

# ПЕРЕРІЗИ РОЗСІЯННЯ ЕЛЕКТРОНІВ НА АТОМІ Sr

Є.А. Нодь

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

Метод  $R$ -матриці з  $B$ -сплайнами використаний для розрахунків *ab initio* пружного і повного перерізів розсіяння електронів на атомі стронцію в області енергій до 10 еВ. Для точного представлення хвильових функцій мішені використовувався багатоконфігураційний метод Хартрі-Фока з неортогональними орбіталями. Розклад сильного зв'язку включав 31 зв'язані стани атома стронцію, від основного стану аж до стану  $5s4f^1F^o$ . Отримано хороше узгодження розрахованого повного перерізу з експериментальними даними.

## Вступ

Атом Sr, на відміну від інших лужноземельних елементів – Mg, Ca, Ba, є порівняно слабо вивченим. Вимірювання повного інтегрального перерізу (ІП) розсіяння електронів на атомі Sr, виконані Romanuk *et al.* [1] в інтервалі енергій від 0.1 до 10 еВ, є єдиним експериментальним дослідженням його енергетичної залежності і резонансної структури. Будь-які вимірювання диференціальних перерізів (ДП) розсіяння електронів на Sr наразі відсутні. Хіба що в роботі Казакова та ін. [2] представлена енергетична залежність струму пружного розсіяння електронів на кут  $90^\circ$ .

З теоретичних досліджень відзначимо розрахунки Фабриканта [3] у наближенні сильного зв'язку (close-coupling) двох каналів, 2CC, розрахунки Szmytkowski and Sienkiewicz [4] у наближенні релятивістських поляризованих орбіталей та Yuan *et al.* [5] у методі кореляційно-поляризаційного потенціалу, – всі вони стосувалися повних ІП при енергіях до 10 еВ. Релятивістські розрахунки Yuan and Zhang [6] та Yuan [7] є джерелом даних про ДП пружних зіткнень електронів із Sr при цих же енергіях.

У роботі Yuan [8], з використанням методів сильного зв'язку 11 станів та 21 станів у рамках  $R$ -матричної схеми, було здійснено дослідження резонансів і припорогових структур при взаємодії електронів з атомами Sr та Ba, відповідно. Представлено результати з розсіяння електронів низьких енергій на Sr та фоторозщеплення від'ємних іонів. Набір диференціальних і

повних (інтегральних) перерізів, перерізів переносу імпульсу та функцій Шермана для пружного розсіяння електронів на атомах Ba та Sr при енергіях нижче 1 кеВ представлено Adibzadeh and Theodosiou [9]. Розрахунки виконані у відносно простому напівемпіричному наближенні з одним підгоночним параметром.

Недавно Felfli *et al.* [10] у рамках методу полюсів Редже здійснили розрахунки енергій спорідненості для атомів Ca, Sr та Се і представили ряд результатів з характеристик розсіяння для вказаних атомів. Так, для атома Sr приведена енергетична залежність інтегрального та парціальних перерізів пружного розсіяння в ультрахолодній області енергій до 0.25 еВ з вузьким резонансним піком при 0.054 еВ.

Зі сказаного вище ясно, що детальні розрахунки характеристик розсіяння (ІП та ДП, ефективних сил зіткнення, параметрів Стокса і т.д.) для всього спектру елементарних переходів у атомі Sr під дією електронного удару є актуальними. Вибір і тестування методів для здійснення вказаної програми є ціллю даної роботи.

У рамках комплексного дослідження лужноземельних атомів нещодавно нами, разом зі співавторами, були здійснені детальні розрахунки ІП та ДП зіткнення електронів з Mg [11-12]. Розрахунки розсіяння були виконані у  $R$ -матричному наближенні з  $B$ -сплайнами –  $B$ -spline  $R$ -matrix (BSR) [13]. Для розрахунків структури мішені використовувався як пакет BSR [13] – наближення BSR37 у роботі [11], так і пакет MCHF [14-15] – наближення MCHF-BSR29

у роботі [12]. Порівняння з наявним експериментом (див. детальніше [11-12]) показало на хорошу точність обох використуваних нами наближень. Це підтверджують і більш ранні розрахунки методом BSR розсіяння e+C [16] та e+Ca [17-19].

