

## РОЗСІЯННЯ ЕЛЕКТРОНІВ НА АТОМІ КАЛЬЦІЮ

О.Зацарінний<sup>1</sup>, К.Бартшат<sup>1</sup>, Л.Бандуріна<sup>2</sup>, С.Гедеон<sup>3</sup>, В.Лазур<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Університет Дрейка, Де-Мойн, Айова, 50311, США

<sup>2</sup> Інститут електронної фізики НАН України,  
вул.Університетська, 21, 88017, Ужгород

<sup>3</sup> Ужгородський національний університет,  
вул.Волошина, 54, 88000, Ужгород

Метод  $R$ -матриці з  $B$ -сплайнами використано для дослідження розсіяння електронів на атомі кальцію в діапазоні енергій від порога до 70 еВ. 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  $4s8s\ ^1S$ . Розраховані інтегральні і диференціальні перерізи добре узгоджуються з існуючими експериментальними даними як для пружного розсіяння, так і для процесів збудження.

### Вступ

Значний обсяг наявних експериментальних та теоретичних результатів, що стосуються дослідження атома Ca, не дозволяє навіть поверхово охопити в даній роботі весь цей масив даних. У своїй попередній статті [1] в рамках методу  $R$ -матриці з  $B$ -сплайнами (BSR) [2] ми здійснили теоретичні розрахунки пружного та повного перерізів розсіяння  $\text{Ca} + e^-$ , а також перерізів фоторозщеплення від'ємного іона  $\text{Ca}^-$  і отримали хороше узгодження з існуючими експериментальними даними. В даній роботі в рамках методу BSR ми дамо інтерпретацію кількох інших наявних експериментальних результатів із низькоенергетичного розсіяння електронів на атомі Ca.

Вимірювання інтегральних перерізів (integral cross sections – ICS) збудження резонансного стану  $4^1P$  атома кальцію [3] наразі залишаються неперевершеними щодо точності та достовірності результату. Експериментальна похибка у визначенні ICS переходу  $4^1S - 4^1P$  в [3] становить не більше 2-3%. Типовий розкид електронів

по енергії – 0.07 еВ. Більш ранні результати, представлені в роботі [4] і уточнені в [5], при хорошому якісному і кількісному узгодженні з даними [3] мають експериментальну похибку до 30%.

В роботі [6] наведені енергетичні залежності перерізів збудження атома Ca електронним ударом для п'яти серій. Однорідність електронного пучка складала  $1 \div 1.2$  еВ, максимальна похибка у визначенні абсолютних перерізів не перевищує 40%. У роботі [7] наведено ефективні перерізи збудження  $n^3P_1$ -рівнів лужноземельних атомів, зокрема єдиний наразі експеримент з визначення ICS переходу  $4^1S - 4^3P^o$  для Ca.

Збудження Ca електронним ударом з основного  $4s^2\ ^1S_0$  та метастабільних  $4s4p\ ^3P_1$  станів було досліджено у роботі [8] в області енергій від порогів до 30 еВ. У [8] приведені експериментальні ICS збудження зі станів  $4^1S$  та  $4^3P^o$  у стани  $4s5s\ ^3S$ ,  $4s4d\ ^3D$ ,  $4p^2\ ^3P$ ,  $3d4p\ ^3P$ ,  $3d4p\ ^3P$  та  $4s5f\ ^3F$  і відповідні теоретичні перерізи, розраховані у наближенні двох і шести станів сильного зв'язку (2CC та 6CC).

Диференціальні та інтегрований перерізи збудження електронами стану  $4^1P^0$  атома Ca представлено в роботі [9]. Диференціальні перерізи (DCS) виміряно при енергіях зіткнення електрона 10, 20, 40, 60 і 100 еВ у двох інтервалах кутів розсіяння: від  $1^\circ$  до  $10^\circ$  та від  $10^\circ$  до  $150^\circ$  (останні крім 100 еВ).

Значення параметрів атомних зіткнень (atomic collision parameters – ACP) для збудження атома Ca електронним ударом, виміряно в роботі [10] з використанням методу надпружного розсіяння при енергіях зіткнення електрона 20, 25 і 35 еВ. Із даних для надпружного розсіяння були визначені псевдостоксові параметри  $P_1^S$ ,  $P_2^S$ ,  $P_3^S$  та отримані параметри  $P_{lin}^+$ ,  $L_\perp^+$ ,  $\gamma^+$ ,  $P_{tot}^+$  для стану  $4^1P^0$ ; при малих енергіях спостерігалися значні розбіжності з теоретичними даними, отриманими у релятивістському наближенні спотворених хвиль.

У роботі [11] представлено вимірювання DCS для пружного розсіяння та збудження двох нижніх станів атома Ca електронами при кутах розсіяння  $90^\circ$  в області енергій до 6–7 еВ.

Серед теоретичних робіт відзначимо розрахунки структури атома Ca, здійснені в роботі [12] з використанням багато-конфігураційного методу Хартрі-Фока з релятивістськими ефектами, включеними через гамільтоніан Брейта-Паулі. Відмінності в енергіях окремих спектроскопічних станів у порівнянні з експериментом NIST [13] не перевищували  $\sim 0.15$  еВ. У статті [14] представлено R-матричне дослідження розсіяння електронів атомами Ca і фоторозщеплення іонів  $Ca^-$  у наближенні сильного зв'язку шести станів ( $^1S$ - $^3P$ - $^3D$ - $^1D$ - $^1P$ - $^1P$ ). У роботі [15] R-матричні розрахунки виконано з метою дослідження ефектів кор-валентної електронної кореляції в розсіянні електронів на атомах Ca при низьких енергіях. Їх проведено з уточненими хвильовими функціями у наближенні п'яти станів сильного зв'язку ( $^1S$ ,  $^3P^0$ ,  $^3D$ ,  $^1D$ ,  $^1P^0$ ). R-матричні ICS та сили зіткнень для пере-

