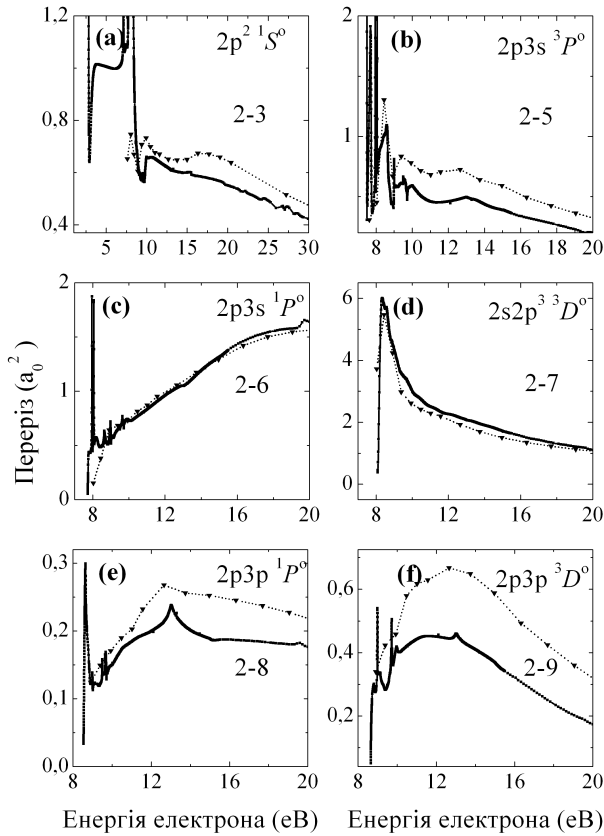


Рис. 4. Те ж, що і на рис. 3 для переходів із метастабільного  $2p^2 \ ^1D$  стану вуглецю.

Аналіз ходу кривих на рис. 3-5 дозволяє зробити висновок про якісне узгодження перерізів збудження, отриманих у різних варіантах  $R$ -матричного методу в області енергій до 20 еВ. Так, для переходу (1-2), рис. 3а, при майже повному узгодженні кривих збудження при енергії більше 9 еВ, в даних [6] спостерігається провал при  $E=8.02$  еВ, який майже співпадає із зафіксованою нами резонансною структурою при  $E=7.959-8.063$  еВ. Отримані нами криві перерізів збудження для переходів (1-3) і (1-4), рис. 3б, 3с, також знаходяться в доброму якісному та кількісному узгодженні з даними [6], за винятком декількох припорогових точок останнього переходу. Перерізи переходів (1-5, 6, 7), отримані у

різних підходах, рис. 3д-3ф, при певному якісному узгодженні, суттєво відрізняються між собою по величині. Багато в чому подібна картина поведінки перерізів спостерігається і для збудження із метастабільних станів  $2p^2 \ ^1D$  та  $2p^2 \ ^1S$  (рис. 4, 5, відповідно).

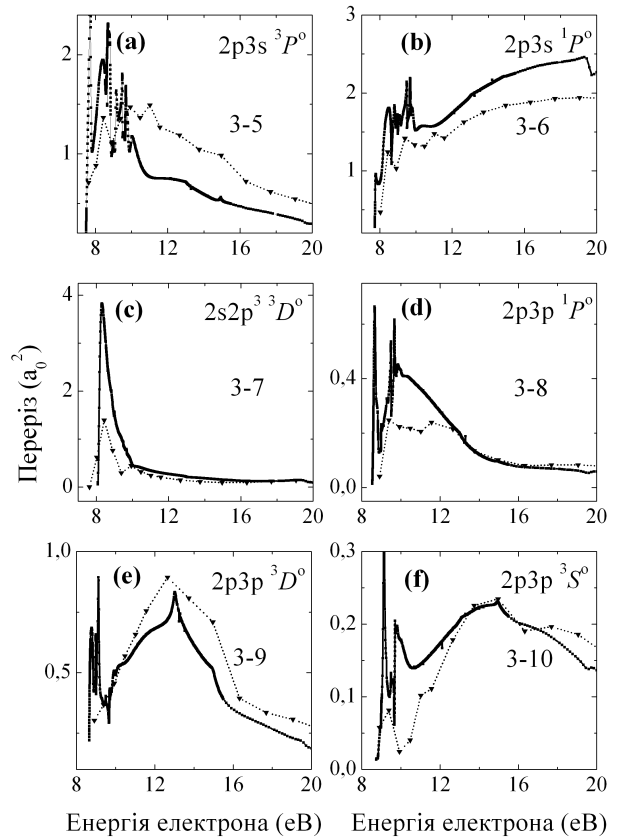


Рис. 5. Те ж, що і на рис. 3 для переходів із метастабільного  $2p^2 \ ^1S$  стану вуглецю.

