

РЕЗОНАНСНА СТРУКТУРА ІНТЕГРАЛЬНИХ ПЕРЕРІЗІВ РОЗСІЯННЯ ЕЛЕКТРОНІВ НА АТОМІ КАЛЬЦІЮ В ОБЛАСТІ ЕНЕРГІЙ ДО 4.3 еВ

С.В. Гедеон

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

Представлені положення і ширини резонансів, виявлених у перерізах розсіяння електронів на атомі кальцію в області енергій від порога реакції до 4.3 еВ та проведена їх ймовірна класифікація. Парціально-хвильовий аналіз інтегральних перерізів здійснено шляхом розрахунку парціальних фаз розсіяння, виявлення структури їх енергетичних залежностей і використання лоренц-підгонки похідних від цих фаз. Дослідження процесів зіткнення $e+Ca$ здійснено за допомогою методу R -матриці з B -сплайнами. Для точного представлення хвильових функцій мішені використовувався багатоконфігураційний метод Хартрі-Фока з неортогональними орбіталями. У розкладі сильного зв'язку було враховано 39 зв'язаних станів атома кальцію. Розраховані параметри резонансів задовільно узгоджуються з даними інших теоретичних розрахунків та експериментом.

Вступ

При здійсненні комплексних розрахунків розсіяння електронів на атомі кальцію за допомогою методу R -матриці з B -сплайнами [1] у наближенні сильного зв'язку з урахуванням 39 спектроскопічних станів мішені (BSR39), нами, разом з співавторами, були досліджені різноманітні аспекти процесів, що супроводжують зіткнення $e+Ca$ [2-5]. Поряд з представленням детальних результатів з диференціальних (ДП) та інтегральних (ІП) перерізів розсіяння електронів на атомі Ca для різних переходів у широкому діапазоні енергій, параметрів Стокса для резонансного переходу, перерізів фоторозщеплення від'ємного іона Ca^- , у кожній з цих робіт, у тій чи іншій мірі, розглядалися й питання резонансної структури перерізів розсіяння. Проте вимушена фрагментарність подібного розгляду у вищезазначених роботах не дала можливості по справжньому ґрунтовно розкрити цю проблему.

Зазначимо, що визначення резонансної структури перерізів розсіяння залишається одним з найбільш актуальних і, у той же

час, одним з найбільш суперечливих питань задачі розсіяння. У роботі [2] було вказано на деякі із найважливіших проблем, що супроводжують встановлення характеристик резонансної структури перерізів розсіяння і дано посилання на відповідні джерела. У даній роботі ми розглянемо більш вузьку задачу, а саме встановлення характеристик резонансів у ІП розсіяння $e+Ca$ у припороговій області енергій до 4.3 еВ. Дана стаття є продовженням комплексних досліджень атома кальцію методом BSR, розпочатих у роботах [2-5], і відповідає їх загальному контексту. Хоча за самою природою досліджуваних об'єктів вона побудована на більш проблемному матеріалі, про що вже йшлося у роботі [2].

Методи розрахунку

Ми не будемо детально зупинятися тут на розрахунку структури атома мішені Ca у наближенні BSR39, оскільки це питання докладно викладено в [2]. Включення у розрахунки *ab initio* валентної і корвалентної кореляцій шляхом добавлення конфігурацій мішені зі збудженим кором,

дозволило отримати точні представлення хвильових функцій мішені. У розрахунках 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 $4s8s\ ^1S$. Загальне узгодження між експериментом і теорією [2] для енергетичного спектру атома мішені та сил осциляторів різних переходів є достатньо хорошим, і в загальному значно кращим, ніж у попередніх розрахунках розсіяння e^+Ca .

Для розрахунків розсіяння використовувалася R -матрична програма з B -сплайнами [1]. Особливості наближення BSR, а також спосіб його застосування для розрахунку розсіяння електронів на атомі кальцію описані, зокрема, в роботах [2–5]. 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). Перерізи обчислювалися за стандартною R -матричною схемою, з використанням для зовнішньої області пакету *FARM* [6]. Для можливості прямого порівняння з експериментом, у розрахунках розсіяння ми використовували експериментальні (див. [2]) енергії збудження мішені. Це є важливим при встановленні параметрів резонансів у перерізах розсіяння.

Для класифікації резонансної структури ми провели парціально-хвильовий аналіз III найбільш характерних переходів, включаючи розрахунок власних значень фазових сум для кожної парціальної хвилі. В областях енергій, де власні значення фазових сум δ збільшувалися на величину, близьку до $\pi = 3.14$, III були перераховані з дуже маленьким кроком по енергії, аж до $1 \cdot 10^{-6}$ еВ, щоб визначити власні значення фазових сум і їх похідні по енергії і з високою точністю. В області резонансу ця похідна приймає форму лоренціана, а її максимум визначає положення резонансу, у той час як ширина резонансу рівна значенню $2/(d\delta/dE)$, узятому при енергії резонансу E_0 . Відзначимо, що R -матричний метод не дає однозначного способу для класифікації резонансів. Щоб одержати деякі не-

прямі ключі щодо класифікації, можна проаналізувати розклад R -матричних полюсів по каналах в околі кожної структури, але, знову ж таки, це не дає гарантії точного встановлення природи резонансної особливості.

Спосіб класифікації, застосований нами у даній роботі, зводився до наступного. По-перше, описаним нижче методом лоренц-підгонки – засобами OriginPro 7.0 – встановлювалися параметри (енергія, ширина, стрибок фази) резонансних особливостей у кожній парціальній хвилі ($^{4,2}S$, $^{4,2}P$, $^{4,2}D$, $^{4,2}F$, $^{4,2}G$, $^{4,2}P^o$, $^{4,2}D^o$, $^{4,2}F^o$, $^{4,2}G^o$), – окремо для парних і непарних станів. По-друге, визначався перелік ймовірних конфігурацій і конфігураційних станів від'ємного іона Ca^- , що могли б збігатися до порогу збудження одного з близько розміщених станів атома Ca . У таблицях 1 та 2 відображені такі відібрані нами для класифікації стани іона Ca^- , відповідно для парних і непарних термів. Нарешті, шляхом порівняння можливих конфігураційних станів від'ємного іона Ca^- і отриманих у розрахунку резонансних особливостей у відповідних парціальних хвилях, встановлювалася ймовірна відповідність конкретної резонансної особливості деякому стану від'ємного іона Ca^- .

