

ОСОБЛИВОСТІ ПЕРЕРІЗІВ РОЗСІЯННЯ ЕЛЕКТРОНІВ НА АТОМІ ВУГЛЕЦЮ

Л.О. Бандурин¹, В.Ф. Гедеон²

¹ІЕФ НАН України, вул. Університетська, 21, 88000, Ужгород

²Ужгородський національний університет, вул. Волошина, 54, 88000, Ужгород

Методом R -матриці з B -сплайнами здійснено розрахунки інтегральних перерізів розсіяння електронів на атомі вуглецю в основному $2p^2\ ^3P$ і метастабільних $2p^2\ ^1D$ та 1S -станах для енергій від порогу реакції до 65 еВ. Розклад сильного зв'язку включав 28 зв'язаних станів атома вуглецю. Представлено перерізи пружного розсіяння, сумарні перерізи збудження та відповідні повні перерізи розсіяння електронів на вуглеці у вказаних станах. Проведено порівняння розрахованих нами перерізів з іншими теоретичними даними.

Ключові слова: електрон-атомні зіткнення, атом вуглецю, збудження з основного і метастабільних станів, метод R -матриці з B -сплайнами, переріз пружного розсіяння, повний переріз.

Вступ

Вуглець належить до найбільш поширених елементів у природі. Він входить до складу багатьох матеріалів, що використовуються в установках по вивченню плазми, де його основна функція полягає в захисті внутрішніх поверхонь від ерозії. При проектуванні і побудові нового покоління установок по утриманню плазми конструкторам необхідні відомості щодо точних значень перерізів розсіяння електронів на вуглеці як в основному, так і в збуджених станах. Проте їх вимірювання є складною технічною задачею і на сьогоднішній день експериментальні дані з перерізів процесу $e + C$ відсутні. Теоретичне дослідження характеристик розсіяння електронів на атомі з двома валентними p -електронами, яким є вуглець, теж являє собою непросту фізичну і обчислювальну проблему. З відносно нових теоретичних розрахунків розсіяння $e + C$, що наявні в літературі, варто відзначити тільки роботи Zatsarinny *et al.* [1] та Dunseath *et al.* [2], виконані в різних версіях R -матричного наближення.

У роботі [1] нами, разом зі співавторами, були представлені перерізи та швидкості збудження вуглецю із основного і метастабільних станів, розраховані методом R -матриці з B -сплайнами (B -spline R -matrix method – BSR) [3], з використан-

ням набагато більш прецизійних хвильових функцій мішені у порівнянні з [2]. Розклад сильного зв'язку каналів [1] включав 28 зв'язаних станів атома вуглецю. Розширений варіант [4] теоретичних даних [2], люб'язно наданий нам авторами, був використаний для порівняльного аналізу результатів двох R -матричних розрахунків [1] та [2] у нашій попередній роботі [5]. В останній, зокрема, були представлені результати теоретичних розрахунків перерізів збудження атома вуглецю електронним ударом із основного $2p^2\ ^3P$ і метастабільних $2p^2\ ^1D$, 1S -станів майже у всі вище розташовані стани, які включені у R -матричний розклад наближення BSR28, розглянутого нами в [1]. Наведено також перерізи найбільш важливих переходів при збудженні зі стану $2s2p^3\ ^5S^o$. Порівняння отриманих BSR28-перерізів з аналогічними даними Dunseath *et al.* [4] показало, що окрім помітних розбіжностей у величині більшості розглянутих перерізів збудження, зумовлених різними способами опису атома-мішені, має місце також і достатньо хороше узгодження їх якісної поведінки, у тому числі резонансних порогових структур.

У даній роботі ми представляємо результати BSR28-розрахунків щодо структури повних і пружних інтегральних перерізів (ІІ) розсіяння $e + C$, а також

сумарних III збудження з основного та двох нижчих збуджених станів атома вуглецю.

