

ЕНЕРГЕТИЧНІ ТА КУТОВІ ЗАЛЕЖНОСТІ ДИФЕРЕНЦІАЛЬНОГО ПЕРЕРІЗУ ПРУЖНОГО РОЗСІЯННЯ ЕЛЕКТРОНІВ НА АТОМІ МАГНІЮ

В.Ф. Гедеон

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

Представлено кутові і енергетичні залежності диференціальних перерізів (ДП) пружного розсіяння електронів на атомі магнію основному стані 3^1S . Розрахунки ДП здійснено за допомогою методу R -матриці з B -сплайнами. Розклад сильного зв'язку включав 37 зв'язаних станів атома магнію. Здійснено порівняння розрахованих кутових залежностей ДП пружного зіткнення $e+Mg$ з наявним експериментом при енергіях зіткнення 10, 15, 20, 40, 60 та 80 еВ. Порівняно з експериментом також енергетичні залежності цих ДП в області енергій від 2 до 5 еВ при фіксованих значеннях кутів 24° , 54° , 90° та 120° . Наведено різні ракурси 3D-поверхні залежностей ДП від кутів розсіяння та енергій налітаючого електрона. Отримано хороше узгодження розрахованих ДП з існуючими експериментальними даними.

Вступ

У недавніх роботах [1, 2] ми з співавторами детально розглянули стан наукових досліджень з розсіяння електронів низьких і середніх енергій на атомі магнію. Результати наявних експериментальних вимірювань [3-10] кутових залежностей диференціальних перерізів (ДП) розсіяння електронів на атомі магнію були порівняні з існуючими теоретичними розрахунками ДП [3-5, 11-16], виконаними у наближенні збіжного сильного зв'язку, методу R -матриці з псевдостанами, у наближенні релятивістських спотворених хвиль, наближенні сильного зв'язку п'яти каналів, методом оптичного сильного зв'язку, модифікованої багаточастинкової теорії першого порядку, а також нерелятивістського наближення спотворених хвиль (детальніше див. [1, 2]). В доповнення до перерахованих вище теоретичних обчислень, у роботах [1, 2] нами були проведені за допомогою методу R -матриці з B -сплайнами (BSR) [17] незалежні *ab initio* розрахунки диференціальних перерізів розсіяння електронів на атомі магнію для широкого спектру розглядуваних переходів, енергій зіткнення та кутів розсіяння. Зокрема, було

здійснено розрахунок методом BSR кутових залежностей ДП пружного розсіяння електронів на атомі Mg в основному стані 3^1S і ДП збудження спектроскопічних станів 3^1P^o , 3^3P^o , 4^1S , 3^1D та 4^1P^o магнію при енергіях зіткнення 10, 15, 20, 40, 60, 80 та 100 еВ у діапазоні кутів розсіяння від 0° до 180° . Крім диференціальних (по куту) перерізів, були розраховані також відповідні інтегральні (по куту) перерізи зіткнення електронів з атомом Mg в основному стані. Порівняння даних, отриманих у наближенні BSR, з наявним експериментом та іншими теоретичними розрахунками показало що використовуваний нами метод забезпечує точність обчислень у загальному кращу, ніж інші теоретичні наближення, за винятком, можливо, прецизійних варіантів методу ССС, які, проте, є надто ресурсозатратними.

Відмітимо, що проведені в роботах [3-5, 11-16] розрахунки стосувалися окремих вибраних переходів і кількох енергій, у кожному випадку, звичайно, інших. Тільки в результаті досліджень [1, 2], проведених у рамках методу BSR, було вперше отримано всебічні набори даних з ДП, що покривають по суті весь набір наявних експериментальних даних. Систематичне порівняння

наявних експериментальних і теоретичних результатів зробило можливим оцінювання точності існуючих даних і знаходження можливих джерел відмінностей. Вказані розрахунки [1, 2] були виконані з використанням розширеної версії R -матричного методу з B -сплайнами, в якій для представлення функцій континууму в розкладі сильного зв'язку хвильової функції розсіяння був використаний B -сплайновий базис. Недавні застосування цього методу до квазі-двоелектронних атомів, таких як Ca [18, 19] та Zn [20], показали значно краще узгодження між експериментом і теорією для низькоенергетичного розсіяння у порівнянні з попередніми розрахунками. Більше того, наближення BSR показало свою високу розрахункову „спроможність” навіть при обчисленні характеристик такого традиційно незручного для обчислень об'єкту як атом вуглецю [21]. Використання наборів неортогональних орбіталей як для побудови хвильових функцій мішені, так і для представлення функцій розсіяння дозволило проводити більш точні описи станів мішені, ніж ті, які використовувалися у більш ранніх розрахунках зіткнення. Зокрема, наявні хвильові функції мішені містять як валентну так і кор-валентну кореляції, які *ab initio* включають багатоконфігураційні розклади з відкритим кором.