Зі сказаного вище зрозуміло, що подібний спосіб класифікації далекий від однозначності – він обраний нами з необхідності, за браком реальних альтернатив. Це – початковий крок для встановлення параметрів квазістаціонарних станів системи „атом Ca + електрон” і, відповідно, ідентифікації станів від'ємного іона Ca^- . Неоднозначність обумовлюється наступними чинниками: а) труднощами обрахунку III поблизу порогів збудження станів атома-мішені; б) розмитістю критеріїв відбору резонансів з-поміж інших особливостей в III, наприклад, "каспів"; в) багатоваріантністю можливостей лоренц-підгонки; г) значною кількістю альтернатив при співставленні певної резонансної особливості з деяким переліком станів від'ємного іона.

Однак, на користь такого способу класифікації можна привести і досить вагомі аргументи. Насамперед, це сама „фізика” задачі, яка передбачає утворення спектру

короткоживучих квазістаціонарних станів іона Ca^- при зіткненні електронів низьких енергій з атомом Ca . По друге, це серійний характер установлених у розрахунку резонансних особливостей і їх узгодження з такими ж серіями можливих квазістаціонарних станів іона Ca^- .

Таблиця 1

Перелік ймовірних конфігураційних термів непарних станів іона Ca^- в області енергій до ~ 4.3 еВ

Конфіг.	Можливі терми	К- сть	
		a	b
$4s4p[{}^3P]3d$	${}^{4,2}P, {}^{4,2}D, {}^{4,2}F^o$	6	6
$4s3d[{}^3D]4p$	${}^{4,2}P, {}^{4,2}D, {}^{4,2}F^o$	6	4
$4s3d[{}^1D]4p$	${}^2P, {}^2D, {}^2F^o$	3	2
$4s4p[{}^1P]3d$	${}^2P, {}^2D, {}^2F^o$	3	3
$4s4p[{}^1P]4d$	${}^2P, {}^2D, {}^2F^o$	3	1
$4s5s[{}^3S]5p$	${}^{4,2}P^o$	2	2
$4s5s[{}^3S]6p$	${}^{4,2}P^o$	2	2
$4s5s[{}^3S]4f$	${}^{4,2}F^o$	2	2
$4s5s[{}^1S]5p$	${}^2P^o$	1	1
$4s5s[{}^1S]4f$	${}^2F^o$	1	1
Всього		29	24

- a) – кількість можливих термів даної конфігурації
 b) – кількість ідентифікованих термів даної конфігурації

Таблиця 2

Перелік ймовірних конфігураційних термів парних станів іона Ca^- в області енергій до ~ 4.3 еВ

Конфіг.	Можливі терми	К- сть	
		a	b
$4s^23d$	2D	1	1
$4s4p^2[{}^3P]$	${}^{4,2}P, {}^2D, {}^2S$	4	4
$4s4p[{}^3P]4f$	${}^{4,2}D, {}^{4,2}F, {}^{4,2}G$	6	5
$4s3d[{}^3D]5s$	${}^{4,2}D$	2	2
$4s3d^2$	${}^2S, {}^{4,2}P, {}^2D, {}^{4,2}F, {}^2G$	7	4
$4s4p[{}^1P]4f$	${}^2D, {}^2F, {}^2G$	3	3
$4s3d[{}^3D]4d$	${}^{4,2}S, {}^{4,2}P, {}^{4,2}D, {}^{4,2}F, {}^{4,2}G$	10	4
$4s3d[{}^1D]4d$	${}^2S, {}^2P, {}^2D, {}^2F, {}^2G$	5	4
$4s5s^2[{}^1S]$	2S	1	1
$4s5s[{}^3S]4d$	${}^{4,2}D$	2	2
$4s5s[{}^1S]6s$	2S	1	1
$4s5s[{}^1S]4d$	2D	1	1
Всього		43	32

Іншими словами, непрямим підтвердженням існування окремого резонансу в певній парціальній хвилі є його належність

до серії, тобто наявність відповідних незалежних резонансних особливостей в інших парціальних хвилях у вузькому діапазоні енергій в околі порогу збудження деякого стану атома Ca . Забігаючи вперед, відзначимо, що у діапазоні енергій від порога реакції і до 4.3 еВ (як видно з таблиць 1 та 2) із 29 ймовірно можливих – для вибраних конфігурацій – непарних станів іона Ca^- знайшли підтвердження у наших розрахунках 24 стани (83%), а із 43 ймовірно можливих парних станів – 32 стани (74%).

Результати і обговорення

Як відзначалося в [2–5], наші розрахунки виявили виражену резонансну структуру для більшості індукованих електронних переходів в атомі кальцію при низьких енергіях. Приклади резонансних особливостей спостерігаються, для переходів як з основного, так і, особливо, з метастабільного станів. На рисунках 1, 2 відображено розклад по парціальних хвилях ${}^2S^e, {}^2P^o, {}^2D^e$ та ${}^2F^o$ інтегральних перерізів пружного розсіяння електронів на кальції в основному стані 4^1S^e і збудження з цього ж стану нижніх рівнів $4^3P^o, 3^3D^e, 3^1D^e, 4^1P^o$ та 5^3S^e атома Ca . В енергетичних залежностях всіх Π помітні явно виражені структури, які можуть трактуватися як резонанси. Енергетична залежність Π пружного розсіяння електронів на атомі Ca у метастабільному стані 4^3P^o приведена на рис. 3. Тут же показаний розклад цього Π по парціальних хвилях, кількість яких для переходів з метастабільного стану значно зростає.

При всій наглядності парціальних розкладів Π окремих переходів, рис. 1-3, більш інформативним для виявлення природи тієї чи іншої резонансної особливості є згаданий вище парціально-фазовий аналіз, окремі елементи якого представлені на рис. 4. З аналізу поведінки парціальних ${}^2D^e$ -перерізів кількох переходів (верхнє графічне вікно) виділяються області енергій з резонансно-подібними особливостями. Енергетичні залежності відповідних фазових сум (в одиницях π радіан), а також їх похідних представлені в середньому і нижньому графічних вікнах рис. 4. Спів-

відносячи особливості у парціальних перерізах з відповідним стрибком фази, робляться попередні висновки щодо наявності чи відсутності резонансу в розглядуваній парціальній хвилі при даній енергії.

