

# РОЗРАХУНКИ ПЕРЕРІЗІВ РОЗСІЯННЯ ЕЛЕКТРОНІВ НА АТОМІ СА

С.В. Гедеон, В.Ю. Лазур

Ужгородський національний університет  
вул. Волошина, 54, 88000, Ужгород

Метод  $R$ -матриці з  $B$ -сплайнами (BSR) застосовано до дослідження розсіяння електронів на атомі кальцію в діапазоні енергій від порога до 30 еВ. Для точного представлення хвильових функцій мішені використовувався багатоконфігураційний метод Хартрі-Фока з неортогональними орбіталями. Розрахунок структури мішені був здійснений у двох наближеннях: з урахуванням у розкладі сильного зв'язку 39 зв'язаних станів атома кальцію – BSR39, та з урахуванням 34 таких станів – MCHF-BSR34. Представлено інтегральні перерізи збудження з метастабільного стану  $4s4p\ ^3P^o$  атома кальцію семи вище розміщених рівнів  $4s5s\ ^3S$ ,  $4s4d\ ^3D$ ,  $3d4p\ ^3D^o$ ,  $4p^2\ ^3P$ ,  $3d4p\ ^3P^o$ ,  $4s5f\ ^3F^o$  та  $3p^63d^2\ ^3P$ . Результати розрахунків цих перерізів задовільно узгоджуються з наявними експериментальними даними. Обговорено резонансну структуру перерізів розсіяння в ультрахолодній області енергій.

## Вступ

У кількох попередніх роботах [1-7] нами, разом зі співавторами, були розраховані різноманітні характеристики розсіяння електронів на атомах Са та Mg. Обчислення для атома кальцію, зокрема, здійснювалися методом  $R$ -матриці з  $B$ -сплайнами [8] у наближенні сильного зв'язку з урахуванням 39 спектроскопічних станів мішені (BSR39). Сукупність отриманих даних з розсіяння  $e+Ca$  [1-5] дозволяє нам говорити про комплексний характер цих розрахунків. Практично всі наявні експериментальні дані з інтегральних та диференціальних перерізів, параметрів Стокса для розсіяння електронів низьких енергій на атомі Са в основному стані  $4^1S$ , а також для фоторозщеплення іона  $Ca^-$  отримали інтерпретацію в рамках єдиного підходу BSR39, у *ab initio* розрахунках з одним і тим же набором базисних одноелектронних орбіталей. Короткий огляд літератури з даного питання можна знайти в [1-5] та наявних там посиланнях.

До тих важливих для практичних застосувань процесів, що супроводжують зіткнення  $e+Ca$  і ще не були розглянуті у наближенні BSR39, належать збудження атома Са електронним ударом з метастабільного рівня  $4^3P^o$ , – експериментальні і теоретичні інтегральні перерізи (ІІ) для

якого представлені в роботі Shafranyosh *et al.* [9], та надпружне розсіяння електронів на Са у цьому ж стані  $4^3P^o$  [10]. Порівняння результатів наших обчислень з даними [9] складає основний зміст даної статті. Надпружне розсіяння ми розглянемо в одній з наступних робіт.

Нещодавно появилось кілька нових праць, які стосуються розсіяння  $e+Ca$ . Так Sharma *et al.* [11] у наближенні релятивістських спотворених хвиль (relativistic distorted-wave approximation – RDW) розраховали перерізи збудження Са з метастабільного стану  $4^3P^o$  для порівняння з даними експерименту [9], – проте без особливого успіху. У статті Felfli *et al.* [12] для пружного електрон-атомного розсіяння була протестована методологія Редже-поліусів. Досліджувався можливий зв'язок енергії „спорідненості” електронів (electron affinity) з припороговими структурами в ІІ розсіяння для атома Са. Представлено повний і парціальні ІІ пружного розсіяння  $e+Ca$  поблизу порогу реакції та енергетичні залежності відповідних диференціальних перерізів (ДІ) при кутах розсіяння  $0^o$ ,  $90^o$  та  $180^o$ . В ІІ розсіяння [12] в околі енергії 0.022 еВ виявлено потужний пік, відсутній в інших розрахунках розсіяння в ультрахолодній області енергій.

У роботі Fursa and Bray [13] методом збіжного сильного зв'язку (convergent

close-coupling – CCC) розраховано збудження електронним ударом резонансного стану  $4^1P^o$  атома Ca з основного стану  $4^1S$  при енергіях від 10 до 55 еВ. Дані [13] були порівняні з наявним експериментом та іншими теоретичними розрахунками, у т.ч. у рамках BSR39 [2], і ще раз підтвердили точність та надійність методу BSR39.

Тут ми продовжуємо дослідження атома Ca методом BSR39, розпочате в [1-5]. Поряд з цим, нами реалізовано й інший варіант обчислення структури мішені Ca, частково апробований на атомі Mg [7]: поєднання розрахунку  $N$ -електронної мішені пакетом MCHF [14, 15] у рамках багатоконфігураційного методу Хартрі-Фока з розрахунком  $(N+1)$ -електронної задачі „атом Ca + електрон, що налітає” методом BSR [8]. У вказаному наближенні MCHF-BSR34 у розкладі сильного зв'язку нами бралися до уваги 34 стани атома Ca.

### Методи розрахунку

#### а) Розрахунки структури мішені методом BSR39

Розрахунок структури атома Ca у наближенні BSR39 детально викладений у роботі [1]. Включення у розрахунки *ab initio* валентної і корвалентної кореляцій шляхом добавлення конфігурацій мішені зі збудженим кором, дозволило отримати точні представлення хвильових функцій мішені. У розрахунках використовувався багатоконфігураційний метод Хартрі-Фока з неортогональними орбіталями [8]. Розклад сильного зв'язку включав 39 нижніх зв'язаних станів мішені Ca, аж до  $4s8s^1S$ . Узгодження між експериментальними даними NIST [16] і теорією [1] для енергетичного спектру атома мішені та сил осциляторів різних переходів в загальному є значно кращим, ніж у попередніх розрахунках розсіяння  $e+Ca$ , виконаних Sampson and Berrington [17], групою авторів з участю Yuan [18-20], а також, у якійсь мірі, Kawazoe *et al.* [21]. Звичайно, жодне з перерахованих наближень не може рівнятися із суто структурними обчисленнями [22].

