

ДИФЕРЕНЦІАЛЬНІ ПЕРЕРІЗИ ПРУЖНОГО РОЗСІЯННЯ ЕЛЕКТРОНІВ НА АТОМІ МАГНІЮ

Є.А. Нодь

Кафедра теоретичної фізики

Розглянуто процеси пружного розсіяння електронів на атомі Mg в основному стані 3^1S при енергіях від порогу до 15 еВ. Розрахунки диференціальних перерізів розсіяння виконані методом R-матриці з B-сплайнами. Для точного представлення хвильових функцій мішені використовувалася багатоконфігураційний метод Хартрі-Фока з неортогональними орбіталями. Розклад сильного зв'язку включав 29 зв'язаних станів атома магнію, від основного стану аж до стану $3p^2\ ^3P$. Досліджено поведінку 3D-поверхні диференціальних перерізів пружного розсіяння e^+Mg при енергіях до 15 еВ.

ВСТУП

Диференціальні перерізи (ДП) пружного розсіяння електронів на атомах незмінно представляють значний теоретичний і практичний інтерес. Недавно було опубліковано ряд експериментальних робіт [1-3], в яких представлені результати вимірювань ДП розсіяння електронів на атомі магнію в області низьких і середніх енергій. З'явилася хороша можливість для багатосторонньої перевірки різних теоретичних моделей розрахунку кутових залежностей ДП процесів пружного розсіяння електронів на магнії. Зокрема, в роботі [1] було експериментально досліджено збудження електронним ударом стану 3^1P атома Mg при 40 еВ з використанням методу кореляції поляризованих фотонів з розсіяними електронами в діапазоні кутів розсіяння від 10° до 120° . У цій роботі представлено відносні ДП для

пружного розсіяння $3^1S - 3^1S$ а також для збудження станів 3^1P та 3^3P при кутах розсіяння від 10° до 140° . Аналогічні до проведених в [1] вимірювання відносних ДП, тільки вже при 20 еВ, представлені в роботі [2]. Тут же приведені результати відповідних розрахунків ДП, виконані у наближенні збіжного сильного зв'язку – convergent close-coupling (CCC) – та методу R -матриці з псевдостанами – R -matrix with pseudostates methods (RMPS). У роботі [3] були виміряні ДП пружного розсіяння атома Mg при енергії налітаючого електрона $E_0 = 10, 15, 20, 40, 60, 80$ та 100 еВ. Інтенсивності розсіяних електронів були виміряні в широкому діапазоні кутів розсіяння (10° – 150°) і нормовані на експериментальні ДП, отримані у [4] при 10° для збудження резонансного стану 3^1P . Абсолютні ДП були екстрапольовані до 0 та 180° . Були також визначені інтегровані (інтегральний Q_I , передачі імпульсу Q_M та в'язкості Q_V) перерізи.

Теоретичні розрахунки ДП атома Mg проводилися у різний час чисельними дослідницькими групами за допомогою різноманітних теоретичних наближень. Варто, проте, зауважити, що у зв'язку з появою все більш прецизійних і досконалих методів розрахунку процесів розсіяння електронів на атомах, дані з ДП, отримані за допомогою менш точних наближень досить швидко застарівають. Тому ми розглянемо тільки кілька останніх робіт, які мають безпосереднє відношення до предмету нашого розгляду. Так, у роботі [5] у наближенні сильного зв'язку п'яти каналів – close-coupling (CC5) approximation, розраховані, крім всього іншого, ДП та інтегровані перерізи пружного розсіяння електронів на магнії при енергіях налітаючого електрона $E_0 = 10, 20, 40$ та 100 еВ. У подібному ж наближенні сильного зв'язку, тільки вже для шести каналів (CC6), а також методом оптичного сильного зв'язку (OCC6) у роботі [6] були розраховані ДП та інтегрований Q_I перерізи пружно-

