

ДИФЕРЕНЦІАЛЬНІ ПЕРЕРІЗИ РОЗСІЯННЯ ЕЛЕКТРОНІВ НА АТОМІ МАГНІЮ

В. Гедеон¹, С. Гедеон¹, О. Зацарінний², В. Лазур¹, Є. Нодь¹

¹ Ужгородський національний університет,
вул. Волошина, 54, 88000, Ужгород

² Університет Дрейка, Де-Мойн, Айова, 50311, США

Метод R -матриці з B -сплайнами використаний для розрахунків *ab initio* диференціальних перерізів розсіяння електронів на атомі магнію. Розглянуто процеси пружного розсіяння електронів на атомі Mg в основному стані 3^1S та процеси збудження спектроскопічних станів 3^1P^o , 3^3P^o , 4^1S , 3^1D та 4^1P^o магнію при енергіях 10, 15, 20, 40, 60 та 80 еВ. Для точного представлення хвильових функцій мішені використовувався багатоконфігураційний метод Хартрі-Фока з неортогональними орбіталами. Розклад сильного зв'язку включав 29 зв'язаних станів атома магнію, від основного стану аж до стану $3p^2\ ^3P$. Отримано хороше узгодження розрахованих диференціальних перерізів з існуючими експериментальними даними.

Вступ

В останній час появилось кілька експериментальних робіт [1-5], в яких представлені результати вимірювань диференціальних перерізів (ДП) розсіяння електронів на атомі магнію. Поряд з більш ранніми роботами [6-7] вони дають хорошу можливість для перевірки різних теоретичних моделей розрахунку кутових залежностей ДП процесів зіткнення $e+Mg$. Зокрема, в роботі [1] було експериментально досліджено збудження електронним ударом стану 3^1P атома Mg при 40 еВ з використанням методу кореляції поляризованих фотонів з розсіяними електронами в діапазоні кутів розсіяння від 10° до 120° , поряд з вимірюваннями параметрів Стокса. У роботі представлено відносні ДП для пружного розсіяння а також для збудження станів 3^1P та 3^3P при кутах розсіяння від 10° до 140° . Аналогічні до проведених в [1] вимірювання параметрів Стокса та відносних ДП, тільки вже при 20 еВ, представлені в роботі [2]. Тут же приведені результати відповідних розрахунків ДП, виконані у наближенні збіжного сильного зв'язку – convergent close-coupling (CCC) – та методу R -матриці з псевдостанами – R -matrix with pseudostates methods (RMPS). В роботі [3] були виміряні ДП збудження електронним

ударом стану 3^1P атома Mg при енергії налітаючого електрона $E_0 = 10, 15, 20, 40, 60, 80$ та 100 еВ, а також виконані відповідні розрахунки у наближенні релятивістських спотворених хвиль – relativistic distorted-wave (RDW) approximation. Інтенсивності розсіяних електронів були виміряні в широкому діапазоні кутів розсіяння (10° – 150°) і нормовані на експериментальні ДП, отримані у [8] при 10° . Абсолютні ДП, але вже для пружного розсіяння електронів на атомі Mg, були експериментально виміряні в [4]. Енергії, при яких знімалися експериментальні ДП, діапазон кутів вимірювання та спосіб нормування в [4] є аналогічними до використаних у [3]. Абсолютні ДП були екстрапольовані до 0 та 180° , а також були визначені інтегровані перерізи. В роботі [5], згідно методики робіт [3, 4], були виміряні абсолютні ДП збудження електронним ударом станів атома Mg $3s4s\ ^1S_0$, $3s3d\ ^1D_2$ та $3s4p\ ^1P_1$ і визначені відповідні інтегровані (інтегральний Q_T , передачі імпульсу Q_M та в'язкості Q_V) перерізи при енергіях налітаючого електрона 10, 20, 40 та 60 еВ. Абсолютні ДП визначалися з відношення інтенсивностей збудження непружних станів $3s4s\ ^1S_0$, $3s3d\ ^1D_2$ і $3s4p\ ^1P_1$ до інтенсивності резонансного стану $3s3p\ ^1P_1$, з урахуванням при цьому абсолютних ДП

для резонансного стану, виміряних у роботі [3]. Як і в попередній роботі [4], абсолютні ДП були екстрапольовані до 0 та 180° і порівняні з наявними експериментальними та теоретичними даними.

Щодо теоретичних розрахунків ДП атома Mg, то, не маючи змоги охопити весь спектр наявних результатів, зупинимося тільки на кількох останніх роботах, які мають безпосереднє відношення до предмету нашого розгляду. Так, у роботі [9] у наближенні сильного зв'язку п'яти каналів – close-coupling (CC5) approximation, розраховані ДП та інтегровані перерізи пружного розсіяння електронів на магнії, а також перерізи збудження електронним ударом Mg з основного стану $3s^2\ ^1S_1$ у стани та $3s3p\ ^1P_1$, $3s4s\ ^1S_0$, $3s3d\ ^1D_2$ та $3s4p\ ^1P_1$ при енергіях налітаючого електрона $E_0 = 10, 20, 40$ та 100 еВ. У подібному ж наближенні сильного зв'язку, тільки вже для шести каналів (CC6), а також методом оптичного сильного зв'язку (OCC6) у роботі [10] були розраховані ДП та інтегровані перерізи Q_1 пружного розсіяння при $E_0=10, 20$ та 40 еВ.

Метод RDW був використаний у роботі [11] для розрахунку ДП збудження станів $3^{1,3}D$ та $4^{1,3}D$ при енергіях налітаючого електрона 20 і 40 еВ. Результати розрахунків прецизійним методом CCC оптичних функцій збудження з основного стану 3^1S магнію резонансного стану 3^1P для енергій налітаючого електрона від порога до 1000 еВ представлені у роботі [12]. Отримано хороше узгодження з відповідними експериментальними функціями збудження стану 3^1P і поляризацією випромінювання $3^1P - 3^1S$. У той же час відмічалися суттєві розходження між даними CCC і наявним на той час експериментом [6, 7] для ДП, що були порашовані і виміряні при енергіях $10, 20$ та 40 еВ.

В роботі [2], як вказувалося вище, крім експериментальних ДП, були представлені ДП пружного розсіяння електронів на Mg, а також ДП збудження двох нижніх станів $3s3p\ ^{1,3}P_1$ при енергії 20 еВ, розраховані у наближеннях CCC та RMPS. Зовсім

недавно в статті [13] методом RDW були розраховані ДП збудження станів магнію $3s4s\ ^1S_0$ та $3s4p\ ^1P_1$ при енергіях налітаючого електрона $E_0 = 10, 20, 40$ та 60 еВ.