Методика розрахунків

Детальний опис використаних нами методів розрахунку структури мішені атома вуглецю і процесу розсіяння $e + C$ був наведений у роботі [1] і тому тут повторюватися не буде. Загальні властивості методу R -матриці з B -сплайнами та особливості його реалізації в програмному пакеті BSR достатньо повно розкриті в роботі [3]. Застосований нами в [1] розклад сильного зв'язку каналів включав 28 спектроскопічних станів атома вуглецю, утворених із конфігурацій $1s^2 2s^2 2p^2$, $1s^2 2s^2 2p 3l$ ($l=1,2,3$), $1s^2 2s^2 2p 4s$, $1s^2 2s 2p^3$ і $1s^2 2p^4$, та доповнений вісьмома псевдостанами, для повного врахування поляризації основного стану атома вуглецю електроном, що налітає. Використання в пакеті BSR неортогональних орбіталей дозволило досягати високої точності розрахунків розсіяння з відносно компактними конфігураційними розкладами, що є суттєвою перевагою при наявності достатньо скромних обчислювальних ресурсів.

Розраховані нами значення енергій станів атома вуглецю, включених у розклад сильного зв'язку, та схема їх розташування наведені в [1], табл. 1, та [5], рис. 1. Згідно даних NIST [6], енергії збудження для трьох розглянутих початкових станів мішені складають: 1) основний стан $2p^2 \ ^3P$ – 0.0 eV; 2) метастабільні стани $2p^2 \ ^1D$ – 1.260 eV та 3) $2p^2 \ ^1S$ – 2.680 eV. Для маркування певного стану ми використовуємо, крім спектроскопічних позначень, його порядковий номер по шкалі енергій. Перерізи обчислювалися за стандартною R -матричною схемою, з використанням для зовнішньої області пакету FARM [7].

Результати

На рис. 1 представлені розраховані нами енергетичні залежності перерізів пружного (elastic) розсіяння σ_{el} електронів на вуглеці в основному $2p^2 \ ^3P$ та метаста-

більних $2p^2 \ ^1D$ і 1S -станах атома вуглецю: переходи (1 – 1), (2 – 2), (3 – 3), відповідно. На рисунку добре видно резонансний пік у пружному перерізі для основного стану $2p^2 \ ^3P$ при енергії 0.585 eV, який відповідає шейп-резонансу в $^2P^o$ -хвилі. Резонансні піки в перерізах пружного розсіяння на вуглеці в основному (1 – 1) і, особливо, в метастабільному $2p^2 \ ^1S$ стані (3 – 3) при енергії ~ 7.109 eV відповідають феш-бахівському резонансу, також відміченому у $^2P^o$ -хвилі. Дуже вузький резонанс при 7.446 eV спостерігається в перерізі пружного розсіяння (1 – 1) у $^4D^e$ -хвилі.

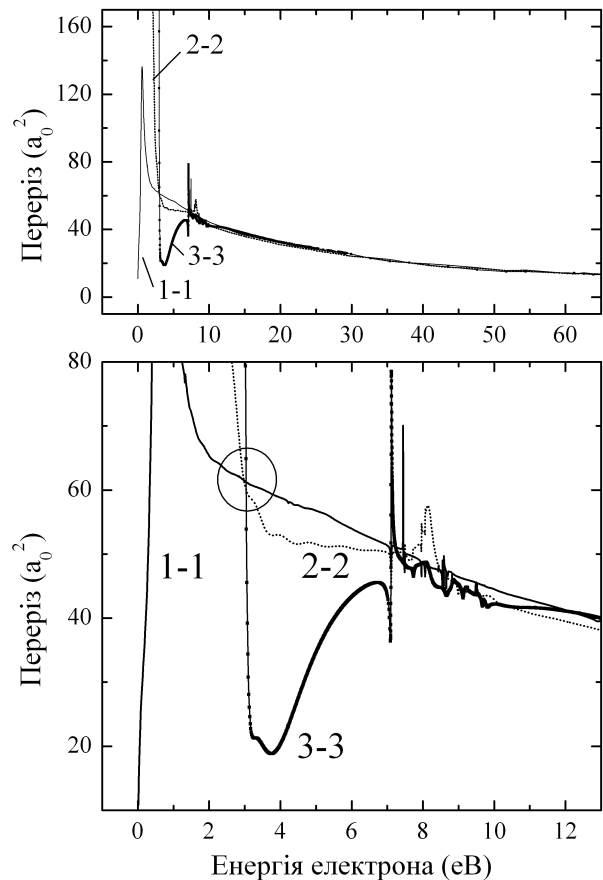


Рис. 1. Залежності перерізів пружного розсіяння від енергії електрона, що налітає, для основного $2p^2 \ ^3P$ і метастабільних $2p^2 \ ^1D$ та 1S -станів вуглецю;

■ — окремі розраховані точки кривої пружного розсіяння (3 – 3).