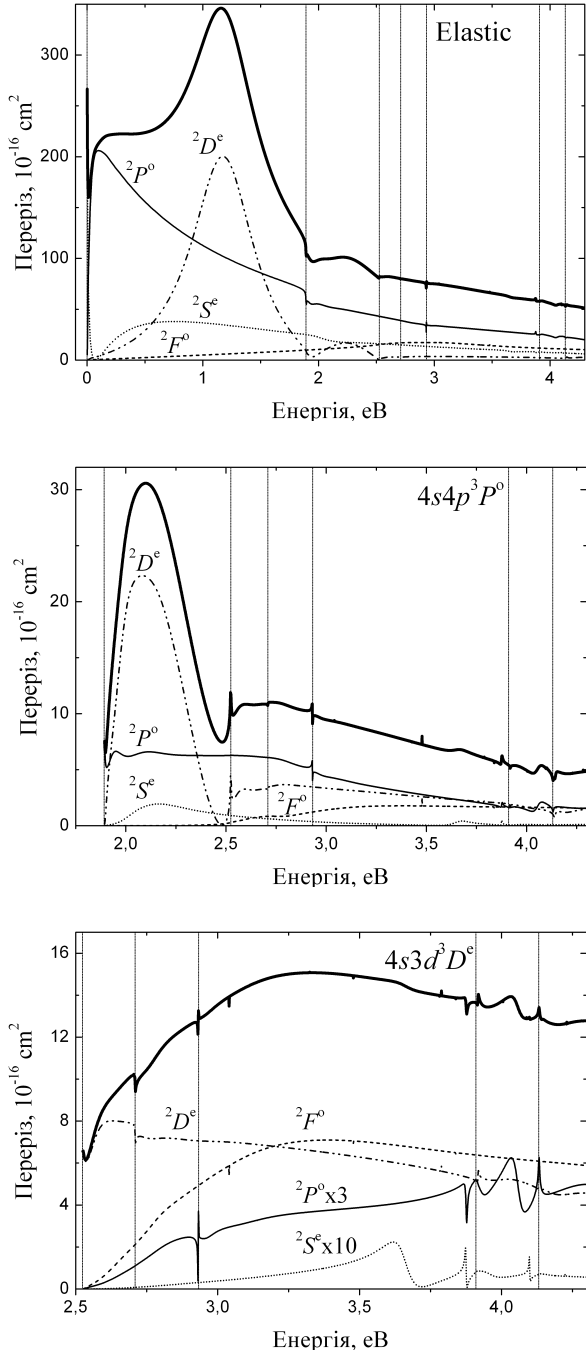


Рис. 1. Інтегральні перерізи пружного розсіяння $e+Ca$ і збудження станів 4^3P^o та 3^3D^e атома Ca (—). Для кожного ПП показано розклад по парціальних хвилях $^2S^e$ (----), $^2P^o$ (—), $^2D^e$ (-·-·-·) та $^2F^o$ (- - -). Вертикальні тонкі лінії вказують на пороги збудження станів атома Ca .

Для встановлення параметрів виявлених резонансів використовувалася проце-

дура лоренц-підгонки (одно-, або багатопікової). Остання використовувалася у випадку накладання резонансів – з тим, щоб сумарна крива лоренціанів підгонки якнайточніше відтворювала криву енергетичної залежності похідної від фази. Для прикладу, на рис. 5 відтворено порядок встановлення характеристик резонансних особливостей у $^2D^e$ -парціальній хвилі при енергіях 1.901 та 2.004 eВ.

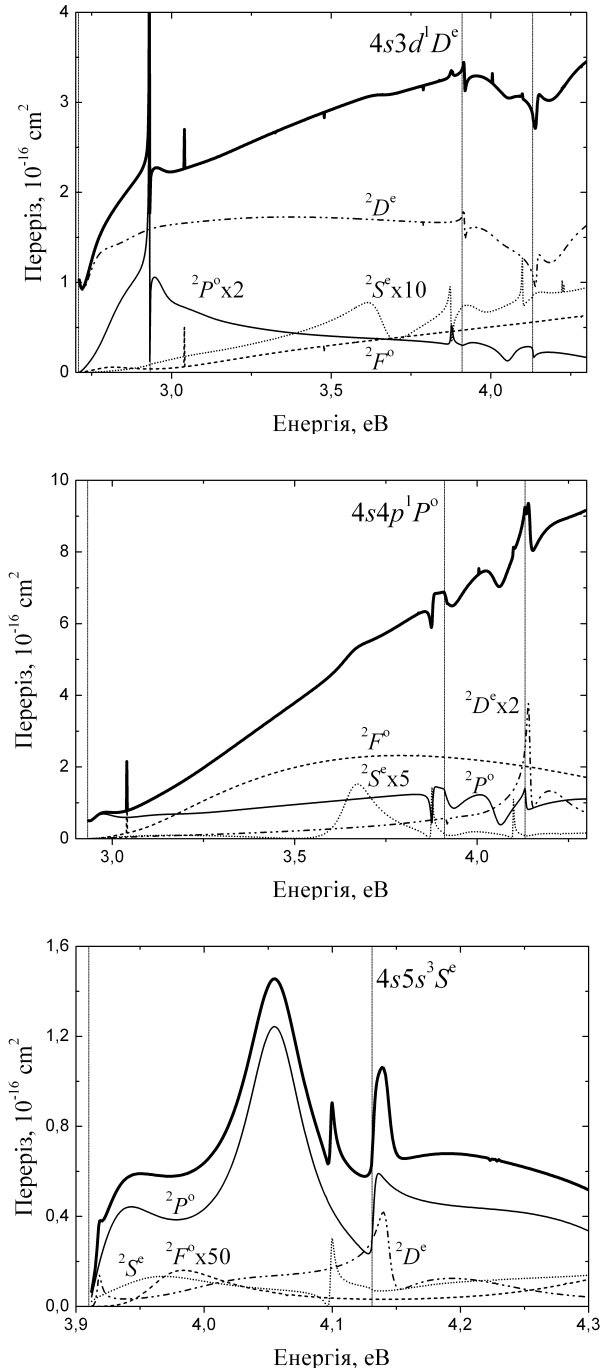


Рис. 2. Інтегральні перерізи збудження станів 3^1D^e , 4^1P^o та 5^3S^e атома Ca . Позначення як на рис.1.

Для повноти картини, на рис. 6 представлені енергетичні залежності похідних від фазових сум для всіх розглянутих парціальних хвиль при енергіях до 4.3 еВ.

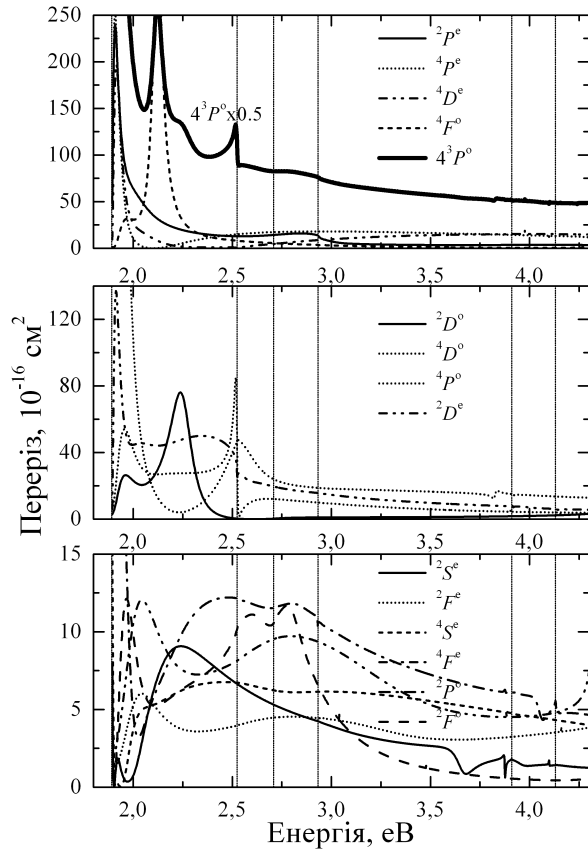


Рис. 3. Інтегральний переріз пружного розсіяння електронів на атомі кальцію у метастабільному стані 4^3P^o (—). Позначення окремих парціальних хвиль показані в графічних вікнах. Вертикальні тонкі лінії вказують на пороги збудження станів атома Са.