Крім диференціальних перерізів зазначених вище переходів, у [1] були представлені також відповідні інтегральні перерізи Mg. Їх дослідження, звичайно, не було таким багатостороннім і детальним, як у наших роботах [22, 23], проте показало хороше узгодження з новітніми експериментальними даними [6] щодо цих перерізів.

Не зважаючи на великий обсяг представлених в [1, 2] даних щодо кутових залежностей ДП розсіяння e^+Mg , у згаданих роботах залишилися зовсім не розкритими питання, пов'язані з енергетичними залежностями цих ДП, а також питання кореляції кутових і енергетичних залежностей ДП. Дана робота якраз і присвячена розгляду перерахованих питань, що не знайшли відображення в [1, 2]. Зазначимо, що єдиною відомою нам роботою у якій розглядаються енергетичні залежності ДП атома Mg є дослідження [24].

Дана стаття організована наступним чином: спочатку дано схематичний опис структури мішені і найбільш важливих аспектів розрахунку зіткнення, далі представляються диференціальні перерізи пружного розсіяння і обговорюються їх енергетично-кутові залежності. Ми закінчуємо обговоренням наявних проблем з аналізом отриманих результатів і оглядом можливих перспектив майбутніх теоретичних досліджень.

Методи розрахунку

У даній роботі нами використано дані з обчислення структури атома Mg здійснені за допомогою пакетів програм BSR [17] і MCHF [25, 26] у попередній статті [1]. Загальна теорія BSR-розрахунків атомної структури та процесів розсіяння електронів на атомах, з описом комп'ютерних програм пакету BSR, наведена в [17]. Конкретна розрахункова модель, результати застосування якої використані у даному дослідженні, була детально описана в нашій попередній роботі [1] і тому не буде повторена тут. Зупинимося тільки на вузлових моментах. Точний опис мішені генерувався шляхом використання багатоконфігураційних розкладів, які враховують і валентну, і кор-валентну кореляції. При цьому використовувалися залежні від терму валентні орбіталі, які були індивідуально оптимізовані для різних розглядуваних станів. В результаті були отримані набори нормованих ортогональних одноелектронних орбіталей для кожного стану у рамках одного терму. У той же час, орбіталі з різних наборів не утворюють ортонормованого базису.

В підході сильного зв'язку до проблеми зіткнення ці неортогональні орбіталі використовуються для опису станів мішені. Як було вказано вище, обчислення виконані за допомогою пакету програм R -матриці з B -сплайнами [17], у якому чисельні B -сплайни використовуються в якості базисних функцій для опису вільного електрона поза R -матричним „боксом” радіусу a . Зокрема, ми приймали $a = 80 a_0$, де $a_0 = 0.528 \times 10^{-10}$ м – борівський радіус, а радіальна область була перекрита 110 сплайнами порядку 8.

Ми починали з генерування орбіталей кора у хартрі-фоківському розрахунку для Mg^{2+} і таким чином отримали валентні орбіталі $3s, 3p, 3d$, та $4s$ з обчислень із замороженим кором для Mg^+ . Далі, корвалентна кореляція моделювалася шляхом додавання конфігурацій $2p^5 \bar{n}l \bar{n}'l'$ через розклад

$$\phi(2p^6 nl) = a_{nl} \phi_{HF}(2p^6 nl) + \sum_{\bar{n}l \bar{n}'l'} b_{\bar{n}l \bar{n}'l'} \chi(2p^5 \bar{n}l \bar{n}'l') \quad (1)$$

де риска означає радше кореляційну, ніж фізичну орбіталь. Іншими словами, хартрі-фоківські хвильові функції $\phi_{HF}(2p^6 nl)$ були покращені кореляційними функціями χ із $2p$ -збудженого кора. Ці розрахунки були здійснені програмою MCHF Froese Fischer *et al.* [26].