го розсіяння при $E_0=10, 20$ та 40 еВ. Вище вже згадувалися робота [2], у якій прецизійними методами ССС та RMPS розраховані ДП пружного розсіяння електронів на Mg при 20 еВ. Зовсім недавно в роботі [7] методом R -матричного наближення з B -сплайнами – B -spline R -matrix (close-coupling) method (BSR) [8] був розрахований цілий спектр кутових залежностей ДП для процесів пружного розсіяння електронів на Mg і збудження з основного стану $3s^2\ ^1S$ магнію у стани та $3s3p\ ^1,^3P$, $3s4s\ ^1S$, $3s3d\ ^1D$ та $3s4p\ ^1P$ з метою інтерпретації майже всіх наявних експериментальних даних для цих процесів. Зокрема, були розраховані ДП вказаних переходів при енергіях зіткнення $E_0 = 10, 15, 20, 40, 60$ та 80 еВ і отримано хороше узгодження теорії з експериментом. Виняток становлять лічені кутові залежності ДП при певних енергіях для окремих переходів, – як от ДП пружного розсіяння при енергії налітаючих електронів 10 еВ. Тут при кутах розсіяння 120 - 150° спостерігаються деякі розбіжності між експериментальними вимірюваннями [3] і BSR-розрахунками [7]. У той же час, при не набагато більших енергіях 15 - 20 еВ теоретичні і експериментальні ДП пружного розсіяння чудово узгоджуються між собою. Тому розрахунок ДП процесу $3s^2\ ^1S - 3s^2\ ^1S$ в області енергій від порога до 15 еВ з метою аналізу вказаних розбіжностей являє значний інтерес.

У даній роботі ми представляємо результати розрахунку диференціальних перерізів пружного розсіяння низькоенергетичних електронів на атомі Mg, виконаного в одному з варіантів R -матричного наближення з B -сплайнами.

I. МЕТОДИ РОЗРАХУНКУ

Модель, використана нами для розрахунку розсіяння e^+ Mg була детально описана в недавній роботі [7] і тому ми опишемо її тут у найбільш загальних рисах. Атом магнію розглядався як система з двома валентними електро-

нами над замороженим кором $1s^2 2s^2 2p^6$. Обчислення атомної структури відбувалося із врахуванням як валентної, так і кор-валентної кореляційної взаємодії електронів у атомі магнію. Остання враховувалася шляхом включення у розгляд станів мішені з розмороженим кором $2p^5$. Даний розклад сильного зв'язку включав 28 нижніх спектроскопічних станів нейтрального магнію, аж до стану $2p^6 3p^2 \ ^3P$ і, додатково, автоіонізаційний стан $2p^6 3p^2 \ ^1S$, який, згідно даних NIST [9], сильно корельований з основним станом магнію $2p^6 3s^2 \ ^1S$. Точний опис мішені забезпечувався шляхом використання багатоконфігураційних розкладів, із використанням залежних від терму валентних орбіталей, які були індивідуально оптимізовані для розглядуваних нами станів. Таким чином, хоча орбіталі з різних наборів не утворюють ортонормованого базису, ми в результаті отримуємо набір нормованих ортогональних одноелектронних орбіталей для кожного терму. В рамках наближення сильного зв'язку ці неортогональні орбіталі використовуються для опису станів мішені при розгляді більш загальної задачі зіткнення. Розрахунки структури атома Mg здійснені нами за допомогою програм пакету MCHF [10, 11], з подальшим розкладом отриманих неортогональних орбіталей по B -сплайновому базису [8].

У розрахунках розсіяння чисельно розраховані B -сплайни використовувалися в якості базисних функцій для опису вільного електрона поза R -матричним „боксом” радіусу a (див. [8]). Зокрема, ми приймали $a = 98 a_0$, де $a_0 = 0.528 \times 10^{-10}$ м – борівський радіус, а радіальна область була перекрита 130 сплайнами порядку 8. Використовуючи 20–190 конфігурацій для кожного стану мішені, одночасно із залежною від терму оптимізацією одноелектронних орбіталей, ми отримали достатньо хороший опис мішені (рівні енергій та сили осциляторів), що є необхідною передумовою подальшого точного опису задачі розсіяння. Більш

детально з цими питаннями можна ознайомитися з недавньої роботи [7].