#### б) Розрахунки структури мішені методом MCHF-BSR34

На відміну від наближення BSR39 [1], даний розрахунок структури  $N$ -електронної мішені Ca здійснювався за допомогою пакету програм MCHF [14, 15], а пакет BSR [8] використовувався при розгляді  $(N+1)$ -електронної системи в задачі розсіяння. Розклад сильного зв'язку включав 33 нижні спектроскопічні стани атома Ca з конфігураціями  $3p^64s4l$  ( $l=0, 1, 2, 3$ ),  $3p^64sns$  ( $n=5, 6, 7$ ),  $3p^63d4l$  ( $l=0,1$ ),  $3p^64snp$  ( $n=5, 6$ ),  $3p^64p^2$ ,  $3p^64s5l$  ( $l=2,3$ ) та  $3p^63d^2$ , а також стан  $3p^63d^2^3P$ . Останній був включений у даний розклад з метою порівняння з експериментом [9].

Одноелектронні орбіталі атома Ca сильно залежать від терму, отже, важко здійснити точний опис усіх станів мішені, що базується на одному ряді ортогональних орбіталей. Пакет [8] дозволяє незалежно оптимізувати орбіталі окремих станів мішені, використовуючи різні неортогональні набори радіальних функцій. Але велика кількість останніх дуже ускладнює наступні розрахунки розсіювання. Тому ми здійснили залежний від терму розрахунок для 12 різних наборів орбіталей, які відповідають термам  $1,3S^e$ ,  $3P^e$ ,  $1,3P^o$ ,  $1,3D^e$ ,  $1,3D^o$ ,  $3F^e$ ,  $1,3F^o$ , – одноелектронні орбіталі в межах одного терму є ортогональними.

В якості кору для багатоконфігураційних розрахунків по методу Хартрі-Фока (HF) були вибрані одноелектронні орбіталі  $1s, 2s, 2p, 3s, 3p$ , розраховані в одноконфігураційному наближенні HF за допомогою пакету MCHF [14, 15] для основного стану атома Ca  $1s^22s^22p^63s^23p^64s^2^1S$ . В подальшому ці орбіталі не змінювалися для всіх виділених 12 наборів.

Розглянемо розрахунок одного з вказаних наборів орбіталей на прикладі терму  $1S$ . Орбіталь  $4s$  була отримана з конфігурації  $1s^22s^22p^63s^23p^64s^2^1S$  у залежному від терму HF-розрахунку. Орбіталі  $5s, 6s$  і  $7s$  були оптимізовані для конфігурацій  $4sns$ , де  $n=5, 6, 7$ , відповідно. Нарешті, орбіталь  $4p$  була розрахована для стану  $4p^2^1S$ . У розрахунках використовувалися також два ряди кореляційних орбіталей – один для т.з. валентної кореляції (врахування взаємодії зі

збудженими валентними електронами), другий – для корвалентної, тобто для поправок від збудження електронів із верхньої  $3p^6$ -оболонки кору. В кожному з вказаних 12 наборів фізичних орбіталей враховувалося по одній валентній і одній корвалентній кореляційній орбіталі для кожної кутової симетрії ( $s, p, d, f$ ).

Розклад конфігурацій для кожного терму при врахуванні валентної кореляції було отримано з використанням усіх можливостей поєднання конфігурацій зі згаданих одноелектронних орбіталей з не більше ніж двома електронами, що займають кореляційні орбіталі  $\bar{n}l$  ( $l=0,1,2,3$ ). При корвалентній кореляції додатково враховувалося ще збудження електронів із верхньої оболонки кору. Для спрощення подальших розрахунків розсіяння, конфігурації з коефіцієнтами розкладу меншими за 0.004 обрізалися. Кінцеві розклади сильного зв'язку містять всього від  $\sim 100$  до 400 конфігурацій для кожного стану.

При розрахунку інших 11 термів були застосовані аналогічні процедури.

Для отримання хорошої точності характеристик розсіяння вище порогу іонізації ( $\sim 6.11$  eV для Ca), у розклад сильного зв'язку бажано було би включати також автоіонізаційні рівні, розміщені вище цього порогу. Але пряме врахування у нашому розкладі, окрім вказаних 34 конфігураційних станів, що відповідають збудженню валентних електронів, певної кількості станів зі збудженим кором значно ускладнило би розрахунки розсіяння через великий розмір охоплюваних матриць. Тому застосування механізму корвалентної кореляції, що забезпечує опосередковане врахування станів неперервного спектру у розкладі сильного зв'язку, було ключовою умовою отримання енергій конфігураційних станів хорошої якості для всього розглядуваного енергетичного спектру.

У таблиці 1 показано порівняння розрахованого нами спектру енергій кальцію з експериментальними значеннями енергій мультиплетів NIST [16], а також з розрахунками інших авторів [17-22]. Загальне узгодження між експери-

ментом і теорією задовільне, з відхиленнями в значеннях енергій, що не перевищують  $\sim 0.06$  eV для більшості станів. Максимальне відхилення даної моделі складає 0.218 eV для енергії збудження стану  $3d4p^3F^o$ . Це краще, ніж при генеруванні описаних в [17-21] структур мішені Ca, які застосовувалися до розрахунку електрон-атомного розсіяння. Сказане стосується не тільки величини відхилення  $\Delta E = E_{\text{theor}} - E_{\text{NIST}}$  теоретичних енергій збудження окремих рівнів від рекомендованих NIST [16] значень, – але й різниці між енергіями сусідніх рівнів та зміни порядку слідування рівнів у порівнянні з даними NIST.

За браком місця ми не наводимо тут дані MCHF-BSR34 щодо сил осциляторів. Проте, як і для наближення BSR39 [1], вони задовільно узгоджуються з експериментом та структурними розрахунками [22] для більшості переходів (див. [1]).