Попри велику кількість теоретичних розрахунків ДП зіткнення електронів з атомом магнію, у жодному з них не вдалося досягти повного узгодження кутових залежностей ДП з наявним експериментом у всьому діапазоні кутів розсіяння (від 0 до 180°), енергій зіткнення ($E_0 = 10, 15, 20, 40, 60, 80$ та 100 еВ) та досліджуваних процесів (пружне розсіяння, збудження з основного стану $3s^2\ ^1S_1$ у стани та $3s3p\ ^{1,3}P_1$, $3s4s\ ^1S_0$, $3s3d\ ^1D_2$ та $3s4p\ ^1P_1$). Для деяких переходів (при певних енергіях) наразі повністю відсутні будь-які теоретичні дані. Тому незалежні розрахунки ДП представляють незмінний інтерес.

У свій час, у роботах [14, 15], нами були представлені результати детальних розрахунків інтегральних перерізів атома магнію, здійснених у наближеннях RMPS19 [14] та RMPS25 [15]. Завдяки створенню пакету BSR для розрахунків структури мішені та характеристик електрон-атомного розсіяння у R -матричному наближенні з B -сплайнами – B -spline R -matrix (close-coupling) method (BSR) [16], значно розширилися „програмна” база для проведення ефективних комп'ютерних досліджень процесів зіткнення електронів на атомах.

Можливості пакету BSR були апробовані нами при дослідженні різноманітних елементарних процесів, що супроводжують зіткнення електронів з атомами, зокрема, у роботі [17], де були представлені результати розрахунків інтегральних характеристик розсіяння $e+S$. Нещодавно у подібному ж R -матричному наближенні з B -сплайнами і неортогональними орбіталями нами виконані комплексні розрахунки процесу розсіяння $e+Ca$ [18, 19]. При цьому за допомогою BSR-пакету [16] і сумісних з ним доповнювальних програм розраховувалися як структура самої мішені, так і різноманітні характеристики розсіяння електронів на атомі кальцію у широкому

діапазоні енергій. Зокрема були пораховані енергії та хвильові функції 39 нижніх спектроскопічних станів мішені, аж до стану $3p^6 4s 8s^1 S$, сили осциляторів, ефективні сили зіткнення, інтегральні та диференціальні перерізи для переходів з основного і чотирьох нижніх збуджених станів у всі вище розміщені стани, включені в розклад сильного зв'язку, параметри Стокса, перерізи фоторозщеплення від'ємних іонів Ca^- тощо. По суті вперше у рамках єдиного розрахунку вдалося отримати хороше узгодження з наявним експериментом для всієї сукупності розглянутих процесів. Лужноземельний атом магнію передеує в Періодичній системі елементів лужноземельному атому кальцію. Тому представляє інтерес перенесення апробованої згаданої вище методики на розрахунок атомної системи з багато в чому подібною до Ca електронною структурою для в'яснення ролі кулонівських, кореляційних, порогових і т.д. ефектів. У даній роботі ми представляємо результати розрахунку диференціальних перерізів розсіяння електронів на атомі Mg для згаданих вище переходів, виконаного в одному з варіантів R -матричного наближення з V -сплайнами.

Методи розрахунку

На відміну від робіт [17-19], розрахунки структури атома Mg здійснені нами не за допомогою програм пакету BSR [16], а з використанням пакету MCHF [20, 21]. Подібні багатоконфігураційні хартрі-фоківські – multiconfiguration Hartree-Fock (MCHF) – обчислення мішені розглядаються нами в якості першого кроку до повномасштабних розрахунків за допомогою пакету BSR як самої мішені атома Mg , так і подальших BSR-розрахунків власне розсіяння $e+Mg$. Загальна теорія BSR-розрахунків розсіяння та опис комп'ютерних програм пакету BSR, використаних нами, наведені в [16]. Тут ми тільки фіксуємо модель обчислення атомної структури і зроблені в даній роботі припущення щодо кореляційної взаємодії електронів у атомі магнію. Даний розклад сильного зв'язку включав 28 нижніх

спектроскопічних станів нейтрального магнію, аж до стану $2p^6 3p^2^3 P$ і, додатково, автоіонізаційний стан $2p^6 3p^2^1 S$, який, згідно даних NIST [22], сильно корельований з основним станом магнію $2p^6 3s^2^1 S$.

А. Розрахунки структури

Магній з його конфігурацією основного стану $[1s^2 \dots 2p^6](3s^2)^1 S$ та збудженими станами $[1s^2 \dots 2p^6](3s nl, 3d nl, 3p nl)^{3,1} L$ може розглядатися у вигляді системи двох електронів над дворазово іонізованим кором $[1s^2 \dots 2p^6]$. Для основного стану і для низько розміщених збуджених станів Mg важливими є як валентна, так і кор-валентна кореляція. Широко використовуваний метод включення кор-валентної кореляції базується на застосуванні напівемпіричного кор-поляризаційного потенціалу. Хоча такий потенціал значно спрощує розрахунки і може забезпечувати точні енергії збудження і сили осциляторів, завжди залишається питання, наскільки добре модельний потенціал може відтворювати всю кор-валентну кореляцію, включаючи недипольні вклади. Тому в даному наближенні ми прагнули включити кор-валентну кореляцію *ab initio* шляхом добавлення конфігурацій мішені зі збудженим кором. Зазвичай прямі багатоконфігураційні хартрі-фоківські розрахунки структури мішені ведуть до дуже великих розкладів, які навряд чи можуть бути використаними в наступних розрахунках розсіяння. З цієї причини, для генерування станів мішені у роботах [17-19] ми використовували V -сплайновий, бокс-обмежений, метод сильного зв'язку [23]. Проте, у даному випадку ми вважали за можливе використати стандартні MCHF-розрахунки станів мішені (з подальшим їх розкладом по V -сплайновому базису), застосувавши у розкладі сильного зв'язку процедуру обрізання коефіцієнтів, менших за 0.004.

Зокрема, розрахунок станів мішені включав наступні кроки. Ми починали генерування орбіталей кора з хартрі-фоківського розрахунку для Mg^{2+} , а потім

отримували валентні орбіталі $3s$, $3p$, $3d$ і т.д., аж до $5g$, від розрахунку із замороженим кором для Mg. Далі, у багатоконфігураційних розрахунках, ми моделювали валентну кореляцію шляхом добавлення конфігурацій $2p^6 3s \bar{n}l$, де риска позначає радше кореляційну, ніж фізичну орбіталь. Кор-валентна кореляція була врахована шляхом включення станів зі збудженим кором $2p^5 3s \bar{n}l \bar{n}'l'$. Потім ці багатоконфігураційні хартрі-фоківські функції були розкладені на V -сплайновому базисі і відповідні рівняння були розв'язані з урахуванням умови перетворення хвильових функцій в нуль на границі. Ця схема дає набір ортогональних одно-електронних орбіталей для кожного зв'язаного стану, але орбіталі різних наборів є не завжди ортогональними одні до одних. Ця процедура часто згадується як „використання неортогональних орбіталей” і ми будемо використовувати її в такому виді і нижче. Валентно і кор-валентно корельовані вказаним способом і розкладені на V -сплайновому базисі стани Mg були використані в якості станів мішені у V -сплайнових розрахунках розсіяння.