ходів з основного стану  $4s^2\ ^1S$  у 5 нижніх збуджених станів  $4s4p\ ^3P^0$ ,  $3d4s\ ^3D$ ,  $3d4s\ ^1D$ ,  $4s4p\ ^1P^0$  та  $4s5s\ ^3S$  атома Ca під дією електронного удару в області енергій від порогів до 5.5–6.5 еВ представлено в роботі [16]. Автори роботи [17] у релятивістському наближенні спотворених хвиль розраховували, зокрема, DCS для збудження станів  $4^{1,3}P_1$  кальцію, при енергіях зіткнення електрона від 20 до 100 еВ. Нещодавно ці розрахунки було поширено [18] на збудження електронами станів  $^{1,3}D$  кальцію. В роботі [19] з використанням нерелятивістського і релятивістського наближення спотворених хвиль отримані диференціальні та інтегровані перерізи, а також параметри Стокса для збудження стану  $4^1P_1$  кальцію в області енергій від 10 до 100 еВ. R-матричні розрахунки збудження електронним ударом стану  $4^1P^0$  атома Ca з використанням 24 станів мішені (RM24) представлені в роботі [20]. Параметри Стокса, диференціальні та інтегровані перерізи було отримано тут для енергій зіткнення 10, 20 та 25 еВ.

Мета даного дослідження полягала в тому, щоб у рамках методу BSR [2] провести, в продовження роботи [1], незалежні розрахунки перерізів розсіяння та величин ACP для процесів  $e + Ca$ . Акцент було зроблено на точності хвильових функцій мішені при дотриманні принципів *ab initio* в розрахунку атомної структури. Іншою особливістю даного наближення є використання залежних від терму неортогональних орбіталей для опису як 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.

Нижче представлено короткий опис застосованих методів розрахунку, а також обговорення отриманих результатів щодо найбільш важливих переходів з основного і нижніх збуджених станів атома Ca під дією електронного удару.

## Методи розрахунку

### A. Розрахунки структури

Порядок розрахунку структури атома кальцію детально викладено у нашій попередній роботі [1], тому ми не будемо зупинятися тут на цьому питанні. Зазначимо тільки, що для основного стану і для низькорозміщених збуджених станів Ca важливими є валентна і кор-валентна кореляції. В даному наближенні ми включили кор-валентну кореляцію *ab initio* шляхом додавання конфігурацій мішені зі збудженим кором. Стани мішені, включені в дані розрахунки розсіяння, наведено в Таблиці 1, а їх енергії зв'язку порівняно з рекомендованими NIST значеннями [13].

Загальне узгодження між експериментом і теорією є достатньо хорошим, з відмінностями в похибках по енергії меншими за 0.1 eV, за винятком нижчих станів  $4s^2 \ ^1S$  та  $4s4p \ ^3P$ . Тут кореляційні поправки очікуються надзвичайно важливими. Точність даних енергій зв'язку є близькою до отриманої в рамках розширених MCHF-розрахунків [12], і дана структура опису являє суттєве покращення в порівнянні з тими, що використовувалися в попередніх *R*-матричних розрахунках [14, 16, 20].

Оцінка якості опису мішені за допомогою сил осциляторів різних переходів була здійснена нами в статті [1] і показала хороше узгодження з наявними експериментальними та теоретичними даними.

### B. Розрахунки розсіяння

Для розрахунків розсіяння ми використали недавно створену *R*-матричну програму з *B*-сплайнами [2]. Особливості наближення BSR, зокрема щодо застосування до електронного зіткнення з аналогічними двоелектронними мішенями, можуть бути встановлені, окрім роботи [1], із двох недавніх публікацій для  $e+Mg$  [21] та  $e+Zn$  [22].

Таблиця 1:

Енергії збудження  $E_{\text{exit}}$  та зв'язку  $E_{\text{bind}}$  (в eV) для спектроскопічних станів мішені Ca. Теоретичні значення  $E_{\text{BSR39}}$  порівняно з даними NIST [13].

