

УДК 539.186

PACS 34.80.Dр, 34.80.Gs

DOI 10.24144/2415-8038.2018.43.108-116

Л.О. Бандурина¹, С.В. Гедеон²

¹ Інститут електронної фізики НАН України, вул. Університетська, 21, Ужгород, 88000, Україна, e-mail: bandurin_unc@ukr.net

² Ужгородський національний університет, вул. Волошина, 54, Ужгород, 88000, Україна, e-mail: sergej.geleon@uzhnu.edu.ua

НЕПРУЖНЕ РОЗСІЯННЯ ЕЛЕКТРОНІВ НА ЗБУДЖЕНИХ АТОМАХ БАРІЮ

У рамках R -матричного методу проведені розрахунки інтегральних перерізів (ІП) збудження низькоенергетичними електронами атомів барію з метастабільних станів $6s5d\ ^3D$ та $6s5d\ ^1D$. Сили зіткнень розраховані в наближенні сильного зв'язку каналів із урахуванням 38 термів. Останні включали 16 фізичних станів мішені та 22 псевдостани, нарахованих в LS - зв'язку. Отримані у наближенні R -матриці з псевдостанами перерізи проявляють яскраво виражену резонансну структуру. Проведено порівняння розрахованих ІП розсіяння e -Ва з наявними експериментальними даними. Отримано добре узгодження теорії з експериментом.

Ключові слова: атом Ва, псевдостани, розсіяння електронів, сильний зв'язок каналів, метод R -матриці, інтегральні перерізи розсіяння.

Вступ

Точні значення перерізів збудження атомів електронним ударом являють значний інтерес. Насамперед, для використання у фізиці плазми та для дослідження фундаментальних механізмів перебігу елементарних процесів зіткнення. Одним із „реперних” об'єктів для подібних досліджень є лужноземельний атом барію. Наявність систематичних даних з інтегральних (ІП) та диференціальних (ДП) перерізів процесів зіткнення e -Ва є необхідною умовою для кінетичного моделювання плазми при побудові лазерів на парах атому барію. Систематичні дані передбачають розрахунок збудження атома Ва як в основному стані ($6s^2\ ^1S$), так і у нижніх збуджених метастабільних станах $6s5d\ ^3,1D$. Ці дані є важливими при конструюванні різних плазмових приладів (вимикачів, розрядних ламп), при дослідженні випромінювання планетарних іоносфер і т.д.. Короткий огляд стану справ з вимірювання і розрахунку окремих характеристик розсіяння e -Ва у період до 2004 р. можна знайти у нашій зі співавторами праці [1].

Зокрема, в [1] у рамках R -матричного методу з псевдостанами (РМПС) були про-

ведені розрахунки ІП збудження атома Ва в основному стані ($6s^2\ ^1S$) електронами низьких енергій. Сили зіткнень були розраховані в наближенні сильного зв'язку каналів з урахуванням 38 термів, які включали 16 фізичних станів мішені та 22 псевдостани. Хвильові функції мішені були отримані накладанням конфігурацій у рамках методу Хартрі-Фока в LS -зв'язку. Метод розрахунку був попередньо відтестований на інших лужноземельних атомах: Sr [2] та Mg [3, 4], а також іонах Zn^+ [5] та Cd^+ [6]. Розраховані в [1] перерізи демонструють яскраво виражену резонансну структуру, яка дає помітний вклад у повні перерізи збудження. Проведене в [1] порівняння з наявними на той час теоретичними [7-8] і експериментальними [9-14] даними показало ефективність методу РМПС38 при застосуванні до опису процесів розсіяння e -Ва. Отримані результати знайшли відображення також у ґрунтовній монографії [15]. Окрім перерахованого, деякі аспекти резонансної структури ІП збудження для e -Ва відображені в праці [16]. Диференціальні перерізи пружного розсіяння e -Ва наведені в [17].

Поряд зі збудженням електронами атома Ва в основному стані, певні зусилля

прикладалися і для отримання характеристик зіткнення у випадку розсіяння електронів на збудженому атомі барію у триплетних $5d\ ^3D_j$ та синглетному $5d\ ^1D_2$ метастабільних станах [12-14, 18-21]. При цьому в експериментальних працях [12-14, 18, 19] були виміряні енергетичні залежності функцій збудження окремих спектральних переходів. У статті [20] інтегровані перерізи збудження були опосередковано розраховані методами збіжного сильного зв'язку (ЗСЗ) та унітаризованої багаточастинкової теорії першого порядку. Розглядалися переходи зі станів $6s6p\ ^1P_1$, $6s5d\ ^1D_2$, $6s6p\ ^3P_{0,1,2}$, та $6s5d\ ^3D_{1,2,3}$ атома Ва. Через трудомісткість обчислень ПП у ЗСЗ-наближенні, ці перерізи були отримані в достатньо обмеженій кількості точок по енергії. У розрахунках методом релятивістських спотворених хвиль [21] були визначені лише ДП окремих переходів зі збуджених станів $6s5d\ ^1,3D_2$ і $6s6p\ ^1P_1$ атома Ва при енергіях у діапазоні від 20 до 40 еВ. Тому систематичні розрахунки ПП збудження з метастабільних станів атома Ва являють значний інтерес.

У даному дослідженні нами представлено енергетичні залежності ПП збудження електронним ударом атома барію зі станів $6s5d\ ^3D$ та $6s5d\ ^1D$ на ряд вище розташованих рівнів. Структура атома барію була розрахована у LS -зв'язку, з урахуванням 16 фізичних станів мішені та 22 псевдостанів, багатоконфігураційним методом Хартрі-Фока (БКХФ) за допомогою пакету програм MCHF [22, 23]. Розрахунки розсіяння e -Ва здійснені методом R -матриці з псевдостанами РМПС38 у наближенні 38 станів сильного зв'язку [1]. Метод R -матриці [24], як відомо, є одним з найбільш ефективних методів розрахунку перерізів електрон-атомного зіткнення при низьких енергіях. Він реалізований у ряді універсальних комп'ютерних кодів [25, 26].