У даних розрахунках розмір a „боксу” R -матриці приймався рівним $a = 98 a_0$ (де $a_0 = 0.529 \times 10^{-10}$ м, – борівський радіус). В результаті ми отримали хороший опис для всіх низько розміщених станів Mg аж до $2p^6 3p^2 {}^3P$. Збереження суттєвих каналів у розкладі сильного зв'язку дозволило нам додатково врахувати частину валентної кореляції, у той час як кор-валентна кореляція була включена шляхом використання багатоконфігураційного розкладу для станів мішені Mg у виді

$$\phi(2p^6 nl n'l') = a_{nl} \phi_{HF}(2p^6 nl n'l') + \sum_{\bar{n}\bar{n}'l'} b_{\bar{n}\bar{n}'l'} \chi(2p^5 3s \bar{n}l \bar{n}'l'), \quad (1)$$

де хартрі-фоківські хвильові функції $\phi_{HF}(2p^6 nl n'l')$ були покращені кореляційними функціями χ при $2p$ -збудженому корі. Кореляційні орбіталі $\bar{n}l$ були оптимізовані для кожного стану окремо.

У даній роботі всі стани мають той самий кор, а для всіх станів nl^2 з еквівалентними електронами ми викорис-

товували той самий багатоканальний розклад, що і для станів $3snl$. У дані розрахунки ми включили 130 V -сплайнів порядку 8. Оскільки описані вище багатоконфігураційні розрахунки зв'язаних станів у рамках сильного зв'язку створюють різні неортогональні набори орбіталей для кожного атомного стану, їхнє подальше використання є дещо ускладненим. З іншого боку, наші конфігураційні розклади для атомних станів містять від 22 до 190 конфігурацій для кожного стану і, таким чином, можуть бути використані для розрахунків розсіяння при наявності достатньо скромних обчислювальних ресурсів.

Таблиця 1

Енергії збудження E_{ex} (в eV) для 28 нижніх спектроскопічних станів та стану $3p^2 {}^1S$ мішені Mg. Теоретичні значення E_{ex_BSR29} порівняні з даними NIST *) [22]. Тут

$$\Delta E = E_{ex_BSR29} - E_{ex_NIST}$$

№	Стан	E_{exNIST} [22]	$E_{exBSR29}$	ΔE
1	$3s^2 {}^1S$	0.0000	0.0000	0.0000
2	$3s3p {}^3P^o$	2.7141	2.7061	-0.0080
3	$3s3p {}^1P^o$	4.3458	4.3544	0.0086
4	$3s4s {}^3S$	5.1078	5.2161	0.1082
5	$3s4s {}^1S$	5.3937	5.3894	-0.0044
6	$3s3d {}^1D$	5.7532	5.7768	0.0236
7	$3s4p {}^3P^o$	5.9324	5.9480	0.0157
8	$3s3d {}^3D$	5.9459	6.0269	0.0810
9	$3s4p {}^1P^o$	6.1182	6.1375	0.0193
10	$3s5s {}^3S$	6.4314	6.4584	0.0270
11	$3s5s {}^1S$	6.5161	6.5081	-0.0081
12	$3s4d {}^1D$	6.5879	6.6113	0.0234
13	$3s4d {}^3D$	6.7190	6.7315	0.0125
14	$3s5p {}^3P^o$	6.7263	6.7118	-0.0145
15	$3s4f {}^1F^o$	6.7790	6.7640	-0.0150
16	$3s4f {}^3F^o$	6.7791	6.7641	-0.0150
17	$3s5p {}^1P^o$	6.7827	6.7758	-0.0069
18	$3s6s {}^3S$	6.9297	6.9386	0.0089
19	$3s6s {}^1S$	6.9663	6.9521	-0.0142
20	$3s5d {}^1D$	6.9814	6.9990	0.0176
21	$3s5d {}^3D$	7.0632	7.0581	-0.0050
22	$3s6p {}^3P^o$	7.0694	7.0460	-0.0234
23	$3s5f {}^1F^o$	7.0924	7.0745	-0.0179
24	$3s5f {}^3F^o$	7.0924	7.0745	-0.0179
25	$3s6p {}^1P^o$	7.0938	7.0767	-0.0170
26	$3s5g {}^3G$	7.0997	7.0772	-0.0225
27	$3s5g {}^1G$	7.0997	7.0777	-0.0220
28	$3p^2 {}^3P$	7.1729	7.1526	-0.0204
29	$3p^2 {}^1S$	8.4650	8.7542	0.2892

*) енергії триплетів усереднені по терму

Стани мішені, включені в дані розрахунки розсіяння, наведені в табл.1, де ми також порівнюємо розраховані енергії збудження з експериментальними значеннями [22]. Загальне узгодження між

Таблиця 2

Сили осциляторів для переходів між станами мішені Mg (з представленням у виді довжин f_l і швидкостей f_v)

Перехід	BSR29		MCHF [24]		Експ. [25]
	f_l	f_v	f_l	f_v	
$(3s2)^1S$ - $(3s3p)^1P^0$	1.737	1.699	1.757	1.736	1.83(8) ^a , 1.83(18) ^b , 1.75(7) ^c , 1.80(5) ^d , 1.86(3) ^e , 1.66(16) ^f
$(3s2)^1S$ - $(3s4p)^1P^0$	0.113	0.112	0.117	0.114	0.19(2) ^a , 0.102(2) ^d , 0.18(4) ^e , 0.109(8) ^g
$(3s3p)^3P^0$	0.132	0.138			
$-(3s4s)^3S$					
$(3s3p)^3P^0$	0.016	0.016			
$-(3s5s)^3S$					
$(3s3p)^3P^0$	0.588	0.632			
$-(3s3d)^3D$					
$(3s3p)^3P^0$	0.150	0.161			
$-(3s4d)^3D$					
$(3s3p)^1P^0$	0.151	0.151	0.155	0.155	
$-(3s4s)^1S$					
$(3s3p)^1P^0$	0.006	0.005			
$-(3s5s)^1S$					
$(3s3p)^1P^0$	0.284	0.192	0.206	0.212	0.34(2) ^g
$-(3s3d)^1D$					
$(3s3p)^1P^0$	0.074	0.104			
$-(3s4d)^1D$					
$(3s4s)^3S$ - $(3s4p)^3P^0$	1.513	1.136			
$(3s4s)^1S$ - $(3s4p)^1P^0$	1.394	1.347	1.236	1.240	
$(3s3d)^1D$ - $(3s4p)^1P^0$	0.145	0.098	0.137	0.140	
$(3s4p)^3P^0$	0.057	0.122			
$-(3s3d)^3D$					
$(3s4p)^3P^0$	0.247	0.251			
$-(3s5s)^3S$					
$(3s4p)^3P^0$	0.531	0.588			
$-(3s4d)^3D$					
$(3s4p)^1P^0$	0.290	0.318			
$-(3s5s)^1S$					
$(3s4p)^1P^0$	1.008	1.029			
$-(3s4d)^1D$					

^a [25(a)]; ^b [25(b)]; ^c [25(c)]; ^d [25(d)]; ^e [25(e)]; ^f [25(f)]; ^g [25(g)]. В останній колонці в дужках вказані експериментальні похибки.