Стани мішені, включені в дані розрахунки розсіяння, наведені в таблиці 1, де ми також порівнюємо розраховані енергії збудження з експериментальними значеннями [9]. Загальне узгодження між експериментом і теорією є достатньо хорошим, з похибками по енергії, в цілому, меншими за 0.1 eV (а подекуди й 0.01 eV), за винятком одного з нижчих станів $3s4s\ ^3S$ та верхнього автоіонізаційного стану $2p^63p^2\ ^1S$ (див. табл. 1). Включення у розклад сильного зв'язку стану $2p^63p^2\ ^1S$, достатньо відірваного від інших розглядуваних нами спектроскопічних станів Mg, обумовлювалося значним змішуванням цього стану з основним станом магнію $2p^63p^2\ ^1S$ (див. [9]), і, відповідно, суттєвим впливом на енергетичний спектр станів із термом 1S . Оцінка якості даного опису мішені, зроблена шляхом аналізу розрахованих нами сил осциляторів, була детально проведена в [7]. Тут відмітимо тільки достатньо добре узгодження наших даних з наявними у літературі експериментальними вимірюваннями і прецизійними теоретичними розрахунками сил осциляторів. Для розглядуваного нами низькоенергетичного розсіяння точні сили осциляторів є особливо важливими, оскільки вони слугують чутливим індикатором адекватності врахування поляризації мішені налітаючим електроном. При розрахунку розсіяння у розглядуваній низькоенергетичній області енергій парціально-хвильові вклади чисельно розраховувалися нами до $L = 25$. Перерізи обчислювалися за стандартною R -матричною схемою, з використанням для зовнішньої області пакету *FARM* [12].

II. РЕЗУЛЬТАТИ І ОБГОВОРЕННЯ

На рис. 1 представлені ДП пружного розсіяння електронів на Mg при енергіях 10 та 15 eV. Поряд з абсолютни-

ми експериментальними ДП [3], на рисунку відображені результати розрахунків ДП, виконаних у наближеннях методу сильного зв'язку п'яти [5] та шести [6] каналів, а також даного R -матричного з B -сплайнами розрахунку із врахуванням 29 спектроскопічних станів атома Mg у розкладі сильного зв'язку, BSR29.

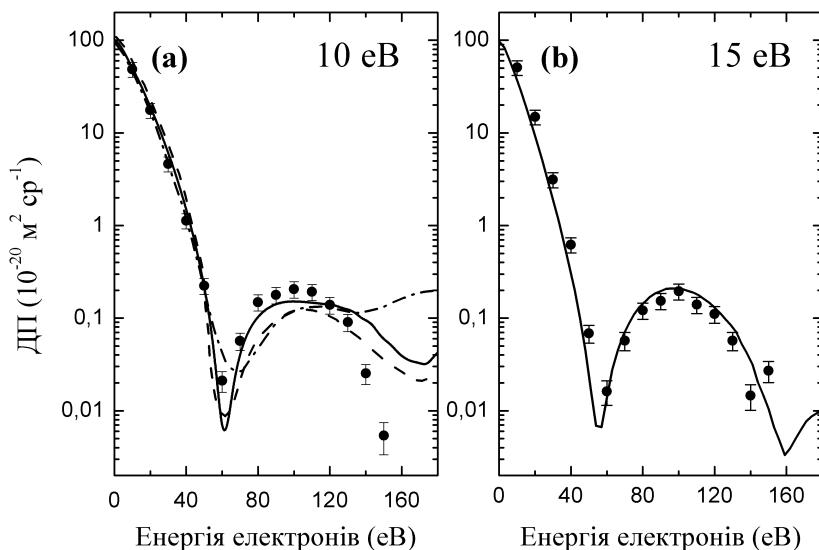


Рис. 1. Кутові залежності ДП переходу $3s^2 \ ^1S - 3s^2 \ ^1S$ для атома Mg при значеннях енергії 10 та 15 eV: (●) експеримент [3]; (—) BSR29, даний розрахунок; (- · - · -) CC5, [5]; (- - -) CC6, [6].

