

УДК 539.1.08, 539.198

С.В. Гедеон, В.Ю. Лазур

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

e-mail: gedsv@narod.ru

BSR-РОЗРАХУНКИ РОЗСІЯННЯ ЕЛЕКТРОНІВ НА АТОМІ КАЛЬЦІЮ ТА ЇХ ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНЕ ПІДГРУНТЯ

Наведено порівняння розрахованих у наближенні методу R -матриці з B -сплайнами (BSR) інтегральних та диференціальних характеристик розсіяння електронів на атомі кальцію з відносно маловідомими експериментальними даними. Отримано хороше узгодження розрахованих і вимірених значень характеристик розсіяння по всьому спектру порівнюваних величин.

Ключові слова: атом кальцію, розсіяння електронів, B -сплайни, R -матриця.

Вступ

У своїх попередніх працях [1-6] ми розглянули різноманітні аспекти комплексних розрахунків розсіяння електронів на атомі кальцію та фоторозщеплення від'ємного іона кальцію Ca^- . Дослідження проводилися методом R -матриці з B -сплайнами [7] у наближенні сильного зв'язку з урахуванням 39 спектроскопічних станів мішені (BSR39). Поряд з цим, для контролю точності обчислень використовувалася спрощена версія вказаного методу – MCHF-BSR34 [6]. У результаті досліджень характеристик розсіяння, обчислених для атома Ca у рамках методу BSR, була продемонстрована висока точність отримуваних результатів і дано обґрунтування практично всіх наявних експериментальних даних [8-21] з низькоенергетичного розсіяння $e+\text{Ca}$ [1-6]. Поза тим, значна частина розрахункових даних до цих пір ще не представлена нами в науковій періодиці. У даній роботі ми наводимо порівняння даних BSR39 з експериментальними результатами [18-21], які впродовж кількох десятиліть не знаходили відповідного теоретичного трактування. З іншого боку, весь масив вимірених даних [8-21] слугує експериментальним підґрунтям якості і точності здійснених нами BSR-розрахунків розсіяння $e+\text{Ca}$.

Методи розрахунку

Питання, пов'язані з розрахунком структури атома мішені Ca у наближеннях BSR39 та MCHF-BSR34 докладно описані в [1] та [6], відповідно, тому ми не будемо зупинятися на них. Точні представлення хвильових функцій мішені були отримані нами завдяки, насамперед, використанню в *ab initio* розрахунках структури атома Ca багатоконфігураційного методу Хартрі-Фока з неортогональними орбіталями [7]. Наступним за значимістю фактором було пряме включення у структурні розрахунки валентної і корвалентної кореляцій – шляхом добавлення конфігурацій мішені зі збудженим кором. Розклад сильного зв'язку BSR39 включав 39 зв'язаних станів нейтрального кальцію, охоплюючи всі стани від основного стану до $4s8s\ ^1S$. Загальне узгодження між експериментом і теорією [1] для енергетичного спектру атома мішені та сил осциляторів різних переходів є достатньо хорошим, і в загальному значно кращим, ніж у попередніх R -матричних розрахунках розсіяння $e+\text{Ca}$ [22, 23], рис. 1.

Для розрахунків розсіяння використовувалася R -матрична програма з B -сплайнами [7]. Особливості наближення BSR, а також спосіб його застосування для розрахунку розсіяння електронів на атомі кальцію описані, зокрема, в роботах [1-6]. У розрахунках розсіяння, 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).

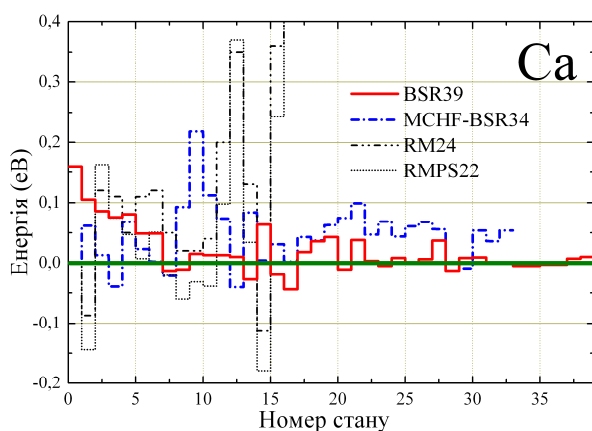


Рис. 1. Відхилення розрахованих енергій зв'язку (для наближення BSR39 [1]) та збудження (наближення MCHF-BSR34 [6], RM24 [22] і RMPS22 [23]) від спектроскопічних даних NIST [24].