У даній роботі нами представлені перерізи повного та пружного розсіяння електронів на атомі Sr, розраховані в наближенні MCHF-BSR31.

### Методи розрахунку

Ми застосовуємо до розрахунку лужноземельного атома Sr методику, апробовану на атомних системах Mg [11-12] та Ca [17-19]. Як і у роботі [19] для атома Ca та у роботі [12] для атома Mg, у даному дослідженні розрахунки структури мішені Sr здійснені за допомогою пакету MCHF [14, 15]. Загальна теорія BSR-розрахунків розсіяння та опис комп'ютерних програм пакету BSR наведені в [13]. Особливості застосування методу MCHF-BSR до розрахунку атомів Ca та Mg, багато в чому подібних по будові до Sr, викладені, відповідно, у недавніх роботах [19] та [12].

Даний розклад сильного зв'язку включає 31 нижні спектроскопічні стани Sr, аж до стану  $5s4f\ ^1F^o$ . Розмір  $a$  „боксу”  $R$ -матриці приймався рівним  $a = 80 a_0$  (де  $a_0=0.529 \times 10^{-10}$  м, – борівський радіус). Збереження суттєвих каналів у розкладі сильного зв'язку дозволило нам додатково врахувати частину валентної кореляції, у той час як корвалентна кореляція була включена шляхом використання багатоконфігураційного розкладу для станів мішені Sr у виді

$$\phi(4p^6 nl n'l') = a_{nl} \phi_{HF}(4p^6 nl n'l') + \sum_{\bar{n}\bar{l}\bar{l}'} b_{\bar{n}\bar{l}\bar{l}'} \chi(4p^5 5s \bar{n}\bar{l} \bar{n}'\bar{l}'), \quad (1)$$

де хартрі-фоківські хвильові функції  $\phi_{HF}(4p^6 nl n'l')$  були покращені кореляційними функціями  $\chi$  при  $4p$ -збудженому корі. Кореляційні орбіталі  $\bar{n}\bar{l}$  були оптимізовані для кожного стану окремо.

У дані розрахунки ми включили 119  $V$ -сплайнів порядку 8. У кінцевому розкладі станів мішені ми зберігали тільки конфі-

гурації з коефіцієнтами розкладу більшими за 0.004, і отримані розклади містять від 50 до 270 конфігурацій для кожного стану.

Таблиця 1  
Енергії збудження (в eВ) для 31 нижніх спектроскопічних станів мішені Sr. Теоретичні значення  $E_{\text{theor}}$  порівняні з даними Moore [20]\*). Тут  $\Delta E = E_{\text{Moore}} - E_{\text{theor}}$

№	Стан	$E_{\text{Moore}}$ [20]	$E_{\text{theor}}$	$\Delta E$
1	$5s^2\ ^1S$	0.0	0.0	0.0
2	$5s5p\ ^3P^o$	1.8231	1.8471	-0.0240
3	$5s4d\ ^3D$	2.2635	2.2723	-0.0089
4	$5s4d\ ^1D$	2.4986	2.4797	0.0188
5	$5s5p\ ^1P^o$	2.6906	2.6731	0.0175
6	$5s6s\ ^3S$	3.6008	3.6325	-0.0316
7	$5s6s\ ^1S$	3.7934	3.7142	0.0791
8	$4d5p\ ^3F^o$	4.1731	4.1109	0.0622
9	$4d5p\ ^1D^o$	4.1945	4.1961	-0.0015
10	$5s6p\ ^3P^o$	4.2067	4.2218	-0.0151
11	$5s6p\ ^1P^o$	4.2282	4.2411	-0.0129
12	$5s5d\ ^1D$	4.3062	4.3107	-0.0045
13	$5s5d\ ^3D$	4.3437	4.3613	-0.0176
14	$5p^2\ ^3P$	4.4057	4.4076	-0.0019
15	$4d5p\ ^3D^o$	4.5187	4.5680	-0.0493
16	$5p^2\ ^1D$	4.5831	4.4989	0.0843
17	$5p^2\ ^1S$	4.6079	4.5897	0.0182
18	$4d5p\ ^3P^o$	4.6277	4.7673	-0.1395
19	$5s7s\ ^3S$	4.6407	4.5786	0.0621
20	$4d5p\ ^1F^o$	4.7130	4.9440	-0.2310
21	$5s7s\ ^1S$	4.7671	4.9537	-0.1866
22	$5s4f\ ^3F^o$	4.8054	4.7335	0.0719
23	$5s7p\ ^1P^o$	4.8245	4.8095	0.0149
24	$5s7p\ ^3P^o$	4.8908	4.8853	0.0055
25	$5s4f\ ^1F^o$	4.9028	4.7540	0.1488
26	$5s6d\ ^3D$	4.9223	4.8845	0.0377
27	$5s6d\ ^1D$	4.9269	4.8591	0.0679
28	$5s8s\ ^3S$	5.0544	5.0080	0.0464
29	$5s8s\ ^1S$	5.0905	5.2155	-0.1249
30	$5s4f\ ^3F^o$	5.1294	5.0492	0.0802
31	$5s4f\ ^1F^o$	5.1483	5.1402	0.0082