З рис. 1а видно, що результати BSR29-розрахунків при енергії 10 eV знаходяться в кращому узгодженні з експериментом, ніж дані інших теоретичних наближень. Від кутів розсіяння, що відповідають розсіянню вперед, і аж до кутів $\sim 120^\circ$, диференціальні перерізи, розраховані методом BSR29, практично не виходять за рамки експериментальних похибок [3]. Тільки при кутах розсіяння від 120° до 150° спостерігається деяке завищення теоретичних резуль-

татів над експериментом, з помітною відмінністю в якісній поведінці кутових залежностей ДП. Вище кутів розсіяння 150° експериментальні дані відсутні і у процес порівняння вноситься значна доля суб'єктивізму. Що стосується наших результатів для 15 еВ, представлених рис. 1b, то вони у межах експериментальних похибок співпадають з даними експериментальних вимірювань [3] для всього діапазону кутів розсіяння від 0 до 140° .

Щоб зрозуміти причини наявних розходжень теоретичних даних з експериментом [3] щодо кутових залежностей ДП пружного розсіяння $e+Mg$ при 10 еВ, нами були розраховані відповідні кутові залежності ДП у всій області енергій від порога процесу і аж до 15 еВ. На основі цих даних побудована тривимірна поверхня енергетично-кутових залежностей ДП, яка представлена на рис. 2. З рисунку видно, що структура вказаної 3D-поверхні має складний характер і побудована з ряду характерних поздовжніх „жолобів” і „хребтів”, у поведінці яких спостерігаються певні закономірності. На жаль, наразі у науковій літературі відсутні дієві методи поглибленого аналізу подібних поверхневих структур. Проте очевидно, що побудова „скелетона” – тобто проєкцій локальних мінімумів і максимумів 3D-поверхні диференціальних перерізів на енергетично-кутову площину могла б дати дуже багато інформації щодо сутності елементарних процесів, які відбуваються при пружному розсіянні електронів на атомі Mg.

Що ж до власне поведінки теоретичних ДП при енергії 10 еВ, то з рис. 2 видно, що в діапазоні енергій $\sim 2.1 \div 13$ еВ при кутах розсіяння, більших за 120° , спостерігається поздовжнє підвищення, свого роду "плато". У той час як, згідно тенденцій поведінки експериментальних ДП, у цій області кутів розсіяння повинен був би спостерігатися поздовжній жолоб.