Перерізи обчислювалися за стандартною R -матричною схемою, з використанням для зовнішньої області пакету *FARM* [25]. Для можливості прямого порівняння з експериментом, у розрахунках розсіяння ми використовували експериментальні (див. [1]) енергії збудження мішені.

Результати і обговорення

Як зазначалося в [6], одним з найбільш проблемних моментів в узгодженні наших BSR39-розрахунків з експериментом була невідповідність між теоретичними і експериментальними [18] положеннями резонансних особливостей у повному перерізі розсіяння $e+\text{Ca}$. Похідні від повного інтегрального перерізу (ПІ), отримані нами, добре узгоджувалися з каліброваними зі зсувом вліво на 0.35 eV даними [11], однак входили у протиріччя з даними [18], рис. 2а. Проте здійснене нами, в свою чергу, перекалібрування енергій [18], зі зсувом вліво на 0.25 eV, дозволило досягти практичного збігу положень розрахованих та вимірних резонансних піків, рис. 2б, що відповідають резонансам $4s^23d^2D$ (при 1.193 eV) та $4s4p[^3P]3d^4D^o$ (при 2.523 eV).

В статті [2] нами були наведені результати розрахунків збудження метастабільного стану 4^3P^o і показана важливість урахування каскадів з верхніх рівнів, у першу чергу з 3^3D , для пояснення результатів експерименту [14], рис. 3. Нам вдалося знайти додаткове підтвердження висловленому в [2] припущенню про визначальну роль каскадного вкладу у функції збудження (Φ_3) стану 4^3P^o [14], шляхом порівняння BSR39-перерізів з Φ_3 [19].

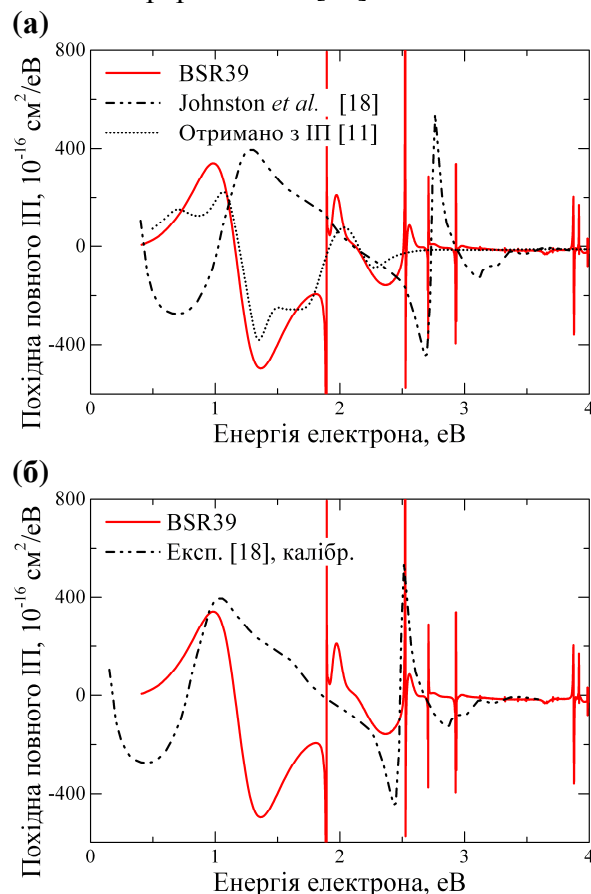


Рис. 2. Похідні повних перерізів розсіяння електрона на атомі кальцію.