#### *в) Розрахунки розсіяння методом - BSR39 та MCHF-BSR34*

Розрахунки розсіяння електронів на атомі Ca у внутрішній області здійснювалися пакетом BSR [8]. Особливості застосування  $R$ -матричного методу з  $B$ -сплайна-ми для випадку BSR39 описані в роботах [1-5]. У даних розрахунках розсіяння в наближеннях BSR39 та MCHF-BSR34, як і при обчисленні зв'язаних станів мішені, ми використовували 118  $B$ -сплайнів порядку 8,  $R$ -матричний радіус був рівним  $a = 80a_0$  (де  $a_0 = 0.529 \times 10^{-10}$  м – борівський радіус). Перерізи обчислювалися за стандартною  $R$ -матричною схемою, з використанням для зовнішньої області пакету FARM [23]. Для можливості прямого порівняння з експериментом, у розрахунках розсіяння методом BSR39 ми використовували експериментальні (див. [1]) енергії збудження мішені – це важливо при встановленні параметрів резонансів у перерізах розсіяння. У підході MCHF-BSR34 подібне калібрування теоретичних енергій у розрахунках розсіяння не проводилося.

**Енергії збудження для спектроскопічних станів атома Са (в еВ):**  
 $E_{\text{NIST}}$  – експериментальні дані NIST [16]<sup>\*)</sup>;  $\Delta E = E_{\text{theor}} - E_{\text{NIST}}$ , – відхилення розрахованих енергій станів атома Са від їх експериментального значення [16].

№	Стан	$E_{\text{NIST}}$	$\Delta E$ , eV				
			MCHF-BSR34	MCHF [22]	RM24 [21] <sup>**) </sup>	RMPS22 [17]	RM6 [18]
1	$4s^2 \ ^1S$	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
2	$4s4p \ ^3P^o$	1.892	0.062	-0.000555	-0.144	-0.087	-0.0876
3	$3d4s \ ^3D$	2.524	0.013	0.00059	0.163	0.12	0.4575
4	$3d4s \ ^1D$	2.709	-0.0397	0.00034	0.075	0.11	0.3382
5	$4s4p \ ^1P^o$	2.933	0.068	0.00037	0.047	0.05	0.1446
6	$4s5s \ ^3S$	3.91	0.023	0.0005	0.007	0.11	0.6745
7	$4s5s \ ^1S$	4.131	0.002	0.00053	0.051	0.12	
8	$3d4p \ ^3F^o$	4.443	-0.022	0.00147	-0.021	0.05	RM5 [19]
9	$3d4p \ ^1D^o$	4.534	0.093	0.00023	-0.06	0.02	0.0
10	$4s5p \ ^3P^o$	4.443	0.218	-8.53E-05	-0.032	0.02	0.1381
11	$4s5p \ ^1P^o$	4.554	0.112	0.00069	-0.039	0.04	0.5205
12	$4s4d \ ^1D$	4.624	0.074	0.00059	0.098	0.2	0.4280
13	$4s4d \ ^3D$	4.74	-0.0407	0.00055	0.37	0.35	0.2439
14	$3d4p \ ^3D^o$	4.681	0.084	0.00082	0.034	0.13	
15	$4p^2 \ ^3P$	4.774	0.004	0.00135	-0.179	-0.113	RM5 [20]
16	$3d4p \ ^3P^o$	4.877	0.031	0.00135	0.243	0.36	0.0
17	$3d4p \ ^1F^o$	5.026	0.002	0.00064	0.862	0.97	-0.0076
18	$4s6s \ ^3S$	5.018	0.043				0.0079
19	$4s6s \ ^1S$	5.045	0.037				0.0339
20	$4p^2 \ ^1D$	5.049	0.063		0.243	0.28	-0.0442
21	$4s6p \ ^1P^o$	5.168	0.075				
22	$4p^2 \ ^1S$	5.181	0.099		0.109	0.21	
23	$4s4f \ ^3F^o$	5.25	0.047		-0.117	-0.031	
24	$4s4f \ ^1F^o$	5.228	0.069		0.019	0.01	
25	$4s6p \ ^3P^o$	5.272	0.044				
26	$4s5d \ ^3D$	5.3	0.061				
27	$4s5d \ ^1D$	5.321	0.068				
28	$3d^2 \ ^3F$	5.393	0.056				
29	$3d4p \ ^1P^o$	5.453	0.001				
30	$4s7s \ ^3S$	5.49	-0.0092				
31	$4s7s \ ^1S$	5.447	0.054		0.961	1.04	
32	$4s5f \ ^3F^o$	5.555	0.036				
33	$4s5f \ ^1F^o$	5.55	0.054				
34	$3d^2 \ ^3P$	6.019	-0.0031				

<sup>\*)</sup> дані для триплетів усереднені по терму; <sup>\*\*)</sup>  ще три конфігурації з [21] не включені у даний розклад.

### Результати і обговорення

На рис. 1-2 наведено порівняння розрахованих нами П збудження електронним ударом атома Са в метастабільному стані  $4s4p \ ^3P^o$  у сім вище розміщених станів:  $4s5s \ ^3S$ ,  $4s4d \ ^3D$ ,  $3d4p \ ^3D^o$ ,  $4p^2 \ ^3P$ ,

$3d4p \ ^3P^o$ ,  $4s5f \ ^3F^o$  та  $3p^6 3d^2 \ ^3P$ , відповідно, з даними експерименту Shafranyosh *et al.* [9] та даними інших теоретичних розрахунків. На рисунках представлені наші результати BSR39 (як з урахуванням вкладу каскадів з вищих рівнів, так і без урахування) та MCHF-BSR34 (без вкладу каскадів).

Наводяться також ІІ, отримані в наближеннях сильного зв'язку шести каналів (6CC) [9] та RDW [11]. Експериментальні функції збудження [9] нормовані нами на перерізи BSR39 (без урахування каскадів) для отримання якнайкращого візуального узгодження з ходом теоретичних ІІ.

Як видно з рисунків, наші ІІ, отримані без врахування каскадів у наближеннях BSR39 та MCHF-BSR34, є достатньо близькі, іноді навіть тотожні між собою, за винятком ІІ збудження стану  $4s5f\ ^3F^o$ . Втрата точності перерізу MCHF-BSR34 для цього стану, рис. 6, зв'язане, на наш погляд, з граничним ефектом – рівень  $4s5f\ ^3F^o$  знаходиться на верхній межі врахованих нами у розкладі сильного зв'язку спектроскопічних станів. Для рівня  $3p^63d\ ^2\ ^3P$ , рис. 2, який не розглядався у наближенні BSR39, розрахунки збудження у підході MCHF-BSR34 дають хороше узгодження з експериментом [9] за винятком вузької припорогової області ~6-9 еВ. Тут на експериментальній залежності ІІ спостерігається помітний пік, відсутній у наших обчисленнях. З іншого боку, у приведеному у роботі [9] 6CC-перерізі, пороговий пік є в наявності, проте загальний хід енергетичної залежності ІІ збудження 6CC значно відрізняється від експериментального.

