

ДИФЕРЕНЦІАЛЬНІ ПЕРЕРІЗИ ПРУЖНОГО РОЗСІЯННЯ ЕЛЕКТРОНІВ НА АТОМІ КАЛЬЦІЮ В ОСНОВНОМУ І НИЖНІХ ЗБУДЖЕНИХ СТАНАХ

С.В. Гедеон

Кафедра теоретичної фізики

Метод R -матриці з B -сплайнами використаний для дослідження диференціальних перерізів пружного розсіяння електронів на атомі кальцію в основному 4^1S та нижніх збуджених станах 4^3P^o , 3^3D та 4^1P^o . Для точного представлення хвильових функцій мішені використовувався багатоконфігураційний метод Хартрі-Фока з неортогональними орбіталями. Розклад сильного зв'язку включав 39 зв'язаних станів нейтрального кальцію, охоплюючи всі стани від основного стану до $4s8s\ ^1S$. Отримано хороше узгодження розрахованих перерізів з існуючими експериментальними даними для пружного розсіяння з основного стану. Проаналізована структура 3D-поверхні отриманих диференціальних перерізів, визначено характеристики виявлених 3D-резонансів і дана їх інтерпретація.

I. ВСТУП

У той час як процеси пружного розсіяння з основного стану атома кальцію детально вивчалися багатьма авторами (див., напр. [1]), пружне розсіяння зі збуджених станів поки що залишалось поза увагою дослідників. У недавній статті [1] у рамках методу R -матриці з B -сплайнами (BSR) [2] ми із співавторами здійснили розрахунки пружного та повного перерізів розсіяння $\text{Ca} + e^-$, а також перерізів фоторозщеплення від'ємного іона Ca^- і отримали хороше узгодження з існуючими експериментальними даними. У даній роботі ми представляємо результати розрахунків у

рамках методу BSR диференціальних перерізів пружного розсіяння електронів на Ca в основному 4^1S і збуджених 4^3P^o , 3^3D , 3^1D та 4^1P^o -станах.

Вимірювання диференціальних перерізів (differential cross sections – DCS) пружного розсіяння електронів на атомі кальцію являє собою непересічну задачу – наразі нам відомі тільки дві роботи [3, 4] у цьому напрямку. Так в роботі [3] представлені вимірювання DCS для пружного розсіяння та збудження двох нижніх станів атома Ca електронами при кутах розсіяння 90° в області енергій від порогів до 6-7 еВ. В експерименті [4] за допомогою оптимізованого трохісного спектрометра була виміряна енергетична залежність функції

$$S(E) = \int_{\theta_2}^{\theta_1} \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega. \quad (1)$$

де

$$\begin{aligned} \theta_1(E) &= \sin^{-1}[(k_1/E)^{1/2}], \\ \theta_2(E) &= \sin^{-1}[(k_2/E)^{1/2}], \\ k_1 &= 0.482, \quad k_2 = 0.508, \end{aligned} \quad (2)$$

тобто отримані, по суті, інтегродиференціальні перерізи (IDCS) пружного розсіяння $4^1S - 4^1S$. Значення коефіцієнтів k_1 , k_2 визначалися параметрами експериментальної установки. Діпазон розглянутих у [4] енергій складав ~ 0.15 - 2.7 еВ.

Стислий огляд теоретичних досліджень пружного розсіяння електронів на Ca був здійснений нами у попередніх статтях [1, 5]. За винятком піонерської роботи [6], у всіх цих дослідженнях розраховувалися інтегральні, як в [7, 8], або інтегродиференціальні, як в [9], перерізи пружного розсіяння електронів на атомі Ca тільки в основному стані.

Мета даного дослідження полягала в тому, щоб у рамках методу BSR [2], на основі розрахованої в роботі [1] К-

матриці розсіяння, отримати диференціальні перерізи пружного зіткнення електронів з атомом Са в основному і чотирьох нижніх збуджених станах та провести аналіз відповідних 3D-поверхонь DCS. Зазначимо, що у BSR-дослідженні [1] акцент був зроблений на точності хвильових функцій мішені при дотриманні принципів *ab initio* в розрахунку атомної структури. Іншою особливістю наближення BSR є використання залежних від терму неортогональних орбіталей як для опису станів мішені, так і характеристик розсіяння. Це дозволяє індивідуально оптимізувати різні атомні хвильові функції, і, отже, отримувати точний опис станів мішені з відносно невеликою кількістю конфігурацій.