У таблиці 3 приведені результати ідентифікації найбільш чітко виражених резонансних особливостей ІІІ, отриманих у даних BSR39-розрахунках в області енергій до 4.3 еВ (без їх порівняння з результатами інших існуючих передбачень). В таблицях 4 та 5 наведені більш розгорнуті дані щодо резонансів в області енергій до 4.3 еВ для непарних і парних термів, відповідно. В цих таблицях, крім однозначно встановлених резонансів, наведені також особливості, "підозрілі" на резонанс, для яких, проте, відсутній повний стрибок фази на π .

Якщо розглядати резонансні прояви в ІІІ розсіяння як результат утворення і розпаду квазістаціонарних станів від'ємного іона кальцію, то, очевидно, утворення та-

ких проміжних станів відбувається з різною імовірністю, а утворені збуджені стани іона Ca^- мають різний час життя. Відповідно, резонансні особливості в ІІІ розсіяння, які є наслідком розпаду подібних

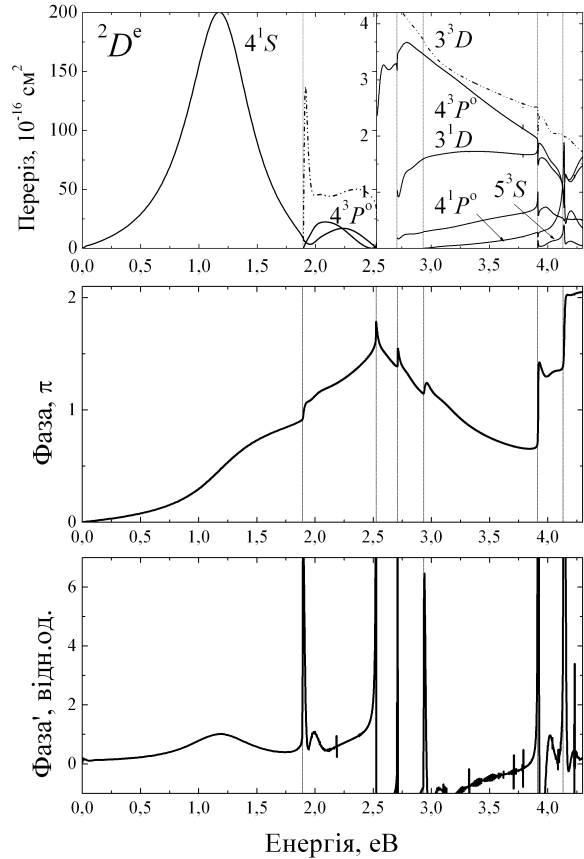


Рис. 4. Парціально-фазовий аналіз резонансних особливостей ІІІ для $^2D^e$ -хвилі. Верхнє вікно: (зліва) парціальні $^2D^e$ -перерізи переходів між станами 4^1S-4^1S , $4^1S-4^3P^o$ та $4^3P^o-4^3P^o$; (справа) парціальні $^2D^e$ -перерізи переходів між станами $4^1S-4^3P^o$, $4^1S-3^1D^e$, $4^1S-4^1P^o$, $4^1S-5^3S^e$, $4^3P^o-3^3D^e$ та $4^3P^o-3^1D^e$ атома Са; б) парціальні $^2D^e$ -фазові суми, в одиницях π радіан; с) похідні від парціальних $^2D^e$ -фазових сум.

станів, теж повинні проявляти себе різним чином, зокрема і різними стрибками фаз. Отже, поряд з обговоренням окремих особливостей в ІІІ, варто перейти до розгляду резонансних серій, елементи яких відповідали б різним степеням збудження квазістаціонарних станів від'ємних іонів. Саме для заповнення "вакантних" місць у подібних серіях та ідентифікації станів від'ємних іонів і потрібно мати повний спектр резонансних особливостей у певній області енергій – таблиці 4 і 5.