Стан	$E_{\text{exit}}$	$E_{\text{bind}}$	$E_{\text{BSR39}}$	$\Delta E$
$4s^2 \ ^1S$	0.000	-6.113	-5.953	0.160
$4s4p \ ^3P^o$	1.892	-4.221	-4.116	0.105
$3d4s \ ^3D$	2.524	-3.589	-3.503	0.086
$3d4s \ ^1D$	2.709	-3.404	-3.328	0.076
$4s4p \ ^1P^o$	2.933	-3.181	-3.100	0.081
$4s5s \ ^3S$	3.910	-2.203	-2.154	0.049
$4s5s \ ^1S$	4.131	-1.982	-1.933	0.049
$3d4p \ ^3F^o$	4.442	-1.671	-1.684	-0.013
$3d4p \ ^1D^o$	4.443	-1.670	-1.681	-0.011
$4s5p \ ^3P^o$	4.534	-1.580	-1.565	0.015
$4s5p \ ^1P^o$	4.554	-1.559	-1.546	0.013
$4s4d \ ^1D$	4.624	-1.489	-1.476	0.013
$4s4d \ ^3D$	4.681	-1.432	-1.422	0.010
$3d4p \ ^3D^o$	4.740	-1.373	-1.401	-0.028
$4p^2 \ ^3P$	4.774	-1.339	-1.275	0.064
$3d4p \ ^3P^o$	4.877	-1.236	-1.256	-0.020
$3d4p \ ^1F^o$	5.026	-1.087	-1.131	-0.044
$4s6s \ ^3S$	5.028	-1.095	-1.077	0.018
$4s6s \ ^1S$	5.045	-1.068	-1.032	0.036
$4p^2 \ ^1D$	5.049	-1.065	-1.022	0.043
$4s6p \ ^1P^o$	5.168	-0.946	-0.957	-0.011
$4p^2 \ ^1S$	5.181	-0.932	-0.894	0.038
$4s4f \ ^3F^o$	5.229	-0.885	-0.882	0.003
$4s4f \ ^1F^o$	5.250	-0.863	-0.868	-0.005
$4s6p \ ^3P^o$	5.272	-0.841	-0.833	0.008
$4s5d \ ^3D$	5.300	-0.813	-0.812	0.001
$4s5d \ ^1D$	5.321	-0.792	-0.786	0.006
$3d^2 \ ^3F$	5.393	-0.721	-0.684	0.037
$3d4p \ ^1P^o$	5.447	-0.666	-0.679	-0.013
$4s7s \ ^3S$	5.453	-0.660	-0.652	0.008
$4s7s \ ^1S$	5.490	-0.624	-0.615	0.009
$4s5f \ ^3F^o$	5.550	-0.563	-0.562	0.001
$4s5f \ ^1F^o$	5.555	-0.558	-0.558	0.000
$4s6d \ ^1D$	5.578	-0.535	-0.540	-0.005
$4s7p \ ^3P^o$	5.579	-0.539	-0.534	0.005
$4s6d \ ^3D$	5.586	-0.528	-0.531	-0.003
$4s7p \ ^1P^o$	5.632	-0.481	-0.484	-0.003
$4s8s \ ^3S$	5.671	-0.442	-0.435	0.007
$4s8s \ ^1S$	5.689	-0.424	-0.414	0.010

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 вигляд

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

Тут  $\bar{\Phi}_i^\Gamma$  – каналні функції, які сформовані шляхом зв'язку кутових і спінових координат  $r_{N+1}$  та  $\sigma_{N+1}$  налітаючого електрона з  $N$ -електронними станами мішені  $\Phi_i(x_1, \dots, x_N)$  для отримання функцій з квантовими номерами комбінованої системи, що позначаються  $\Gamma$ . 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  $a = 80a_0$  (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* [23]. Для можливості прямого порівняння з експериментом у розрахунках розсіяння ми використовували експериментальні енергії збудження мішені.

## Результати і обговорення

### А. Розрахунки інтегральних перерізів

#### Резонансний перехід $4s^2 \ ^1S - 4s4p \ ^1P^o$

На рис. 1 представлено порівняння розрахованих нами перерізів збудження резонансного рівня  $4s4p \ ^1P^o$  з експериментом [3] та RM24-перерізами [20]. Представлені в [3] виміри оптичної функції збудження ( $\Phi_3$ ), є сумою прямого збудження рівня  $4s4p \ ^1P^o$  і вкладу каскаду з розміщених вище рівнів. Ми розрахували коефіцієнти розгалуження для усіх включених станів Ca і використовували потім, разом з ICS із BSR39-розрахунків, для оцінки вкладу каскаду і, отже, оцінки вимірюваної оптичної  $\Phi_3$ . З рис. 1. видно,

що наші дані BSR39 з врахуванням каскадів добре узгоджуються з експериментом [3] для всієї області енергій від порога до  $\sim 8$  еВ. При більших енергіях перерізи BSR39 із врахуванням каскадів на  $\sim 15\text{--}20\%$  перевищують експериментальні дані [3]. Дані BSR39 без врахування каскадів добре узгоджуються з інтегрованими перерізами збудження  $^1P^o$ -стану [9], отриманими в результаті інтегрування вимірних DCS, при енергії 10 і 20 еВ. Помітне (10–15%) перевищення наших теоретичних перерізів резонансного переходу над вимірними в експерименті [9] не виходить, як видно з рис. 1б, за межі експериментальних похибок, за винятком енергії 60 еВ. Теоретичні інтегровані перерізи збудження резонансного рівня [20] з точністю до 1-5% співпадають з даними BSR39. Порівняння BSR39-даних для резонансного переходу з даними роботи [16] наведено нижче.

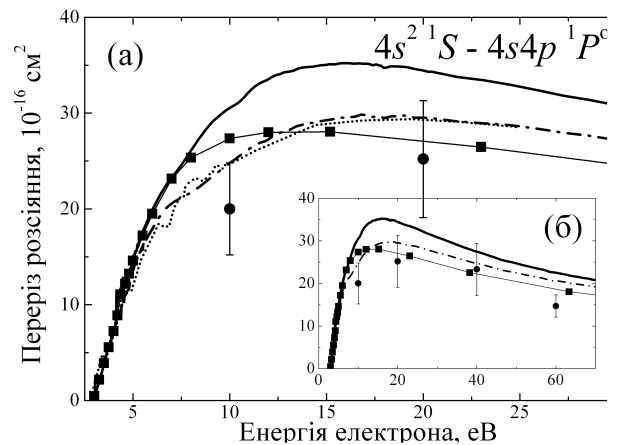


Рис. 1. Інтегральні перерізи збудження резонансного стану  $4s4p \ ^1P^o$  атома Ca електронним ударом: (—■—) експеримент [3]; (●) – експеримент [9]; (---) – BSR39, без вкладу каскадів; (—) – BSR39, із вкладом каскадів; (----) RM24 – розрахунок [20].