\*) енергії триплетів усереднені по терму

Стани мішені, включені в дані розрахунки розсіяння, наведені в табл.1, де розраховані енергії збудження порівняні з експериментальними значеннями [20]. Узгодження з експериментом є достатньо хорошим, з похибками, в цілому, меншими за 0.1-0.2 eВ (а подекуди й 0.01 eВ), за винятком стану  $4d5p\ ^1F^o$  (див. табл. 1).

Розрахунки  $(N+1)$ -електронної задачі розсіяння e+Sr у внутрішній області ( $r \leq a$ )

подібні до виконаних нами для Mg [11-12]. Як і при розрахунку структури, ми використали 119 *B*-сплайнів порядку 8, з *R*-матричним радіусом  $a=80 a_0$ . Парціально-хвильові вклади розраховувалися до  $L=50$ . Перерізи обчислювалися за стандартною *R*-матричною схемою, з використанням для зовнішньої області пакету *FARM* [21].

### Результати і обговорення

На рис. 1 зображені повні і пружні  $\Pi$  розсіяння  $e+\text{Sr}$ . Поряд з оригінальними  $\Pi$  [1], представлені калібровані (зі зсувом вправо на 0.98 eV) та нормовані (фактором 1.2) нами інтегральні перерізи, рис. 1а. Калібрування та нормування проводилися з метою якнайкращого візуального узгодження виміряних в [1] і розрахованих нами перерізів. Зокрема, – максимально точного збігу малих піків у  $\Pi$  вище порогу збудження стану  $5^3P^0$ . На рис. 1а показані також 2СС-перерізи Фабриканта [3] та дані наближення релятивістських поляризованих орбіталей Szmytkowski and Sienkiewicz [4], які майже не відтворюють резонансну структуру  $\Pi$  в області енергій до 2.5 eV.

На рис. 1b представлені калібровані нами дані [1], без нормування. Наші перерізи MCHF-BSR31 порівнюються з RM11-перерізами Yuan [8], які практично збігаються з нашими даними вище  $\sim 3$  eV. Що стосується приведеного у роботі Felfli *et al.* [10] резонансного піку в  $\Pi$  пружного розсіяння при енергії 0.054 eV, то ця структура нами не підтверджується. Навпаки, висновок Yuan [8] щодо обумовленості піку в околі 0.8 eV резонансом форми  $^2D$  і наявності меншого піку вище порогу збудження  $5^3P^0$  узгоджується з нашими даними.

На рис. 2 та 3 приведені кутові залежності ДП пружного розсіяння  $e+\text{Sr}$  для енергій 0.05, 0.1, 1.0, 1.6, 2, 3, 5 та 10 eV. Дані MCHF-BSR31 порівняні з даними Yuan and Zhang [6], Yuan [7] і Adibzadeh and Theodosiou [9]. Наші ДП якісно узгоджуються з даними [6-7] для всіх енергій, крім 0.05 eV, однак дещо відрізняються по величині. Перерізи, отримані в [6-7] при енергії 0.05 eV, мають два локальні мінімуми, що напевно чи вірно для таких малих енергій. Результати Yuan [7] у наближенні Дірака-