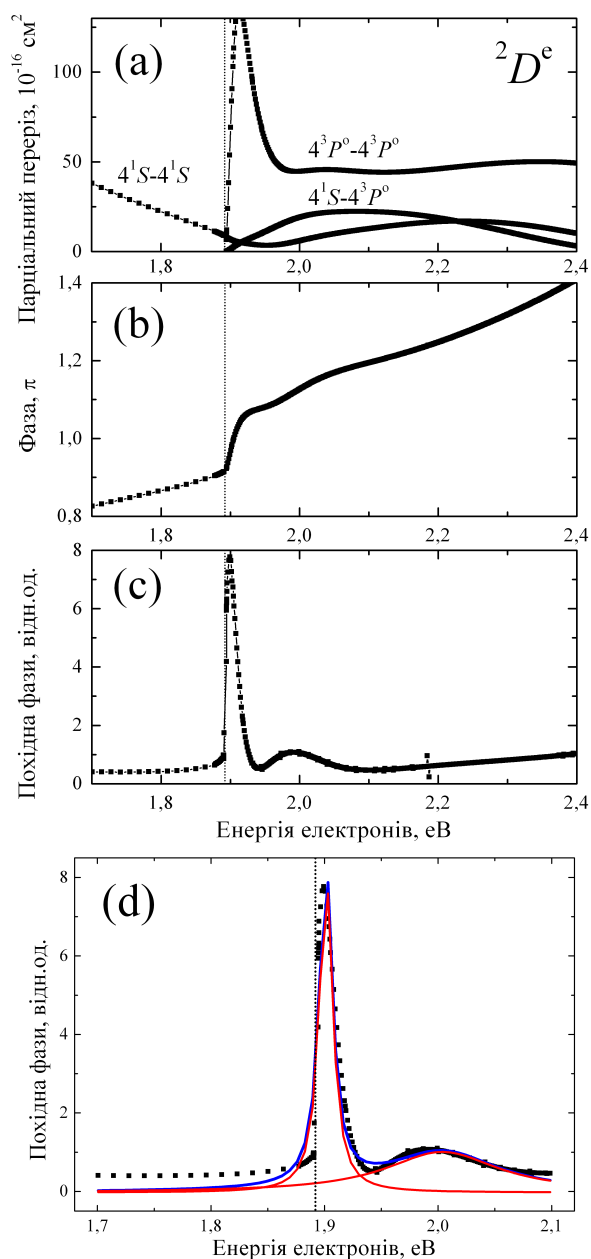


Рис. 5. Порядок проведення парціально-фазового аналізу резонансних особливостей в ІП атома Са при енергіях 1.901 та 2.004 еВ для ${}^2D^e$ -хвилі: а) парціальні ${}^2D^e$ -перерізи переходів між станами 4^1S-4^1S , $4^1S-4^3P^0$ та $4^3P^0-4^3P^0$; б) парціальні ${}^2D^e$ -фази, в одиницях π радіан; в) похідні від парціальних ${}^2D^e$ -фаз, – їх енергетичні залежності за формою подібні до лоренціанів; д) Лоренц-підгонка енергетичних залежностей похідних від парціальних фазових сум – випадок врахування двох піків на кривій підгонки. Положення і ширина лоренціанів підгонки відповідають положенню і ширині відповідних резонансів у ІП атома Са. Квадратиками (■) відмічені точки $BSR39$ -розрахунку ІП.

У цих таблицях, крім, положення по енергії E_0 , ширини W , та можливої класифікації того чи іншого резонансу, наведена також одна оціночна характеристика: значки „***” відповідають „безсумнівним”

резонансам, „***” – досить імовірним, а „*” – дещо проблематичним, але без яких лоренц-підгонка інших резонансів зустрічає сильні труднощі, або взагалі не збігається.

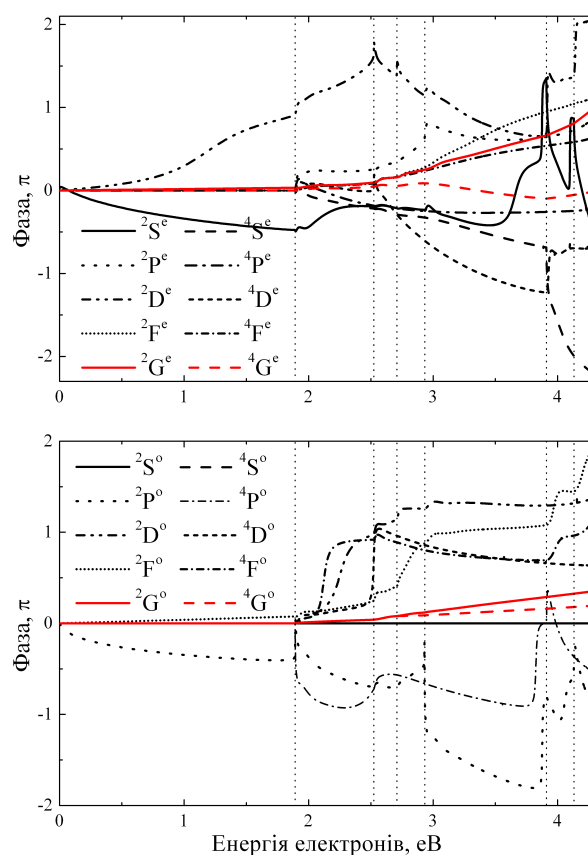


Рис. 6. Парціальні фази розсіяння електрона на атомі кальцію для парних (верхнє вікно) та непарних (нижнє вікно) термів. Стрибок фази на $\sim(+1)$ (в одиницях π) відповідає наявності чіткого резонансу у даній парціальній хвилі.

Розглянемо тепер найбільш помітні з резонансів, що згадуються у літературі. Від’ємний іон кальцію має зв’язаний стан $4s^2 4p \ 2P^o$, що „обмежений” відносно основного стану кальцію $4s^2 \ 1S$ величиною $\sim 0.01-0.07$ еВ, тобто стан, спорідненість якого, згідно різних джерел, складає не більше 70 меВ (див., напр. [10], [7-9]). Таким чином, енергія зв’язаного стану може бути використана для перевірки якості хвильових функцій мішені і моделі розсіювання. Нижчі полюси R -матриці в парціальній хвилі $2P^o$ можуть лежати близько до вищезгаданого зв’язаного стану (див. [2]).

Терм ${}^2D^e$ конфігурації $4s^2 3d$ є незв’язаним, але, як було встановлено в багатьох попередніх розрахунках (див., наприклад, [7-9]), трактується як резонанс форми.

Наші розрахунки вказують на положення цього шейп-резонансу в пружному перерізі у виді піку при 1.193 еВ, рис. 1. Порівняння енергетичних залежностей значень похідних від повного перерізу, отриманих на експерименті [10] та розрахованих нами, рис. 7, показує на більшу структурованість теоретичних результатів у припороговій області. Зокрема, прослідковується наявність у згаданих енергетичних залежностях не двох, а трьох чітко виражених особливостей у вигляді широких потужних структур, що могли би трактуватися як надпорогові резонанси форми. Крім того, на два останні пологі виступи накладаються характерні вузькі піки резонансів Фешбаха. При ще вищих енергіях прослідковується поява значної кількості вузьких резонансних піків, які поки що неможливо зафіксувати на експерименті. Виявлена нами резонансна структура у певній мірі підтверджується даними робіт [8-9]. У той же час, експериментальні результати [10], на нашу думку, не є надійними, оскільки вимірюваний сигнал пропорційний похідній тільки при малих тисках, що не було дотримано у випадку експерименту на атомі Са. Тому при виявленні резонансної структури ІІ більш прийнятним є використання відкоригованих результатів роботи [11], а не даних [10], параметри ж резонансу $4s^2 3d \ ^2D^e$ ми вважаємо цілком установленими.

Обговоримо ще одну особливість, не приведену в табл. 3, проте помітну в енергетичних залежностях ІІ – у вигляді другого пологого піку в перерізах пружного розсіяння та, одночасно, потужного надпорогового піку у ІІ збудження стану $4s4p \ ^3P^o$, рис. 1. Мається на увазі гіпотетичний шейп-резонанс $4s4p^2 \ ^2D^e$ при енергії 2.004 еВ, табл. 5, що не був, на відміну від попереднього, широко обговорений у літературі (див., наприклад, [10, 8-9]). Фактично цей шейп-резонанс перебиває весь діапазон енергій між порогоми збудження станів 4^3P^o та 3^3D^e . Ми розраховали його положення і ширину, визначаючи їх тим же чином, як і для резонансу $4s^2 3d \ ^2D^e$, обговореному вище. Ці величини знаходяться в хорошому узгодженні зі скоригованими даними для повного перерізу [11] та більш пізніми експериментами [12].