експериментом і теорією є достатньо хорошим, з похибками по енергії, в цілому, меншими за 0.1 еВ (а подекуди й 0.01 еВ), за винятком одного з нижчих станів $3s4s^3S$ та верхнього автоіонізаційного стану $2p^63p^2^1S$ (див. табл. 1). Тут кореляційні поправки виявляються надзвичайно важливими.

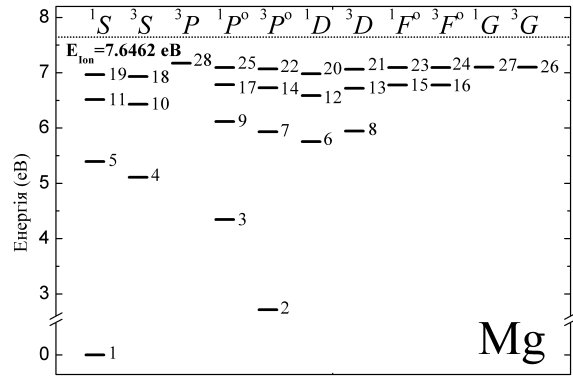


Рис. 1. Схема розміщення 28 нижніх енергетичних рівнів атома Mg. Нумерація станів дана згідно позначень табл. 1.

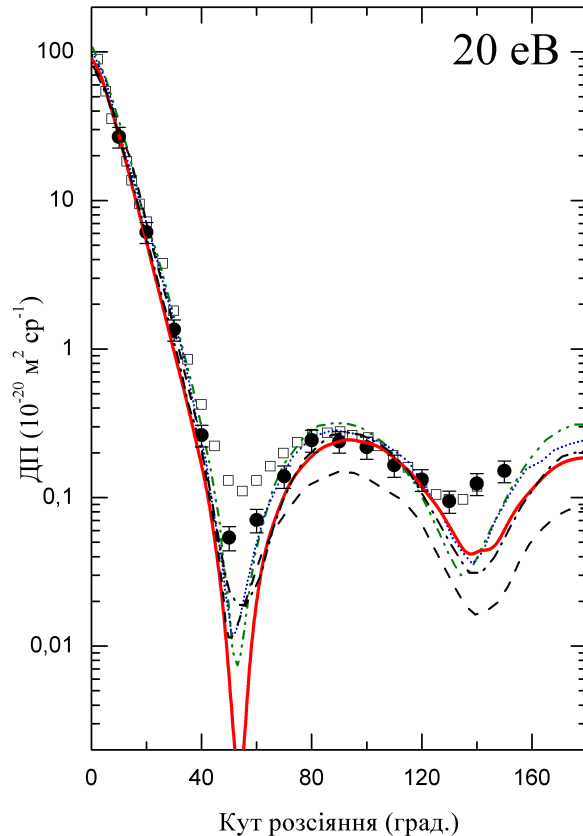


Рис. 2. Кутові залежності ДП пружного розсіяння $3s^2^1S - 3s^2^1S$ при значеннях енергії 20 еВ: (●) експеримент [4]; □ експеримент [2]; (—) BSR29, даний розрахунок; (·····) CCC, [2]; (-----) RMPS, [2]; (- · - · -) CC5, [9]; (- - - -) CC6, [10].

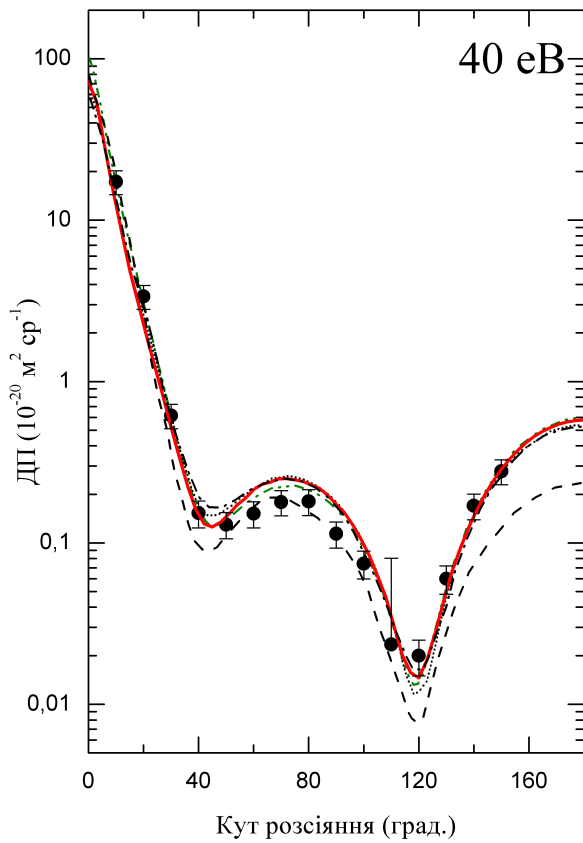


Рис. 3. Те ж, що і на рис. 2, але при значеннях енергії 40 еВ: (●) експеримент [4]; □ експеримент [1]; (—) BSR29, даний розрахунок; (-·-·-·-) CCC, [12]; (- - - -) CC5, [9]; (· · · ·) CC6, [10].

Включення у розклад сильного зв'язку стану $2p^6 3p^2 \ ^1S$, достатньо відірваного від інших розглядуваних нами спектроскопічних станів Mg, обумовлювалося значним змішуванням цього стану з основним станом магнію $2p^6 3s^2 \ ^1S$ (див. [22]), і, відповідно, суттєвим впливом на енергетичний спектр станів із термом $\ ^1S$. Відзначимо, що певні проблеми з розрахунком стану $2p^6 3p^2 \ ^1S$ є, на наш погляд, одним з основних джерел можливих неточностей у описі процесу розсіяння електронів на атомі Mg.

Для наочності на рис. 1 наведена схема розміщення 28 нижніх енергетичних рівнів атома магнію. З вертикальних колонок видно, скільки станів для кожного з розглядуваних термів $\ ^{1,3}S$, $\ ^{1,3}P^0$, $\ ^3P$, $\ ^{1,3}D$, $\ ^{1,3}F^0$ та $\ ^{1,3}G$ було враховано нами у розкладі сильного зв'язку.