Крім резонансних особливостей перерізів пружного розсіяння σ_{el} , варто відзначити ще одну властивість цих перерізів, яка, на наш погляд, є фізично навіть більш цікавою і значимою. Мова йде про майже повну тотожність значень перерізів пружного розсіяння σ_{el} електронів на вуглеці в різних початкових станах $2p^2 \ ^3P$, 1D та 1S

при енергіях вище ~ 9 eV (перерізи σ_{el} для перших двох станів практично співпадають вже при енергіях порядку 3 eV). Подібне може свідчити про повне „нерозрізнення” налітаючим електроном основного і двох нижчих метастабільних станів атома-мішені при таких енергіях. З іншого боку, глибокий провал у перерізі пружного розсіяння (3 – 3) при енергії електрона $\sim 3-5$ eV міг би слугувати ідентифікаційною ознакою наявності в експериментальній суміші атомів вуглецю у початковому стані $2p^2\ ^1S$. Як ще одну особливість, відмітимо взаємний перетин перерізів пружного розсіяння електронів на вуглечі в різних початкових станах $2p^2\ ^3P$, 1D та 1S поблизу точки ~ 3.04 eV (рис. 1b, область, обведена кружечком), де відповідні σ_{el} дуже близькі або співпадають: 61.22, 59.85 і 61.22 од. a_0^2 .

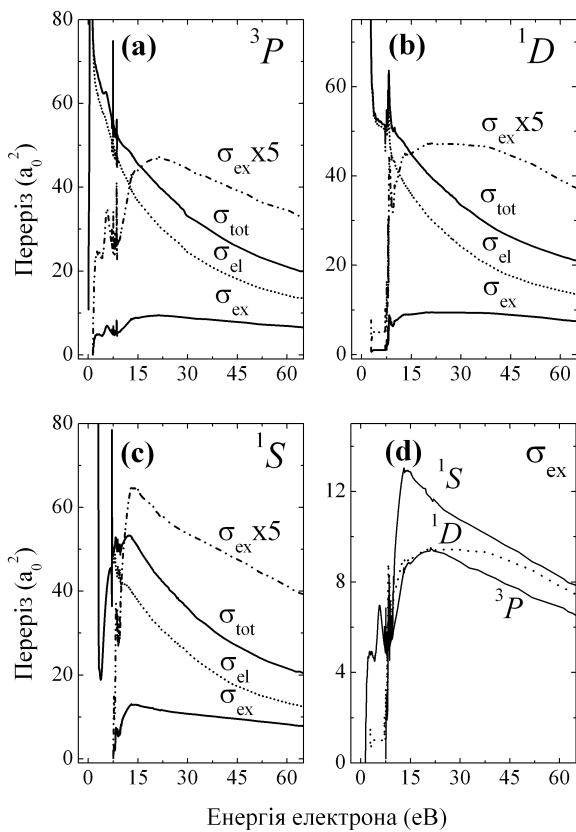


Рис. 2. (а-с) Залежності пружного σ_{el} та повного σ_{tot} інтегральних перерізів розсіяння $e + C$, а також сумарних ІП збудження σ_{ex} від енергії для основного $2p^2\ ^3P$ і метастабільних $2p^2\ ^1D$, 1S – станів вуглецю. (d) Порівняння сумарних перерізів збудження σ_{ex} з різних початкових станів $2p^2\ ^3P$, 1D та 1S вуглецю.

На рис. 2 приведено порівняння розрахованих нами ІП пружного розсіяння σ_{el} , повних (total) ІП розсіяння σ_{tot} та сумарних ІП збудження (excitation) σ_{ex} для основного стану $2p^2\ ^3P$ (рис. 2a) і метастабільних $2p^2\ ^1D$ і 1S – станів (рис. 2 b,c), відповідно. Повний переріз розсіяння визначався як $\sigma_{tot} = \sigma_{el} + \sigma_{ex}$, сумарні перерізи збудження $\sigma_{ex} = \sum_i (\sigma_{ex})_i$ – шляхом сумування перерізів $(\sigma_{ex})_i$ кожного окремого i -го переходу між заданим початковим і кінцевим станами; останні пробігали всі фізичні стани, що включені в даний розклад сильного зв'язку і знаходяться вище заданого початкового стану. Так, для ІП збудження σ_{ex} із основного стану – $i = 1 \div 27$, для збудження з метастабільних $2p^2\ ^1D$, 1S – станів $i = 1 \div 26$ та $1 \div 25$,