З рис. 1-2 видно, що теоретичні розрахунки у наближенні 6CC дають завищені на 10-70% значення у порівнянні з даними BSR39 для всіх переходів, крім збудження рівня  $4s5f\ ^3F^o$ , де результати цих розрахунків дуже близькі одні до одних. Що стосується наближення RDW, то ІІ збудження для всього розгляданого діапазону енергій (від ~5 до 30 еВ) наводяться в [11] тільки для станів  $4s5s\ ^3S$ ,  $4s4d\ ^3D$  та  $4p^2\ ^3P$ . Для станів  $3d4p\ ^3D$ ,  $3d4p\ ^3P^o$  та  $4s5f\ ^3F^o$  RDW-перерізи наведені тільки для енергій більших 15 еВ. У припороговій області енергій (~5-10 еВ) RDW-перерізи [11] проявляють тенденцію до сильного, аж до фактора 2, завищення у порівнянні з даними BSR39.

Як видно з рис. 1-2, дані BSR39 достатньо добре узгоджуються з енергетичними залежностями ІІ збудження [9]

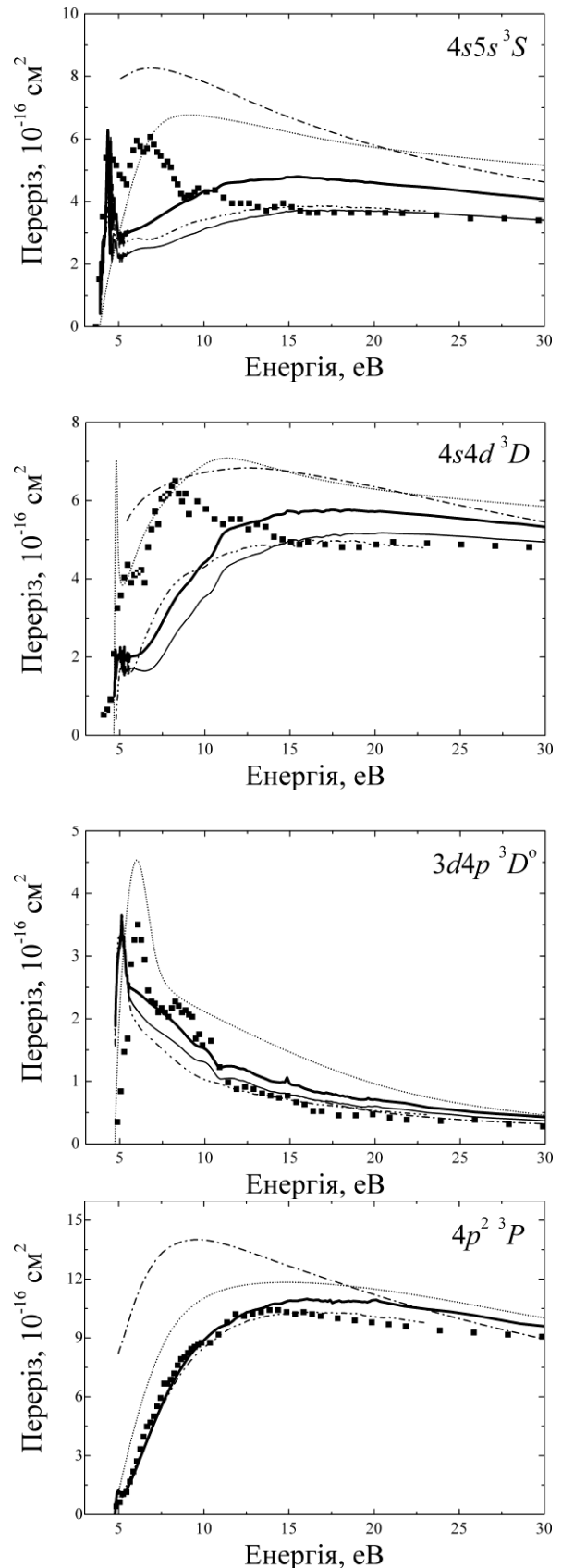


Рис. 1. Інтегральні перерізи збудження електронним ударом атома Са в метастабільному стані  $4s4p\ ^3P^o$  у стани  $4s5s\ ^3S$ ,  $4s4d\ ^3D$ ,  $3d4p\ ^3D^o$  і  $4p^2\ ^3P$ : експеримент: (■ ■ ■ ■) – Shafranyosh *et al.* [9]; розрахунки: (—) – BSR39+каскади; (—) – BSR39; (- · · -) – MCHF-BSR34; (----) – 6CC, Shafranyosh *et al.* [9]; (- · -) – RDW, Sharma *et al.* [11].