Методи розрахунку

а) Розрахунок структури мішені

Атом барію може бути адекватно змодельований як багатоелектронна структура з двома валентними електронами над інертним хартрі-фоківським кором плюс локально поляризований потенціал. У роботі [20], в рамках методу ЗСЗ, розрахунок структури

мішені атома барію був проведений згідно нерелятивістської схеми LS -зв'язку. Таке наближення є доволі грубим для таких важких атомів, як барій, для якого встановлено суттєве спін-орбітальне змішування ряду рівнів. Однак, як показали автори [20], спін-орбітальне змішування між синглетними і триплетними станами проявляється тільки для деяких слабких інтеркомбінаційних переходів при середніх і високих енергіях налітаючого електрона. В області низьких енергій більш важливими є ефекти сильного зв'язку, а спін-орбітальним змішуванням можна знехтувати. Тому навіть з розрахованою у LS -наближенні структурою атома-мішені Ва можна отримати прийнятні результати для ПП збудження елементарних переходів при e -Ва-розсіянні.

Таблиця 1. Енергії збудження (в еВ) для 16 нижніх станів мішені атома Ва. Наші дані РМПС38 [1] порівняні з теоретичними розрахунками ЗСЗ115 [8] та емпіричними даними Мур С.Е. [27] *).

№	Стан	$E_{\text{РМПС38}}$ [1]	$E_{\text{ЗСЗ}}$ [8]	E_{Moore} [27]
1	$6s^2\ ^1S$	0.0	0.0	0.0
2	$5d6s\ ^3D$	1.153	1.211	1.160
3	$5d6s\ ^1D$	1.376	1.439	1.413
4	$6s6p\ ^3P^o$	1.338	1.588	1.622
5	$6s6p\ ^1P^o$	2.070	2.264	2.239
6	$5d^2\ ^1D$	2.844	3.023	2.859
7	$5d6p\ ^1D^o$	2.683	2.869	2.861
8	$5d6p\ ^3F^o$	2.561	2.880	2.862
9	$5d^2\ ^3P$	2.879	3.108	2.937
10	$5d6p\ ^3D^o$	2.821	3.111	3.059
11	$5d6p\ ^3P^o$	3.022	3.296	3.200
12	$5d^2\ ^1S$	3.208	3.338	3.200
13	$6s7s\ ^3S$	3.120	3.275	3.243
14	$5d6p\ ^1F^o$	3.320	3.344	3.324
15	$6s7s\ ^1S$	3.337	3.550	3.450
16	$5d6p\ ^1P^o$	3.435	3.612	3.540

*) енергії триплетів усереднені по терму

Як зазначалося вище, у наших R -матричних розрахунках ми використали хвильові функції мішені, розраховані за допомогою пакету атомних програм MCHF [22, 23], У рамках схеми LS -зв'язку був нарахований основний стан $6s^2$ атому Ва. Після цього всі орбіталі $1s, \dots, 6s$ заморожувалися. Валентні орбіталі $7s, 8s, 6p, 7p, 8p, 5d, 6d$ і $4f$ були нараховані методом Хартрі-Фока для конфігурацій $6snl$ з усередненим

термом. Кінцеві хвильові функції були отримані з використанням методу накладання конфігурацій (НК). При цьому розклад конфігурацій містив всі можливі двоелектронні орбіталі, які можна побудувати з орбіталей, вказаних вище.

В таблиці 1 наведені розраховані нами значення енергій збудження 16 нижніх станів Ва. Всі вони включені в даний розклад сильного зв'язку. Тут же для порівняння наведені емпіричні дані Мур [27] та енергії, що використовувалися в ЗСЗ-розрахунках [8]. Для триплетів дані [27] були усереднені за підрівнями тонкої структури. Схема розміщення врахованих нами в розрахунках розсіяння 16 нижніх LS -рівнів атома Ва показана на рис. 1.

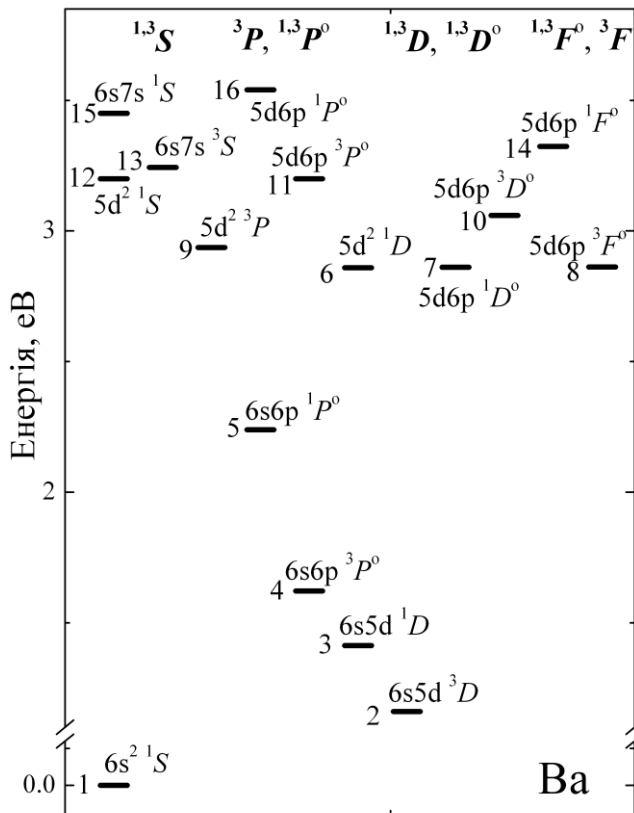


Рис. 1. Схема розміщення врахованих у РМПСЗ8-розрахунках e -Ва -розсіяння 16 нижніх рівнів атома барію [27].