(а) порівняння даних BSR39 з прямим експериментом Johnston *et al.* [18] та даними Romaniuk *et al.* [11]; похідні від каліброваних (див. [1, 6]) ПІ Romaniuk *et al.* [11] розраховані нами;

(б) порівняння даних BSR39 з експериментом Johnston *et al.* [18], каліброваним зі зсувом вліво по шкалі енергій на 0.25 eV.

З рис. 3 видно, що розраховані ПІ збудження стану 4^3P^o , з урахуванням каскадів, у межах експериментальних похибок практично співпадають з вимірними в [19] Φ_3 , які проте довелося відкалібрувати зі зсувом вліво по шкалі енергій на 0.68 eV.

З аналізу наявних експериментальних праць видно, що отримання „чистого”, без

домішку каскадних вкладів значення Π переходу $4^1S - 4^3P^0$ є складною вимірювальною задачею, поки що недоступною для розв'язання. Тому для прояснення картини збудження цього важливого стану, ми розрахували напівемпіричний переріз „чисто-го” переходу $4^1S - 4^3P^0$.

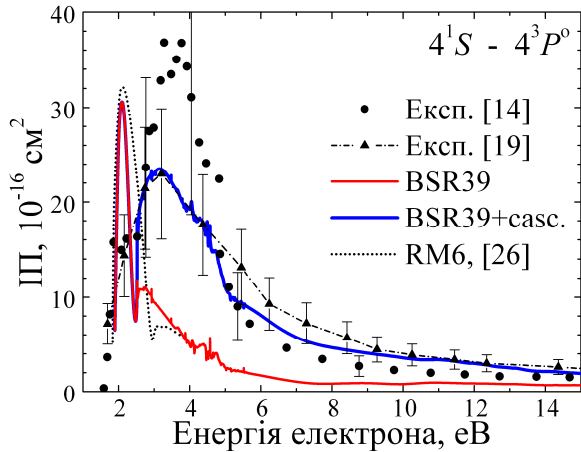


Рис. 3. Перерізи збудження електронним ударом забороненого переходу $4^1S - 4^3P^0$ як функція енергії електрона, що налітає. Порівняння Π , розрахованих у наближеннях BSR39 (з урахуванням і без урахування вкладу каскадів) та RM6 – Yuan and Fritsche [26], з експериментами Стародуба [14] та Добрышева и др. [19]. Дані [19] відкалібровані нами по енергії зі зсувом вліво на 0.68 eV;

Віднімаючи від каліброваного (див [1]) повного Π , виміряного в [11], теоретичні BSR39-перерізи пружного розсіяння, ми одержуємо в діапазоні між порогами збудження станів 4^3P^0 (1.892 eV) і 3^3D (2.524 eV) „чистий” напівемпіричний Π вказаного переходу, рис. 4. Порівняння BSR39-даних з R -матричними розрахунками [26-27] показує на значно краще узгодження наших даних з напівемпіричним перерізом $\sigma_{\text{emp}} = \sigma_{\text{tot_exp}} - \sigma_{\text{el_BSR}}$. Основна причина розходжень BSR39-перерізів з даними наближень RM6 і RM5 [26-27] полягає у значно кращому описі структури мішені, що досягнута у наших розрахунках. Так, у розрахунках [26-27] допущено майже двократне розширення піку між порогами 4^3P^0 -та 3^3D -збудження у порівнянні зі спектроскопічними даними NIST [19], рис. 4б.

Чи не найбільш точними експериментальними результатами, отриманими для розсіяння $e+\text{Ca}$, є абсолютні вимірювання збудження резонансного переходу $4^1S -$

4^1P^0 [9]. У роботі [2] ми вже проводили порівняння BSR39-перерізів з експериментальними даними [9], які включають вклад каскадних переходів з вищих рівнів, а також з іншими прецизійними теоретичними розрахунками в наближеннях збіжного сильного зв'язку (ССС) [28] та R -матричного наближення RM24 [22].