Короткий опис застосованих методів розрахунку, а також обговорення отриманих результатів представлені, відповідно, в розділах II і III.

II. МЕТОДИ РОЗРАХУНКУ

A. Розрахунки структури

Розрахунок структури атома кальцію, здійснений у роботі [1], дає енергії рівнів та хвильові функції, що добре узгоджуються з експериментальними енергіями та значеннями сил осциляторів, рекомендованими NIST [10]. Зокрема, в [1] приведені значення енергій 39 нижніх спектроскопічних станів Са, розраховані методом BSR39, та дано їх порівняння з даними NIST [10]. Загальне узгодження між експериментом і теорією є достатньо хорошим, з відмінностями в енергіях зв'язку меншими за 0.1 eV, за винятком нижчих станів $4s^2\ ^1S$ та $4s4p\ ^3P^o$. Дана структура опису являє суттєве покращення в порівнянні з тими, що

використовувалися в попередніх R -матричних розрахунках [7-8, 11-12]. Оскільки в подальших розрахунках розсіяння нами використовувалися експериментальні значення енергій станів, то відповідні енергії з BSR39-розрахунків тут не приводяться. Схема розміщення станів мішені, включених у дані розрахунки розсіяння, та їх енергії [10] приведені на рис. 1. Результати оцінки якості хвильових функцій атом-мішені Ca за допомогою сил осциляторів різних переходів, здійсненої в [1], за браком місця тут не приводяться.

В. Розрахунки розсіяння

Для розрахунків розсіяння ми використовували недавно створену R -матричну програму з B -сплайнами [2]. Особливості наближення BSR, зокрема щодо застосування до електронного зіткнення, можуть бути встановлені з роботи [1] і посилань, наведених у ній.

У методі BSR ми використовували B -сплайни в якості універсального базису для представлення орбіталей розсіяння у внутрішній області з $r \leq a$. Отже, R -матричний розклад у цій області має вид:

$$\Psi_k^\Gamma(x_1, \dots, x_{N+1}) = A \sum_{ij} \bar{\Phi}_i^\Gamma(x_1, \dots, x_N; r_{N+1} \sigma_{N+1}) r_{N+1}^{-1} B_j(r_{N+1}) a_{ijk}^\Gamma \quad (3)$$

Тут $\bar{\Phi}_i^\Gamma$ – каналні функції, які сформовані шляхом зв'язку кутових і спінових координат r_{N+1} та σ_{N+1} налітаючого електрона з N -електронними станами мішені $\Phi_i(x_1, \dots, x_N)$ для отримання функцій з квантовими номерами комбінованої системи, що позначаються Γ . Крім того, сплайни $B_j(r)$ представляють орбіталі континууму.

У розрахунках розсіяння, як і при обчисленні зв'язаних станів мішені, ми використовували 118 B -сплайнів порядку 8, R -матричний радіус був рівним $a = 80 a_0$ (де

$a_0=0.529 \times 10^{-10}$ м – борівський радіус). Парціально-хвильові вклади чисельно розраховувалися аж до $L = 25$, при необхідності – до $L = 50$. Перерізи обчислювалися за стандартною R -матричною схемою, з використанням для зовнішньої області пакету *FARM* [13]. Як указувалося вище, в розрахунках розсіяння ми використовували експериментальні енергії збудження мішені.

III. РЕЗУЛЬТАТИ І ОБГОВОРЕННЯ

DCS пружного переходу $4s^2 \ ^1S - 4s^2 \ ^1S$

Насамперед, приведемо порівняння наших BSR-результатів з наявними експериментальними даними.

На рис. 2а показано порівняння розрахованих нами за формулами (1), (2) значень функції $S(E)$, тобто IDCS пружного розсіяння електронів на Ca, з експериментом [4] та теоретичними розрахунками [9] в області енергій до 3 еВ. Експериментальні IDCS [4] були нормовані нами на BSR-значення $S(E)$ – суцільна лінія – при $E = 1.83$ еВ. З рис. 2а видно, що як по абсолютній величині, так і щодо положення піків/провалів, експериментальна та теоретичні криві досить добре корелюють між собою. Розрахунки $S(E)$ були здійснені нами також для ряду інших значень k_1 та k_2 з (2), зокрема, при $k_1=1.260$, $k_2=1.274$ (рис. 2а, штрихована лінія, – значення $S(E)$ домножені на фактор 4). Як видно з рис. 2а, енергетичні залежності $S(E)$ в розрахунках BSR39, зняті при різних наборах значень параметрів k_i ($i=1,2$), суттєво відрізняються. На рис. 2б відображено дві енергетичні залежності параметричних функцій $\theta_i(k_i)$, ($i=1,2$), для двох різних областей (смуг) кутів розсіяння, у яких (смугах) розраховувалися $S(E)$ з (1)-(2) при різних значеннях коефіцієнтів k_1 та k_2 .