В цілому узгодження з експериментальними результатами може бути охарактеризоване як добре, із середнім відхиленням біля 0.1 еВ. Найбільша відмінність ~ 0.3 еВ має місце для рівнів $5d6p\ ^3F^o$ та $6s6p\ ^3P^o$ (енергії мішені в наближенні ЗСЗ, в середньому, дещо кращі). Скоріше за все, останнє пов'язано з включенням у розрахунки ЗСЗ [8] напівемпіричного поляризаційного по-

тенціалу кора. В наших подальших R -матричних розрахунках перерізів зіткнень ми використали експериментальні енергії [27].

б) Розрахунки розсіяння

Розрахунки ІІ розсіяння були проведені в наближенні сильного зв'язку з використанням R -матричного методу із псевдо-станами. В даному методі конфігураційний простір ділиться на дві області: внутрішню, $0 < r < a$, де кореляційні ефекти дуже важливі, та зовнішню, $r > a$, де взаємодія налітаючого електрона з атомом включає лише мультипольні потенціали. У внутрішній області повна хвильова функція системи "електрон + атом" для даного набору повних кутових моментів зображається у вигляді розкладу за скінченним набором базисних функцій:

$$\Psi_k(r_1, \dots, r_N, r) = A \sum_{ij} a_{ijk} \bar{\Phi}_i(r_1, \dots, r_N) \frac{1}{r} u_{ij}(r) + \sum_j b_{jk} \phi_j(r_1, \dots, r_N, r),$$

(1)

де $\bar{\Phi}_i$ – каналові функції, які формуються з всіх N -електронних станів мішені Φ_i і включають в себе кутову частину континуальної орбіталі; u_{ij} -базисні радіальні орбіталі, які описують рух розсіяного електрона; оператор A відповідає за повну антисиметризацію хвильових функцій. Зв'язані канали ϕ_j в (1) представляють всі можливі $(N+1)$ -електронні конфігурації, побудовані із орбіталей мішені $P_{nl}(r)$. Друга сума в (1) має включати принаймні ті конфігурації, які компенсують умови ортогональності $\langle u_{ij} | P_{nl}(r) \rangle = 0$, які накладаються на радіальні функції u_{ij} . Для цього зв'язані канали ϕ_j просто створюються з членів першої суми в (1) шляхом заміни континуальних орбіталей u_{ij} на зв'язані орбіталі мішені $P_{nl}(r)$, з відповідними змінами зв'язку кутових моментів у випадку еквівалентних електронів. Коефіцієнти a_{ijk} та b_{jk} у виразі (1) визначаються шляхом діагоналізації повного $(N+1)$ -електронного гамільтоніану у внутрішній області з відповідними граничними умовами. Параметри розсіяння пізніше визначалися шляхом зшивки при $r=a$ з асимптотич-

ним розв'язком для зовнішньої області. Для проведення R -матричних розрахунків у внутрішній області ми використали програму RMATRIX1 [25], а для знаходження асимптотичних розв'язків та параметрів розсіювання - програму FARM [26]. Щоб мати можливість виявлення потенціальних резонансів у III розсіювання, розрахунки цих III здійснювалися з достатньо малим кроком по енергії, аж до $0.000005 R_y$. Це вимагало розрахунку K -матриці розсіювання та сил зіткнення для великої кількості точок (~ 1600) по енергії. На відміну від ССС-методу, де розрахунки параметрів розсіювання виконуються для кожної точки по енергії, в R -матричному методі рівняння Шредінгера у внутрішній області розв'язується лише один раз. Для кожного ж значення енергії задача зіткнення розв'язувалася лише у зовнішній області.

Дані R -матричні розрахунки III розсіювання проведені з врахуванням 38 станів мішені: 16 фізичних станів (розташованих в області енергій до 3.5 eV), з експериментальними енергіями, та 22 псевдостанів з енергіями, що знаходяться поблизу порогу іонізації та в суміжному континуумі (по два псевдо-стани для кожного терму мішені, який був урахований при розв'язанні). Псевдостани включалися в розклад сильного зв'язку для того, щоб: а) компенсувати ефект від тих зв'язаних та неперервних станів мішені, які не були включені в розклад сильного зв'язку, б) контролювати ефекти нефізичних резонансів, як це було детально обговорено для e -Mg у [3, 4] та e -Cd⁺ у [6]. Фізичні стани, включені в наші розрахунки, як зазначалося вище, наведені на Рис. 1.

У R -матричних розрахунках III розсіювання були використані такі параметри: R -матричний радіус $a = 60 a_0$ (де $a_0 = 0.529 \cdot 10^{-10}$ м – борівський радіус), базисні функції континуума $u_j(r)$ для кожного орбітального кутового моменту дорівнювали $N^{\text{cont}}=20$, а значення орбітального кутового моменту розсіяного електрона було рівним $l \leq 13$. R -матричні розрахунки з повним врахуванням обміну здійснювалися для парціальних хвиль з $L \leq 10$. Для розглянутої нами низькоенергетичної області оцінки внеску вищих парціальних хвиль не проводилися.