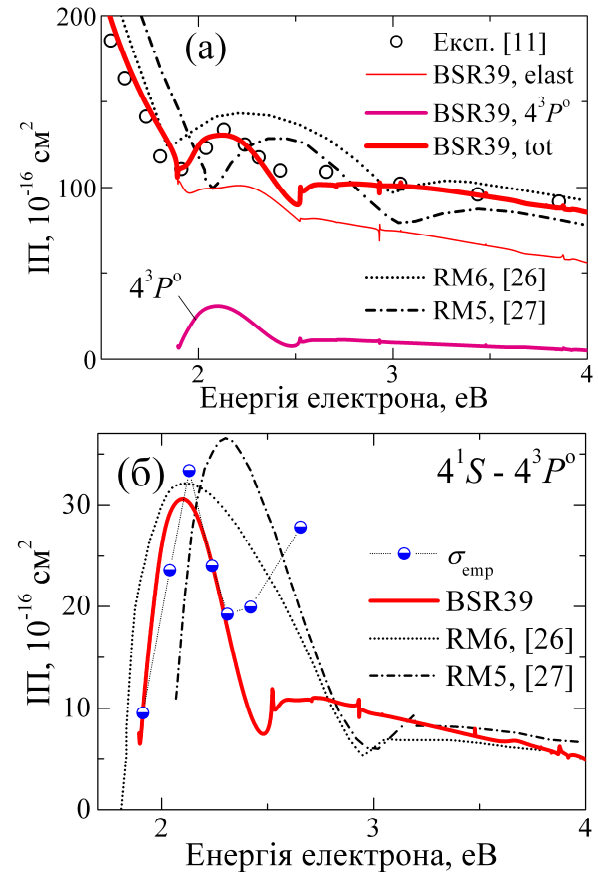


Рис. 4. Отримання напівемпіричного „чистого” перерізу переходу $4^1S - 4^3P^0$.

(а) вклад збудження $4^1S - 4^3P^0$ у повний переріз: різниця між повним експериментальним Π [11] та пружним BSR39-перерізом у діапазоні енергій 1.892-2.524 eV рівна „чистому” Π збудження стану 4^3P^0 ; нижня суцільна лінія – BSR39-переріз збудження стану 4^3P^0 ; наведені також повні Π , отримані у рамках наближень RM6 – Yuan and Fritsche [26] та RM5 – Yuan and Lin [27];

(б) Π збудження $4^1S - 4^3P^0$, отримані без урахування вкладу каскаду з верхніх рівнів: напівемпіричний переріз $\sigma_{\text{emp}} = \sigma_{\text{tot_exp}} - \sigma_{\text{el_BSR}}$ порівнюється з даними BSR39, а також з RM6 [26] та RM5 [27].

Для всіх теоретичних підходів при енергіях вище 10-15 eV характерним є 10-20 % завищення результатів над експериментальними даними [9] з урахуванням каскадного вкладу. Аналогічні результати були отримані нами і в наближенні MCHF-BSR34 [6]. Поза розглядом, однак, зали-

шилася поведінка ІІ збудження резонансного переходу при енергіях нижче другого порогу іонізації, тобто нижче ~ 10 еВ. На рис. 5 ми наводимо порівняння експериментальних і теоретичних ІІ резонансного збудження для енергій до 10 еВ.

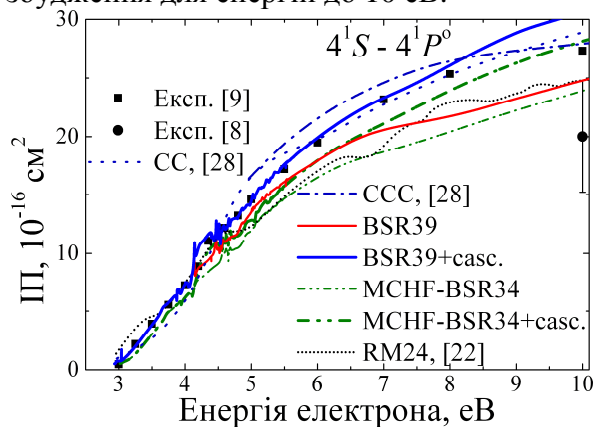


Рис. 5. Інтегральні перерізи резонансного переходу $4s^2 \ ^1S - 4s4p \ ^1P^o$ в Са при енергіях до 10 еВ. Порівняння ІІ, розрахованих у наближеннях BSR39 (з урахуванням і без урахування вкладу каскаду), RM24 – Kawazoe *et al.* [22], CCC та CC (з урахуванням каскаду) – Fursa and Bray [28], з експериментом Ehlers and Gallagher [9]; показано також наші розрахунки у наближеннях MCHF-BSR34, MCHF-BSR34+cascade та експеримент Milisavljevic *et al.* [8] при 10 еВ.