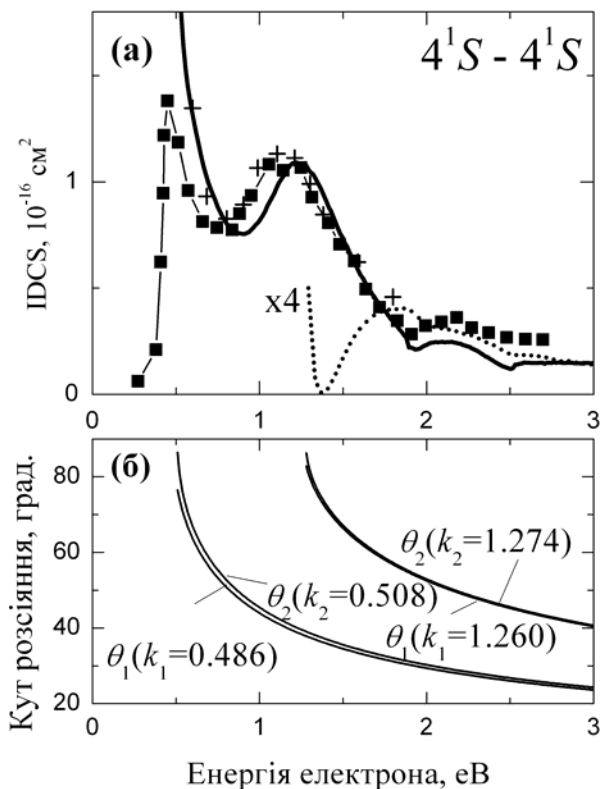


Рис. 2. (а) Частково інтегровані DCS, функція $S(E)$, для пружного переходу $4^1S - 4^1S$: (—)– BSR39 при $k_1=0.486$, $k_2=0.508$; (■)– експеримент [4], дані нормовані при 1.83 eВ на розрахунок BSR39; (+)– розрахунок [9]; (- -)– BSR39 при $k_1=1.260$ та $k_2=1.274$; (б) енергетична залежність кутів θ_1 та θ_2 при різних значеннях коефіцієнтів k_1 та k_2 з (2).

Для наглядності, на рис. 3 представлено фрагмент 3D-поверхні DCS, на якому знаками „□” відмічено енергетично-кутовий діапазон, у якому розраховувалася функція $S(E)$ при $k_1=0.486$, $k_2=0.508$. При зміщенні смуги кутів-енергій в область розміщення воронки на поверхні DCS, наприклад при $k_1=1.260$ та $k_2=1.274$, функція $S(E)$ матиме

зовсім інший характер, – як показано штрихованою лінією на рис. 2а. Таким чином, вигляд енергетичної залежності IDCС пружного переходу $4^1S - 4^1S$, рис. 2а, сильно залежить від смуги кутів-енергій, у якій розраховується функція $S(E)$, рис. 2b, і визначається характеристиками 3D-поверхні DCS, рис. 3.

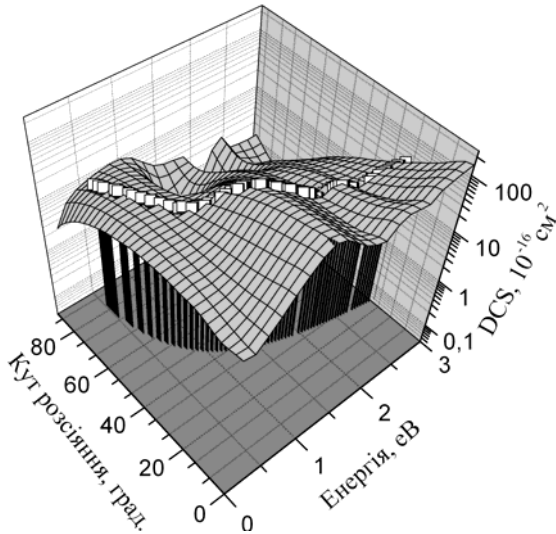


Рис. 3. Фрагмент трьохвимірної поверхні DCS пружного розсіяння електронів атомом Ca в основному стані. Знаками „□” відмічено енергетично-кутовий діапазон з якого було знято експериментальні дані [4] для цих перерізів. На задньому плані видно глибокі „воронкоподібні” структури на поверхні DCS.