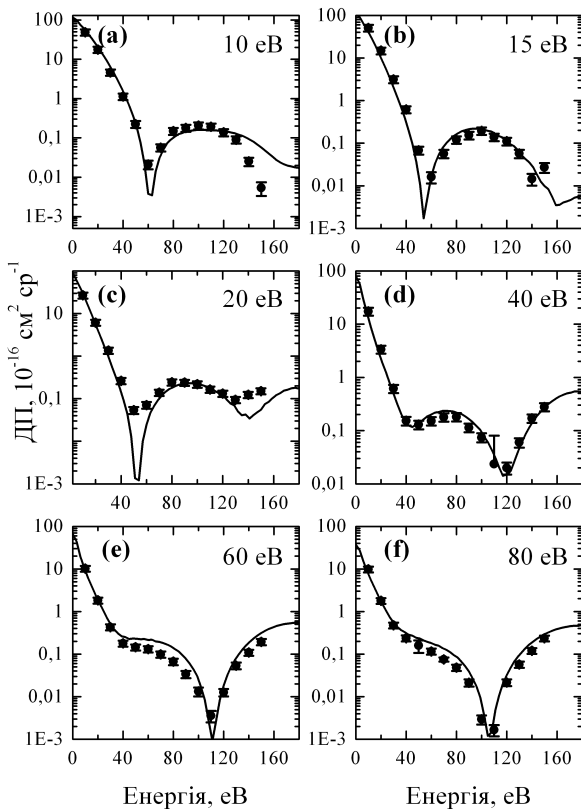


Рис. 1. (a)-(f) Кутові залежності ДП пружного розсіяння $3s^2 \ ^1S - 3s^2 \ ^1S$ при значеннях енергій 10, 15, 20, 40, 60 та 80 еВ: (●) експеримент [6]; (—) BSR37, даний розрахунок. Детальне порівняння з даними [4, 11, 12] наведено у роботі [1].

У подальшому, в багатоконфігураційних BSR-розрахунках мішені для системи

$Mg^+ + e^-$, нами були нараховані електронні орбіталі атома Mg для симетрій $^1,3S, ^1,3P^o, ^3P, ^1,3D$ та $^1,3F^o$ – всього 36 нижніх станів атома Mg (за винятком станів з конфігурацією $5g, 6g$), а також для високо розміщеного автоіонізаційного стану $2p^6 3p^2 \ ^1S$. Тобто у розкладі сильного зв'язку ми врахували 37 спектроскопічних станів, включаючи стани конфігурації $3p^2$ поза неон-подібним кором. Ми використовували той самий багатоканальний розклад (1) як для станів $3snl$, так і для всіх станів nl^2 з еквівалентними електронами.

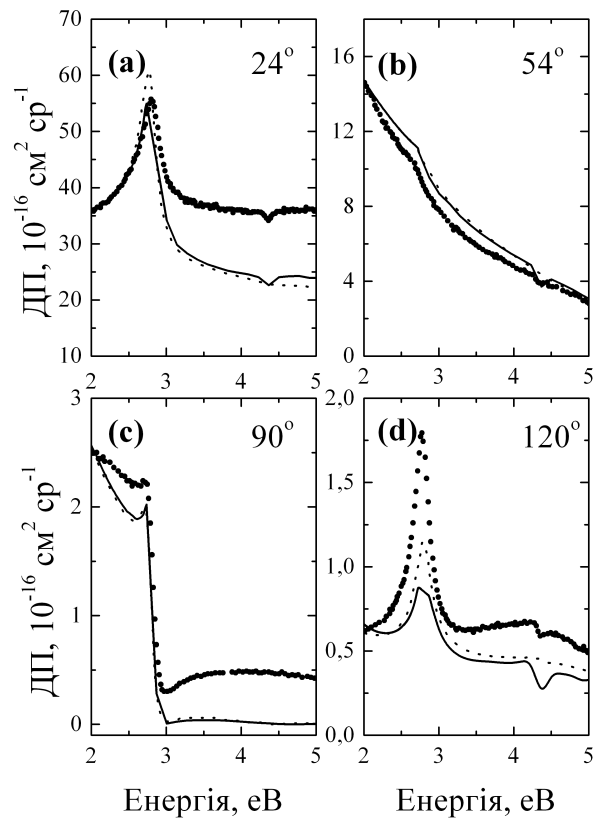


Рис. 2. (a)-(d) Залежності ДП пружного розсіяння $3s^2 \ ^1S - 3s^2 \ ^1S$ від енергії при значеннях кутів $24^\circ, 54^\circ, 90^\circ$ та 120° : (●) експеримент [24]; (—) BSR37, даний розрахунок; (- - -) RM, [24].