Результати й обговорення

На рис. 2-5 наведені енергетичні залежності III розсіювання електронів на атомі Ва у метастабільних станах $6s5d \ ^{1,3}D$, отримані нами в наближенні РМПС38. Показані як III збудження вищерозташованих рівнів, так й III пружного розсіювання на збуджених атомах Ва. На рисунках чітко виділяються енергетичні залежності дипольних переходів $6s5d \ ^3D \rightarrow 6s6p \ ^3P^o$, $5d6p \ ^3F^o$, $5d6p \ ^3P^o$, та $6s5d \ ^1D \rightarrow 5d6p \ ^1F^o$, $5d6p \ ^1P^o$, а також монопольних переходів $6s5d \ ^3D \rightarrow 5d6p \ ^3D^o$ та $6s5d \ ^1D \rightarrow 5d6p \ ^1D^o$, $5d^2 \ ^1D$. Вони характеризуються вузьким припороговим піком, повільним ростом, з досягненням широкого пологого піку при енергії зіткнення ~ 10 eV, і ще повільнішим спаданням. Перерізи цих переходів є відносно великими і зазвичай на порядок перевищують III інтеркомбінаційних переходів. На цьому фоні дещо дивно веде себе III дипольного переходу $6s5d \ ^1D \rightarrow 6s6p \ ^1P^o$, чия енергетична залежність радше подібна до енергетичних залежностей інтеркомбінаційних переходів.

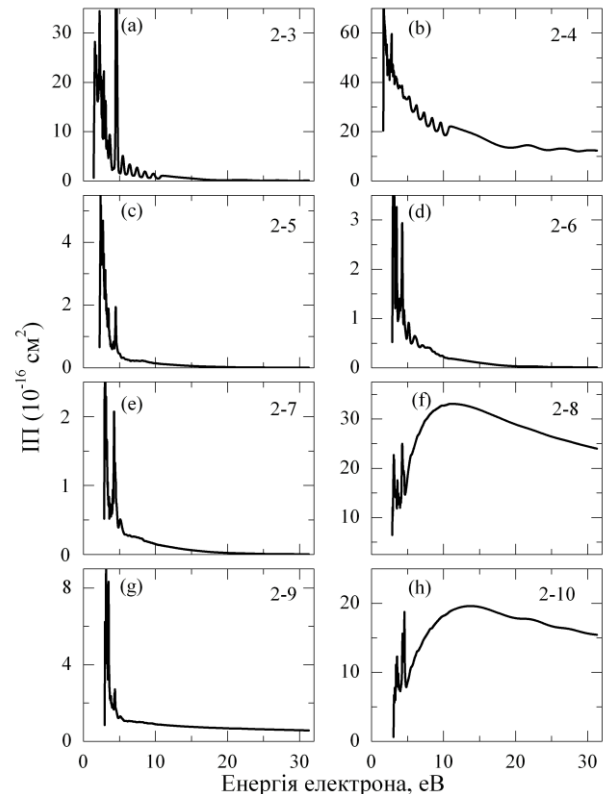


Рис. 2. III розсіювання e -Ва. РМПС38-розрахунки для переходів з рівня $6s5d \ ^3D$ на вище розташовані рівні атома Ва (нумерація переходів дана згідно табл. 1).

Слід зазначити також, що включення всього $L \leq 10$ парціальних хвиль у R -матричні розрахунки з повним врахуванням

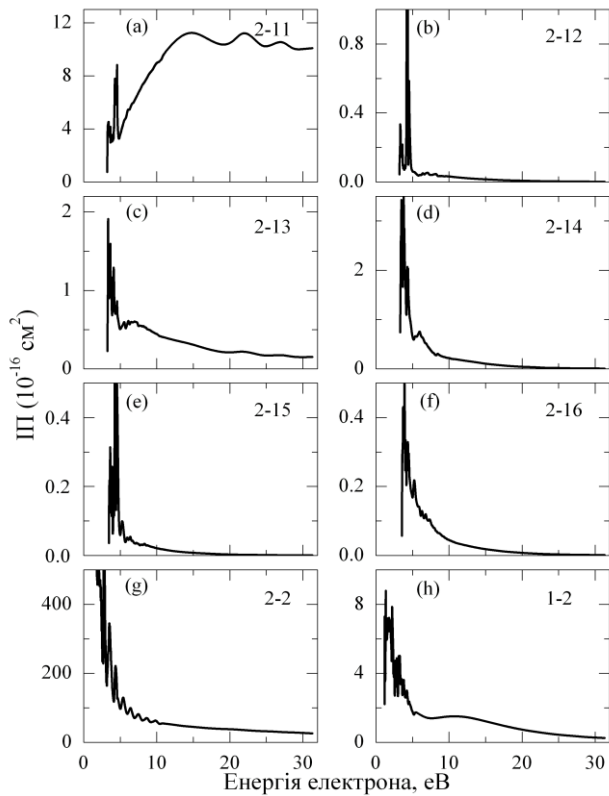


Рис. 3. Позначення як на рис.2; h) – перехід 1–2.

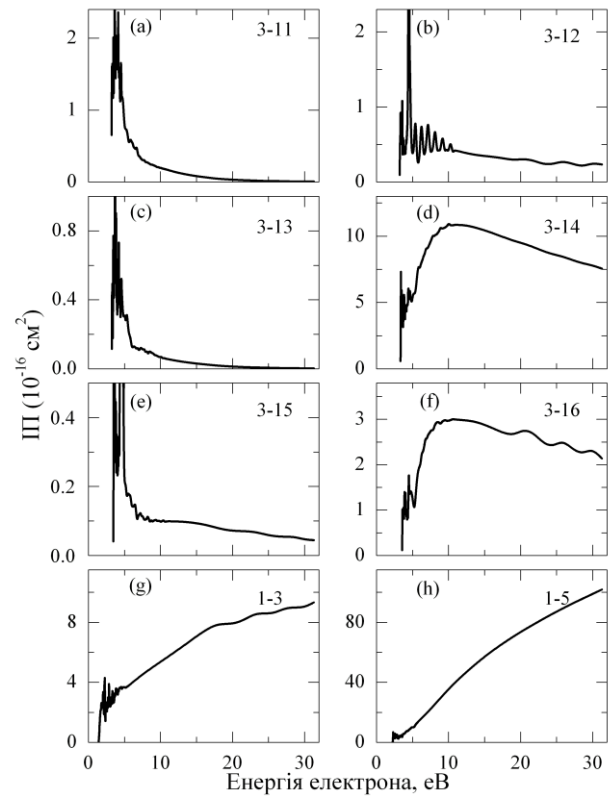


Рис. 5. Позначення як на рис.4; g) – перехід 1–3; h) – резонансний перехід 1–5.