На рис. 6-10 представлено загальний хід перерізів збудження переходів із трьох нижчих станів у більшість вище розташованих збуджених станів. Як видно з цих рисунків, найбільші розходження між результатами двох  $R$ -матричних підходів спостерігаються в області енергій від  $\sim 15$  до  $\sim 40$  еВ, де значення перерізів [6] стабільно перевищують перерізи BSR28. Винятком є переходи (1-23, 25), рис. 7е,г, для яких перерізи майже співпадають, перехід (2-15), рис. 8е, де криві перетинаються при енергії  $\sim 27$  еВ, а також перехід (2-22), рис. 9с, де переріз BSR28 значно перевищує дані [6]. Слід також відмітити, що для переходів (1-16, 17, 24, 27; 2-16, 17, 24; 3-16, 17) дані [6] відсутні, рис. 6h, 7а,ф,г; 8f, 9с,д;

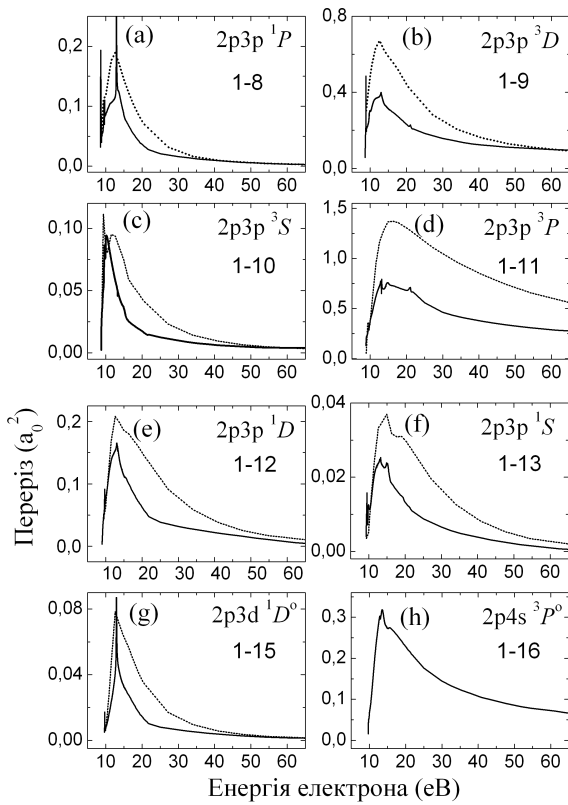


Рис. 6. Залежності перерізів збудження від енергії для переходів із основного  $2p^2\ ^3P$ -стану вуглецю: (—) – BSR28; (---) – розрахунки [6].

10d. Кореляція наших даних з результатами [6] спостерігається також у поведінці перерізів ряду інших переходів.