Інша оцінка якості нашого опису мішені може бути зроблена з аналізу розрахованих нами сил осциляторів. Порівняння останніх з наявними в

літературі даними розширених МСНФ-розрахунків [24] та експериментальними значеннями сил осциляторів [25] наведено в Табл. 2. З таблиці видно достатньо добре узгодження наших даних як з експериментальними силами осциляторів [25], так і прецизійними даними, отриманими у наближенні МСНФ [24]. Точні сили осциляторів є дуже важливими для отримання надійних абсолютних значень перерізів і швидкостей для дипольних переходів. Для низько-енергетичного розсіяння, що розглядається у даній статті, точні сили осциляторів є особливо важливими, оскільки це визначає, чи вірно ми враховуємо поляризацію мішені налітаючим електроном.

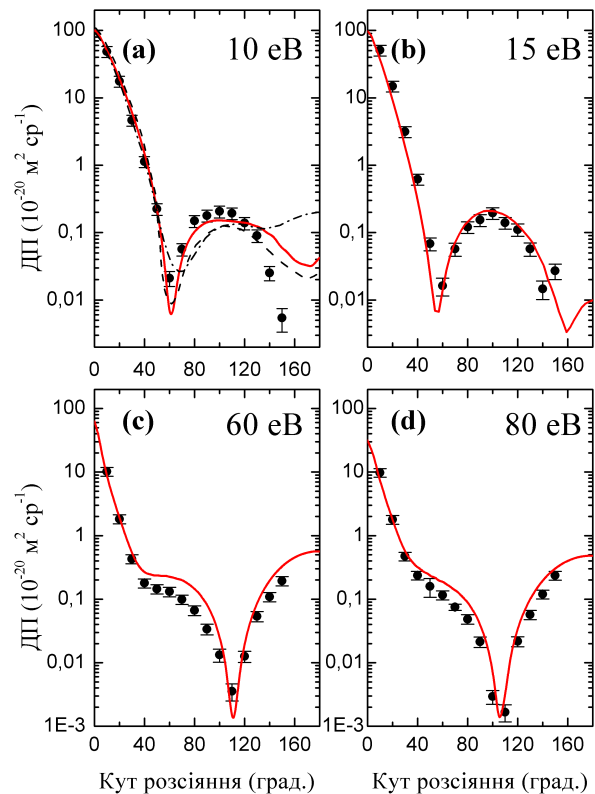


Рис. 4. Те ж, що і на рис. 2, але при значеннях енергій 10, 15, 60 та 80 еВ.

В. Розрахунки розсіяння

Для розрахунків розсіяння ми використовували пакет програм BSR [16] R -матричного методу з B -сплайнами. Особливості наближення BSR, зокрема щодо застосування до електронного

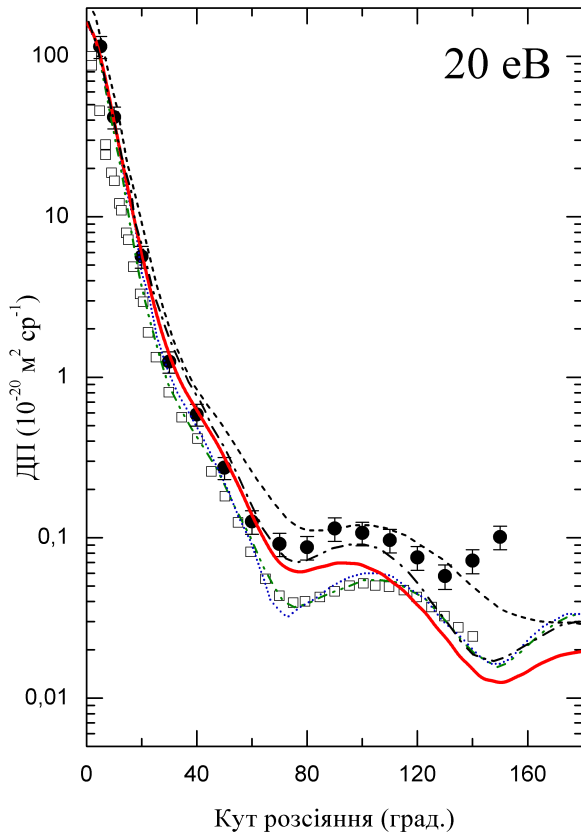


Рис. 5. Кутові залежності ДП переходу $3s^2 \ ^1S - 3s3p \ ^1P$ при значеннях енергії 20 еВ: (●) експеримент [3]; □ експеримент [2]; (—) BSR29, даний розрахунок; (---) CCC, [2]; (.....) RMPS, [2]; (- · - · -) CC5, [9]; (- - -) RDW, [3].

зіткнення, можуть бути встановлені з роботи [16] і посилань, наведених у ній. 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 вид:

$$\Psi_k^\Gamma(x_1, \dots, x_{N+1}) = A \sum_{ij} \bar{\Phi}_i^\Gamma(x_1, \dots, x_N; r_{N+1} \sigma_{N+1}) r_{N+1}^{-1} B_j(r_{N+1}) a_{ijk}^\Gamma \quad (2)$$

Тут $\bar{\Phi}_i^\Gamma$ – каналні функції, які сформовані шляхом зв'язку кутових і спінових координат r_{N+1} та σ_{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 Γ . Крім того, сплайни $B_j(r)$ представляють орбіталі континууму.

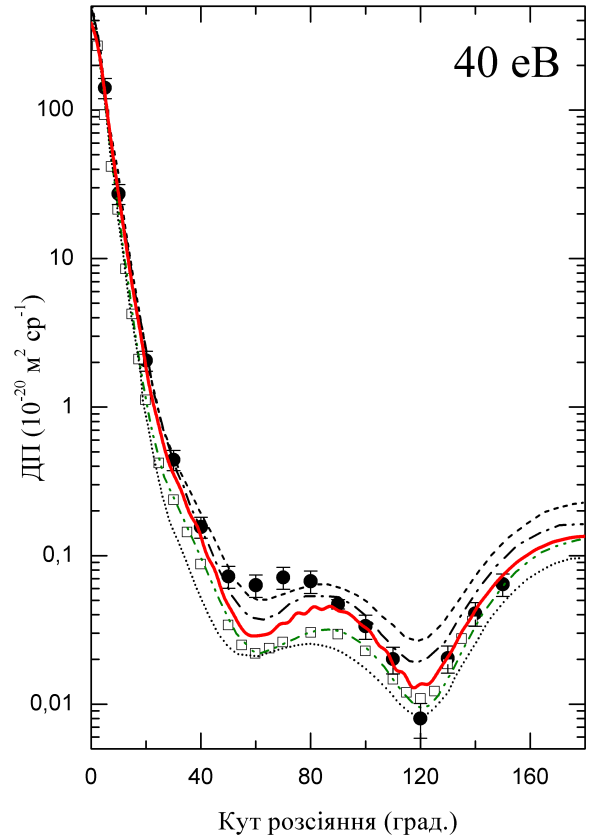


Рис. 6. Те ж, що і на рис. 5, але при значеннях енергії 40 еВ: (●) експеримент [3]; □ експеримент [1]; (—) BSR29, даний розрахунок; (---) CCC, [12]; (.....) RMPS, взято з роботи [1]; (- · - · -) CC5, [9]; (- - -) RDW, [3].