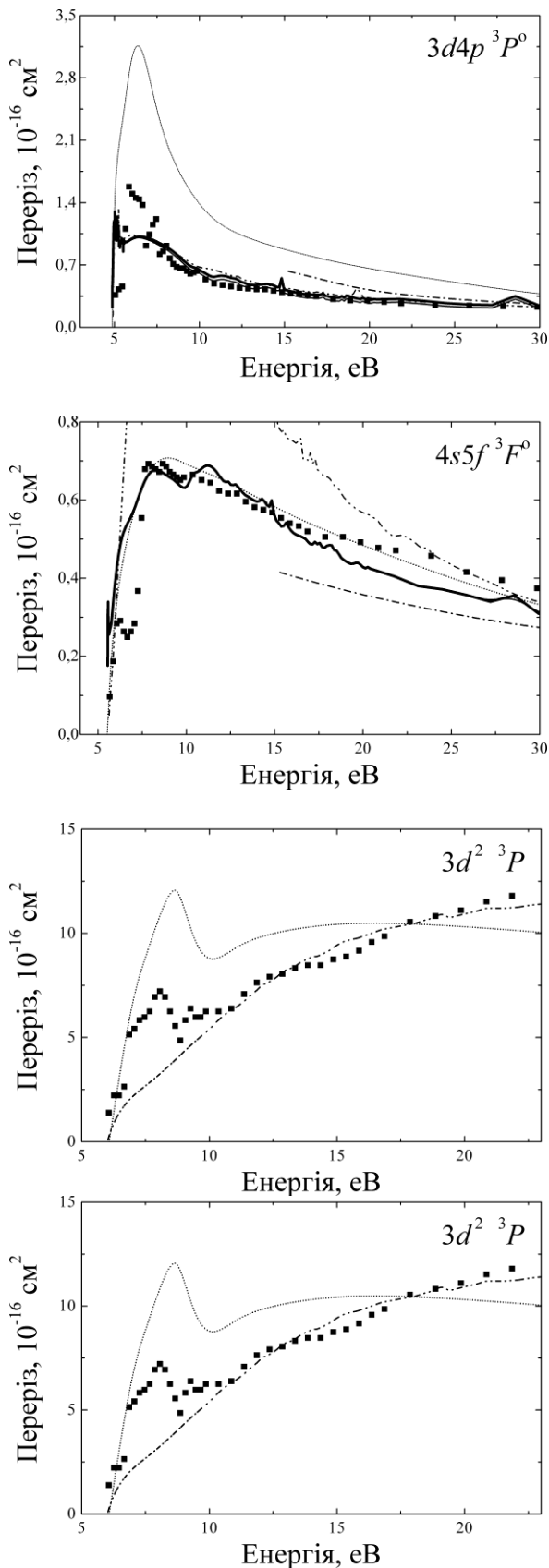


Рис. 2. Те ж, що і на рис. 1, але для збудження станів  $3d4p\ ^3P^o$ ,  $4s5f\ ^3F^o$  та  $3p^o3d^2\ ^3P$ .

при всіх енергіях, за винятком порогових областей для збудження станів  $4s5s\ ^3S$  та  $4s4d\ ^3D$ . Тут в експериментальних ІІ [9]

при  $\sim 5-10$  еВ спостерігаються досить потужні піки, відсутні на відповідних теоретичних залежностях, в т.ч. розрахованих і в наближеннях БСС та RDW. Пояснити вказані структури вкладом каскадів з вищих рівнів наразі не вдається, оскільки врахування каскадного вкладу за рахунок дипольних переходів, як видно з рис. 1, призводить тільки до загального збільшення BSR39-перерізу на 10-20% без якісної зміни характеру його енергетичної залежності. Можливо, ці порогові структури викликані вкладом каскадів з вищих рівнів за рахунок недипольних переходів.

Розглянемо тепер розсіяння електронів на кальції при наднизьких енергіях. У зв'язку з появою роботи Felfli *et al.* [12] питання поведінки перерізів розсіяння  $e+Ca$  в ультрахолодній області знову набуло актуальності. В представлених у роботі [12] ІІ розсіяння проявляється потужний пік при енергії  $\sim 0.022$  еВ, який автори інтерпретують як свого роду реакцію системи на утворення стійкого стану  $4s^24p\ ^2P^o$  аніона кальцію. Енергію, при якій появляється пік у повному ІІ розсіяння  $e+Ca$ , вони прямо пов'язують з енергією спорідненості аніона  $Ca$ . Не маючи змоги в даній роботі розглянути всі теоретичні аспекти проблеми, зауважимо наступне.

Проведені нами розрахунки BSR39 [1] не вказують на наявність у розглядуваній області енергій якогось піку у перерізі розсіяння. Згідно BSR39, стан  $4s^24p\ ^2P^o$  є зв'язаним станом від'ємного іона  $Ca^-$ , з енергією спорідненості 0.015 еВ. Отже, він не дає вклад в ІІ розсіяння  $e+Ca$ . Це узгоджується з  $R$ -матричними із псевдостанами (RMPS) розрахунками [24] і даними методу Дірака-Фока (DF) Yuan [25].

У той же час, проведені нами паралельно з BSR39 розрахунки структури мішені у наближенні MCHF-BSR34 не призвели до утворення зв'язаного стану  $4s^24p\ ^2P^o$  іона  $Ca^-$ . Оскільки це суперечить відомим експериментам і розрахункам (див. детальніше [1]), перевага у подальших детальних обчисленнях розсіяння, зокрема щодо резонансної поведінки перерізів, була віддана наближенню BSR39. Так от, в ІІ розсіяння, отриманих нами у відхиленому з вказаних міркувань

підході MCHF-BSR34, якраз і появляється припороговий пік, аналогічний до виявленого у роботі [12].

На рис. 3 показані ІП розсіяння у припороговій області, отримані у підходах BSR39, MCHF-BSR34, RMPS [24], DF [25] та методі полюсів Редже [12]. З рисунка видно, що різниця у поведінці розрахованих нами в підходах BSR39 та MCHF-BSR34 перерізів спостерігається тільки при енергіях, нижчих за  $\sim 0.4$  еВ. При вищих енергіях перерізи, отримані у цих підходах, практично ідентичні. Пороговий пік, що спостерігається у даних [12] при енергії в околі 0.022 еВ, є значно ширшим, ніж той, що отриманий нами в наближенні MCHF-BSR34 при енергії  $\sim 0.005$  еВ. Проте, на нашу думку, і перший, і другий є проявом певної неадекватності вибору фізичної моделі і/або чисельної процедури розрахунку структури атома Ca і, відповідно, перерізів розсіяння. Зокрема, в підході MCHF-BSR34 відбувається «зміщення» енергії зв'язаного стану  $4s^2 4p^2 P^o$  від'ємного іона Ca<sup>-</sup> вище порогу реакції, і цей зв'язаний стан іона проявляється як квазістаціонарний з усіма відповідними наслідками: у перерізі розсіяння появляється припороговий резонансний пік, рис. 3. Причини появи подібного ж піку у роботі [12] вимагають додаткового аналізу. У будь-якому випадку ясно, що експеримент з визначення перерізів розсіяння в області енергій до 0.5 еВ був би дуже доречним.