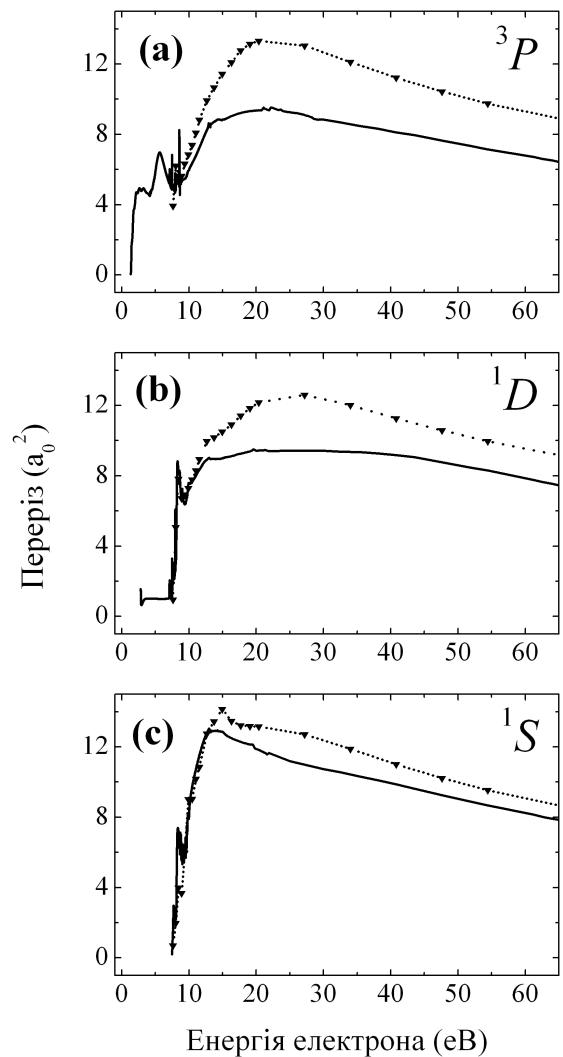


Рис. 3. Порівняння сумарних ІП збудження σ_{ex} із основного $2p^2\ ^3P$ і метастабільних $2p^2\ ^1D$, 1S – станів вуглецю: (—) – BSR28; (---) – розрахунок [4].

відповідно.

Із рис. 2a,b,c видно, що з ростом енергії відносна роль пружного розсіяння σ_{el} у повному перерізі розсіяння σ_{tot} зменшується, а відносна роль сумарного перерізу збудження σ_{ex} , навпаки, зростає для кожного із початкових станів $2p^2\ ^3P$, 1D та 1S . Порівняння між собою ІІ збудження σ_{ex} з цих початкових станів показано на рис. 2d. З рисунка можна зробити висновок, що з ростом енергії сумарні перерізи збудження σ_{ex} із трьох розглянутих початкових станів також проявляють тенденцію до зближення. Так, в діапазоні енергій 20÷60 еВ, максимальні відмінності між вказаними перерізами σ_{ex} складають не більше 15%. Враховуючи сказане вище про ІІ пружного розсіяння, можемо говорити про практичний збіг повних перерізів розсіяння σ_{tot} для різних початкових станів $2p^2\ ^3P$, 1D та 1S вуглецю при енергіях більше ~20 еВ, а, можливо, навіть 10 еВ. Це відкриває шлях до проведення експерименту з вимірювання повних перерізів розсіяння e+C без апелювання до труднощів приготування парів атомів вуглецю у певному початковому стані.

На рис. 3 проведено порівняння розрахованих нами сумарних BSR28-перерізів збудження σ_{ex} із різних початкових станів з такими ж результатами [4]. Найкраще узгодження перерізів σ_{ex} , розрахованих у двох різних R-матричних підходах, спостерігається для

початкового стану 1S , дещо гірше – для переходів зі станів 3P і 1D . Сумарні перерізи збудження σ_{ex} із різних початкових станів 3P , 1D , 1S , отримані нами на основі даних [4], практично співпадають при енергіях більших ~10-20 еВ, як і відповідні BSR28-перерізи.