У розрахунках розсіяння, як і при розкладі по B -сплайнах зв'язаних станів мішені, ми використовували 130 B -сплайнів порядку 8, R -матричний радіус був рівним $a = 98 a_0$ (де a_0 – борівський радіус). Парціально-хвильові вклади чисельно розраховувалися аж до $L = 45$, при необхідності – до $L = 55$. Перерізи обчислювалися за стандартною R -матричною схемою, з використанням для зовнішньої області пакету *FARM* [26]. На відміну від робіт [17-19] у розрахунках розсіяння ми використовували не експериментальні енергії збудження мішені, а енергії, отримані в BSR29-розрахунках.

Результати і обговорення

ДП пружного розсіяння $3s^2 \ ^1S - 3s^2 \ ^1S$

На рисунках 2-4 представлені ДП пружного розсіяння електронів на Mg. Поряд з абсолютними експеримент-

тальними ДП [4], та відносними експериментальними ДП [1, 2] на рисунках відображені результати розрахунків ДП, виконаних у наближеннях збіжного сильного зв'язку та R -матричного наближення з псевдостанами [2, 12], методу сильного зв'язку п'яти [9] та шести [10] каналів, а також даного R -матричного з B -сплайнами розрахунку із врахуванням 29 спектроскопічних станів атома Mg у розкладі сильного зв'язку, BSR29.

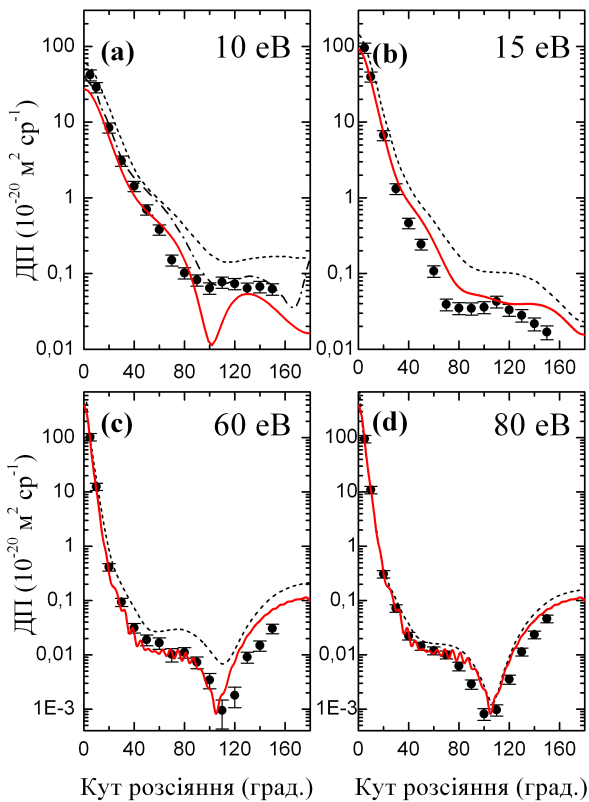


Рис. 7. Те ж, що і на рис. 5, але при значеннях енергій 10, 15, 60 та 80 еВ. (●) експеримент [3]; (—) BSR29, даний розрахунок; (- · - · -) CC5, [9]; (- - -) RDW, [3].

Зазначимо, що проведене в роботі [4] нормування відносних експериментальних перерізів [1, 2] на абсолютні перерізи [4] при 100° дало чудове узгодження між даними цих незалежних вимірювань при 20 та 40 еВ. Виняток складає поведінка кутових залежностей ДП при великих кутах розсіяння.

З рис. 2 та 3 видно, що результати BSR29-розрахунків при енергіях 20 та 40 еВ знаходяться на рівні прецизійних обчислень, виконаних методом CCC (див.

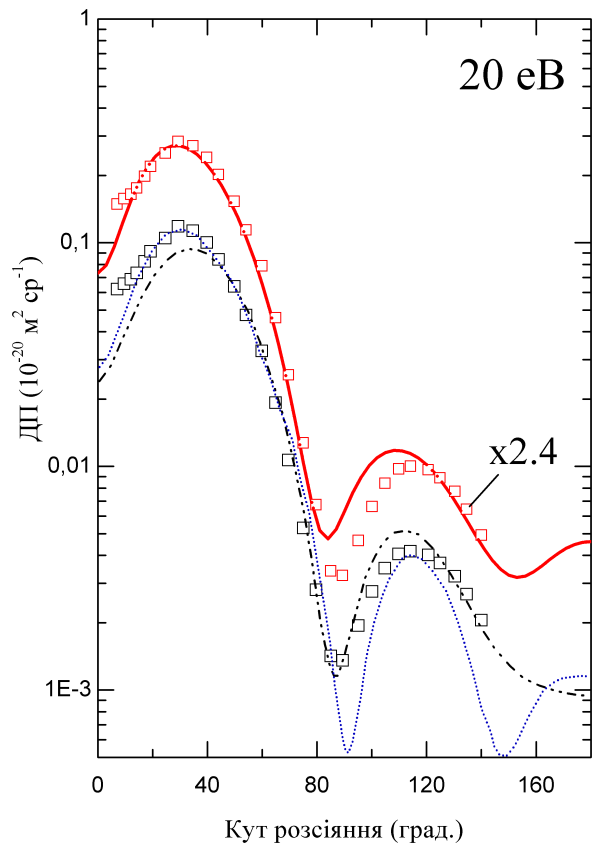


Рис. 8. Кутові залежності ДП переходу $3s^2 \ ^1S - 3s3p \ ^3P$ при значеннях енергії 20 еВ: □ експеримент [2]; (—) BSR29, даний розрахунок; (- · - · -) CCC, [2]; (.....) RMPS, [2]. Відносні експериментальні ДП [2] представлені як з оригінальним нормуванням на CCC-дані [2] (нижній набір квадратиків), так і з альтернативним нормуванням на результати BSR29 (верхній набір квадратиків), шляхом домноження на фактор 2.4.

[2]). Проте і ті, і другі у певних діапазонах кутів розсіяння допускають деякі відхилення від даних експерименту [4]. Що стосується наших результатів представлених рис. 4, то вони наразі є або кращими з наявних розрахункових даних – при 10 еВ, або взагалі єдиними теоретичними ДП – при 15, 60 та 80 еВ. Як видно з рис. 4, найкраще узгодження наших даних для даного переходу з експериментом [4] досягнуто при енергії 15 еВ.