Розбіжність розглядуваних теоретичних даних з експериментальними результатами може викликатися як вкладом каскадів, так і розрахунком власне перерізу збудження  $4s4p \ ^1P^o$ . Основна причина розбіжностей між даними BSR39 (а також [20]) і експериментом [3] криється, на наш погляд, у способі розрахунку струк-

тури мішені. Варіюючи методи обчислення одноелектронних орбіталей і багатоконфігураційних розкладів, нам вдалося добитися кращого узгодження з даними [3] для розглядуваного переходу. Проте при цьому дещо погіршувалося узгодження з експериментом для пружного розсіювання та фоторозщеплення  $\text{Ca}^-$ . Тому, маючи за мету провести комплексні дослідження всього спектру переходів при розсіянні  $e+\text{Ca}$  на основі єдиних розрахунків структури мішені, ми зупинилися на варіанті розрахунку структури, описаному в [1].

### Збудження метастабільного стану $4s4p\ ^3P^o$

При експериментальному визначенні ефективних перерізів збудження  $4^3P^o$ -рівня оптичним методом достовірність отримуваних величин перерізів у значній мірі залежить (див., наприклад [5]), від точності визначення часу життя стану  $4^3P^o$ . Якщо час життя відносно невеликий, то практично всі збуджені атоми розпадутися в області огляду детектора. У протилежному випадку потрібно вносити певні корективи у величини отримуваних на експерименті перерізів. Окремого розгляду заслуговують також питання впливу збудження з метастабільного стану та вкладу каскадів з вищих рівнів на переріз переходу  $4^1S^e-4^3P^o$ .

На рис. 2 показано порівняння отриманих нами ICS з експериментальними даними [5, 7] та результатами  $R$ -матричних розрахунків [14]. З рис. 2 видно, що задовільного узгодження даних BSR39 з експериментом [5, 7] можна досягти тільки шляхом включення каскаду з рівня  $3^3D^e$ . Іншими словами, в експерименті [5, 7] фактично були поміряні не перерізи переходу  $4^1S^e-4^3P^o$ , а сумарні перерізи збудження станів  $4^3P^o$  та  $3^3D^e$ . Зауважимо, що хоча в самій роботі [5, 7] вклад каскадів оцінюється в  $\sim 3\%$ , вочевидь, він є суттєво більшим.

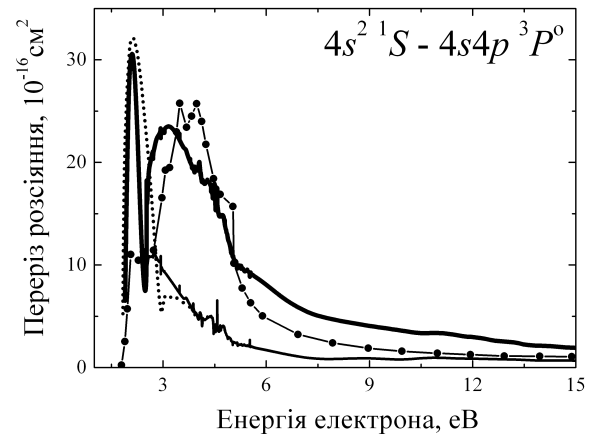


Рис. 2. Перерізи збудження метастабільного стану  $4s4p\ ^3P^o$  атома кальцію електронним ударом. (•••) – експеримент [5, 7], дані нормовані множителем 0.7; BSR39 – даний розрахунок: (—) переріз переходу  $4^1S^e-4^3P^o$ ; (—) сумарний переріз збудження стану  $4^3P^o$  та вкладу каскаду з рівня  $3^3D^e$ ; (- - -) RM6 – розрахунок [14].

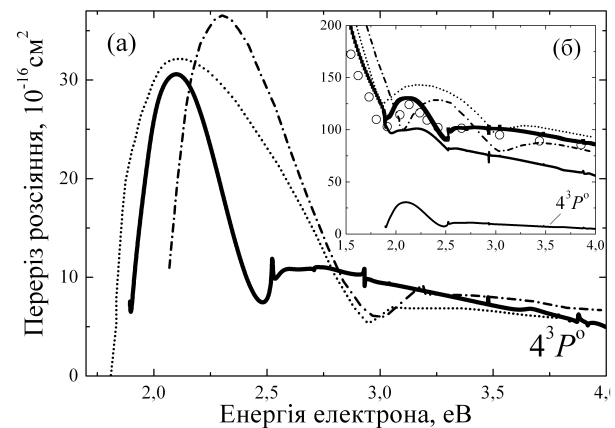


Рис. 3. (а) ICS збудження стану  $4s4p\ ^3P^o$  атома  $\text{Ca}$  електронним ударом: (—) BSR39 – даний розрахунок; (----) RM6 – розрахунок [14]; (----) RM5 – розрахунок [15]. (б) Пружний та повний перерізи розсіювання електронів на атомі кальцію: (—) повний та (—) пружний перерізи BSR39; (- - -) повний переріз RM6 [14]; (- · - · -) повний переріз RM5 – [15]; (○) – експеримент [24]; нижня суцільна лінія – BSR39-переріз збудження стану  $4^3P^o$ .

Для оцінки точності розрахунку перерізів власне переходу  $4^1S^e-4^3P^o$ , на рис. 3 наші дані BSR39 порівнюються з даними робіт [14, 15] та експериментом [24], який достатньо ґрунтовно був обговорений на-

ми в роботі [1]. На рис. 3б наведено фрагменти повного і пружного перерізів розсіяння електрона на Са, отримані в експерименті [24], та розраховані методами BSR39, RM6 [14] та RM5 [15]. Очевидно, в області енергій від 1.892 до 2.524 еВ різниця між повним і пружним перерізами відповідає перерізу збудження нижнього метастабільного рівня  $4^3P^0$ . Як видно з рис. 3б, перерізи BSR39 краще, ніж дані [14, 15] відтворюють особливості перенормованої (див. [1]) експериментальної кривої як по шкалі енергій, так і щодо величини перерізів. На жаль, при відсутності прямого вимірювання перерізу збудження рівня  $4^3P^0$ , наразі можлива тільки подібна непряма його оцінка.