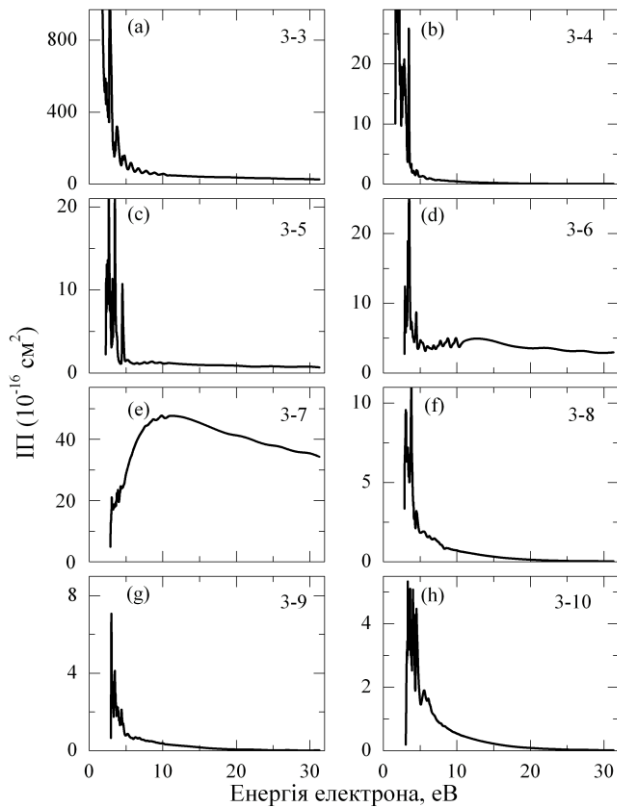


Рис. 4. ПІ розсіяння e -Ва. РМПС38-розрахунки для переходів з рівня $6s5d^1D$ на вище розташовані рівні атома Ва (нумерація переходів дана згідно табл. 1).

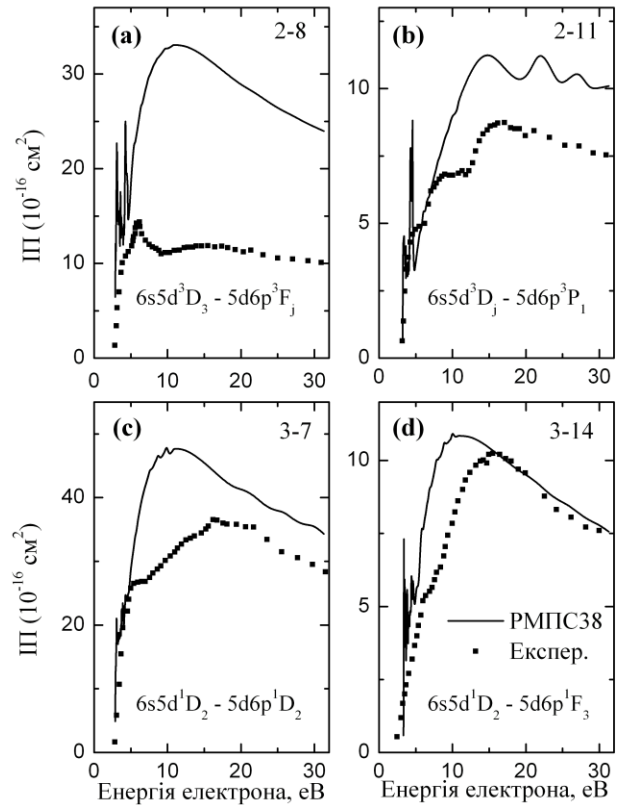


Рис. 6. Енергетичні залежності ПІ збудження електронним ударом атома барію в станах $6s5d^3D$ та $6s5d^1D$: теоретичні дані РМПС38 (даній розрахунок) порівняні з експериментальними результатами Шафраньоша [13]. Спектроскопічні маркери експериментальних переходів наведені в графічних вікнах. Нумерація розрахованих переходів дана згідно табл. 1.

обміну, призвело до певної нестійкості обчислювальної процедури. На рис. 2a,b, 3a,g, 4a,d та 5b енергетичні залежності ІІ проявляють у тій чи іншій мірі осцилюючу поведінку. Оскільки причина її появи зрозуміла, і вона не вносить принципових змін у характер поведінки ІІ, ми не стали вносити якихось коректив у результати прямих РМПС-розрахунків.

На рис. 6 наведено порівняння ІІ з наших РМПС38-обчислень із даними експерименту [13]. За винятком рис. 6a (де експериментальні дані наведені для переходу $6s5d\ ^3D_3 \rightarrow 5d6p\ ^3F_j$ між складовими мультиплетів початкового і кінцевого станів атома Ва), отримано чудове якісне і добре кількісне узгодження теорії з експериментом.

Підкреслимо, що ми жодним чином не нормували експериментальні перерізи на теоретичні результати. На жаль, ми не можемо прямо порівняти свої РМПС38-перерізи з результатами ЗС3115 [20], оскі-

льки в цій праці наведені тільки ІІ для переходу між складовими мультиплетів початкового і кінцевого станів атома Ва.