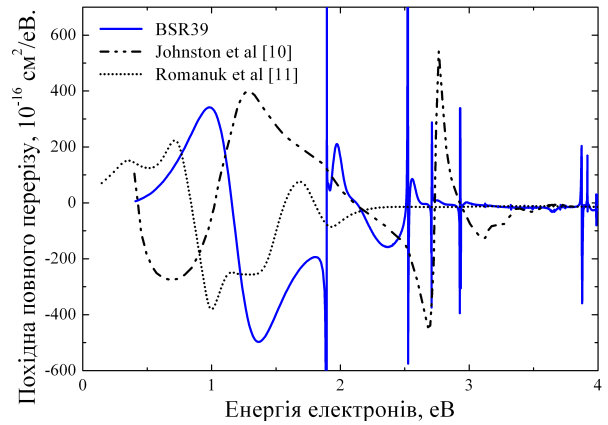


Рис. 7. Похідні повних перерізів розсіяння електрона на атомі кальцію Експеримент: (.....) – Johnson *et al* [10]; (- - -) – Romanuk *et al* [11], похідні від перерізів [11] розраховані нами; (—) – BSR39, даний розрахунок. При зсуві вправо на 0.35 еВ, як запропоновано в [2], дані Romanuk *et al* [11] дуже добре корелюють з даними BSR39.

Резонанс $4s4p^2 \ ^2D^e$ розміщений всього на ~ 0.112 еВ вище порога збудження стану $4s4p \ ^3P^o$ атома кальцію і може автовідриватися або в стан 4^3P^o , або в основний стан 4^1S . Фазовий аналіз показує на досить значне перекриття резонансних піків двох згаданих $^2D^e$ -шейп-резонансів, що зв'язані з конфігураціями $4s^2 3d$ та $4s4p^2$ і зосереджені в околі енергій 1.193 та 2.004 еВ, відповідно. Із графіка енергетичної залежності фазових сум, рис. 4-6, видно, що має місце накладання навіть не двох вказаних $^2D^e$ -резонансних особливостей, а трьох: „середня” з них носить характер вузького $^2D^e$ -резонансу форми при ~ 1.901 еВ, пов'язаного, на наш погляд, з утворенням проміжного стану $4s4p[^3P]4f \ ^2D^e$. Сумарний стрибок фази двох останніх резонансів при цьому не перевищує $\sim 0.5\pi$ радіан, рис. 4-6, що, скоріше за все, зв'язано з „інтерференцією” резонансних особливостей.

Як слідує зі сказаного, встановлення природи особливостей у перерізах розсіяння тільки для однієї $^2D^e$ -парціальної хвилі у невеликому інтервалі енергій вимагає комплексного розв'язання великої кількості складних завдань з установлення положення, ширини, фазового зсуву для кожної з особливостей, а також їх кореляції з вище і нижче розміщеними резонансними структурами, які до того ж належать різним парціальним хвилям. При цьому трактування одних і тих же особливостей

стосовно їх належності тому чи іншому проміжному квазізв'язаному стану системи „атом Ca + електрон” є завідомо неоднозначним через відсутність даних з енергетичної структури станів від'ємного іона Ca^- . Більше того, однією з цілей даної роботи є саме дослідження можливості установлення подібної структури з парціально-фазового аналізу резонансної структури ПП розсіяння $e+\text{Ca}$. Представляє інтерес також відповідність між структурою рівнів іона Ca^- та атома Sc. Природний порух перенести структуру рівнів атома Sc на стани іона Ca^- зустрівся зі значними труднощами, зокрема, через наявність в атомі Sc низькорозміщених термів конфігурації d^3 і відсутність при низьких енергіях термів конфігурації d^2 атома Ca. Тому в якості визначального нами був обраний принцип класифікації, за яким стани від'ємного іона збігаються до ближчого порогу збудження деякого стану атома Ca. Вибір певної конфігурації іона Ca^- для установлення її відповідності деякій серії резонансів визначався різними додатковими факторами. Наприклад, вибір конфігурації $4s4p[{}^3P]4f$, а не, скажімо, $4s3d^2$ чи $3d^3$, для серії резонансів з енергіями 1.901, 1.903, 1.957, 1.966, 1.975 eV був обумовлений наявністю в серії терму ${}^4D^e$, якому відповідає потужна порогова структура в ${}^4D^e$ -парціальному перерізі переходу ${}^3P^o - {}^3P^o$ при енергії 1.903 eV, рис. 3, табл. 5.

Результати проведеної нами роботи з визначення індивідуальних характеристик окремих резонансів та їх подальшої класифікації, крім табл. 4, 5, відображені на рис. 8. Тут представлена наглядна схема запропонованої нами класифікації виявлених резонансів у діапазоні енергій налітаючого електрона 1.15÷4.3 eV. Крім енергій кожного резонансного рівня на рис. 8 відображені пороги збудження окремих термів, а також стани від'ємних іонів, яким, на нашу думку, відповідає той чи інший резонанс.

Висновки

Нами представлені результати розрахунку положення і ширини резонансів в інтегральних перерізах розсіяння електронів на

атомі кальцію в діапазоні енергій від порога до 4.3 eV. В роботі використані дані розрахунків перерізів розсіяння $e+\text{Ca}$ в рамках методу R -матриці з B -сплайнами [1], виконані в рамках комплексних досліджень атома кальцію [2-5]. Парціально-хвильовий аналіз інтегральних перерізів здійснено шляхом розрахунку парціальних фаз розсіяння, виявлення структури їх енергетичних залежностей і використання лоренц-підгонки похідних від цих фаз. Поряд з резонансними особливостями, для яких стрибок фази є близьким до 1 (в од. π радіан), у розгляд були введені особливості зі значно меншими значеннями стрибка фази. Це дало змогу зв'язати виявлені резонансні особливості інтегральних перерізів розсіяння з квазістаціонарними станами від'ємного іона Ca не поодинокі, а цілими серіями, що збігаються до порогових енергій збудження атома Ca. Подібний підхід, з одного боку, дозволяє провести більш повну класифікацію квазістаціонарних станів системи "атом Ca плюс електрон", з іншого – неминуче вносить додаткову неоднозначність у процес класифікації. Порівняння параметрів деяких найбільш помітних резонансів з результатами інших теоретичних розрахунків, зокрема [7-9], та експериментальними даними [10-12] показало в цілому на їх задовільне узгодження. У той же час, більшість резонансних особливостей у перерізах розсіяння $e+\text{Ca}$ виявлені і попередньо класифіковані нами вперше. Всього виявлено 11 чітко окреслених резонансів, біля 20 менш явно виражених, та близько 25 резонансних особливостей, що „проявляють” себе лише у процесі проведення лоренц-підгонки. На наш погляд, всі ці особливості пов'язані з утворенням квазістаціонарних станів іона Ca^- . Відповідно, нами отримана ймовірна схема енергетичних рівнів аніона Ca. Багато принципових проблем ідентифікації виявлених резонансів мають стати предметом подальшого ґрунтовного вивчення.