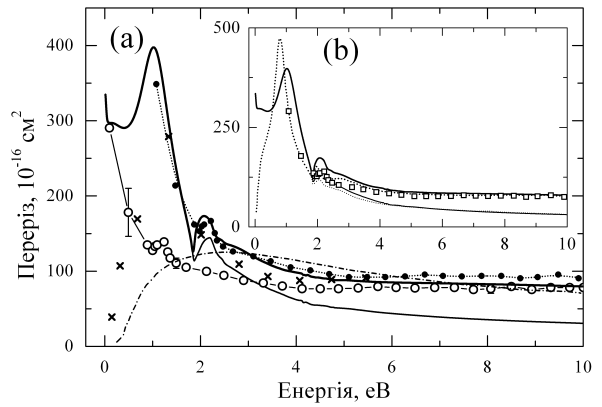


Рис. 1. Повний і пружний перерізи розсіяння електронів на атомі Sr в області енергій до 10 eV. Вікно (а): (—○—) –експеримент Romanuyk *et al.* [1]; (—●—) –експеримент [1], дані калібровані зі зсувом вправо на 0.98 eV та нормовані фактором 1.2; даний розрахунок: (—) – MCHF-BSR31, повний переріз; (—) – MCHF-BSR31, пружний переріз; інші розрахунки: (×) – 2СС, Фабрикант [3]; (—·—·—) – Szmytkowski and Sienkiewicz [4]. Вікно (b): (□) –експеримент [1], дані калібровані зі зсувом вправо на 0.98 eV, без нормування; даний розрахунок – як у вікні (а); інші розрахунки: (—●—) – RM11, Yuan [8], повний переріз; (—·—·—) – RM11, [8], пружний переріз.

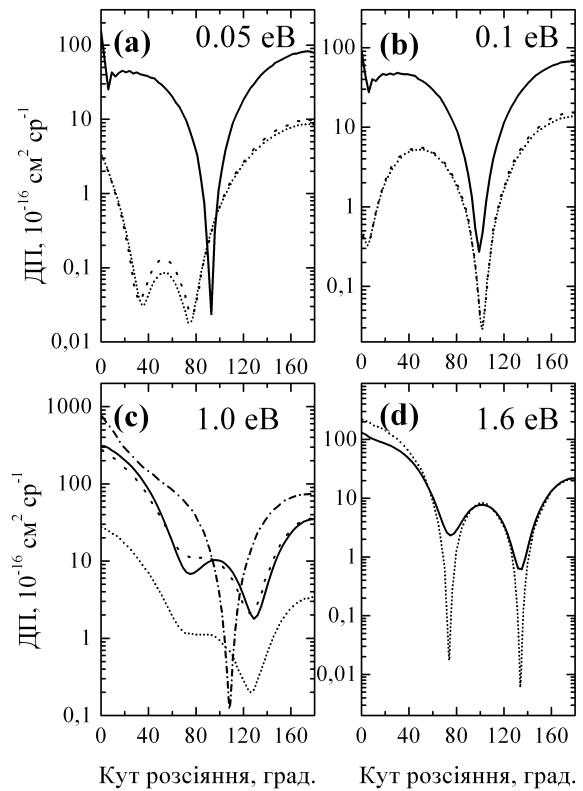


Рис. 2. Диференціальні перерізи пружного розсіяння  $e+\text{Sr}$ . (—) – MCHF-BSR31, даний розрахунок; (—·—·—) – RM11, Yuan and Zhang [6]; (—·—·—) – Dirac-Fock, Yuan [7]; (—·—·—) – Adibzadeh and Theodosiou [9].