Використовуючи 20–50 конфігурацій для кожного стану мішені, одночасно із залежною від терму оптимізацією одноелектронних орбіталей, ми отримуємо опис мішені (рівні енергій та сили осциляторів) який може бути використано у розрахунках зіткнення при наявності досить скромних обчислювальних ресурсів. Подробиці можна установити з таблиць 1 та 2 статті Zatsarinny *et al.* [1]. Як сказано вище, тут

ми тільки фіксуємо модель обчислення структури мішені і зроблені в даній роботі припущення щодо кореляційної взаємодії електронів у атомі магнію.

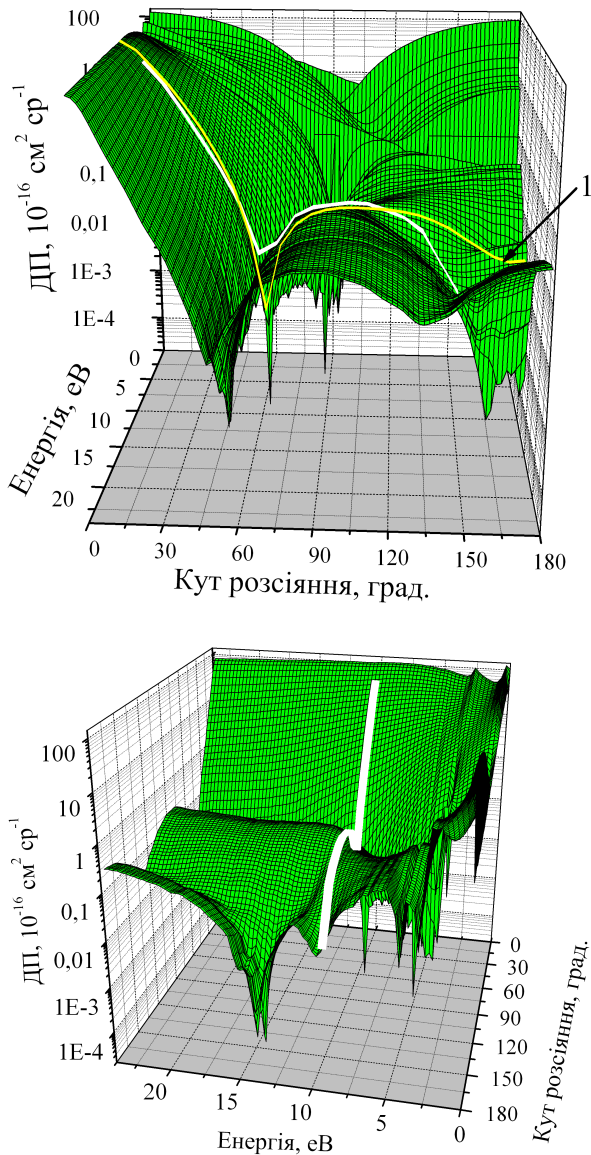


Рис. 3. Різні ракурси 3D-поверхні кутової та енергетичної залежностей ДП пружного переходу $3s^2 1S - 3s^2 1S$ при розсіянні електронів на атомі Mg в області енергій до 25 еВ. Жовта (позначена цифрою 1) і біла смуги на 3D-поверхні позначають зріз ДП при енергії 10 еВ, розрахованих у наближенні BSR37 та поміряних на експерименті [6], відповідно.

Перерізи обчислювалися за стандартною R -матричною схемою, з використанням для зовнішньої області пакету *FARM* [27]. Як і у роботах [18-21], у розрахунках розсіяння ми використовували експериментальні енергії збудження мішені NIST [28], а не енергії, отримані в BSR37-

розрахунках.

Результати і обговорення

На рис. 1 представлені ДП пружного розсіяння електронів на Mg. Абсолютні експериментальні ДП [6] порівняні з результатами даного R -матричного з B -сплайнами розрахунку із врахуванням 37 спектроскопічних станів атома Mg у розкладі сильного зв'язку, BSR37. На рисунку не відображені результати розрахунків ДП, виконаних у наближеннях збіжного сильного зв'язку та R -матричного наближення з псевдостанами [4, 14], методу сильного зв'язку п'яти [11] та шести [12] каналів, а також відносні експериментальні ДП [3, 4], оскільки детальне порівняння наших BSR37-результатів з цими даними було проведено у роботах [1, 2].