Як видно з рисунка, результати наближення BSR39 [1-2] з урахуванням каскадів знаходяться в найкращому, у порівнянні з іншими розрахунками, узгодженні з експериментом [9] у діапазоні 3-9 еВ, практично повністю співпадаючи з вимірюваною енергетичною залежністю ІІ.

Окрім ІІ, важливою інтегральною характеристикою процесу розсіяння є ефективні сили зіткнення. Особливе значення вони мають для розрахунку різних плазмових процесів – як у лабораторній, так і в астрофізичній плазмі. На рис. 6 наведено порівняння розрахованих нами ефективних сил зіткнень для переходу $4s^2 \ ^1S - 4s4p \ ^1P$ з розрахунками Samson and Berrington [23] та експериментальними вимірюваннями Crandall *et al.* [21].

На завершення нам хотілося б звернути увагу на давній експеримент з вимірювання диференціальних перерізів (ДП) пружного розсіяння на 90° [20]. Автори цього вимірювання виявили помітну поперечну (щодо осі енергій) складку в енергетичній

залежності ДП пружного розсіяння, проте висловили певний сумнів у наявності подібної структури, віднісши її до можливих похибок експерименту.

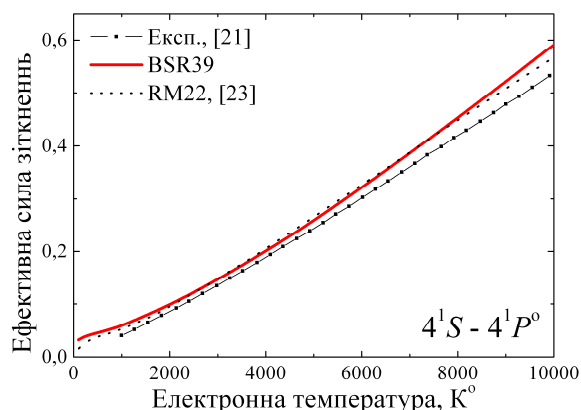


Рис. 6. Ефективні сили зіткнень для резонансного переходу $4s^2 \ ^1S - 4s4p \ ^1P^o$ в атомі Са: результати BSR39 порівнюються з експериментальними даними Crandall *et al.* [21] та з R-матричними розрахунками RM22 – Samson and Berrington [23].

У наших BSR39-розрахунках наявність подібної структури знайшла повне підтвердження. Більше того, ми „включили” вказану складку в „контекст”, побудувавши відповідну 3D-поверхню енергетично-кутових залежностей ДП пружного розсіяння і показавши її енергетичний зріз при куті розсіяння 90° , рис. 7а, б.

Для виявлення особливостей поведінки ДП пружного розсіяння в припороговій області до ~ 1.8 еВ на рис. 7в, г наведені фрагменти 3D-поверхонь ДП пружного розсіяння, розраховані методом оптичного потенціалу (наша реконструкція даних [29]) та у наближенні BSR39, відповідно. На рис. 7г чітко видно локалізовані мінімуми на 3D-поверхні ДП, – т.з. критичні точки, $min1$, $min2$ та $min3$, фізичний зміст яких є сенс обговорити в окремій роботі.

Висновки

Нами представлено порівняння теоретичних BSR39-результатів розсіяння електронів на атомі Са [1-6] з рядом відносно маловідомих експериментальних даних, зокрема [18-21]. Виміряні характеристики процесів, що супроводжують зіткнення

$e+Ca$, [8-21], добре узгоджуються з теоретичними результатами BSR39 та MCHF-BSR34, слугуючи, таким чином, яскравим підтвердженням вірності і точності вибраних розрахункових моделей розсіювання $e+Ca$ у рамках методу BSR [7].