На рис. 4 ми порівнюємо розраховані нами BSR39-перерізи з експериментальними DCS пружного розсіяння на 90° [3] у припороговій області енергій до 7 еВ. Дуже добре узгодження теорії з експериментом, нормованим на BSR39-перерізи при 1.8 еВ, спостерігається в діапазоні енергій 1.3-2.8 еВ.

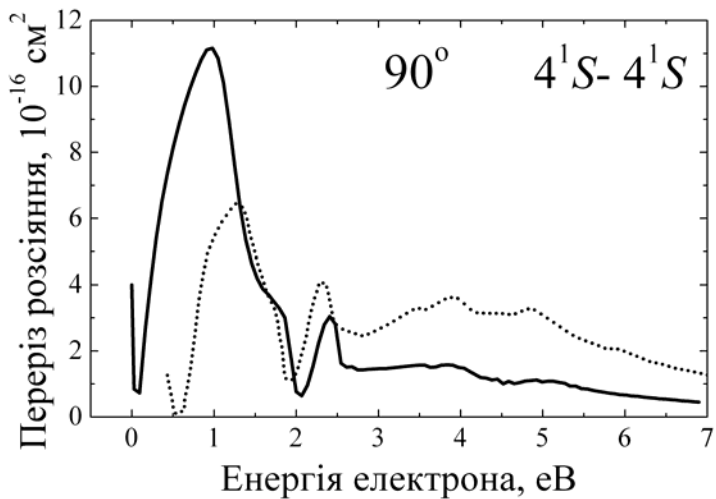


Рис. 4. Диференціальні перерізи пружного розсіяння електронів на атомі Са на кут на 90° . (—) BSR39; (- - -) експеримент [3].

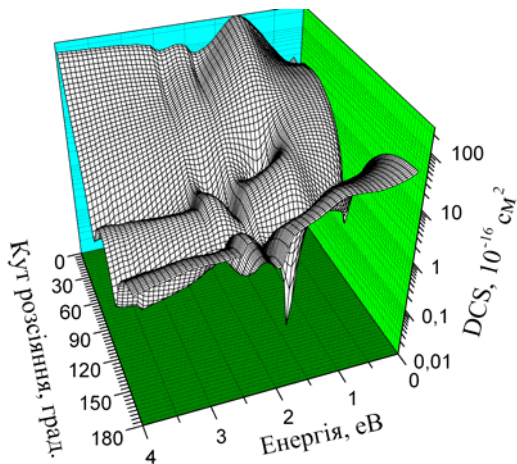


Рис. 5. Диференціальні перерізи пружного переходу $4^1S - 4^1S$ в атомі Са при зіткненні з електронами; енергії до 4 eВ.

Якісні відмінності при менших енергіях зв'язані, як вказувалося в [3], з великою шириною апаратної функції, в результаті чого припороговий мінімум, розрахований при ~ 0.01 еВ зміщується на експерименті вправо на ~ 0.4 еВ.

Для більш повного уявлення про характер поведінки DCS пружного розсіяння електронів на Са у припороговій області до 4 еВ, на рис. 5 приведена тривимірна поверхня кутової і енергетичної залежностей DCS для цього випадку. В області енергій 1.2-3 еВ дуже добре видно характерні поперечні складки на поверхні DCS, які спостерігалися й на експерименті [3]. На поверхні DCS видно також воронкоподібні структури, пов'язані з включенням додаткових каналів розсіяння.

На рис. 6 показано інший ракурс 3D-поверхні DCS пружного розсіяння, а саме зі сторони низьких енергій, вид зверху. Точки локальних мінімумів – воронкоподібних впадин – позначені кружками, пронумеровані і з'єднані між собою лініями по місцю проходження поздовжніх (скісних) впадин-жолобів на 3D-поверхні DCS. Проекція схеми розміщення локальних мінімумів на площину енергій-кутів показана на рис. 7.