### Розрахунки інтегральних перерізів для різних серій переходів

Перерізи переходів з основного стану  $4s^2 \ ^1S$  атома Са в 5 нижніх збуджених станів  $4s4p \ ^3P^0$ ,  $3d4s \ ^3D$ ,  $3d4s \ ^1D$ ,  $4s4p \ ^1P^0$  та  $4s5s \ ^3S$  представлені на рис. 4а-д, де проведено порівняння наших BSR39-даних (без врахування і з врахуванням каскадів з вищих рівнів) з перерізами [16], розрахованими у наближенні RM22 в області енергій до 6-7 еВ. На рис. 4е показані наші ICS переходів із стану  $4s4p \ ^3P^0$  атома Са на останні чотири з перелічених рівнів.

З рис. 4 видно, що енергетичні залежності теоретичних перерізів, розрахованих у наближенні BSR39 та RM22 [16], досить добре узгоджуються між собою. Проте наявні і відмінності: BSR39 – перерізи розраховані з більшою густиною точок по енергії та у ширшому діапазоні енергій, у загальному вони менші за абсолютними значеннями. Багато структур, помітних в енергетичних залежностях перерізів [16], у наших розрахунках не підтверджено.

На рис. 5 перерізи BSR39 для переходів зі збуджених станів  $3^1D$  та  $4^1P^0$  атома Са у кілька вище розміщених станів під дію електронного удару порівняно з експериментальними функціями збуджен-

ня [6]. Аналогічні дані отримано нами й для всіх інших переходів, вимірюваних у [6], проте за браком місця ми їх тут не наводимо.

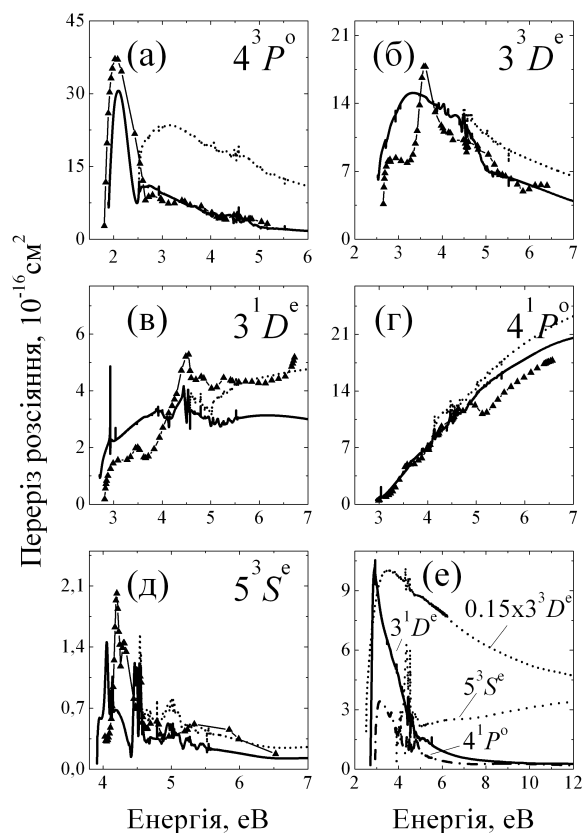


Рис. 4. (а)–(д) Інтегральні перерізи переходу з основного стану  $4s^2 \ ^1S$  атома кальцію в 5 нижніх збуджених станів:  $4s4p \ ^3P^0$ ,  $3d4s \ ^3D$ ,  $3d4s \ ^1D$ ,  $4s4p \ ^1P^0$  та  $4s5s \ ^3S$  під дію електронного удару. (—) BSR39 (без каскадів); (---) BSR39 (з каскадами); (—▼—) – розрахунок [16]. (е) Перерізи BSR39 для переходів з рівня  $4^3P^0$  у чотири найближчі збуджені стани.

Нами досліджено також серії переходів з рівнів  $4^1S$  та  $4^3P^0$  у кінцеві стани з  $n^{1,3}L$  ( $n=3,4,5,6,7,8$   $L=S, P, D, F$ ). На рис. 6 для прикладу наведено ICS збудження атома Са електронами для серії  $n^{1,3}D$  ( $n=3, 4, 5, 6$ ). Окремо розглядалися збудження триплетних і синглетних термів  $S, P, D, F$  для подібних конфігурацій з різними значеннями головних квантових чисел  $n$  ( $n=3, 4, 5, 6, 7, 8$ ), або різних термів однієї конфігурації, наприклад,  $3d4p \ ^{1,3}P, D, F^0$ .