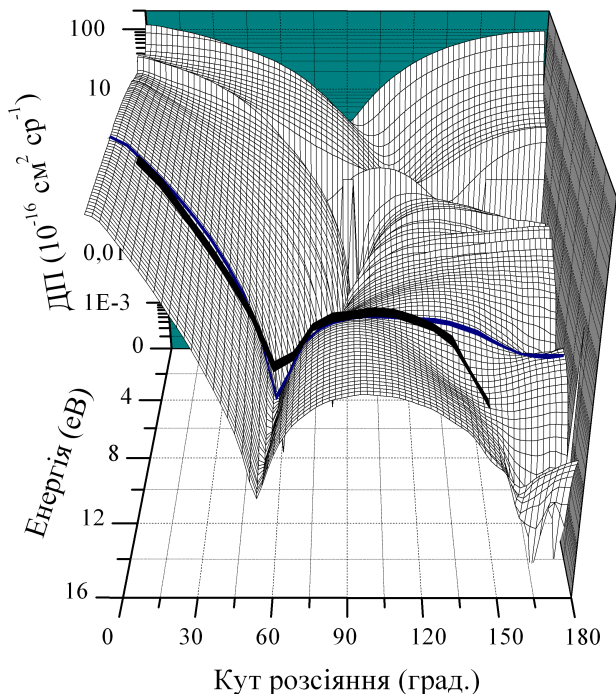


Рис. 2. Фрагмент трьохвимірної поверхні DCS пружного розсіяння електронів атомом Mg в основному стані $3s^2 \ ^1S$. Темними смугами відмічено експериментальну (коротша смуга) [3] та теоретичну BSR29 (довша смуга) кутові залежності ДП пружного розсіяння при 10 еВ. На задньому плані видно глибокі/високі поздовжні жолобо/хребтоподібні структури на поверхні DCS.

Як видно з таблиці 1, у вказаному діапазоні енергій розміщені всі пороги збудження спектроскопічних станів мішені, включених у даний розгляд. Тому подібна поведінка теоретичних BSR-перерізів у низькоенергетичній області, скоріше за все, зумовлена недостатнім урахуванням всіх кореляцій між розрахованими за допомогою пакету MCHF [10, 11] станами мішені. В подальшому нами намічається врахувати згадані кореляції шляхом розрахунку виключно методом BSR як атомних функцій мішені, так і власне розсіювання.

Таблиця 1

Енергії збудження E_{ex} (в еВ) для 28 нижніх спектроскопічних станів та стану $3p^2\ ^1S$ мішені Mg. Теоретичні значення E_{ex_BSR29} порівняні з даними NIST ^{*)} [9]. Тут $\Delta E = E_{ex_BSR29} - E_{ex_NIST}$.

№	Стан	E_{exNIST} [9]	E_{ex_BSR29}	ΔE
1	$3s^2\ ^1S$	0.0000	0.0000	0.0000
2	$3s3p\ ^3P^o$	2.7141	2.7061	-0.0080
3	$3s3p\ ^1P^o$	4.3458	4.3544	0.0086
4	$3s4s\ ^3S$	5.1078	5.2161	0.1082
5	$3s4s\ ^1S$	5.3937	5.3894	-0.0044
6	$3s3d\ ^1D$	5.7532	5.7768	0.0236
7	$3s4p\ ^3P^o$	5.9324	5.9480	0.0157
8	$3s3d\ ^3D$	5.9459	6.0269	0.0810
9	$3s4p\ ^1P^o$	6.1182	6.1375	0.0193
10	$3s5s\ ^3S$	6.4314	6.4584	0.0270
11	$3s5s\ ^1S$	6.5161	6.5081	-0.0081
12	$3s4d\ ^1D$	6.5879	6.6113	0.0234
13	$3s4d\ ^3D$	6.7190	6.7315	0.0125
14	$3s5p\ ^3P^o$	6.7263	6.7118	-0.0145
15	$3s4f\ ^1F^o$	6.7790	6.7640	-0.0150
16	$3s4f\ ^3F^o$	6.7791	6.7641	-0.0150
17	$3s5p\ ^1P^o$	6.7827	6.7758	-0.0069
18	$3s6s\ ^3S$	6.9297	6.9386	0.0089
19	$3s6s\ ^1S$	6.9663	6.9521	-0.0142
20	$3s5d\ ^1D$	6.9814	6.9990	0.0176
21	$3s5d\ ^3D$	7.0632	7.0581	-0.0050
22	$3s6p\ ^3P^o$	7.0694	7.0460	-0.0234
23	$3s5f\ ^1F^o$	7.0924	7.0745	-0.0179
24	$3s5f\ ^3F^o$	7.0924	7.0745	-0.0179
25	$3s6p\ ^1P^o$	7.0938	7.0767	-0.0170
26	$3s5g\ ^3G$	7.0997	7.0772	-0.0225
27	$3s5g\ ^1G$	7.0997	7.0777	-0.0220
28	$3p^2\ ^3P$	7.1729	7.1526	-0.0204
29	$3p^2\ ^1S$	8.4650	8.7542	0.2892