## Висновки

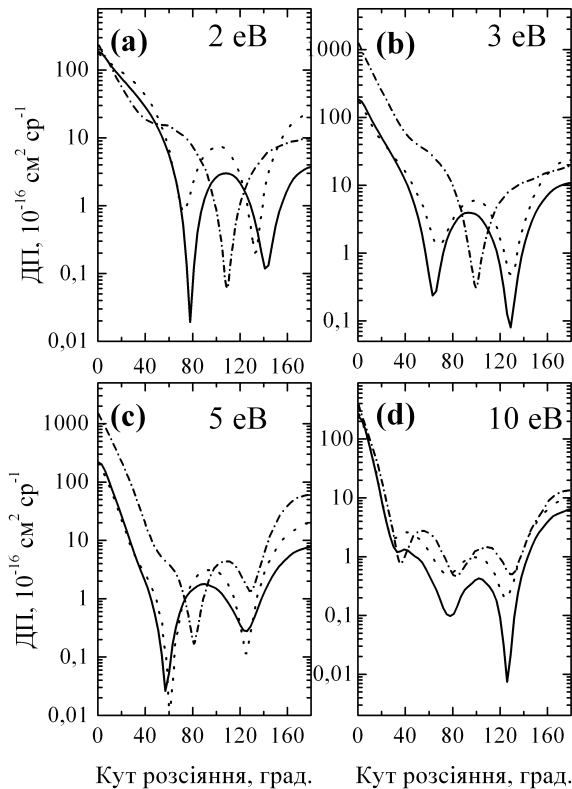


Рис. 3. Диференціальні перерізи пружного розсіяння  $e+\text{Sr}$ . (—) – MCHF-BSR31, даний розрахунок; (- - -) – Dirac-Fock, Yuan [7]; (- · - · -) – Adibzadeh M. and Theodosiou [9].

Фока, за винятком енергій 0.05 і 0.1 еВ, близькі до даних MCHF-BSR31. Кутова залежність напівемпіричних ДП [9] для енергії 1.0 еВ якісно відрізняється від обох  $R$ -матричних результатів та даних [7]. З ростом енергії результати [9] дещо зближуються з нашими даними, рис. 3.

## Література

1. Romanyuk N.I., Shpenik O.B., 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. – Iss. 7. – P. 472–475.
2. Казаков С.М., Романюк Н.И., Христофоров О.В., Шпенник О.Б. Резонансные явления, наблюдаемые при взаимодействии медленных электронов с атомами стронция // *Опт. и спектр.* – 1985. – Т. 59, вып.1. – С. 38–43.
3. Фабрикант И.И. Столкновение медленных электронов с атомами щелочноземельных элементов // В сб. «Атомные процессы», редактор Петеркоп Р.К. – Рига: Зинатне, 1975. – С. 80–123.
4. Szmytkowski R. and Sienkiewicz J.E. Elastic scattering of electrons by strontium and barium atoms // *Phys. Rev. A.* – 1994. – V.50. – No 5. – P. 4007–4012.
5. Yuan J., Zhang Zh., and Wan H. Elastic scattering of low-energy electrons with Sr atoms // *Phys. Rev. A.* – 1990. – V.41. – No 9. – P. 4732–4739.
6. Yuan J. and Zhang Z. Enhanced spin polarization of elastic electron scattering from alkaline-earth-metal atoms in Ramsauer-Townsend and low-lying shape

Ми представили ІІ та ДП зіткнення електронів з атомом Sr при енергіях до 10 еВ, розраховані методом  $R$ -матриці з  $V$ -сплайнами [13]. Структура мішені розраховувалася за допомогою пакету MCHF [14-15] у рамках методики, апробованої на атомах Ca [19] та Mg [12]. У розкладі сильного зв'язку враховувалися 31 нижні стани атома Sr. Нами підтверджено висновок Yuan [8] стосовно необхідності калібрування даних експерименту [1] зі зсувом вверх по енергії на 0.98 еВ (у Yuan [8] – на 0.84 еВ) та обумовленості піку в околі 0.8 еВ резонансом форми  $^2D$  і наявності меншого піку в околі енергії  $\sim 2.1$  еВ, – трохи вище порогу збудження  $5^3P^o$ . Спрощені наближення [3, 4] не відтворюють резонансної структури ІІ у цій області енергій.

Нами представлені також кутові залежності ДП пружного розсіяння  $e+\text{Sr}$  при енергіях 0.05, 0.1, 1.0, 1.6, 2, 3, 5 та 10 еВ. Результати порівняні з розрахунками [6-7] та [9], очевидна необхідність проведення відповідних експериментів.

Автор висловлює подяку своєму науковому керівнику Гедеону В.Ф., д-ру Зацарінному О.І. та проф. Лазуру В.Ю. за допомогу у проведенні досліджень, що привели до появи даної роботи.