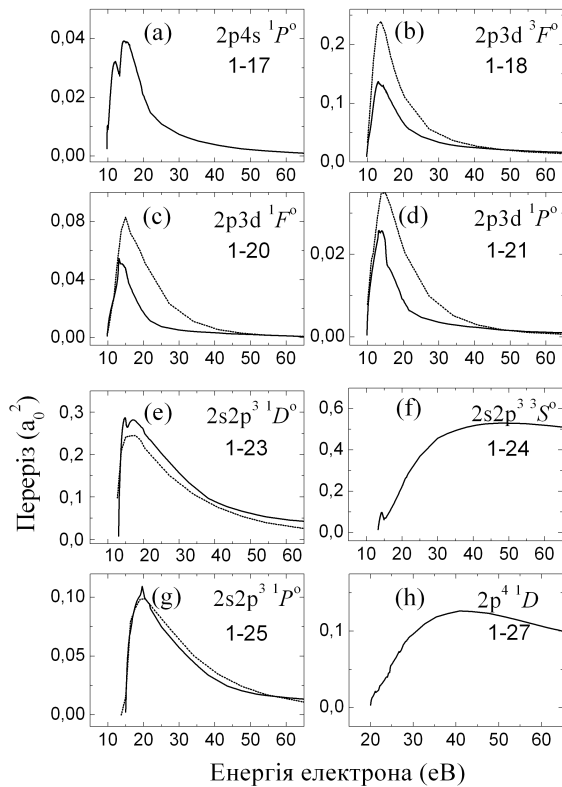


Рис. 7. Те ж, що і на рис. 6 для деяких переходів із основного  $2p^2\ ^3P$ -стану вуглецю.

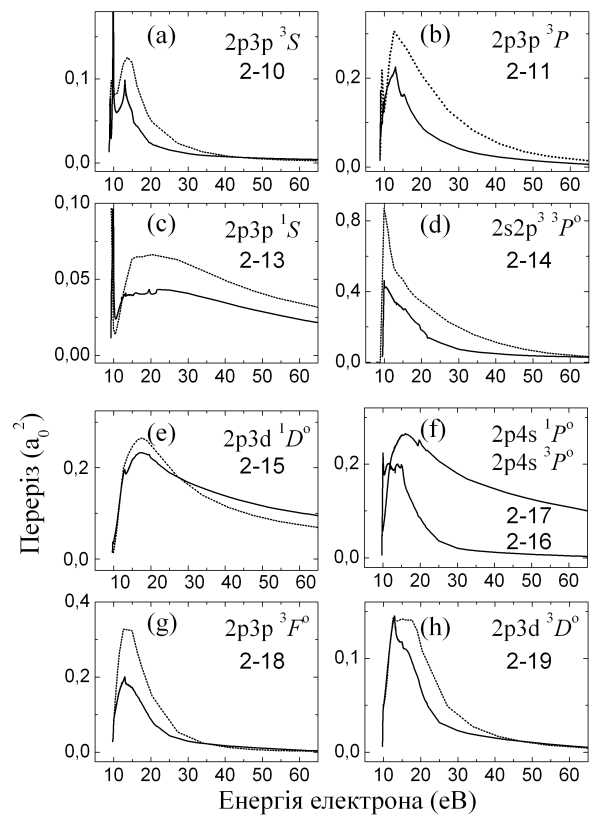


Рис. 8. Те ж, що і на рис. 6 для переходів із метастабільного  $2p^2\ ^1D$ -стану вуглецю.

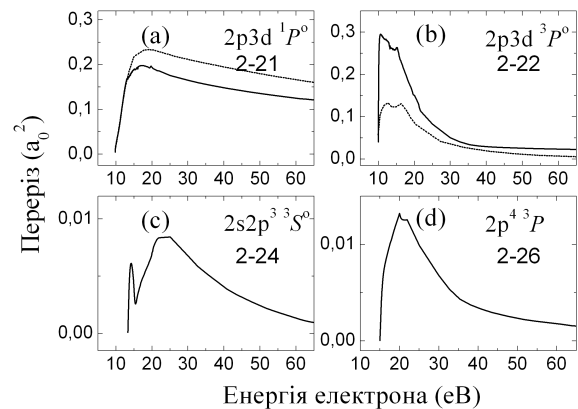


Рис. 9. Те ж, що і на рис. 6 для переходів із метастабільного  $2p^2\ ^1D$ -стану вуглецю.

Цікавим є і порівняння наших розрахунків BSR28 з даними [6] для переходів із метастабільного стану  $2s2p^3\ ^5S^o$  атома вуглецю, рис. 11. Аналіз перерізів цих переходів є важливим тому, що конфігурації  $2s2p^3$  утворюються в процесі  $sp^3$ -гібридизації атомів вуглецю при їх поєднанні в ароматичні хімічні сполуки, включаючи і фулерени, а стан  $2s2p^3\ ^5S^o$  є найбільш низьким зі станів конфігурації  $2s2p^3$ . Відмітимо, насамперед, майже повний збіг (за винятком порогового піку) перерізів BSR28