Автори висловлюють подяку д-ру О.І. Зацарінному та проф. К. Бартшату за допомогу в проведенні розрахунків, що призвели до появи даної статті.

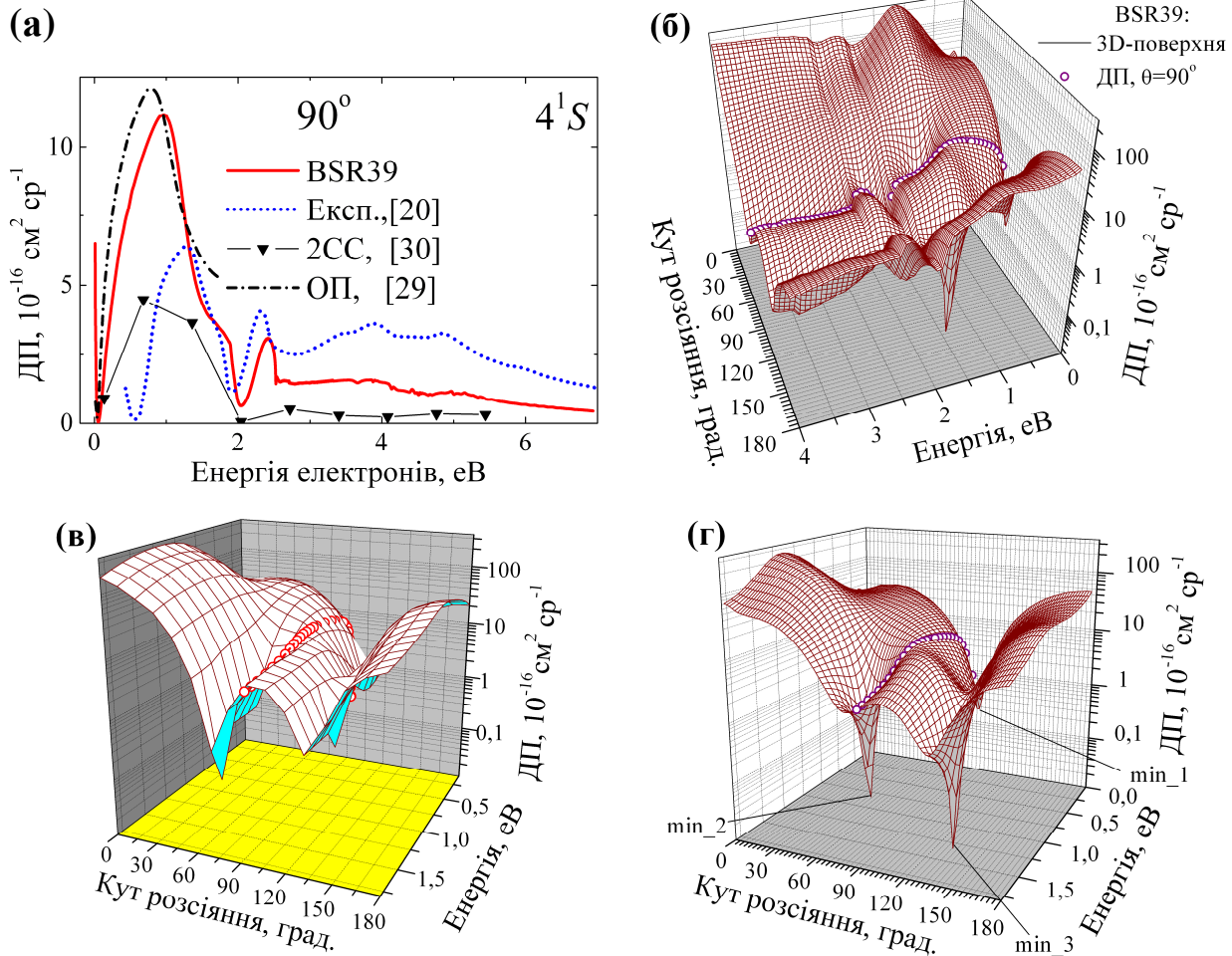


Рис. 7. Диференціальні перерізи пружного розсіювання $e+Ca$:

- (а) енергетична залежність ДП пружного розсіювання на кут на 90° : порівняння BSR39-перерізів з експериментом [20], та ДП у наближеннях сильного зв'язку 2СС [30] і оптичного модельного потенціалу [29];
 (б) BSR39, фрагмент 3D-поверхні ДП пружного розсіювання для енергій до 4 еВ;
 (в) реконструкція 3D-поверхні ДП пружного розсіювання на основі даних [29], до 1.8 еВ;
 (г) BSR39, фрагмент 3D-поверхні ДП пружного розсіювання для енергій до 1.8 еВ, з локальними мінімумами $min1$, $min2$ та $min3$ – т.з. критичними точками.

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

- 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).
- 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 5. – P. 4023-4031.
- Зацарінний О., Бартшат К., Бандуріна Л., Гедеон С., Лазур В. Розсіювання електронів на атомі кальцію // Наук. вісник Ужгородського ун-ту. Серія Фізика. – 2007. – № 21. – P. 205-214.
- Гедеон С.В. Розсіювання електронів на кальції при наднизьких енергіях // На-

- ук. вісник Ужгородського ун-ту. Серія Фізика. – 2008. – № 23. – С. 53-57.
5. Гедеон С.В. Резонансна структура інтегральних перерізів розсіяння електронів на атомі кальцію в області енергій до 4.3 еВ // Наук. вісник Ужгородського ун-ту. Серія Фізика. – 2009. – № 24. – С. 239-249.
 6. Гедеон С.В., Лазур В.Ю. Розрахунки перерізів розсіяння електронів на атомі Са // Наук. вісник Ужгородського ун-ту. Серія Фізика. – 2009. – № 25. – С. 130-140.
 7. Zatsarinny O. BSR: B-spline atomic R-matrix codes // Comput. Phys. Commun. – 2006. – V.174. – No 4. – P. 273-356.
 8. Milisavljević S., Šević D., Pejcev V., Filipović D.M. and Marinković B.P. Differential and integrated cross sections for the electron excitation of the 4^1P^o state of calcium atom // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. – 2004. – V.37. – No18. – P. 3571-3581.
 9. 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. – P. 1026.
 10. Алексахин И.С., Запесочный И.П., Гарга И.И., Стародуб В.П. Возбуждение резонансных линий бария и кальция // Опт. и спектр. – 1971. – Т.20. – вып. 6. – С. 1178–1179.
 11. Romanyuk N.I., Shpenik O.B., and Zapesochnyi I.P. The electron impact cross sections and features an calcium, strontium and barium atoms // Pis'ma Zh. Eksp. Teor. Fiz. – 1980. – V.32. – P. 472-475 [JETP Lett. – 1980. – V.32. – P. 452-455].
 12. Романюк М.І., Шпенник О.Б., Папп Ф.Ф., Чернишова І.В., Манді Й.В., Келемен В.І., Сабад О.П., Ремета С.Ю. Дослідження низькоенергетичного розсіювання електронів на атомах Mg та Ca з використанням оптимізованого трохіодного спектрометра // Укр. фіз. журн. – 1992. – Т.37. – № 11. – С. 1639-1647.
 13. Гарга И.И., Алексахин И.С., Запесочный И.П., Стародуб В.П. Возбуждение щелочноземельных атомов электронным ударом. IV. Кальций // Опт. и спектр. – 1974. – Т.37. – вып. 5. – С. 843-849.
 14. Стародуб В.П. Эффективные сечения возбуждения n^3P_1 -уровней щелочноземельных атомов // Опт. и спектр. – 1998. – V.85. – вып. 1. – С. 24-26.
 15. 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. – No 9. – P. 2261-2285.
 16. Milisavljevic S., Sevic D., Chauhan R.K., Pejsev V., Filipovic D.M., Srivastava R. and Marinkovic B.P. Differential and integrated cross sections for the elastic electron scattering by calcium atom // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. – 2005. – V.38. – No 14. – P. 2371-2383
 17. Murray A.J. and Cvejanovic D. Low energy superelastic scattering from the 4^1P_1 state of calcium in an (e, 2e) spectrometer // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. – 2003. – V.36. – P. 4889–4910.
 18. Johnston A.R., Gallup G.A. and Burrow P.D. Low-lying negative-ion states of calcium // Phys. Rev. A. – 1989. – V.40. – No 9. – P. 4770–4772.
 19. Добрышин В.Е., Раховский В.И., Шустряков В.М. Измерение абсолютных сечений возбуждения $4^3P_{0,1,2}$ состояний кальция электронным ударом // Опт. и спектр. – 1982. – Т.52. – вып. 4. – С. 609–613.
 20. Казаков С.М., Христофоров О.В. Резонансное рассеяние электронов малых энергий атомами кальция // ЖТФ. – 1985. – Т.55. – С. 795-797.
 21. Crandall D.H., Dunn G.H., Gallagher A., Hummer D.G., Kunasz C.V., Leep D., and Taylor P.O. Rate coefficients for electron excitation of the first resonance transition in H, Li, Na, Ca, Ca^+ , and Ba^+ calculated from experimental data // Astrophys. J. – 1974. – V.191. – P. 789-793.
 22. Kawazoe Sh., Kai T., Chauhan R.K., Srivastava R. and Nakazaki Sh. Excitation of the 4^1P^o state of calcium by electron