Для більшої наглядності, на рис. 8 показана "перевернута" поверхня DCS, на якій локальні мінімуми-воронки мають вигляді конусоподібних „піків”, а впадини-жолоби – вигляд поздовжніх „хребтів”.

Параметри особливих точок на поверхні DCS пружного розсіяння електронів на Са в основному стані приведені в табл. 1.

Особливу увагу привертає точка локального мінімуму під номером 6 ($E=6.12$ еВ; $\theta=57.8^\circ$), у якій відбувається галуження жолобу, що проходить через точки мінімумів 2, 4, 6 та 8 на поверхні DCS, на два жолоби. Звернемо увагу, що енергія іонізації атома Са рівна $E_{\text{ion}}=6.113$ еВ, а кут θ близький до 1 радіана (57.3°).

Таблиця 1.

**Параметри особливих точок на поверхні DCS
пружного розсіяння e+Ca**

№ п/п	E_{\min} , eВ	θ_{\min} , град.	σ_{\max} , Mb	σ_{\min} , Mb
1	0.1361	99.47	—	—
2	1.3473	73.89	$\cong 16$	4.8E-3
3	1.4185	134.53	$\cong 3$	1.5E-3
4	2.1310	82.42	$\cong 3$	5.3E-1
5	2.2022	136.89	$\cong 1$	4.1E-1
6	6.1208	57.79	$\cong 0.25$	3.59E-5
7	11.6069	125.53	$\cong 0.1$	1.20E-4
8	16.4517	83.84	$\cong 0.01$	5.33E-5

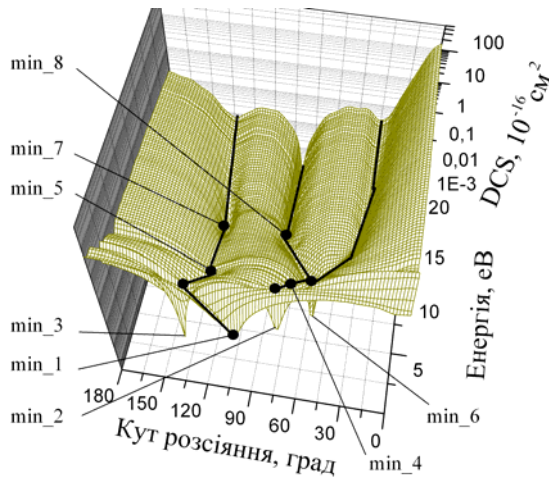


Рис. 6. Розміщення локальних мінімумів (●) і поздовжніх впадин-жолобів (—) на 3D-поверхні DCS. Нумерація мінімумів – по зростанню енергії.

Тут E_{\min} , θ_{\min} , σ_{\min} – енергія, кут та значення DCS у нижній точці воронки; σ_{\max} – значення DCS біля „горловини” воронки.

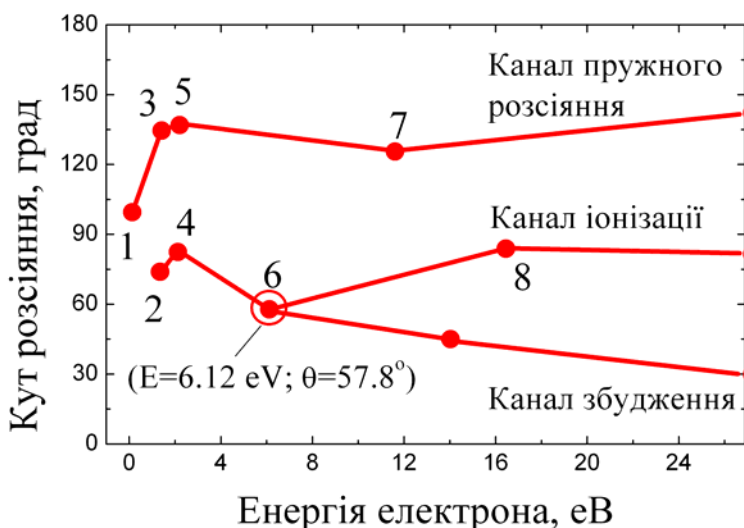


Рис. 7. Схема розміщення локальних мінімумів (●) і поздовжніх впадин-жолобів (—) на 3D-поверхні DCS. Нумерація мінімумів як на рис. 6. У точці 6 ($E=6.12$ eV; $\theta=57.8^\circ$) спостерігається галуження впадини-жолоба на поверхні DCS.