Автор висловлює подяку д-ру Зацарінному О.І. та проф. Лазуру В.Ю. за допомогу в проведенні досліджень, що призвели до появи даної статті.

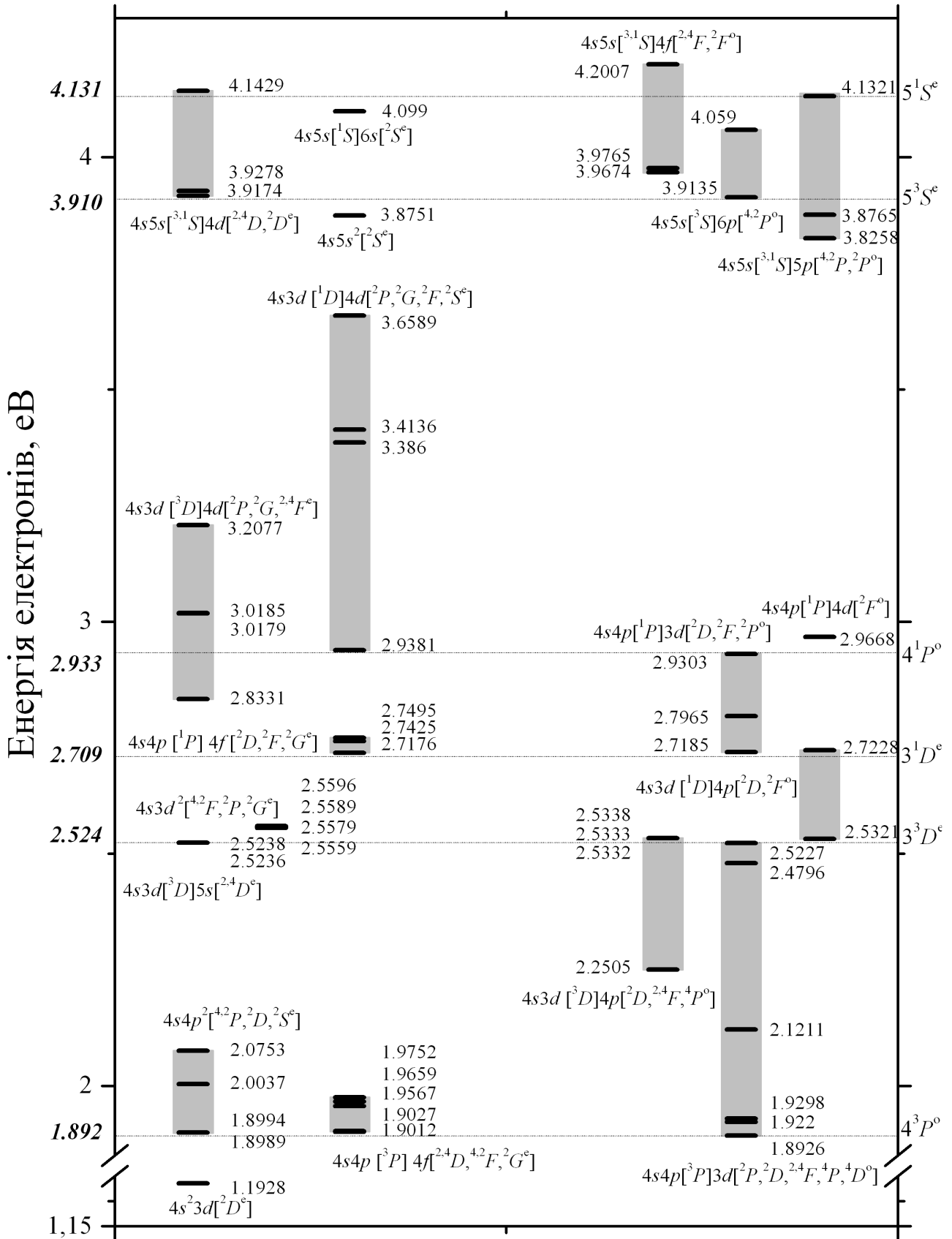


Рис. 8. Схема ймовірної класифікації резонансів у III атома Са в області енергій від 1.15 до ~4.3 еВ.

Таблиця 3

Перелік найбільш чітких резонансів у ІІІ атома Са в області енергій до 4.3 еВ

Енергія, еВ	Ширина, меВ	Зсув фази, π	Класифікація	
			Поч. стан	Кін. стан
1.193	700	0.83	$4s^2 3d^2 D$	$4s^2 1S$
2.121	59	0.83	$4s 4p [^3P] 3d^4 F^o$	$4s 4p^3 P^o$
2.251	140	0.84	$4s 3d [^3D] 4p^2 D^o$	$4s 3d^3 D$
2.523	13	0.85	$4s 4p [^3P] 3d^4 D^o$	$4s 4p^3 P^o$
3.659	101	0.72	$4s 3d [^1D] 4d^2 S$	$4s 3d^1 D$
3.826	16	0.9	$4s 5s [^3S] 5p^4 P^o$	$4s 5s^3 S$
3.875	3	0.98	$4s 5s^2 2S$	$4s 5s^3 S$
3.877	7	0.96	$4s 5s [^3S] 5p^2 P^o$	$4s 5s^3 S$
3.917	4	0.77	$4s 5s [^3S] 4d^2 D$	$4s 5s^3 S$
4.099	3	0.86	$4s 5s [^1S] 6s^2 S$	$4s 5s^1 S$
4.143	11	0.67	$4s 5s [^1S] 4d^2 D$	$4s 5s^1 S$

Таблиця 4

Перелік резонансів непарних станів в ІІІ атома Са в області енергій до ~4.3 еВ

E_0 , еВ	W, меВ	Ймовірна класифікація
1.893	0,2	** $4s 4p [^3P] 3d [^2P^o]$
1.922	40	* – “ – – “ – $[^2D^o]$
1.93	39	* – “ – – “ – $[^2F^o]$
2.121	59	*** – “ – – “ – $[^4F^o]$
2.251	140	*** $4s 3d [^3D] 4p [^2D^o]$
2.48	128	** $4s 4p [^3P] 3d [^4P^o]$
2.523	13	*** – “ – – “ – $[^4D^o]$
2.532	14	** $4s 3d [^1D] 4p [^2D^o]$
2.533	16	* $4s 3d [^3D] 4p [^2F^o]$
2.533	18	* – “ – – “ – $[^4F^o]$
2.534	24	* $4s 3d [^3D] 4p [^4P^o]$
2.719	16	** $4s 4p [^1P] 3d [^2D^o]$
2.723	18	** $4s 3d [^1D] 4p [^2F^o]$
2.797	116	** $4s 4p [^1P] 3d [^2F^o]$
2.93	1	* – “ – – “ – $[^2P^o]$
2.967	45	* $4s 4p [^1P] 4d [^2F^o]$
3.826	16	*** $4s 5s [^3S] 5p [^4P^o]$
3.877	7	*** $4s 5s [^3S] 5p [^2P^o]$
3.914	5	** $4s 5s [^3S] 6p [^4P^o]$
3.967	40	** $4s 5s [^3S] 4f [^2F^o]$
3.977	97	* – “ – – “ – $[^4F^o]$
4.059	42	* $4s 5s [^3S] 6p [^2P^o]$
4.132	4	* $4s 5s [^1S] 5p [^2P^o]$
4.201	56	** $4s 5s [^1S] 4f [^2F^o]$