- impact // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* – 2006. – V.39. – No 3. – P. 493-503.
23. 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.
24. NIST 2005. *Atomic Spectra Database* // http://physics.nist.gov/cgi-bin/AtData/main_asd.
25. Burke V.M. and Noble C.J. FARM: The atomic R-matrix program // *Comp. Phys. Commun.* – 1995. – V.85. – No 3. – P. 471-500.
26. Yuan J. and Fritsche L. Electron scattering by Ca atoms and photodetachment of Ca⁻ ions: An R-matrix study // *Phys. Rev. A.* – 1997. – V.55. – No 2. – P. 1020-1027.
27. 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.
28. Fursa D.V and Bray I. Calculation of electron-impact 4¹P excitation of calcium // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* – 2008. – V.41. – No 14. – P. 145206 (7pp).
29. Kelemen V.I., Remeta E.Yu., and Sabad. E.P. Scattering of electrons by Ca, Sr, Ba and Yb atoms in the 0-200 energy region in the optical potential model. // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* – 1995. – V.28. – No 8. – P. 1527-1546.
30. Фабрикант И.И. Столкновение медленных электронов с атомами щелочноземельных элементов // В сб. «Атомные процессы». – Рига, «Зинатне». – 1975. – С. 80-123.

Стаття надійшла до редакції 29.05.2011

S.V. Gedeon, V.Yu. Lazur

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

THE BSR-CALCULATIONS OF ELECTRON-IMPACT SCATTERING ON CALCIUM ATOM AND THEIR EXPERIMENTAL GROUNDING

The comparison of integral and differential characteristics of electron-impact scattering on calcium atom, that were calculated in *B*-spline *R*-matrix (BSR) approach, with relatively unknown experimental data is presented. There is a good agreement between calculated and measured values of scattering characteristics for the all spectrum of compared data.

Key words: calcium atom, electron-impact scattering, *B*-spline, *R*-matrix.

С.В. Геден, В.Ю. Лазур

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

BSR-РАСЧЕТЫ РАССЕЯНИЯ ЭЛЕКТРОНОВ НА АТОМЕ КАЛЬЦИЯ И ИХ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ПОДОПЛЕКА

Приведено сравнение рассчитанных в приближении метода *R*-матрицы с *B*-сплайнами (BSR) интегральных и дифференциальных характеристик рассеяния электронов на атоме кальция с относительно малоизвестными экспериментальными данными. Получено хорошее согласование рассчитанных и измеренных значений характеристик рассеяния по всему спектру сравниваемых величин.

Ключевые слова: атом кальция, рассеяние электронов, *B*-сплайны, *R*-матрица.