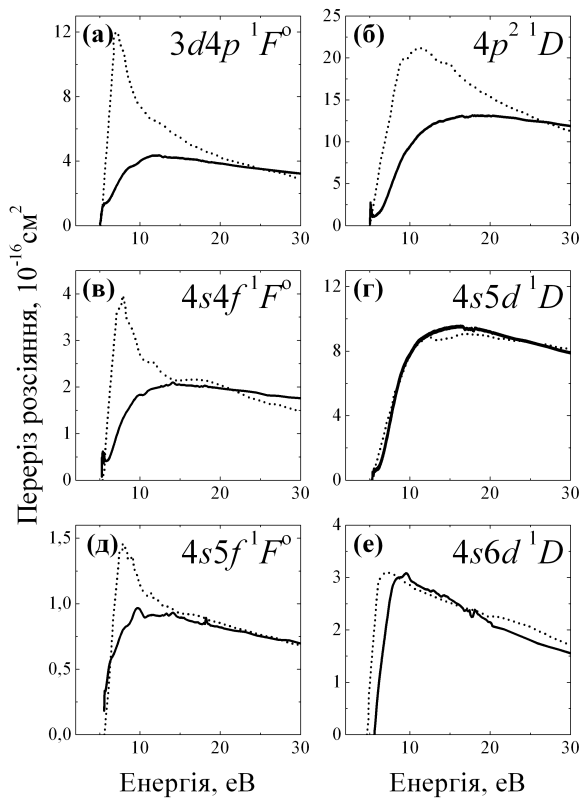


Рис. 5. (а,в,д) – інтегральні перерізи переходів зі збудженого стану  $3^1D$  атома Са в стани  $3d4p\ ^1F^o$ ,  $4s4f\ ^1F^o$  та  $4s5f\ ^1F^o$  під дією електронного удару; (б,г,е) – ІСХ переходів зі збудженого стану  $4^1P^o$  атома Са в стани  $4p^2\ ^1D$ ,  $4s5d\ ^1D^o$  та  $4s6d\ ^1D^o$ . (—) BSR39; (---) – експеримент [6].

*Розрахунки диференціальних перерізів та АСП*

**Збудження резонансного переходу  $4s^2\ ^1S - 4s4p\ ^1P^o$**

На рис. 7 представлено порівняння розрахованих нами DCS з експериментом [9], й теоретичними розрахунками методом  $R$ -матриці (RM24 [20] та релятивістських спотворених хвиль (RDW) [19] для енергій електрона 10 та 20 еВ. Аналогічні графіки для енергій 40, 60 та 100 еВ за браком місця тут не приводяться. Як видно з рис. 7, нам вдалося трохи покращити узгодження теоретичних перерізів з експериментом [9] у порівнянні з даними [19] та [20], хоча у деяких діапазонах енергій розходження теорії й експерименту все ще залишаються досить

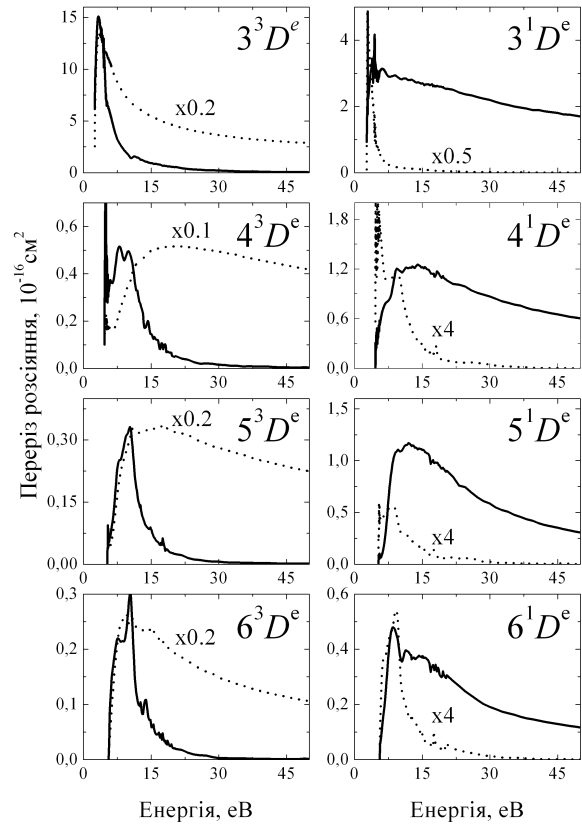


Рис. 6. ІСХ збудження атома Са електронами з рівнів  $4^1S$  (—) та  $4^3P^o$  (---) у кінцеві стани  $n^{1,3}D$  для серії  $n=3, 4, 5, 6$ .

значними. Зазначимо, що при BSR39-розрахунках DCS, особливо при великих енергіях, доводилося враховувати до  $L=50$  парціальних хвиль.

**Диференціальні перерізи для пружного розсіяння  $4s^2\ ^1S - 4s^2\ ^1S$**

На рис. 8 ми порівнюємо розраховані нами BSR39-перерізи з експериментальними DCS пружного розсіяння на  $90^o$  [11] 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. Якісні відмінності при менших енергіях зв'язані, як вказувалося в [11], з великою шириною апаратної функції, в результаті чого припороговий мінімум, розрахований при  $\sim 0.01$  еВ, зміщується на експерименті вправо на  $\sim 0.4$  еВ.

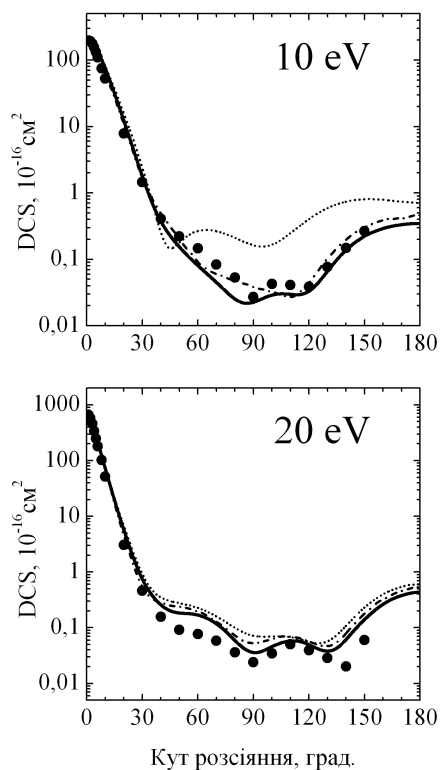


Рис. 7. Диференціальні перерізи збудження стану  $4s4p\ ^1P^o$  атома Ca електронним ударом при енергіях 10 і 20 еВ. (●) – експеримент [9]; (—) BSR39; (-----) RM24 – розрахунок [20]; (- - - -) RDW – розрахунок [19].