Таблиця 5

Перелік резонансів парних станів в ІІІ атома Са в області енергій до ~4.3 еВ

E_0 , еВ	W, меВ	Ймовірна класифікація
1.193	700	*** $4s^2 3d [^2D]$
1.899	12	** $4s 4p^2 [^3P] [^4P]$
1.899	12	** – “ – – “ – $[^2P]$
1.901	14	** $4s 4p [^3P] 4f [^2D]$
1.903	17	** – “ – – “ – $[^4D]$
1.957	97	* – “ – – “ – $[^4F]$
1.966	113	* – “ – – “ – $[^2F]$
1.975	65	* – “ – – “ – $[^2G]$
2.004	122	** $4s 4p^2 [^2D]$
2.075	246	** $4s 4p^2 [^2S]$
2.524	1	* $4s 3d [^3D] 5s [^2D]$
2.524	0,3	* – “ – – “ – $[^4D]$
2.556	39	* $4s 3d^2 [^3F] [^4F]$
2.558	53	* – “ – – “ – $[^2F]$
2.559	40	* $4s 3d^2 [^3P] [^2P]$
2.56	44	* $4s 3d^2 [^1G] [^2G]$
2.718	126	* $4s 4p [^1P] 4f [^2D]$
2.743	33	* – “ – – “ – $[^2F]$
2.75	45	* – “ – – “ – $[^2G]$
2.833	256	* $4s 3d [^3D] 4d [^2P]$
2.938	12	** $4s 3d [^1D] 4d [^2P]$
3.018	141	* $4s 3d [^3D] 4d [^2G]$
3.019	102	** – “ – – “ – $[^2F]$
3.208	1029	* – “ – – “ – $[^4F]$
3.386	369	** $4s 3d [^1D] 4d [^2G]$
3.414	1462	** – “ – – “ – $[^2F]$
3.659	101	*** $4s 3d^2 [^1S] [^2S]$
3.875	3	*** $4s 5s^2 [^1S] [^2S]$
3.917	4	*** $4s 5s [^3S] 4d [^2D]$
3.928	15	** – “ – – “ – $[^4D]$
4.099	3	*** $4s 5s [^1S] 6s [^2S]$
4.143	11	*** $4s 5s [^1S] 4d [^2D]$

Література

1. Zatsarinny O. BSR: B-spline atomic R-matrix codes // *Comput. Phys. Commun.* – 2006. – V.174. – P.273-356.
2. Zatsarinny O., Bartschat K., Gedeon S., Gedeon V., and Lazur V. Low-energy electron scattering from Ca atoms and photodetachment of Ca^- // *Phys. Rev. A.* – 2006. – V.74. – P.052708(10 pp).
3. Zatsarinny O., Bartschat K., Bandurina L. and Gedeon S. Electron-impact excitation of calcium // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* – 2007. – V.40. – P.4023-4031.
4. Зацарінний О., Бартшат К., Бандуріна Л., Гедеон С., Лазур В. Розсіяння електронів на атомі кальцію // *Наук. вісник УжНУ, серія Фізика.* – 2007. – V.21. – P.205-214.
5. Гедеон С.В. Розсіяння електронів на кальції при наднизьких енергіях // *Наук. вісник УжНУ, серія Фізика.* – 2008. – V.23. – P.53-57.
6. Burke V.M., Noble C.J. FARM: The atomic R-matrix program // *Comp. Phys. Commun.* – 1995. – V. 85. – P. 471-500.
7. Yuan Jianmin and Fritsche L. Electron scattering by Ca atoms and photodetachment of Ca^- ions: An R-matrix study // *Phys. Rev. A* **55** (1997) 1020–1027
8. Yuan Jianmin and Lin C.D. Effect of core-valence electron correlation in low-energy electron scattering with Ca atoms // *Phys. Rev. A.* – 1998. – V.58. – P. 2824–2827.
9. Yuan Jianmin. Core-valence electron correlation effects in photodetachment of Ca^- ions // *Phys. Rev. A.* – 1999. – V.61. – P. 012704 (6 pp).
10. Johnston A.R., Gallup G.A. and Burrow P.D. Low-lying negative-ion states of calcium // *Phys. Rev. A.* – 1989. – V.40. – P. 4770–4772.
11. Romanyuk N.I., Shpenik O.B., and Zapesochnyi I.P. The electron impact cross sections and features an calcium, strontium and barium atoms // *Pis'ma Zh. Eksp. Teor. Fiz.* – 1980. – V.32. – P.472-475 [*JETP Lett.* – 1980. – V.32. – P.452-455.
12. Романюк М.І., Шпенік О.Б., Папп Ф.Ф., Чернишова І.В., Манді Й.В., Келемен В.І., Сабад О.П., Ремета С.Ю. Дослідження низькоенергетичного розсіювання електронів на атомах Mg та Ca з використанням оптимізованого трохіодного спектрометра // *Укр. фіз. журн.* – 1992. – V.37. – № 11. – P. 1639–1647.

THE RESONANCE STRUCTURE OF INTEGRAL CROSS SECTIONS OF ELECTRON SCATTERING ON CALCIUM ATOM IN ENERGY REGION UP TO 4.3 eV

S.V. Gedeon

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

Positions and widths of the resonances revealed in the cross sections of electron scattering on the calcium atom in the energy region from the threshold of reaction up to 4.3 eV are presented, and their possible classification is provided. The study of the $e+\text{Ca}$ collision processes is carried out with the *B*-spline *R*-matrix method. The multiconfiguration Hartree-Fock method with non-orthogonal orbital sets is employed for accurate representation of the target wavefunctions. The close-coupling expansion includes 39 bound states of neutral calcium. The partial-wave analysis of resonance structures includes calculation of partial scattering phases, exposure of their energy dependence in the fine mesh and usage of Lorentz-type fitting the phase derivatives at resonance positions. The calculated resonances parameters yield satisfactory agreement with the data from other theoretical calculations and experiment.