Як видно з рис. 5-8 і табл. 1, воронкоподібні особливості на 3D-поверхні DCS пружного розсіяння $e+Ca$ появляються або безпосередньо перед/після відкриття нового каналу реакції (пружне розсіяння – збудження – іонізація), або в точках зміни напрямку проходження поздовжніх (скі-сних) впадин-жолобів.

Для ілюстрації останнього твердження, на рис. 9 приведені кутові залежності DCS при фіксованих значеннях енергії.

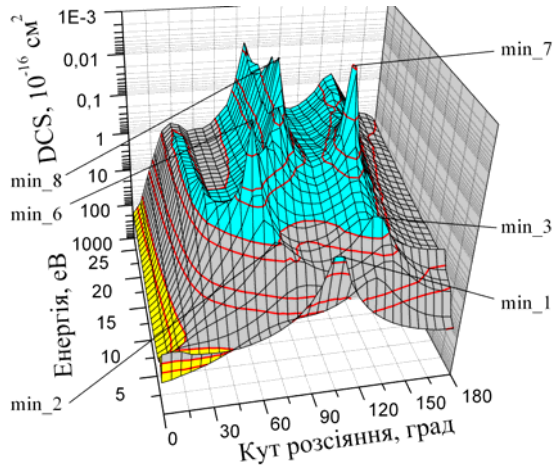


Рис. 8. Розміщення локальних мінімумів і поздовжніх впадин-жолобів на 3D- поверхні DCS з інверсованою віссю перерізів (зображення рис. 6 повернуте на 180° відносно осі енергій). „Геодезичне” розфарбування поверхні дозволяє виділити області з „еквіпотенціальними” DCS. Нумерація мінімумів – як на рис. 6.

З правої частини рисунка видно, як змінюється характер залежності профілю DCS: від структури з одним мінімумом (при куті $\sim 100^\circ$), рис. 9б, до структури з двома мінімумами (при кутах $\sim 83^\circ$ та $\sim 135^\circ$), рис. 9е, – через послідовність проміжних резонансних структур при енергіях в околі ~ 1.4 eV та ~ 2.2 eV, рис. 9а, в, д. Нагадаємо, що поріг збудження нижнього метастабільного стану 4^3P^0 становить 1.892 eV, тобто розміщений якраз поміж резонансними особливостями з номерами 2, 3 (енергія ~ 1.35 -1.4 eV) та 4, 5 (енергія ~ 2.13 -2.2 eV).

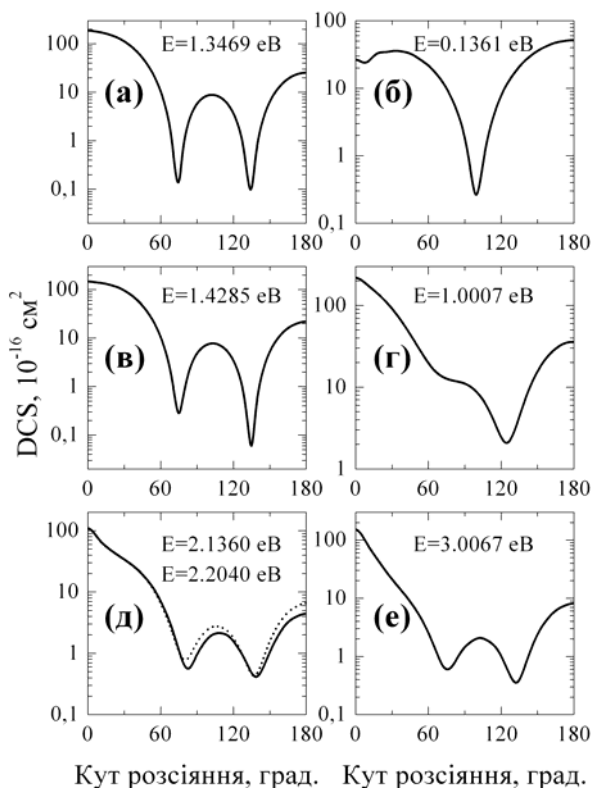


Рис. 9. Кутові залежності DCS при фіксованих значеннях енергії; (а, в, д) – вид профілів DCS в околі особливих точок 2-5; (б, г, е) – вид профілів DCS при малих, проміжних і вищих енергіях, відповідно.