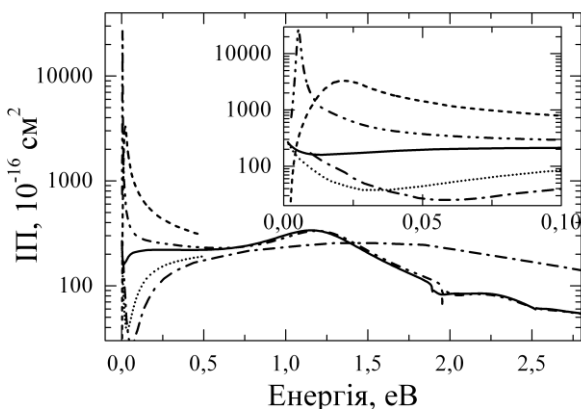


Рис. 3. Інтегральні перерізи пружного розсіяння електронів на атомі Ca у наднизькоенергетичній області: розрахунки: (—) – BSR39; (- · - ·) – MCHF-BSR34; (- -) – Felfli *et al.* [12]; (····) – RMPS, Bartschat and Sadeghpour [24]; (- - -) – DF, Yuan [25].

Непрямим підтвердженням того, що обговорювані резонансні піки спричинені зсувом зв'язаного стану  $4s^2 4p^2 P^o$  від'ємного іона Ca<sup>-</sup> в квазістаціонарну область слугують енергетичні залежності парціальних перерізів розсіяння, приведені на рис. 4. З рисунка видно, що основні відмінності між даними MCHF-BSR34 і BSR39, а також даними наближення RMPS [24] викликані поведінкою парціального перерізу  $^2P^o$ .

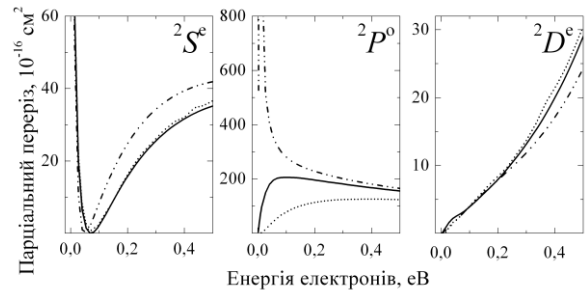


Рис. 4. Парціальні перерізи пружного розсіяння електронів на атомі Ca у наднизькоенергетичній області: розрахунки: (—) – BSR39; (- · - ·) – MCHF-BSR34; (- · - ·) – RMPS, Bartschat and Sadeghpour [24].

Для кращого розуміння причин, що викликають появу у перерізах розсіяння обговорюваних псевдопиків, на рис. 5 показано порівняння енергетичних залежностей ДП, отриманих у вказаних трьох підходах. На рис. 5а диференціальні перерізи представлені у лінійному масштабі. Тому малі за абсолютною величиною перерізи BSR39 є майже непомітними на фоні даних, отриманих в інших підходах. Енергетичні залежності ДП, отримані у підходах MCHF-BSR34 та методі полюсів Редже, також значно відрізняються між собою при всіх трьох розглянутих кутах розсіяння  $0^\circ$ ,  $90^\circ$  та  $180^\circ$ , рис. 5а.

На рис. 5б енергетичні залежності ДП розсіяння, розраховані методами BSR39 та MCHF-BSR34, представлені у логарифмічному масштабі. Видно, що відмінності у поведінці проявляються тільки при кутах розсіяння  $0^\circ$  та  $180^\circ$  і лише при енергіях, менших за  $\sim 0.4$  еВ. Диференціальні перерізи розсіяння на  $90^\circ$  у двох наших розрахунках майже ідентичні між собою. В загальному ж, вказані нюанси в поведінці низькоенергетичних залежностей ДП, отриманих у рамках методу полюсів Редже

[12] та MCHF-BSR34, не мають, на нашу думку, суттєвого значення, оскільки стосуються псевдоструктур, викликаних не фізичними процесами, а спричинених особливостями застосування фізичних моделей та обчислювальних процедур.

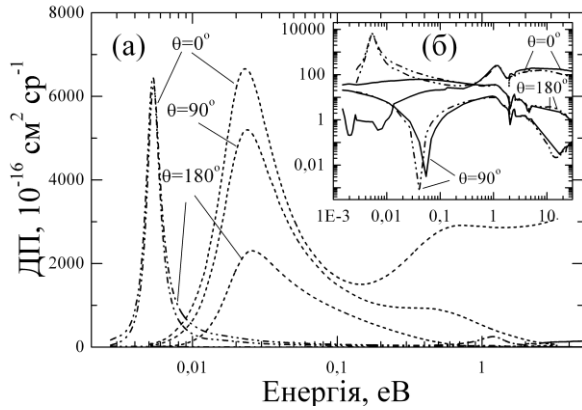


Рис. 5. Диференціальні перерізи розсіяння електронів на атомі Ca у наднизькоенергетичній області: розрахунки: (—) – BSR39; (---) – MCHF-BSR34; (.....) – Felfli *et al.* [12].

Насамкінець зупинимося ще раз на питанні точності розрахунків перерізів у підході MCHF-BSR34. Як відомо, найвища точність у вимірюванні і розрахунку ІІ окремих переходів при розсіянні  $e+Ca$  досягнута для випадку збудження резонансного стану  $4s4p \ ^1P^0$ . На рис. 6 показано порівняння розрахованих нами перерізів

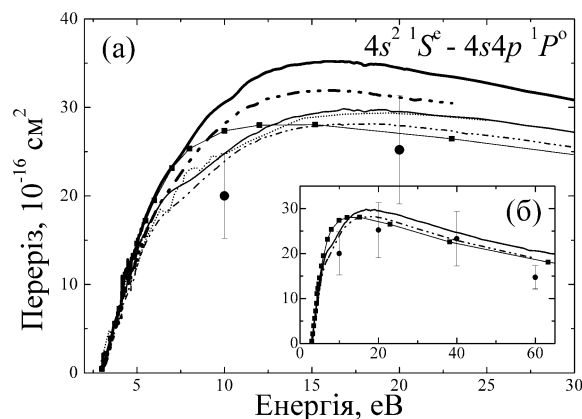


Рис. 6. Інтегральні перерізи резонансного переходу  $4s^2 \ ^1S^e - 4s4p \ ^1P^0$  в атомі Ca: експерименти: (■-■-■) – Ehlers and Gallagher [24]; (●) – Milisavljević *et al.* [25]; розрахунки: (—) – BSR39+каскади; (---) – BSR39; (---) – MCHF-BSR34; (— · — · —) – MCHF-BSR34+каскади; (.....) – RM24, Kawazoe *et al.* [21].