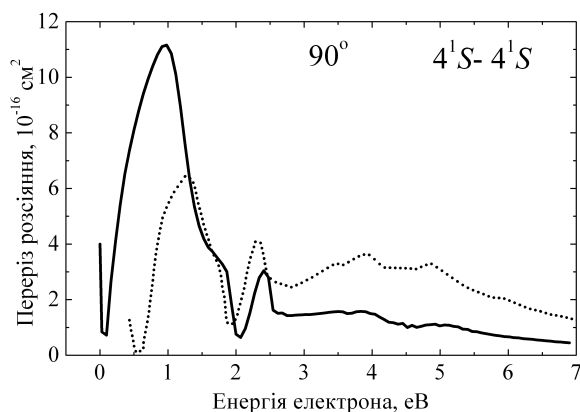


Рис. 8. Диференціальні перерізи пружного розсіяння електронів на атомі Ca на кут  $90^\circ$ . (—) BSR39; (-----) експеримент [11].

Для більш повного уявлення про характер поведінки DCS пружного розсіяння електронів на Ca у припороговій області до 4 еВ, на рис. 9 наведено тривимірну поверхню кутової й енергетичної залежностей DCS для цього випадку. В

області енергій 1.2–3 еВ дуже добре видно характерні складки на поверхні DCS, які спостерігалися й на експерименті [11]. На поверхні DCS видно також воронкоподібні структури, пов'язані з включенням додаткових каналів розсіяння.

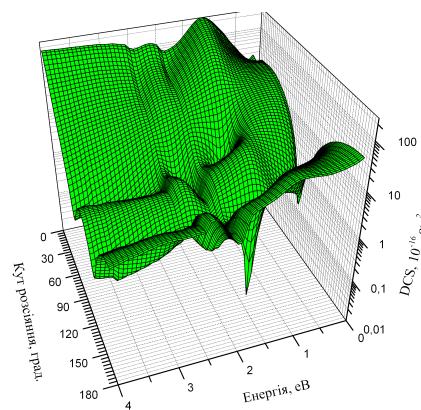


Рис. 9. Диференціальні перерізи пружного розсіяння електронів на атомі Ca.

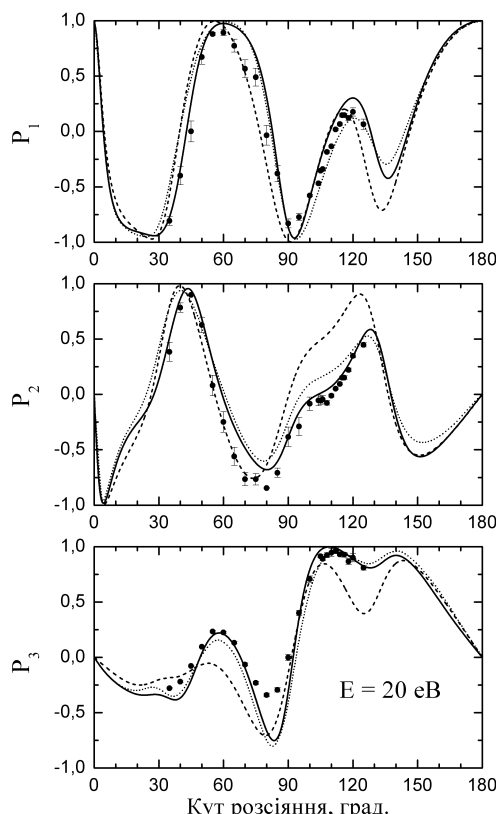


Рис. 10. Псевдостоксові параметри  $P_1$ ,  $P_2$ ,  $P_3$  для збудження резонансного стану  $4s4p\ ^1P^o$  атома Ca електронами при енергії 20 еВ: (—) – дані BSR39; (●) – експеримент [10]; (- - -) – теоретичні розрахунки [20] і (- - -) – [16].



*Розрахунки параметрів атомних зіткнень (АСР) для збудження стану  $4s4p\ ^1P^o$*

Для порівняння з експериментом [10] нами були розраховані величини АСР резонансного переходу  $4s^2\ ^1S - 4s4p\ ^1P^o$  при енергіях 10, 20, 25 і 35 еВ. На рис. 10 наведено порівняння експериментальних і теоретичних псевдостоксових параметрів для енергії 20 еВ. Крім розрахунків BSR39, на рис. 10 наведено теоретичні результати [20] та [19]. З рис. 10 видно, що наші псевдостоксові параметри  $P_1$ ,  $P_2$ ,  $P_3$  при енергії 20 еВ у ряді випадків дуже близькі до результатів [20], проте загалом проявляють краще узгодження з експериментом [10]. Результати розрахунків для інших енергій за браком місця не приводяться.

### Висновки

Ми представили теоретичні інтегральні та диференціальні перерізи, а також параметри Стокса для низькоенергетичного зіткнення електронів з атомом Са. Розрахунки було виконано з новою розширеною версією  $R$ -матричного (сильний зв'язок) методу [2], в якому для представлення функцій континууму використовується  $V$ -сплайновий базис. Використання неортогональних наборів орбіталей для побудови як хвильових функцій мішені, так і представлення функцій розсіяння дозволяє нам незалежно оп-

тимізувати різноманітні атомні хвильові функції і, отже, генерувати більш точний опис станів мішені, ніж ті, що використовувалися в попередніх розрахунках розсіяння. Зокрема, дані хвильові функції мішені містять валентну і кор-валентну кореляції разом з релаксаційними ефектами, зумовленими сильним проникненням  $3d$ -електрона в кор.