DCS пружного розсіяння електронів на Ca в збуджених станах 4^3P^0 , 3^3D , 3^1D та 4^1P^0

Крім дослідження структури 3D-поверхні DCS пружного розсіяння електронів на атомі Ca в основному стані, подібні ж розрахунки були здійснені нами і по відношенню до пружного зіткнення електронів з атомом Ca у чотирьох нижніх збуджених станах 4^3P^0 , 3^3D , 3^1D та 4^1P^0 .

На рис. 10 представлено порівняння кутових залежностей відповідних DCS (за винятком переходу $3^1D - 3^1D$) зі значеннями пружного розсіяння Са в основному стані.

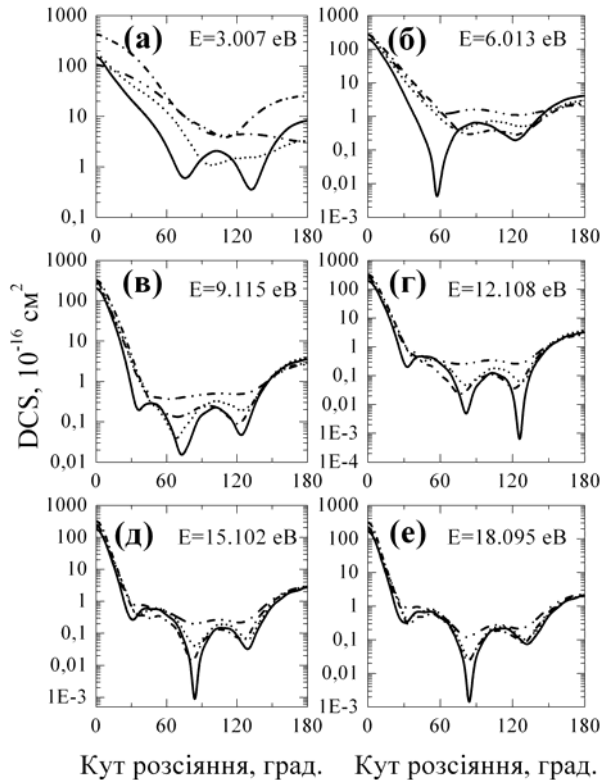


Рис. 10. Кутові залежності DCS при фіксованих значеннях енергії; (—) – перехід $4^1S - 4^1S$; $(- - -)$ – перехід $4^3P^o - 4^3P^o$; $(- \cdot \cdot \cdot)$ – перехід $3^3D - 3^3D$; $(- \cdot - \cdot)$ – перехід $4^1P^o - 4^1P^o$.

Перерізи переходу $3^1D - 3^1D$ мають той же характер поведінки і порядок величини, що і DCS, приведені на рис. 10.

Трьохвимірною поверхню DCS для цього переходу представлена на рис. 11.

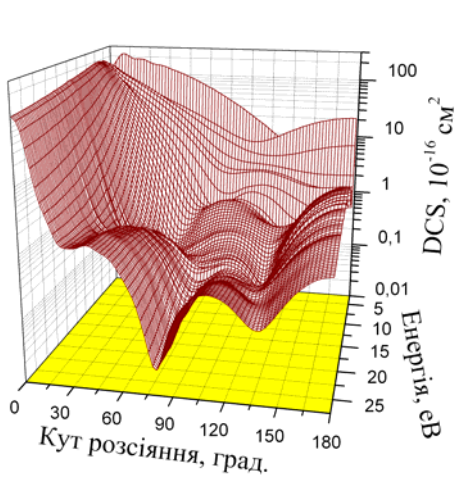


Рис. 11. Диференціальні перерізи пружного переходу $3^1D - 3^1D$ в атомі Ca при зіткненні з електронами; енергії до 25 еВ.

З рис. 10 можна зробити висновок про зростання подібності кутових залежностей DCS пружних зіткнень електронів з Ca у різних збуджених станах із ростом енергії зіткнення. З рис. 10 також видно, що диференціальні перерізи переходу $4^1S - 4^1S$ є більш структурованими, у їх кутових залежностях спостерігаються глибокі (з перепадом значень у 6 порядків!) локальні структури. Подібні особливості або повністю відсутні при розсіянні на збуджених станах Ca, або ці структури не настільки чітко виражені, рис. 11.