резонансного переходу у підході MCHF-BSR34 з нашими ж даними BSR39,  $R$ -матричними розрахунками (RM24) Kawa-zoe *et al.* [21] та експериментами Ehlers and Gallagher [26] і Milisavljević *et al.* [27]. Наші дані в обох розглянутих підходах наведені як без урахування вкладу каскадів з вищих рівнів, так і з врахуванням таких. Як видно з рисунка, дані MCHF-BSR34 для збудження резонансного переходу не поступаються за точністю даним, отриманим у наближенні BSR39, а в деяких областях енергій навіть краще узгоджуються з наявним експериментом. Отже, наближення MCHF-BSR може розглядатися в якості повноцінного наукового інструменту для розрахунку електрон-атомного розсіяння.

### Висновки

Нами представлені результати розрахунку ІІ розсіяння електронів на атомі кальцію в основному  $4s^2 \ ^1S$  та метастабільному  $4s4p \ ^3P^0$ -станах у діапазоні енергій від порога до  $\sim 30$  eV. Обчислення розсіяння були виконані методом  $R$ -матриці з  $B$ -сплайнами [8]. Розрахунок структури мішені був здійснений у двох наближеннях: з урахуванням у розкладі сильного зв'язку 39 зв'язаних станів атома кальцію – BSR39, та з урахуванням 34 таких станів – MCHF-BSR34.

В даній роботі ми продовжили систематичні дослідження атома Ca [1-5] з використанням наближення BSR39, а також здійснили аналогічні розрахунки методом MCHF-BSR34. Нами представлені ІІ збудження з метастабільного стану  $4s4p \ ^3P^0$  семи рівнів  $4s5s \ ^3S$ ,  $4s4d \ ^3D$ ,  $3d4p \ ^3D^0$ ,  $4p^2 \ ^3P$ ,  $3d4p \ ^3P^0$ ,  $4s5f \ ^3F^0$  та  $3p^6 3d^2 \ ^3P$ , отримані в результаті розрахунків *ab initio* в рамках вказаних наближень. Загальне узгодження наших перерізів BSR39 та MCHF-BSR34 з експериментом [9] можна охарактеризувати як задовільне і помітно краще, ніж отримане у рамках наближень 6CC [9] та RDW [11]. Проте у припороговій області енергій  $\sim 5-10$  eV перерізи збудження станів  $4s5s \ ^3S$  та  $4s4d \ ^3D$ , отримані на експерименті і розраховані нами, містять суттєві якісні відмінності.



Врахування вкладу каскадів з вище розміщених рівнів не призвело до усунення вказаних розбіжностей.

В роботі також представлені результати розрахунків ПІ та ДП перерізів розсіяння  $e^+Ca$  в ультрахолодній області енергій. В результаті порівняння результатів наближень BSR39, MCHF-BSR34, RMPS [24], DF [25] та методу полюсів Редже [12] ми дійшли висновку, що резонансні піки, спостережувані в околі енергій 0.022 eV у роботі [12] та в околі енергій 0.005 eV у наближенні MCHF-BSR34, скоріше за все, спричинені неадекватним вибором математичної моделі розсіяння і/або обчислювальної процедури. Проте, кінцеву відповідь на виниклі питання може

дати лише прецизійний експеримент з вимірювання перерізів у даній області енергій.

Нарешті, шляхом багатостороннього порівняння результатів наближень BSR39 та MCHF-BSR34 нами був зроблений висновок щодо прийнятної точності результатів, отримуваних у рамках останнього підходу. Виняток становлять області наднизьких енергій до  $\sim 0.4$  eV та процеси збудження у високорозміщені рівні, що знаходяться на верхній межі врахованих нами станів у розкладі сильного зв'язку.

Автори висловлюють подяку д-ру Зацарінному О.І. за допомогу в проведенні досліджень, що призвели до появи даної статті.

## Література

1. Zatsarinny O., Bartschat K., Gedeon S., Gedeon V., and Lazur V. Low-energy electron scattering from Ca atoms and photodetachment of  $Ca^-$  // *Phys. Rev. A.* – 2006. – V.74. – No 5. – P. 052708 (10 pp).
2. Zatsarinny O., Bartschat K., Bandurina L. and Gedeon S. Electron-impact excitation of calcium // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* – 2007. – V.40. – No 20. – P. 4023-4031.
3. Зацарінний О., Бартшат К., Бандуріна Л., Гедеон С., Лазур В. Розсіяння електронів на атомі кальцію // *Наук. вісник УжНУ, серія Фізика.* – 2007. – № 21. – P.205-214.
4. Гедеон С.В. Розсіяння електронів на кальції при наднизьких енергіях // *Наук. вісник УжНУ, серія Фізика.* – 2008. – V.23. – P. 53-57.
5. Гедеон С.В. Резонансна структура інтегральних перерізів розсіяння електронів на атомі кальцію в області енергій до 4.3 eV // *Наук. вісник Ужгородського університету. Серія “Фізика”.* – 2009. – V. 24. – С. 239-249.
6. Zatsarinny O., Bartschat K., Gedeon S., Gedeon V., Lazur V., and Nagy E. Cross sections for electron scattering from magnesium // *Phys. Rev. A.* – 2009. – V.79. – No 5. – P. 052709 (10pp).
7. Гедеон В., Гедеон С., Зацарінний О., Лазур В., Нодь Є. Диференціальні перерізи розсіяння електронів на атомі магнію // *Науковий вісник Ужгородського університету. Серія “Фізика”.* – 2008. – V. 23. – С. 23-35.
8. Zatsarinny O. BSR: B-spline atomic R-matrix codes // *Comput. Phys. Commun.* – 2006. – V.174. – No 4. – P. 273-356.
9. Shafranyosh I.I., Snegurskaya T.A., Margitich N.A., Bogacheva S.P., Lengyel V.I. and Zatsarinny O.I. Excitation of the Ca atom from the metastable states by electron impact // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* – 1997. – V.30. – P. 2261–2285.
10. Shafranyosh I.I. private communications.
11. Sharma L., Srivastava R. and Stauffer A.D. Electron excitation of the  $4s4p\ ^3P$  metastable state of calcium / 7th Asian International Seminar on Atomic and Molecular Physics // *J. Phys.: Conf. Ser.* – 2007. – V. 80. – No 1. – P. 012020 (13).
12. Felfli Z., Msezane A.Z and Sokolovski D. Simple method for electron affinity determination: results for Ca, Sr and Ce // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* – 2008. – V.41. – No 4. – P. 041001 (6pp).
13. Fursa D.V and Bray I. Calculation of electron-impact  $4^1P$  excitation of calcium // *J. Phys. B: At. Mol. Opt.*