Висновки

Отримані нами в підході РМПС38 інтегральні перерізи розсіяння електронів на атомі Ва в збуджених станах $6s5d\ ^3D$ та $6s5d\ ^1D$ носять систематичний характер, охоплюють велику кількість спектральних переходів, нараховані у значній кількості точок по енергії і добре узгоджуються з наявними експериментальними даними [13]. Показано, що наближення РМПС38 достатньо точно передає основні особливості ІІ елементарних процесів збудження при розсіяння e -Ва в області енергій 0-30 еВ.

Автори висловлюють подяку своїм співавторам по роботі [1] проф. О. Зацарінному та доц. В. Гедеону за допомогу в проведенні розрахунків та продуктивні обговорення.

ЛІТЕРАТУРА

- Zatsarinny O.I., Bandurina L.A., Gedeon V.F. *R*-matrix calculations of the integral electron-impact excitation cross sections of the ground state of the barium atom // *Opt. Spectrosc.* – 2004. – Vol. 97, No 4. – P. 499-507.
- Gedeon V., Lengyel V., Zatsarinny O., Kocher C.A. Calculation of electron-impact excitation from metastable states of the Sr atom // *Phys. Rev. A.* – 1997. – Vol. 56, No 5. – P. 3753-3764.
- Gedeon V., Lengyel V., Zatsarinny O., Kocher C.A. Electron-impact excitation of the Mg atom from the ground and metastable states: *R*-matrix calculation with pseudostates // *Phys. Rev. A.* – 1999. – Vol. 59, Iss. 3. – P. 2016-2029.
- Zatsarinny O.I., Bandurina L.A., Gedeon V.F. Resonances in electron-impact integral excitation cross sections of the magnesium atom // *Opt. Spectrosc.* – 2003. – Vol. 95, No 2. – P. 167-175.
- Zatsarinny O., Bandurina L. *R*-matrix calculations of the electron-impact excitation of Zn^+ // *Journ. Phys. B.* – 1999. – Vol. 32, No 19. – P. 4793-4804.
- Zatsarinny O.I., Bandurina L.A. *R*-matrix calculations of the electron-impact excitation cross sections for the Cd^+ ion // *Opt. Spectrosc.* – 2000. – Vol. 89, Iss. 4. – P. 498-505.
- Fabrikant I.I. Calculation of electron scattering cross sections for magnesium and barium // *Journ. Phys. B.* – 1980. – Vol. 13, No 3. – P. 603-612.
- Fursa D.V., Bray I. Calculation of electron scattering from the ground state of barium // *Phys. Rev. A.* – 1999. Vol. 59, Iss. 1. – P. 282-294.
- Aleksahin I.S., Zapesochnyi I.P., Garga I.I., Starodub V.P. Excitation of alkaline-earth atoms by electron impact. 5: Barium. // *Opt. Spectrosc.* – 1975. – Vol. 38, Iss. 2. – P. 126-129.
- Chen S.T., Gallagher A. Excitation of the Ba and Ba^+ resonance lines by electron impact on Ba atoms // *Phys. Rev. A.* – 1976. Vol. 14, Iss. 2. – P. 593-601.
- Romanyuk N.I., Shpenik O.B., Zapesochnyi I.P. Cross sections and characteristics of electron scattering by calcium, strontium, and barium atoms // *JETP Lett.* – 1980. – Vol. 32, No 7. – P. 452-455.
- Алексахин И.С., Загребин С.Б., Озолиньш Д.А., Самсон А.В., Шафраньош И.И., Шишова Т.А. Эффективные сечения возбуждения атомов бария электронным ударом из метастабильного

- 5^1D_2 -состояния // Опт. и спектр. – 1982. – Т. 53, Вып. 2. – С. 375-378.
13. Шафраньош І.І. Процеси непружних взаємодій електронів із збудженими атомами // Дисертація на здобуття вченого ступеня д.ф.-м.н. (Ін-т. фізики НАНУ, Київ). – Ужгород. – 1993. – 231с.
 14. Стародуб В.П. // Експериментальні дослідження збудження атомів стронція і барія електронами низьких енергій // Дисертація на здобуття вченого ступеня к.ф.-м.н. – Ужгород. – 1975. – 140 с.
 15. Lengyel V., Zatsarinny O., and Remeta E. // Electron scattering on complex atoms (ions). (Horizons in World Physics, Vol. 234). Huttington, New York: Nova Science Publishers, Inc., 2000, 474 p.
 16. Yuan J. The resonance structures of electron interaction with Sr and Ba atoms: low-energy electron scattering and photo-detachment of the negative ions // J. Phys. B. – 2003. – V.36. – No 10. – P. 2053–2071.
 17. Adibzadeh M. and Theodosiou C.E. Elastic electron scattering from Ba and Sr // Phys. Rev. A. – 2004. – V. 70, Iss. 5. – P. 052704 (11).
 18. Shafranyosh I., Zatsarinny O., Gedeon V., Bandurina L. Thes. 18 Conf. fund. atmosph. spect. Russian, Zvenigorod. – 2003. – P. 129-130.
 19. Shafranyosh I.I., Snegurskaya T.A., Margitich M.O. Spectroscopic studies of barium atom excitation from singlet and triplet metastable states by electrons // Uzgh. Univ. Scient. Herald. Ser. Phys. – 2006. – Iss. 19. – P. 130-136.
 20. Fursa D.V., Bray I., Csanak G., Clark R.E.H., Abdallah J., Jr., Kanik I., Trajmar S. Electron-impact excitation of excited atomic barium // Phys. Rev. A. – 2002. – V. 65, Iss. 3. – P. 032723 (7).
 21. Srivastava R., Stauffer A.D. Inelastic electron scattering from excited barium atoms // Phys. Rev. A. – 2005. – V. 71, Iss. 5. – P. 052715 (8).
 22. Froese Fischer C. The MCHF atomic-structure package // Comput. Phys. Commun. – 1991. – V. 64. – P. 369-398.
 23. Froese Fischer C., Brage T., Jonsson O. Computational Atomic Structure. An MCHF Approach // London: Institute of Physics Publishing. – Bristol. – 1997. – 279 p.
 24. Burke P.G., Berrington K.A. Atomic and molecular processes: an *R*-matrix approach // Bristol: Institute of Physics, 1993. – 416 p.
 25. Berrington K.A., Eissner W.B., Norrington P.N. RMATRX1: Belfast atomic *R*-matrix codes // Comput. Phys. Commun. – 1995. – Vol. 92, Iss. 2-3. – P. 290-420.
 26. Burke V.M. FARM – A flexible asymptotic *R*-matrix package / V.M. Burke, C.J. Noble // Comput. Phys. Commun. – 1995. – V. 85, No 3. – P. 471-500.
 27. Moore C.E. // Atomic Energy Levels Circ. Washington, DC: US Govt Printing Office, 1949. V. 1. No 467.