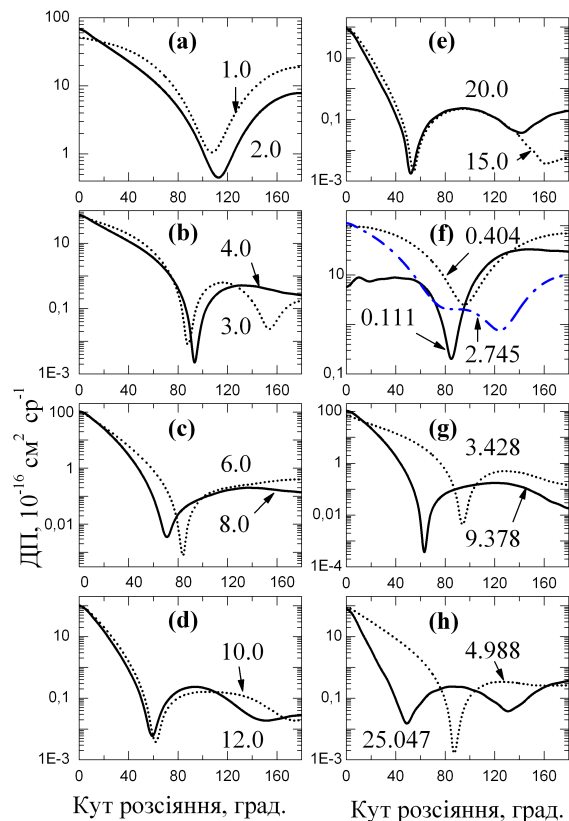


Рис. 4. (а-е) Динаміка зміни ДП пружного розсіяння $e+Mg$: зрізи кутових залежностей ДП з ростом енергії налітаючого електрона. (f-н) Зрізи кутових залежностей ДП пружного розсіяння в "околі особливих точок" на відповідній 3D-поверхні. Значення енергій проставлені у графічних вікнах.

З рис. 1 видно, що у всьому діапазоні енергій від 10 до 80 еВ і для всіх кутів роз-

сіяння, від 0 до 180°, спостерігається чудове узгодження даних BSR37 з експериментом [6]. Виняток становлять дві останні експериментальні точки (при кутах 140° та 150°) для енергій 10, 15 та 20 еВ, для яких теоретична крива дещо відхиляється від експериментальних значень.

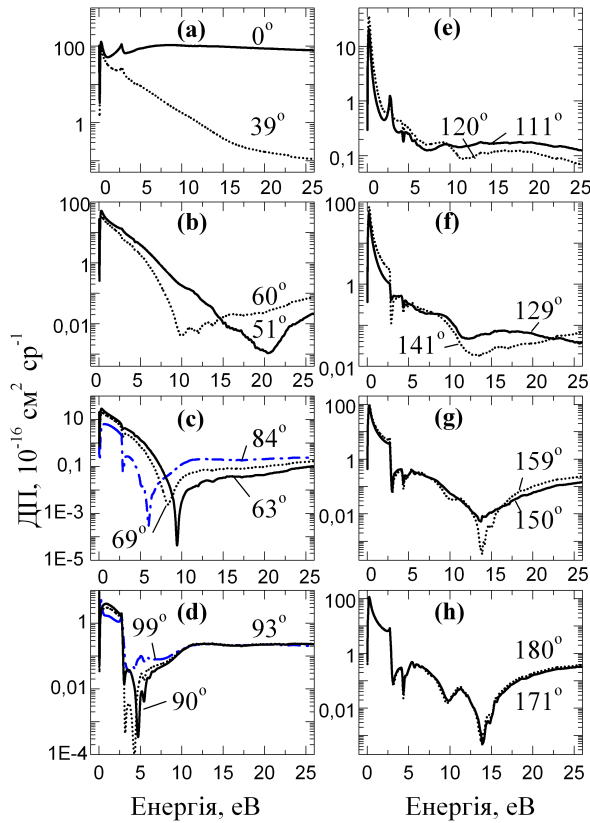


Рис. 5. (a)-(h) Динаміка зміни ДП пружного розсіяння $e+Mg$: зрізи енергетичних залежностей ДП з ростом кута розсіяння електрона на атомі Mg. Значення кутів розсіяння проставлені у графічних вікнах.

Як видно з рис. 1, зміна форми кутових залежностей ДП зі зміною енергії для пружного переходу є досить значною. Природним є бажання отримати уявлення про зміну цих залежностей не тільки у виділених точках по енергії, а у всьому неперервному енергетичному діапазоні від порога до, наприклад, 25 еВ. Ще більший інтерес являє дослідження, поряд з кутовими залежностями ДП, енергетичних залежностей розглядуваних ДП. Наскільки нам відомо, зміна енергетичних залежностей ДП пружного розсіяння електронів на Mg при фіксованих кутах розсіяння розглядалася тільки у роботі [24]. На рис. 2 проведено

порівняння енергетичних залежностей ДП, розрахованих методом BSR37, з експериментальними даними [24] і представлені у цій же роботі теоретичними розрахунками у R -матричному наближенні (RM).