- Phys. – 2008. – V.41. – No 14. – P. 145206 (7pp).
14. Froese Fischer C. The MCHF atomic-structure package // *Comput. Phys. Commun.* – 1991. – V.64. – Iss. 3. – P. 369–398.
  15. Froese Fischer C., Brage T., Jonsson O. *Computational Atomic Structure. An MCHF Approach* // London: Institute of Physics Publishing. – Bristol. – 1997. – 279 p.
  16. NIST 2005. *Atomic Spectra Database* // [http://physics.nist.gov/cgi-bin/AtData/main\\_asd](http://physics.nist.gov/cgi-bin/AtData/main_asd).
  17. Samson A.M. and Berrington K.A. Electron impact excitation cross sections and rates from the ground state of atomic calcium // *At. Data Nucl. Data Tabl.* – 2001. – V. 77. – No 1. – P. 87–95.
  18. Yuan J. and Fritsche L. Electron scattering by Ca atoms and photodetachment of Ca<sup>-</sup> ions: An R-matrix study // *Phys. Rev. A.* – 1997. – V.55. – No 2. – P. 1020–1027.
  19. Yuan J. and Lin C.D. Effect of core-valence electron correlation in low-energy electron scattering with Ca atoms // *Phys. Rev. A.* – 1998. – V.58. – No 4. – P. 2824–2827.
  20. Yuan J. Core-valence electron correlation effects in photodetachment of Ca<sup>-</sup> ions // *Phys. Rev. A.* – 1999. – V.61. – No 12. – P. 012704 (6 pp).
  21. Kawazoe Sh., Kai T., Chauhan R.K., Srivastava R. and Nakazaki Sh. Excitation of the 4<sup>1</sup>P<sup>o</sup> state of calcium by electron impact // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* – 2006. – V.39. – No 3. – P. 493–503.
  22. Froese Fischer Ch. and Tachiev G. Allowed and spin-forbidden electric dipole transitions in Ca I // *Phys. Rev. A.* – 2003. – V.68. – P. 012507 (6 pp).
  23. 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.
  24. Bartschat K. and Sadeghpour H.R. Ultralow-energy electron scattering from alkaline-earth atoms: the scattering-length limit // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* – 2003. – V.36. – No 1. – P. L9-L15.
  25. Yuan J. Intra-atomic relativistic effects on the spin polarization in low-energy electron scattering from Ca, Sr, Ba, and Yb atoms // *Phys. Rev. A.* – 1995. – V.52. – No 6. – P. 4647–4655.
  26. Ehlers V.J. and Gallagher A. Electron Excitation of the 4227-Å Calcium Line // *Phys. Rev. A.* – 1973. – V.7. – No 5. – P. 1573–1585; *ibid* (Erratum) // *Phys. Rev. A.* – 1974. – V.9. – No 2. – P. 1026–1026.
  27. Milisavljevic S., Šević D., Pejcev V., Filipovic D.M. and Marinkovic B.P. Differential and integrated cross sections for the electron excitation of the 4<sup>1</sup>P<sup>o</sup> state of calcium atom // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* – 2004. – V.37. – No18. – P. 3571–3581.

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

**S.V. Gedeon, V.Yu. Lazur**

Uzhhorod National University, 54 Voloshyna str., Uzhhorod, 88000

The *B*-spline *R*-matrix method (BSR) is used to investigate electron scattering from neutral calcium in the energy range from threshold to 30 eV. The multiconfiguration Hartree-Fock method with nonorthogonal orbital sets is employed for an accurate representation of the target wavefunctions. The calculations of the atomic structure was carried out in two approximations: with including in close-coupling expansion the 39 bound states of neutral calcium (BSR39) and with including the 34 such states (MCHF-BSR34). The integral excitation cross sections from the 4s4p <sup>3</sup>P<sup>o</sup> metastable state to the seven located above levels 4s5s <sup>3</sup>S, 4s4d <sup>3</sup>D, 3d4p <sup>3</sup>D<sup>o</sup>, 4p<sup>2</sup> <sup>3</sup>P, 3d4p <sup>3</sup>P<sup>o</sup>, 4s5f <sup>3</sup>F<sup>o</sup> and 3p<sup>6</sup>3d<sup>2</sup> <sup>3</sup>P were submitted. The results of calculations of these cross sections yield satisfactory agreement with the available experimental data. The resonance structure of scattering cross-sections in ultracold energy region is discussed.

# РАСЧЕТЫ СЕЧЕНИЙ РАССЕЯНИЯ ЭЛЕКТРОНОВ НА АТОМЕ Ca

**С.В. Гедеон, В.Ю. Лазур**

Ужгородский национальный университет, ул. Волошина, 54  
88000 Ужгород, Украина

Метод  $R$ -матрицы с  $B$ -сплайнами (BSR) применен к исследованию рассеяния электронов на атоме кальция в диапазоне энергий от порога до 30 эВ. Для точного представления волновых функций мишени использовался многоконфигурационный метод Хартри-Фока с неортогональными орбиталями. Расчет структуры мишени был выполнен в двух приближениях: с учетом в разложении сильной связи 39 связанных состояний атома кальция – BSR39, и с учетом 34 таких состояний – MCHF-BSR34. Представлены интегральные сечения возбуждения из метастабильного состояния  $4s4p\ ^3P^o$  атома кальция семи вышерасположенных уровней  $4s5s\ ^3S$ ,  $4s4d\ ^3D$ ,  $3d4p\ ^3D^o$ ,  $4p^2\ ^3P$ ,  $3d4p\ ^3P^o$ ,  $4s5f\ ^3F^o$  и  $3p^63d^2\ ^3P$ . Результаты расчетов этих сечений удовлетворительно согласуются с имеющимися экспериментальными данными. Обсуждена резонансная структура сечений рассеяния в ультрахолодной области энергий.