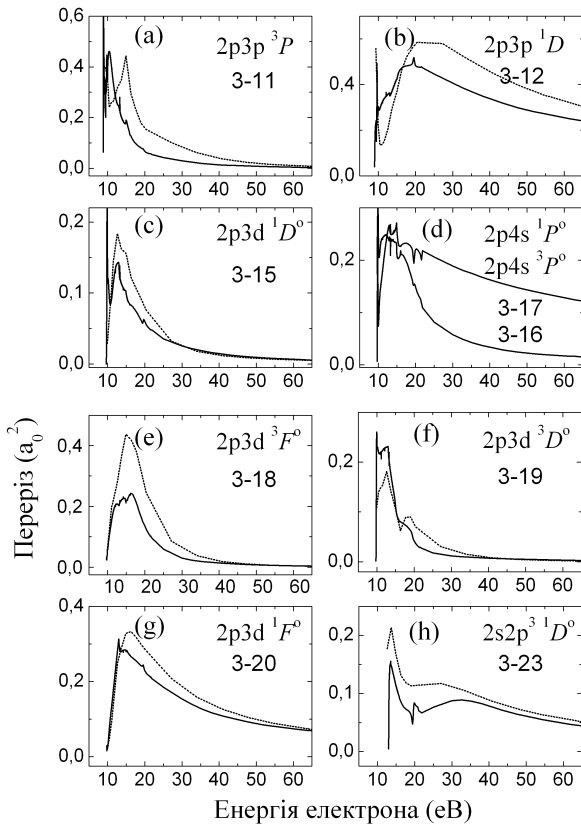


Рис. 10. Те ж, що і на рис. 6 для переходів із метастабільного  $2p^2\ ^1S$ -стану вуглецю.

з даними [6] для домінуючого переходу  $2s2p^3\ ^5S^o-2s2p^3\ ^3D^o$ , рис. 11b. Має місце узгодження порогової поведінки відносно значних по величині перерізів переходу (4–11), рис. 11d. Для інших переходів розбіжності результатів вказаних розрахунків є більш значними, аж до фактору 2.3, як для переходу  $2s2p^3\ ^5S^o-2s2p^3\ ^3P^o$ , рис. 11e.

### Висновки

Нами представлені теоретичні розрахунки перерізів збудження атома вуглецю електронним ударом із основного  $2p^2\ ^3P$  і метастабільних  $2p^2\ ^1D$ ,  $^1S$ -станів майже у всі вище розташовані стани, які включені у  $R$ -матричний розклад наближення BSR28. Наведено також перерізи найбільш важливих переходів при збудженні зі стану  $2s2p^3\ ^5S^o$ . Проведено порівняння отриманих результатів з аналогічними даними Dunseath *et al.* [6].

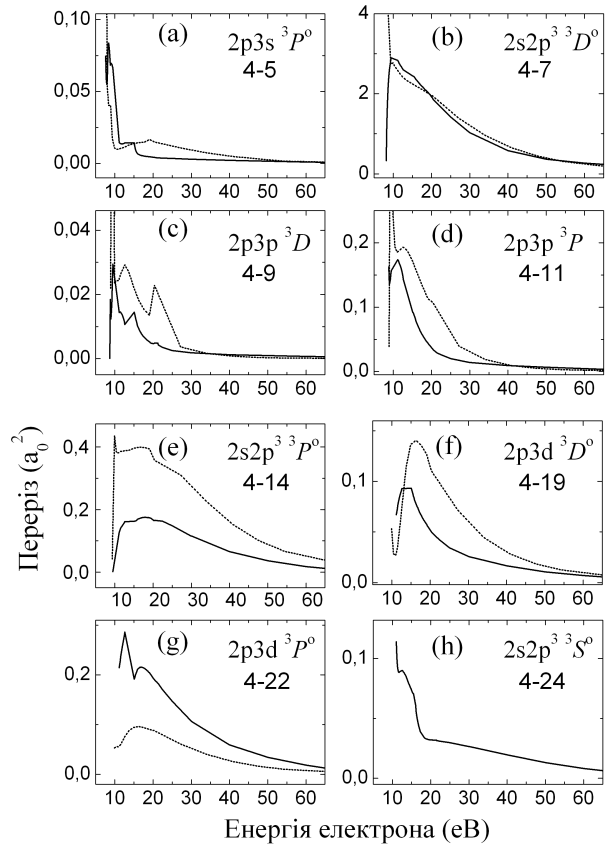


Рис. 11. Те ж, що і на рис. 6 для переходів із метастабільного  $2s2p^3\ ^5S^o$ -стану вуглецю.