ДП резонансного переходу $3s^2 \ ^1S - 3s3p \ ^1P$

На рис. 5-7 представлено порівняння результатів наших BSR29-розрахунків з даними експериментів [1-3] та теоретичними ДП, обчисленими у наближеннях збіжного сильного зв'язку та

R -матричного наближення з псевдо-станами [2, 12], сильного зв'язку п'яти каналів [9] і релятивістських спотворених хвиль [3, 11]. В загальному, при характеристиці результатів збудження резонансного стану $3s3p\ ^1P$ можна повторити ті ж висновки, що були зроблені вище при обговоренні ДП пружного розсіяння електронів на магнії.

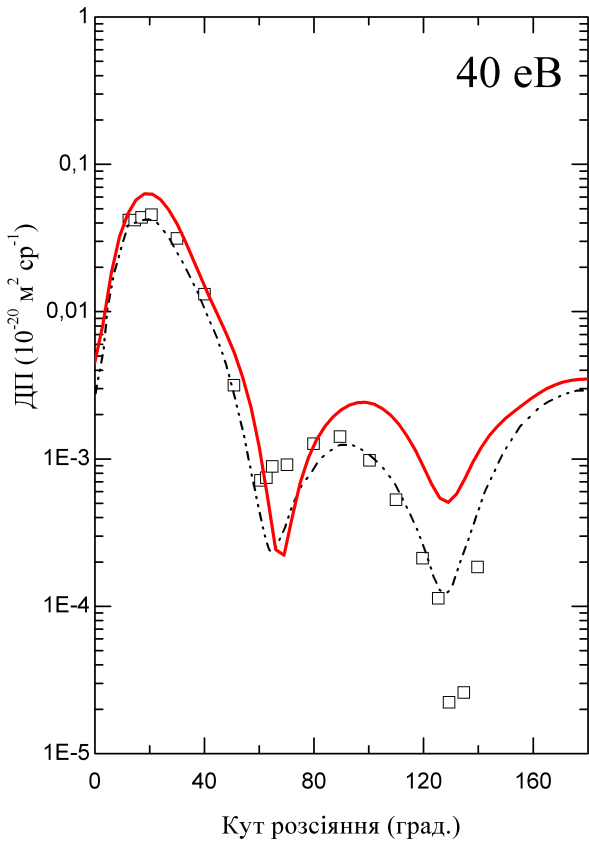


Рис. 9. Те ж, що і на рис. 8, але при значенні енергії 40 еВ: \square експеримент [1]; (—) BSR29, даний розрахунок; (---) CCC, [12]. У даному випадку перенормування експериментальних ДП не проводилося.

Як особливість розрахунку ДП для даного переходу, треба відмітити доволі повільну збіжність по парціальних хвилях. На рис. 6 і 7, тобто починаючи з енергії 40 еВ і вище, на графіках кутових залежностей ДП, розрахованих методом BSR29, помітна незначна хвилястість. Подібне є свідченням необхідності врахування додаткових парціальних хвиль L у розкладі сильного зв'язку, понад уже враховані $L=55$. Проте це потребує достатньо багато часу при наявній

комп'ютерній базі і наразі знаходиться за рамками наших обчислювальних можливостей. З іншого боку, в подібному "згладжуванні" розрахованих ДП і немає особливої потреби: на рис. 6 та 7 чітко видно загальну тенденцію поведінки наших ДП і хороше узгодження з експериментом [3] при енергіях 40, 60 та 80 еВ.

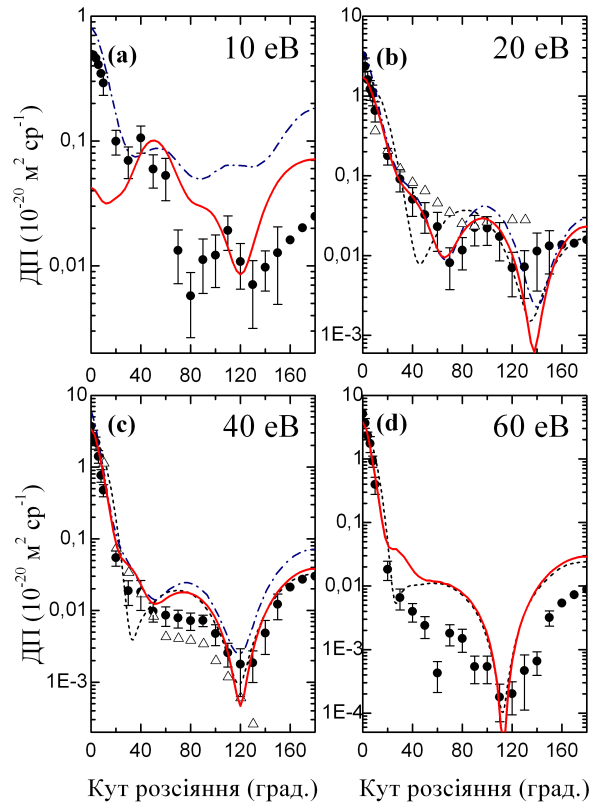


Рис. 10. Кутові залежності ДП переходу $3s^2\ ^1S - 3s4s\ ^1S$ при значеннях енергій 10, 20, 40 та 60 еВ: (●) експеримент [5]; Δ експеримент [6]; (—) BSR29, даний розрахунок; (-·-·-) CC5, [9]; (- - -) RDW, [13].

ДП переходу $3s^2\ ^1S - 3s3p\ ^3P$

На рис. 8-9 представлено порівняння наявних у літературі експериментальних та теоретичних ДП збудження стану 3^3P з результатами наших розрахунків. Диференціальні перерізи для цього переходу вимірювалися й розраховувалися дещо рідше, ніж ДП пружного розсіяння та збудження резонансного стану. Оскільки експериментальні ДП [2] є відносними, то вони нормувалися в [2] на розраховані тут же теоретичні дані з метою отримання найкращого візуального узгодження теорії

та експерименту. На рис. 8 нами запропоноване альтернативне нормування експериментальних ДП [2] при 20 еВ, що відрізняється від оригінального в 2.4 рази. Очевидно, встановлення істинного ходу кутових залежностей ДП для цього переходу потребує проведення додаткових вимірювань у абсолютній шкалі одиниць.