Висновки

Нами представлені теоретичні розрахунки пружних σ_{el} та повних σ_{tot} ІІ розсіяння електронів на вуглеці в основному та двох нижчих метастабільних станах, а також відповідних сумарних ІІ збудження σ_{ex} у всі вище розташовані стани, які включені у R-матричний розклад. Для перерізів σ_{ex} проведено порівняння BSR28-результатів з аналогічними даними Dunseath *et al.* [4]. Аналіз особливостей перерізів σ_{el} , σ_{tot} та σ_{ex} для розсіяння електронів на вуглеці в різних початкових станах $2p^2\ ^3P$, 1D і 1S приводить до висновку про практичну ідентичність вказаних перерізів при енергіях вище 10-20 еВ. Це, на наш погляд, усуває деякі з труднощів, що перешкоджають експериментальній перевірці енергетичної залежності ІІ розсіяння e + C для відповідних енергій.

Автори висловлюють подяку д-ру Зацарінному О.І. та проф. Бартшату К. за наукову співпрацю, що сприяла появі даної роботи.

Література

1. Zatsarinny O., Bartschat K., Bandurina L., and Gedeon V. Electron-impact excitation of carbon // *Phys. Rev. A.* – 2005. – V. 71. – No 4. – P. 042702 (9pp.).
2. Dunseath K.M., Fon W.C., Burke V.M., Reid R.H.G., and Noble C.J. Electron-impact excitation of the $n \leq 4$ levels of carbon // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* – 1997. – V. 30. – No 2. – P. 277-287.
3. Zatsarinny O. BSR: B-spline atomic R-matrix codes // *Comput. Phys. Commun.* – 2006. – V. 174. – No 4. – P. 273-356.
4. Dunseath K.M., Fon W.C., Burke V.M., Reid R.H.G. and Noble C.J. // Reid R.H.G., private communications.
5. Бандурина Л.О., Гедеон В.Ф. Розрахунки перерізів розсіяння електронів на атомі вуглецю // Науковий вісник Ужгородського університету. Серія Фізика. – 2010. – Вип. 27 – С. 66-71.
6. NIST: <http://physics.nist.gov/cgi-bin/AtData>.
7. Burke V.M. and Noble C.J. FARM — A flexible asymptotic R-matrix package // *Comp. Phys. Commun.* – 1995. – V.85. – No 3. – P. 471–500.

THE FEATURES OF ELECTRON SCATTERING CROSS SECTIONS ON CARBON ATOM

L.O. Bandurina¹, V.F. Gedeon²

¹Institute of Electron Physics, 21 Universitetska Str., 88000, Uzhhorod

²Uzhhorod National University, 54 Voloshyna Str., 88000, Uzhhorod

The calculation of integral cross sections of electron scattering on neutral carbon in ground $2p^2\ ^3P$ and metastable $2p^2\ ^1D$ and 1S states is carried out with the B -spline R -matrix method for energy from reaction threshold to 65 eV. The close-coupling expansion includes 28 bound states of neutral carbon. The elastic scattering cross sections, the summary excitation cross sections and the corresponding total cross sections of electron scattering on neutral carbon in these states is presented. The comparison of the cross sections, calculated by us, with other theoretical data is carried out.

Key words: electron-atom collision, carbon atom, excitation with ground and metastable states, the B -spline R -matrix method, integral cross-sections, the elastic scattering cross-section, total cross-section.

ОСОБЕННОСТИ СЕЧЕНИЙ РАССЕЯНИЯ ЭЛЕКТРОНОВ НА АТОМЕ УГЛЕРОДА

Л.А. Бандурина¹, В.Ф. Гедеон²

¹ИЭФ НАН Украины, ул. Университетская, 21, 88000, Ужгород

²Ужгородский национальный университет, ул. Волошина, 54, 88000, Ужгород

Методом R -матрицы с B -сплайнами осуществлены расчеты интегральных сечений рассеяния электронов на атоме углерода в основном $2p^2\ ^3P$ и метастабильных $2p^2\ ^1D$ и 1S -состояниях для энергий от порога реакции до 65 эВ. Разложение сильной связи включало 28 связанных состояний атома углерода. Представлены сечения упругого рассеяния, суммарные сечения возбуждения и соответствующие полные сечения рассеяния электронов на углероде в указанных состояниях. Проведено сравнение рассчитанных нами сечений с другими теоретическими данными.

Ключевые слова: электрон-атомные столкновения, атом углерода, возбуждения с основного и метастабильных состояний, метод R -матрицы с B -сплайнами, интегральные сечения, сечение упругого рассеяния, полное сечение.