^{*)} енергії триплетів усереднені по терму

ВИСНОВКИ

Ми представили теоретичні диференціальні перерізи для зіткнення електронів з атомом Mg при енергіях від по-

рогу процесу і до 15 еВ. Розрахунки було виконано методом R -матриці з V -сплайнами [8]. Для побудови багатоконфігураційних хвильових функцій мішені були використані неортогональні набори орбіталей, розрахованих методом MCHF [10, 11]. Подібне представлення функцій розсіяння дозволяє нам незалежно оптимізувати різноманітні атомні хвильові функції і, отже, генерувати точний опис станів мішені. Використовувані нами хвильові функції мішені містять як валентну, так і кор-валентну кореляції, включену через збудження $2p^6$ -оболонки кора.

Порівняння наших BSR29-перерізів для пружного розсіяння з наявними експериментальними вимірюваннями [1-3] та теоретичними розрахунками [2, 5, 6] вказує, в загальному, на хороше узгодження з експериментом розрахованих нами ДП, краще, ніж в інших теоретичних підходах. Побудована 3D-поверхня диференціальних перерізів дозволила глибше проаналізувати поведінку ДП пружного розсіяння у припороговій області.

Автор висловлює подяку науковому керівнику с.н.с. В. Гедеону, д-ру О. Зацарінному, проф. В. Лазуру та асп. С. Гедеону за наукову співпрацю, що призвела до появи даної статті.

ЛІТЕРАТУРА

1. Brown D.O., Cvejanović D. and Crowe A. The scattering of 40 eV electrons from magnesium: a polarization correlation study for the 3^1P state and differential cross sections for elastic scattering and excitation of the 3^1P and 3^3P states // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **36** (2003), 3411–3423.
2. Brown D.O., Crowe A., Fursa D.V., Bray I. and Bartschat K. Electron scattering from magnesium at an incident energy of 20 eV // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **38** (2005), 4123–4134.

3. Predojevic B., Pejcev V., Filipovic D.M., Ševic D. and Marinkovic B.P. Elastic electron scattering by a magnesium atom // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **40** (2007) 1853–1861
4. Filipović D.M., Predojević B., Šević D., Pejčev V., Marinković B.P., Rajesh Srivastava, Stauffer A.D.. Electron impact excitation of the $3s3p\ ^1P_1$ state of magnesium: Electron scattering at small angles // *Int. J. Mass Spectrom.* **251** (2006), 66-72.
5. Mitroy J and McCarthy I.E. Differential cross sections and Stokes parameters for electron-magnesium scattering // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **22** (1989), 641-654.
6. McCarthy I.E., Ratnavelu K. and Zhou Y. Coupled-channels optical calculation of electron-magnesium scattering // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **22** (1989), 2597-2603.
7. Гедеон В., Гедеон С., Зацарінний О., Лазур В., Нодь Є. Диференціальні перерізи розсіяння електронів на атомі магнію // Науковий вісник Ужгородського ун-ту. Серія Фізика. Випуск 23. – 2008. – С. 23-35.
8. Zatsarinny O. BSR: B-spline atomic R-matrix codes // *Comput. Phys. Commun.* **174** (2006), 273-356.
9. Ralchenko Yu., Kramida A.E., Reader J. and NIST ASD Team (2008). NIST Atomic Spectra Database (version 3.1.5), [Online]; <http://physics.nist.gov/asd3> [2008, June 2]. National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD.
10. Froese C. Fischer. The MCHF atomic-structure package // *Comput. Phys. Commun.* **64** (1991), 369–398.
11. Froese C. Fischer, Brage T., Jonsson O. Computational Atomic Structure. An MCHF Approach // London: Institute of Physics Publishing, Bristol, 1997. – 279 p.
12. Burke V.M. and Noble C.J. FARM: The atomic R-matrix program // *Comp. Phys. Commun.* **85** (1995), 471–452.