Окрім помітних розбіжностей у величині більшості порівняних перерізів збудження, має місце також і достатньо хороше узгодження їх якісної поведінки, у тому числі резонансних порогових структур. Вочевидь, в обох  $R$ -матричних розрахунках [1] і [2] враховані основні фізичні фактори, які необхідні для адекватного опису процесу розсіяння  $e + C$ . Відмінності ж у результатах двох вказаних розрахунків пов'язані, на наш погляд, з різними способами опису атома-мішені. Зрозуміло, існує велика потреба в експериментальних і додаткових теоретичних дослідженнях, для того, щоб надійно встановити істинні значення характеристик розсіяння електронів на вуглеці.

Автори висловлюють подяку д-ру Зацарінному О.І. та проф. Бартшату К. за наукову співпрацю, що сприяла появі даної роботи.

### Література

1. Zatsarinny O., Bartschat K., Bandurina L. and Gedeon V. Electron-impact excitation of carbon // *Phys. Rev. A.* – 2005. –

V. 71. – No 4. – P. 042702 (9pp.).  
2. Dunseath K.M., Fon W.C., Burke V.M., Reid R.H.G. and Noble C.J. Electron-

- impact excitation of the  $n \leq 4$  levels of carbon // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* – 1997. – V. 30. – No 2. – P. 277-287.
3. Burke P.G, Burke V.M., and Dunseath K.M. Electron-impact excitation of complex atoms and ions // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* – 1994. – V. 27. – No 21. – P. 5341-5373.
  4. Burke V.M. and Noble C.J. Farm — A flexible asymptotic R-matrix package // *Comp. Phys. Commun.* – 1995. – V.85. – No 3. – P. 471–500.
  5. Zatsarinny O. BSR: B-spline atomic R-matrix codes // *Comput. Phys. Commun.* – 2006. – V. 174. – No 4. – P.273-356.
  6. Dunseath K.M., Fon W.C., Burke V.M., Reid R.H.G., and Noble C.J. // Reid R.H.G., private communications.

## THE CALCULATIONS OF ELECTRON SCATTERING CROSS SECTIONS ON CARBON ATOM

L.O. Bandurina<sup>1</sup>, V.F. Gedeon<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Institute of Electron Physics, 21 Universitetska Str., 88000, Uzhhorod

<sup>2</sup>Uzhhorod National University, 54 Voloshyna Str., 88000, Uzhhorod

The cross sections of electron scattering on neutral carbon for energy from thresholds to 65 eV are presented. The study of the e+C collision processes is carried out with the *B*-spline *R*-matrix method. The multiconfiguration Hartree-Fock method with non-orthogonal orbital sets is employed for accurate representation of the target wavefunctions. The close-coupling expansion includes 28 bound states of neutral carbon. The calculated cross sections yield satisfactory agreement with the data from other theoretical calculations.

*Key words:* electron-atom collision, carbon atom, excitation with ground and metastable states, the *B*-spline *R*-matrix method, integral cross-sections.

## РАСЧЕТЫ СЕЧЕНИЙ РАССЕЯНИЯ ЭЛЕКТРОНОВ НА АТОМЕ УГЛЕРОДА

Л.О. Бандурина<sup>1</sup>, В.Ф. Гедеон<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Институт электронной физики НАН Украины, ул. Университетская, 21, 88000, Ужгород

<sup>2</sup>Ужгородский национальный университет, ул. Волошина, 54, 88000, Ужгород

Представлены сечения рассеяния электронов на атоме углерода для энергий от порога реакции до 65 эВ. Исследования процесса рассеяния e+C выполнены методом *R*-матрицы с *B*-сплайнами. Для точного представления волновых функций мишени использовался многоконфигурационный метод Хартри-Фока с неортогональными орбиталями. Разложение сильной связи включало 28 связанных состояний атома углерода. Рассчитанные нами сечения удовлетворительно согласуются с данными других теоретических расчетов.

*Ключевые слова:* электрон-атомные столкновения, атом углерода, возбуждения с основного и метастабильных состояний, метод *R*-матрицы с *B*-сплайнами, интегральные сечения.