- resonance regions // Phys. Rev. A. – 1993. – V.48. – No 3. – P. 2018–2023.
7. Yuan J. Intra-atomic relativistic effects on the spin polarization in low-energy electron scattering from Ca, Sr, Ba, and Yb atoms // Phys. Rev. A. – 1995. – V.52. – No 6. – P. 4647–4655.
  8. Yuan J. The resonance structures of electron interaction with Sr and Ba atoms: low-energy electron scattering and photodetachment of the negative ions // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. – 2003. – V.36. – No 10. – P. 2053–2071.
  9. Adibzadeh M. and Theodosiou C.E. Elastic electron scattering from Ba and Sr // Phys. Rev. A. – 2004. – V.70. – No 5. – P. 052704 (11 pp).
  10. Felfli Z., Msezane A.Z and Sokolovski D. Simple method for electron affinity determination: results for Ca, Sr and Ce // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. – 2008. – V.41. – No 4. – P. 041001 (6pp).
  11. 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. – No 5. – P. 052709 (10pp).
  12. Гедеон В., Гедеон С., Зацарінний О., Лазур В., Нодь Є. Диференціальні перерізи розсіяння електронів на атомі магнію // Наук. вісник Ужгородського ун-ту. Серія Фізика. – 2008. – № 23. – С. 23–35.
  13. Zatsarinny O. BSR: B-spline atomic R-matrix codes // Comput. Phys. Commun. – 2006. – V.174. – No 4. – P. 273–356.
  14. Froese Fischer C. The MCHF atomic-structure package // Comput. Phys. Commun. – 1991. – V.64. – No 3. – P. 369–398.
  15. Froese Fischer C., Brage T., Jonsson O. Computational Atomic Structure. An MCHF Approach // London: Institute of Physics Publishing. – Bristol. – 1997. – 279 p.
  16. 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).
  17. Zatsarinny O., Bartschat K., Gedeon S., Gedeon V., Lazur V. Low-energy electron scattering from Ca atoms and photodetachment of  $\text{Ca}^-$  // Phys. Rev. A. – 2006. – No 5. – V.74. – P. 052708 (10pp).
  18. Zatsarinny O., Bartschat K., Bandurina L., Gedeon S. Electron-impact excitation of calcium // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. – 2007. – V.40. – No 20. – P. 4023–4031.
  19. Гедеон С., Лазур В. Розрахунки перерізів розсіяння електронів на атомі Ca // Наук. вісник Ужгородського ун-ту. Серія Фізика. – 2009. – №25. – С. 130–140.
  20. Moore C.E. Atomic Energy Levels as Derived from the Analysis of Optical Spectra // in Natl. Stand. Ref. Data 35, Vol III (Reprint of NBS Circ. 467, Vol. III, 1958), 245 pp. (Nat. Bur. Stand., U.S., 1971).
  21. Burke V.M. and Noble C.J. FARM: The atomic R-matrix program // Comp. Phys. Commun. – 1995. – V.85. – No 3. – P. 471–500.

## THE CROSS SECTIONS OF ELECTRON-IMPACT SCATTERING ON Sr

**E.A. Nagy**

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

The B-spline R-matrix method is used to *ab initio* calculations of elastic and total electron scattering cross sections from neutral strontium in energy range up to 10 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 31 bound states of neutral strontium, covering all states from the ground state to  $5s4f^1F^o$ . The present calculations of total cross sections yield good agreement with the experimental data.

# СЕЧЕНИЯ РАССЕЯНИЯ ЭЛЕКТРОНОВ НА АТОМЕ Sr

**Е.А. Нодь**

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

Метод  $R$ -матрицы с  $B$ -сплайнами использован для расчетов *ab initio* упругого и полного сечений рассеяния электронов на атоме стронция в области энергий до 10 эВ. Для точного представления волновых функций мишени использовался многоконфигурационный метод Хартри-Фока с неортогональными орбиталями. Разложение сильной связи включало 31 связанные состояния атома стронция, от основного состояния и до состояния  $5s4f\ ^1F^o$ . Получено хорошее согласие рассчитанного полного сечения с имеющимися экспериментальными данными.