Стаття надійшла до редакції 29.04.2018 р.

Л.А. Бандурина¹, С.В. Гедеон²

¹ Інститут електронної фізики НАНУ, ул. Университетская, 21, Ужгород, 88000, Україна,

² Ужгородський національний університет, ул. Волошина, 54, Ужгород, 88000, Україна,

НЕУПРУГОЕ РАССЕЯНИЕ ЭЛЕКТРОНОВ НА ВОЗБУЖДЕННЫХ АТОМАХ БАРИЯ

В рамках *R*-матричного метода проведены расчеты интегральных сечений (ИС) возбуждения низкоэнергетическими электронами атомов бария с метастабильных состояний $6s5d\ ^3D$ та $6s5d\ ^1D$. Силы столкновений рассчитаны в приближении сильной связи каналов с учетом 38 термов. Последние включали 16 физических состояний мишени и 22 псевдосостояния, начисленных в *LS*-связи. Полученные в приближении *R*-матрицы с псевдосостояниями сечения проявляют ярко выраженную резонансную структуру. Проведено сравнение рассчитанных ИС рассеяния *e*-Ba с имеющимися экспериментальными данными. Получено хорошее согласие теории с экспериментом.

Ключевые слова: атом Ba, псевдосостояния, рассеяние электронов, сильная связь каналов, метод *R*-матрицы, интегральные сечения рассеяния.

L.O. Banduryna¹, S.V. Gedeon²

¹ Institute of Electron Physics. NAS of Ukraine, Voloshina Str., 54. Uzhgorod, 88000, Ukraine,

² Uzhgorod National University, Universytetska Str., 21, Uzhgorod, 88000, Ukraine,

INELASTIC ELECTRON SCATTERING FROM EXCITED BARIUM ATOMS

Background: Progress in the field of physics of electron-atom collisions is dependent on two main factors: a) the availability of new studies of individual atomic systems; b) the clarify, systematize and generalize of results, obtained in previous studies. In the last two decade we, together with co-authors, investigate in detail the elastic and inelastic electron scattering on neutral atomic systems Mg, Ba, Sr, Ca, Si, F, Al, and B. The purpose of this paper is to systematize and summarize the results of studies of Ba atom, and is to continue the investigation of the scattering integral cross sections of electrons on the excited barium atom, begun in our previous work.

Methods: The atomic structure for Ba, as well as the excitation cross sections for e -Ba scattering processes were obtained by the R -matrix with pseudostates method. The multiconfiguration Hartree-Fock method with orthogonal orbital sets was employed for an accurate representation of the targets wave functions. The close coupling expansions include 39 term: 16 spectroscopic states of neutral barium and 22 pseudostates. The scattering calculations was then carried out in the same way as in standard R -matrix calculations.

Results: The integral cross sections for the scattering of low-energy electrons by a barium atom in the excited states $6s5d^3D$ and $6s5d^1D$ are calculated. The calculations were carried out in the R -matrix approximation with pseudostates. The collision strengths were calculated in the close coupling channels approximation with allowance for 38 terms. The latter include 16 physical states of the target and 22 pseudostates accumulated in the LS-coupling. The cross sections obtained in the R -matrix approximation exhibit a pronounced resonance structure. A comparison was made of the calculated ICS scattering e -Ba with the available experimental data. A good agreement between the theory and experiment was obtained.

Conclusions: For the e -Ba collisions were the scattering cross-sections calculated. All transitions from the excited $6s5d^3D$ and $6s5d^1D$ states of the Ba atom to the 15 lowest excited levels were considered. The energy dependences of the ICS on the type of spectral transition in the Ba atom were discussed.

Key words: Ba atom, pseudostates, electron scattering, channels close coupling, R -matrix method, scattering integral cross-sections