Як видно з рис. 2, енергетичні залежності ДП [24] представлені у дуже вузькому діапазоні енергій (від 2 до 5 еВ) і тільки при чотирьох значеннях кутів: 24°, 54°, 90° та 120°. Дані двох незалежних R -матричних наближень, даного BSR37 і представленого у роботі [24], щодо енергетичних залежностей ДП практично співпадають для всіх розглянутих енергій і кутів. Обидва R -матричні наближення досить добре передають якісну залежність вимірних на експерименті ДП від енергії. У той же час, при кутах 24°, 90° та 120° спостерігаються досить значні розбіжності в абсолютних значеннях експериментальних і розрахованих ДП. Очевидно, природа цих розбіжностей потребує додаткового досконального вивчення.

Наступним кроком, поряд з відображенням окремо кутових і окремо енергетичних залежностей ДП, є їх представлення у вигляді тривимірної 3D-поверхні.

Для ілюстрації можливостей 3D-аналізу на рис. 3 представлено два ракурси 3D-поверхні кутової і енергетичної залежностей ДП пружного розсіяння електронів на магнії в області енергій до 25 еВ. На рисунку видно складну структуру цієї поверхні, що характеризується наявністю глибоких поздовжніх/скісних жолобів між підвищеними ділянками, а також поперечних складок і подібних до вирв мінімумів з чіткою енергетично-кутовою локалізацією. Дрібноструктурна "гладкість" розглядуваної 3D-поверхні очевидно залежить не тільки від фізики задачі, але й від якості чисельного розрахунку відповідних ДП. У певній мірі відсутність "немотивованих" збрижень, зломів та інших нерівностей на цій поверхні може слугувати хорошим візуальним тестом для визначення якості проведених розрахунків ДП.

Поряд з якісною оцінкою розрахованих ДП пружного розсіяння $e+Mg$, проілюстрованої рис. 3, на рис. 4 та 5 показано, відповідно, зрізи кутових та енергетичних залежностей цих ДП при фіксованих значен-

нях енергії, чи кутів розсіяння. З аналізу зрізів кутових залежностей ДП при різних енергіях, рис. 4, можна скласти уявлення про динаміку зміни ДП з ростом енергії (а)-(ф), а також про поведінку ДП в околі локалізованих по кутах і енергіях "особливих областей" на 3D-поверхні. Аналогічну інформацію, але вже стосовно енергетичних залежностей при фіксованих кутах розсіяння можна отримати з рис. 5. Як видно з рис. 5, найбільш інтенсивних змін енергетична залежність ДП пружного розсіяння зазнає в області кутів розсіяння від ~ 60 до 110° . І навпаки, при кутах, більших за $\sim 150^\circ$, ця залежність залишається практично незмінною. Інтерес могло би представляти, для прикладу, встановлення відповідності між резонансами в інтегральних перерізах розсіяння і спостережуваними структурами на розглядуваній 3D-поверхні, а також причини появи локальних, подібних до вирв, особливостей на поверхні ДП в залежності від енергій і кутів розсіяння.

Додаткові можливості для встановлення якісної залежності ДП від енергій і кутів розсіяння, а також від головного квантового числа міг би дати аналіз 3D-поверхонь для ДП збудження станів $3sns^{1,3}S$, $n=3,4,5$, $3snp^{1,3}P$, $n=3,4$ та $3snd^{1,3}D$, $n=3,4$, що, можливо, стане предметом нашого наступного дослідження. Очевидно, на часі стоїть питання про створення ефективних методів чисельного аналізу 3D-поверхонь з побудовою відповідних скелетонів, придатних для подальшої теоретичної обробки.

Висновки

Ми представили теоретичні енергетично-кутові залежності диференціальних перерізів пружного зіткнення електронів з атомом Mg в основному стані в області енергій від порога реакції до 80 еВ. Розрахунки було виконано за допомогою розширеної версії *R*-матричного (сильний зв'язок) методу [17], в якому для представлення функцій континууму використовується *B*-сплайновий базис.