Дані розрахунки виконано, в розвиток і доповнення роботи [1], у рамках єдиного комплексного дослідження властивостей атома Са в підході BSR [2]. Ми ставили за мету дати інтерпретацію наявних експериментальних даних з низькоенергетичного розсіяння електронів на атомі Са, виходячи з єдиної теоретичної концепції.

Порівняння наших BSR39-перерізів, як інтегральних, так і диференціальних, а також параметрів Стокса для збудження резонансного рівня  $4^1P^o$  з експериментальними вимірюваннями [3, 9, 10] та теоретичними розрахунками [17-20] вказує, в загальному, на краще узгодження з експериментом у нашому випадку, ніж в інших теоретичних підходах.

Експериментальні вимірювання: а) інтегральних перерізів [5, 7] зі збудження метастабільного рівня  $4^3P^o$ , б) серій ICS зі збудження з рівнів  $3^1D^o$  та  $4^1P^o$  у кілька вище розміщених станів [6], а також с) DCS при розсіянні на  $90^\circ$  [11] взагалі вперше отримали задовільну теоретичну інтерпретацію на основі наших розрахунків.

### Література

1. O. Zatsarinny, K. Bartschat, S. Gedeon, V. Gedeon, and V. Lazur, Phys. Rev. A 74, 052708, (2006).
2. O. Zatsarinny, Comput. Phys. Commun. 174, 273 (2006).
3. V.J. Ehlers and A. Gallagher, Phys. Rev. A 7, 1573 (1973); *ibid* (Erratum), Phys. Rev. A 9, 1026 (1974).
4. И.С. Алексахин, И.П. Запесочный, И.И. Гарга, В.П. Стародуб, Опт. и спектр. 20, 1178 (1971).
5. В.П. Стародуб, Дисс... докт. физ.-мат. наук (Ужгород, 1999).
6. И.И. Гарга, И.С. Алексахин, И.П. Запесочный, В.П. Стародуб, Опт. и спектр. 37, 843 (1974).
7. В.П. Стародуб, Опт. и спектр. 85, 24 (1998).
8. I.I. Shafranyosh, T.A. Snegurskaya, N.A. Margitich, S.P. Bogacheva, V.I. Lengyel and O.I. Zatsarinny, J. Phys. B 30, 2261 (1997).

9. S. Milisavljević, D. Šević, V. Pejčev, D. M. Filipović and B.P. Marinković, *J. Phys. B* 37, 3571 (2004).
10. A.J.Murray, D.Cvejanovic, *J. Phys. B* 36, 4889 (2003).
11. С.М. Казаков, О.В.Христофоров, *ЖТФ* 55, 795 (1985).
12. Ch.F.Fischer, G.Tachiev, *Phys. Rev. A* 68, 012507 (2003).
13. NIST 2005. Atomic Spectra Database, [http://physics.nist.gov/cgi-bin/AtData/main\\_asd](http://physics.nist.gov/cgi-bin/AtData/main_asd).
14. J. Yuan, L. Fritsche, *Phys. Rev. A* 55, 1020 (1997).
15. J. Yuan, C.D. Lin, *Phys. Rev. A* 58, 2824 (1998).
16. A.M. Samson, K.A. Berrington, *At.Data and Nuclear data Tables* 77, 87 (2001).
17. R.Srivastava, T.Zuo, R.P.McEachran, A.D. Stauffer, *J. Phys. B* 25, 3709 (1992).
18. K. Muktavat, R. Srivastava, A.D. Stauffer, *J. Phys. B* 35, 4797 (2002).
19. R. K. Chauhan, R. Srivastava, A.D. Stauffer, *J. Phys. B* 38, 2385 (2005).
20. S. Kawazoe, T. Kai, R.K. Chauhan, R. Srivastava, S. Nakazaki, *J. Phys. B* 39, 493 (2006).
21. K. Bartschat, O. Zatsarinny, I. Bray, D.V. Fursa, A.T. Stelbovics, *J. Phys. B* 37, 2617 (2004).
22. O. Zatsarinny, K. Bartschat, *Phys. Rev. A* 71, 022716 (2005).
23. V.M. Burke, C.J. Noble, *Comp. Phys. Commun.* 85, 471 (1995).
24. N.I. Romanyuk, O.B. Shpenik, I.P. Zapesochnyi, *Pis'ma Zh. Eksp. Teor. Fiz.* 32, 472 (1980) [*JETP Lett.* 32, 452 (1980)].

## ELECTRON-IMPACT SCATTERING ON CALCIUM

**O.Zatsarinny<sup>1</sup>, K.Bartschat<sup>1</sup>, L.Bandurina<sup>2</sup>, S.Gedeon<sup>3</sup>, V.Lazur<sup>3s</sup>**

<sup>1</sup> Drake University, Des Moines, Iowa, 50311, USA

<sup>2</sup> Institute of Electron Physics, Ukr. Nat. Acad. Sci.,  
21 Universitetska str., Uzhhorod, 88017

<sup>3</sup> Uzhhorod National University, 54 Voloshyna str., Uzhhorod, 88000

The B-spline R-matrix method is used to investigate electron scattering from neutral calcium in the low-energy range from threshold to 70 eV. The multiconfiguration Hartree-Fock method with non-orthogonal orbital sets is employed for an accurate representation of the target wavefunctions. The close-coupling expansion includes 39 bound states of neutral calcium, covering all states from the ground state to 4s8s 1S. The present calculations of integral and differential cross sections yield good agreement with the few available experimental data for both elastic electron scattering and excitation processes.