Структура 3D-поверхонь для розсіяння на збуджених станах 4^3P^o , 3^3D , 3^1D та 4^1P^o містить дуже багато однотипних елементів, що можна бачити з тих же рис. 10, 11. За браком місця, відповідні 3D-поверхні DCS тут не наводяться. Всі ці поверхні послідовно прорізаються одним –

двома – трьома поздовжніми/скісними впадинами-жолобами, кожен з яких появляється при відкритті нового каналу розсіяння, як було вказано вище для переходу $4^1S - 4^1S$ і підтверджено для переходу $3^1D - 3^1D$, рис. 11. Основні відмінності між кутовими залежностями обговорюваних DCS спостерігаються безпосередньо у припорогових областях, рис. 10а.

IV. ВИСНОВКИ

Ми представили результати досліджень структури диференціальних перерізів пружного розсіяння електронів на атомі Ca в основному і чотирьох нижніх збуджених станах. Розрахунки були виконані з новою розширеною версією *R*-матричного (сильний зв'язок) методу [2], в якому для представлення функцій континууму використовується *B*-сплайновий базис. Вказані DCS розраховувалися на основі *K*-матриці, отриманої в дослідженні [1].

Порівняння наших BSR39-перерізів, як інтегродиференціальних, так і диференціальних, для пружного розсіяння електронів на Ca в основному стані 4^1S з наявними вимірюваннями [3, 4] вказує, в загальному, на їх хороше узгодження з експериментом. Це дає підстави очікувати, що й виявлені нами локальні воронкоподібні структури на 3D-поверхні DCS, також ґрунтуються на реальних фізичних процесах, а не є обчислювальними артефактами.

Перерізи пружного розсіяння електронів на Ca в збуджених станах 4^3P^0 , 3^3D , 3^1D та 4^1P^0 не є настільки структурованими як при розсіянні на основному стані. Проте вони містять багато однотипних структурних елементів, зокрема поздовжніх впадин-жолобів, поява і кількість яких тісно корелює з кількістю відкритих каналів розсіяння.

Автор висловлює подяку проф. К.Бартшату, д-ру О.Зацарінному та проф В.Лазуру за наукову співпрацю, що призвела до появи даної статті.

ЛІТЕРАТУРА

1. O. Zatsarinny, K. Bartschat, S. Gedeon, V. Gedeon, and V. Lazur, *Phys. Rev. A* **74**, 052708, (2006).
2. Oleg Zatsarinny, *Comput. Phys. Commun.* **174**, 273 (2006).
3. С.М. Казаков, О.В. Христофоров, *ЖТФ* **55**, 795 (1985).
4. М.І. Романюк, О.Б. Шпеник, Ф.Ф. Папп, І.В. Чернишова, Й.В. Манді, В.І. Келемен, О.П. Сабад, С.Ю. Ремета. *Укр. фіз. журн.* **37**, 1639 (1992).
5. О. Зацарінний, К. Бартшат, Л. Бандурина, С. Геден, В. Лазур. *Наук. вісн. УжНУ, сер. “Фізика”*, **20** (2007) (прийнято до друку)
6. И.И. Фабрикант. В сб. «Атомные процессы», Рига, «Зинатне», 1975, 80.
7. Jianmin Yuan and L. Fritsche, *Phys. Rev. A* **55**, 1020 (1997).
8. Jianmin Yuan and C.D. Lin, *Phys. Rev. A* **58**, 2824 (1998).
9. V.I. Kelemen, E.Yu. Remeta and E.P. Sabad. *J. Phys. B*, **28**, 1527 (1995).
10. NIST 2005. Atomic Spectra Database, http://physics.nist.gov/cgi-bin/AtData/main_asd; W.L. Wiese, J.R. Fuhr, and T.M. Deters, *Atomic Transition Probabilities of Carbon, Nitrogen and Oxygen: a Critical Data Compilation of NIST* (Washington, DC: American Chemical Society, 1996).
11. Andy M. Samson and Keith A. Berrington, *At. Data and Nuclear data Tables* **77**, 87 (2001).
12. S. Kawazoe, T. Kai, R.K. Chauhan, R. Srivastava and S. Nakazaki, *J. Phys. B* **39**, 493 (2006).
13. V.M. Burke and C.J. Noble, *Comp. Phys. Commun.* **85**, 471 (1995).