Дані розрахунки виконано з метою детального дослідження як енергетичних, так і кутових залежностей ДП розсіяння електронів на атомі Mg, у рамках єдиного підходу BSR [17], виходячи з єдиної теоретичної концепції. Порівняння кутових залежностей наших диференціальних BSR37-перерізів, для пружного розсіяння з наявними експериментальними вимірюваннями [6], а також енергетичних залежностей наших ДП з експериментом [24] вказує, в загальному, на хороше узгодження результатів BSR37-розрахунку ДП з їх вимірними значеннями. У той же час, між енергетичними залежностями ДП, вимірними на експерименті [24] і розрахованими за допомогою двох *R*-матричних методів BSR37 і RM [24] спостерігаються певні відмінності, які вимагають проведення подальших теоретичних і емпіричних досліджень. Для ілюстрації можливостей 3D-аналізу, нами приведені також різні ракурси 3D-поверхні кутової і енергетичної залежності ДП пружного розсіяння $e+Mg$ в області енергій до 25 еВ. Проведено аналіз особливостей, спостережуваних на 3D-поверхні, в залежності від енергій і кутів розсіяння.

Література

1. Zatsarinny O., Bartschat K., Gedeon S., Gedeon V., Lazur V. and Nagy E. Cross sections for electron scattering from magnesium // Phys. Rev. A. – 2009. – V.79. – 052709 (10pp).
2. Гедеон В., Гедеон С., Зацарінний О., Лазур В., Нодь Є. Диференціальні перерізи розсіяння електронів на атомі магнію // Науковий вісник Ужгородського університету. Серія Фізика. 2008. – № 23. – С. 23-35.
3. Brown D.O, Cvejanovi'c 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.* – 2003. – V.36. – P. 3411–3423.
4. 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.* – 2005. – V.38. – P. 4123–4134.
 5. Filipovic D.M., Predojevic B., Pejcev V., Šević D., Marinkovic B.P., Rajesh Srivastava and Stauffer A.D. Electron scattering by magnesium: excitation of the $3s3p\ ^1P_1$ state // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* – 2006. – V.39. – P. 2583–2592.
 6. Predojevic B., Pejcev V., Filipovic D.M., Šević D. and Marinkovic B.P. Elastic electron scattering by a magnesium atom // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* – 2007. – V.40. – P. 1853–1861.
 7. Predojevic B., Pejcev V., Filipovic D.M., Šević D. and Marinkovic B.P. Electron scattering by magnesium: excitation of the $3s4s\ ^1S_0$, $3s3d\ ^1D_2$ and $3s4p\ ^1P_1$ states // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* – 2008. – V.41. – P. 015202 (10pp).
 8. Filipović D.M., Predojević B., Šević D., Pejčev V., Marinković B.P., Srivastava Rajesh, Stauffer A.D. Electron impact excitation of the $3s3p\ ^1P_1$ state of magnesium: Electron scattering at small angles // *Int. J. Mass Spectrom.* – 2006. – V.251. – P. 66-72.
 9. Williams W. and Trajmar S. Electron impact excitation of magnesium at 10, 20 and 40 eV impact energies // *J. Phys. B: Atom. Molec. Phys.* – 1978. – V.11. – P.2021-2029.
 10. Brunger M.J., Riley J.L., Scholten R.E. and Teubner P.J.O. Electron impact excitation of the 3^1P state in magnesium // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* – 1988. – V.21. – P. 1639-1648.
 11. Houghton R.K., Brunger M.J., Shent G., and Teubner P. J. O. Electron impact excitation of the 3^3P state in magnesium *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* – 1994. – V. 27. – P. 3573-3580.
 12. Mitroy J. and McCarthy I.E. Differential cross sections and Stokes parameters for electron-magnesium scattering // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* – 1989. – V.22. – P. 641-654.
 13. McCarthy I.E, Ratnavelu K., and Zhou Y. Coupled-channels optical calculation of electron-magnesium scattering // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* – 1989. – V.22. – P. 2597-2603.
 14. Srivastava R., McEachran R.P. and Stauffer A D. Excitation of the D states of magnesium // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* – 2001. – V.34. – P. 2071-2079.
 15. Fursa Dmitry V. and Bray Igor. Excitation of the 3^1P state of magnesium by electron impact from the ground state // *Phys. Rev. A.* – 2001. – V.63. – P. 032708 (9 pp).
 16. Sharma Lalita, Rajesh Srivastava, and Stauffer A.D. Electron excitation of the $3s4s\ ^1S_0$ and $3s4p\ ^1P_1$ states of magnesium // *Phys. Rev. A.* – 2008. – V.78. – P. 014701 (3 pp).
 17. Zatsarinny O. BSR: B-spline atomic R-matrix codes // *Comput. Phys. Commun.* – 2006. – V.174. – P. 273-356.
 18. Zatsarinny O., Bartschat K., Gedeon S., Gedeon V., Lazur V. Low-energy electron scattering from Ca atoms and photodetachment of Ca^- // *Phys. Rev. A.* – 2006. – V.74. – P. 052708 (10pp).
 19. Zatsarinny O., Bartschat K., Bandurina L., Gedeon S. Electron-impact excitation of calcium // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* – 2007. – V.40. – P. 4023-4031.
 20. Zatsarinny O., Bartschat K. Benchmark calculations for electron collisions with zinc atoms // *Phys. Rev. A.* – 2005 – V.71 – P. 022716 (8pp).
 21. Zatsarinny O., Bartschat K., Bandurina L., and Gedeon V. Electron-impact excitation of carbon // *Phys. Rev. A.* – 2005. – V.71. – P. 042702 (9pp).
 22. Gedeon V., Lengyel V., Zatsarinny O., and Kocher C.A. Electron-impact excitation of the *Mg* atom from the ground and metastable states: *R*-matrix calculation with pseudo-states. // *Phys. Rev. A.* – 1999. – V.59. – P. 2016-2029.
 23. Zatsarinnyi O.I., Bandurina L.A. and Gedeon V.F. Resonances in Electron-Impact Integral Excitation Cross Sections of the Magnesium Atom // *Opt. Spectrosc.* – 2003. – V.95. – P. 167-175 (in Russian).