PACS: 34.80.DP, 34.80.GS

REFERENCES

- Zatsarinny O.I., Bandurina L.A., Gedeon V.F. (2004) “ R -matrix calculations of the integral electron-impact excitation cross sections of the ground state of the barium atom” // Opt. Spectrosc., Vol. 97, No 4, P. 499-507.
- Gedeon V., Lengyel V., Zatsarinny O., Kocher C.A. (1997) “Calculation of electron-impact excitation from metastable states of the Sr atom” // Phys. Rev. A, Vol. 56, No 5, P. 3753-3764.
- Gedeon V., Lengyel V., Zatsarinny O., Kocher C.A. (1999) “Electron-impact excitation of the Mg atom from the ground and metastable states: R -matrix calculation with pseudostates” // Phys. Rev. A, Vol. 59, Iss. 3, P. 2016-2029.
- Zatsarinny O.I., Bandurina L.A., Gedeon V.F. (2003) “Resonances in electron-impact integral excitation cross sections of the magnesium atom” // Opt. Spectrosc, Vol. 95, No 2, P. 167-175.
- Zatsarinny O., Bandurina L. (1999) “ R -matrix calculations of the electron-impact excitation of Zn^+ ” // Journ. Phys. B, Vol. 32, No 19, P. 4793-4804.
- Zatsarinny O.I., Bandurina L.A. (2000) “ R -matrix calculations of the electron-impact excitation cross sections for the Cd^+ ion” // Opt. Spectrosc, Vol. 89, Iss. 4, P. 498-505.
- Fabrikant I.I. (1980) “Calculation of electron scattering cross sections for magnesium and barium” // Journ. Phys. B, Vol. 13, No 3, P. 603-612.
- Fursa D.V., Bray I. (1999) “Calculation of electron scattering from the ground

- state of barium” // *Phys. Rev. A*, Vol. 59, Iss. 1, P. 282-294.
9. Aleksahin I.S., Zapesochnii I.P., Garga I.I., Starodub V.P. (1975) “Excitation of alkaline-earth atoms by electron impact. 5: Barium” // *Opt. Spectrosc*, Vol. 38, Iss. 2, P. 126-129.
 10. Chen S.T., Gallagher A. (1976) “Excitation of the Ba and Ba⁺ resonance lines by electron impact on Ba atoms” // *Phys. Rev. A*, Vol. 14, Iss. 2, P. 593-601.
 11. Romanyuk N.I., Shpenik O.B., Zapesochnyi I.P. (1980) “Cross sections and characteristics of electron scattering by calcium, strontium, and barium atoms” // *JETP Lett*, Vol. 32, No 7, P. 452-455.
 12. Aleksahin I.S., Zagrebin S.B., Ozolin'sh D.A., Samson A.W., Shafran'osh I.I., Shishova T.A. (1982) “The effective electron impact excitation cross sections of barium atoms from the metastable 5¹D₂- state” [“Effektiwnyje sechenija wozbuzhdenija atomow barija elektronnym udarom iz metastabil'nogo 5¹D₂-sostojanija”] // *Opt. Spectrosk.* (Russian), V. 53, Iss. 2, P. 375-378.
 13. Shafran'osh I.I. (1993) “Processes of inelastic interactions of electrons with excited atoms” [“Procesy nepruzhnyh wzajemodij elektroniv iz zbudzheny atomamy”] // Doctoral Dissertation (Inst. of Physics NASU, Kyiv) Uzhgorod, 231 p.
 14. Starodub W.P. (1975) // “Experimental investigations of the excitation of strontium and barium atoms by low-energy electrons” [“Experymental'ni doslidzhennia zbudzhennia atomiv stroncija ta barija elektronamy nyz'kyh energij”] // Doctoral Dissertation, Uzhgorod, 140 p.
 15. Lengyel V., Zatsarinny O., and Remeta E. (2000) “Electron scattering on complex atoms (ions)” // (Horizons in World Physics, Vol. 234). Huttington, New York: Nova Science Publishers, Inc., 474 p.
 16. Yuan J. (2003) “The resonance structures of electron interaction with Sr and Ba atoms: low-energy electron scattering and photodetachment of the negative ions” // *J. Phys. B.*, V. 36, No 10, P. 2053-2071.
 17. Adibzadeh M. and Theodosiou C.E. (2004) “Elastic electron scattering from Ba and Sr” // *Phys. Rev. A*, V. 70, Iss. 5, P. 052704 (11).
 18. Shafranyosh I., Zatsarinny O., Gedeon V., Bandurina L. (2003) “The low-energy electron scattering on barium atom” // *Thes. 18 Conf. fund. atmosph. spect. Russian, Zvenigorod*, P. 129-130.
 19. Shafranyosh I.I., Snegurskaya T.A., Margitich M.O. (2006) “Spectroscopic studies of barium atom excitation from singlet and triplet metastable states by electrons” // *Uzhg. Univ. Scient. Herald. Ser. Phys*, Iss. 19, P. 130-136.
 20. Fursa D.V., Bray I., Csanak G., Clark R.E.H., Abdallah J., Jr., Kanik I., Trajmar S. (2002) “Electron-impact excitation of excited atomic barium” // *Phys. Rev. A*, V. 65, Iss. 3, P. 032723 (7).
 21. Srivastava R., Stauffer A.D. (2005) “Inelastic electron scattering from excited barium atoms” // *Phys. Rev. A*, V. 71, Iss. 5, P. 052715 (8).
 22. Froese Fischer C. (1991) “The MCHF atomic-structure package” // *Comput. Phys. Commun.*, V. 64, P. 369-398.
 23. Froese Fischer C., Brage T., Jonsson O. (1997) “Computational Atomic Structure. An MCHF Approach” // London: Institute of Physics Publishing, Bristol, 279 p.
 24. Burke P.G., Berrington K.A. (1993) “Atomic and molecular processes: an *R*-matrix approach” // Bristol: Institute of Physics, 416 p.
 25. Berrington K.A., Eissner W.B., Norrington P.N. (1995) “RMATRIX1: Belfast atomic *R*-matrix codes” // *Comput. Phys. Commun*, Vol. 92, Iss. 2-3, P. 290-420.
 26. Burke V.M. (1995) “FARM – A flexible asymptotic *R*-matrix package” / V.M. Burke, C.J. Noble // *Comput. Phys. Commun.*, V. 85, No 3, P. 471-500.
 27. Moore C.E. (1949) “Atomic Energy Levels Circ.” // Washington, DC: US Govt Printing Office, V. 1, No 467.