24. Sullivan J.P., Burrow P.D., Newman D.S., Bartschat K., Michejda J.A., Panajotovic R., Moghbelalhossein M., McEachran R. P. and Buckman S.J. An experimental and theoretical study of transient negative ions in Mg, Zn, Cd and Hg // *New Journal of Physics*. – 2003. – V.5. – № 1. – P. 159.1–159.26.
25. Froese Fischer C. The MCHF atomic-structure package // *Comput. Phys. Commun.* – 1991. – V.64. – P. 369–398.
26. Froese Fischer C., Brage T., Jonsson O. *Computational Atomic Structure. An MCHF Approach* // London: Institute of Physics Publishing, Bristol, 1997. – 279 p.
27. Burke V.M. and Noble C.J. FARM: The atomic R-matrix program // *Comp. Phys. Commun.* – 1995. – V.85. – P. 471-500.
28. 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.

THE ENERGY AND ANGULAR DEPENDENCES OF DIFFERENTIAL CROSS SECTIONS OF ELECTRON-IMPACT SCATTERING ON MAGNESIUM

V.F. Gedeon

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

The angular and energy dependences of differential cross-sections (DCS) of elastic electron-impact scattering on magnesium atom in a 3^1S ground state are submitted. The DCS calculations are carried out by the *B*-spline *R*-matrix method. The close-coupling expansion includes 37 bound states of neutral magnesium. The comparison of the calculated angular dependences of DCS of elastic e^+Mg collisions with available experiment is carried out at impact energies 10, 15, 20, 40, 60, and 80 eV. The energy dependences these DCS in the energies field from 2 up to 5 eV at fixed angle values 24° , 54° , 90° , and 120° also were compared to experiment. The miscellaneous camera angles of 3D-surface of DCS dependences from scattering angles and incident electron energies are added. The good agreement of calculated DCS with available experimental data is obtained.

ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ И УГЛОВЫЕ ЗАВИСИМОСТИ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОГО СЕЧЕНИЯ УПРУГОГО РАССЕЯНИЯ ЭЛЕКТРОНОВ НА АТОМЕ МАГНИЯ

В.Ф. Гедеон

Ужгородский национальный университет, ул. Волошина, 54, 88000 Ужгород, Украина

Представлены угловые и энергетические зависимости дифференциальных сечений (ДС) упругого рассеяния электронов на атоме магния в основном состоянии 3^1S . Расчеты ДС выполнены с помощью метода *R*-матрицы с *B*-сплайнами. Разложение сильной связи включало 37 связанных состояний атома магния. Осуществлено сравнение рассчитанных угловых зависимостей ДС упругого столкновения e^+Mg с имеющимся экспериментом при энергиях столкновения 10, 15, 20, 40, 60 и 80 эВ. Сравнены с экспериментом также энергетические зависимости этих ДС в области энергий от 2 до 5 эВ при фиксированных значениях углов 24° , 54° , 90° и 120° . Приведены разные ракурсы 3D-поверхности зависимостей ДС от углов рассеяния и энергий налетающего электрона. Получено хорошее согласие рассчитанных ДС с имеющимся экспериментом.