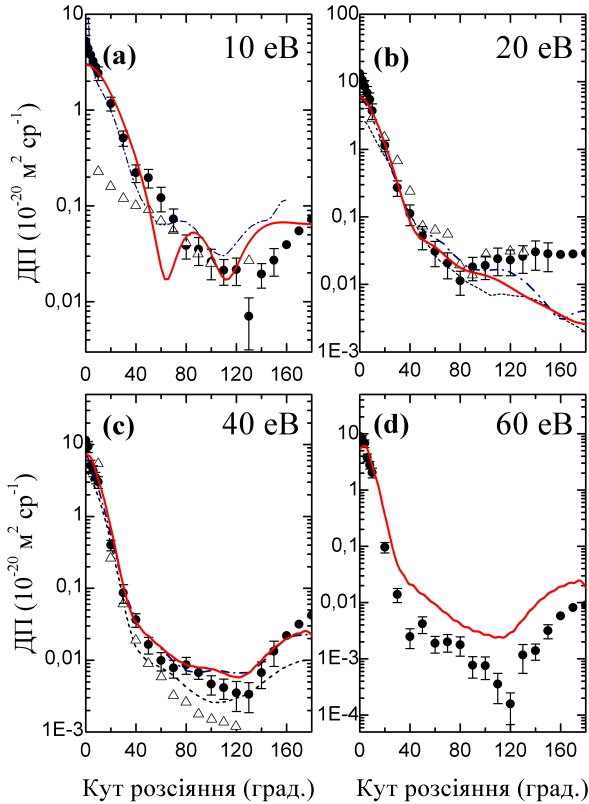


Рис. 11. Кутові залежності ДП переходу $3s^2\ ^1S - 3s4d\ ^1D$ при значеннях енергій 10, 20, 40 та 60 еВ: (●) експеримент [5]; (Δ) експеримент [6]; (—) BSR29, даний розрахунок; (- · - · -) CC5, [9]; (- - -) RDW, [11].

ДП переходів з основного стану $3s^2\ ^1S$ у збуджені стани $3s4s\ ^1S$, $3s3d\ ^1D$ та $3s4p\ ^1P$

На рис. 10-12 представлені ДП збудження електронним ударом п'ятого, шостого та дев'ятого по порядку рівнів атома Mg (згідно класифікації NIST [22], табл. 1) при енергіях 10, 20, 40 та 60 еВ. У порівнянні з ДП пружного розсіяння та резонансного переходу, при збудженні станів $3s4s\ ^1S$, $3s3d\ ^1D$ та $3s4p\ ^1P$ проходить певна втрата обчислювальної точності, що і зрозуміло, враховуючи достатньо високу степінь збудження.

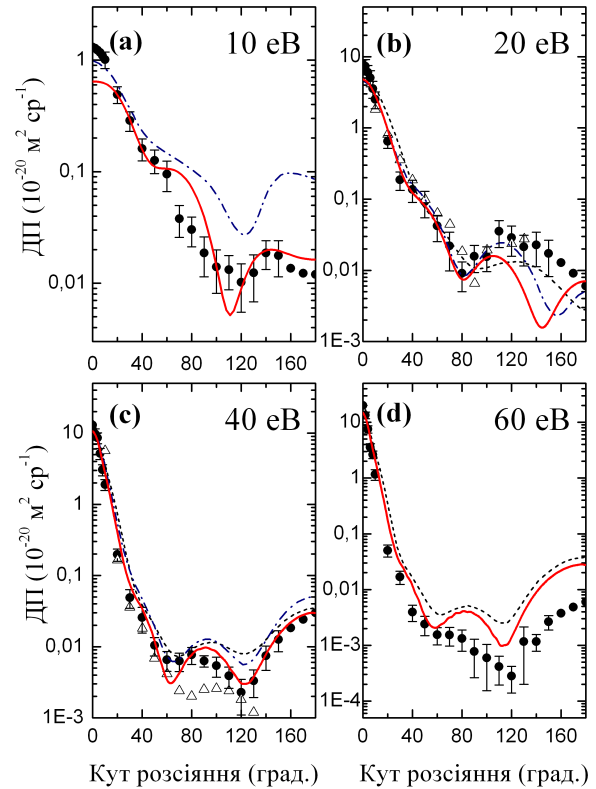


Рис. 12. Те ж, що і на рис. 10, але для переходу $3s^2\ ^1S - 3s4p\ ^1P$.

Як видно з рисунків, найбільш проблематичним є точний розрахунок кутової залежності ДП при енергії 10 еВ, де очікуються важливими кореляційні ефекти. Зі значною долею вірогідності можна стверджувати про наявність відчутної кореляції при низьких енергіях між станами $3s4s\ ^1S$ та $3s4s\ ^3S$. Хоча енергія синглетного стану 4^1S визначена з точністю до -0.0044 еВ (див. табл. 1) відмічене вище відхилення (0.1082 еВ) від даних NIST [22] у розрахунку енергії триплетного стану 4^3S вочевидь впливає на точність розрахунку ДП збудження стану 4^1S при енергії 10 еВ, рис. 10а. Проте вже при енергії 20 еВ наші ДП для цього переходу практично співпадають, з врахуванням експериментальних похибок, із даними вимірювань [5] у всьому діапазоні кутів розсіяння. З певними зауваженнями це стосується і енергії 40 еВ. Знову ж таки, для енергії 60 еВ, при якісному узгодженні ходу теоретичних і експериментальних даних, спостерігається

певне завищення розрахованих ДП над вимірними у роботі [5].

Для випадку збудження станів 3^1D та 4^1P , рис. 11 та 12, відповідно, найкраще узгодження наших даних з експериментом [5] досягнуто при енергії 40 еВ. При інших енергіях наближення BSR29 дало, в загальному, дещо покращене узгодження розрахованих і вимірних [5] даних у порівнянні з результатами інших теоретичних обчислень [9, 11, 13].

Висновки

Ми представили теоретичні диференціальні перерізи для зіткнення електронів з атомом Mg при енергіях 10, 15, 20, 40, 60 та 80 еВ. Розрахунки було виконано за допомогою розширеної версії R -матричного (сильний зв'язок) методу [16], в якому для представлення функцій континууму використовується B -сплайновий базис. Використання неортогональних наборів орбіталей для побудови як хвильових функцій мішені, так і представлення функцій розсіяння дозволяє нам незалежно оптимізувати різноманітні атомні хвильові функції і, отже,

генерувати більш точний опис станів мішені, ніж ті, що використовувалися в попередніх розрахунках розсіяння. Використовувані нами хвильові функції мішені містять як валентну, так і корвалентну кореляції, включену через збудження $2p^6$ -оболонки кора.

Дані розрахунки виконано з метою дослідження ДП всієї сукупності різноманітних процесів, що супроводжують розсіяння електронів на атомі Mg, у рамках єдиного підходу BSR [16], виходячи з єдиної теоретичної концепції.

Порівняння наших BSR29-перерізів, як для пружного розсіяння, так і збудження станів 3^1P^o , 3^3P^o , 4^1S , 3^1D та 4^1P^o з наявними експериментальними вимірюваннями [1-7] та теоретичними розрахунками [2, 3, 4, 9-13] вказує, в загальному, на хороше узгодження з експериментом розрахованих нами ДП, у більшості випадків краще, ніж в інших теоретичних підходах. Деякі експериментальні вимірювання ДП взагалі вперше отримали теоретичну інтерпретацію на основі наших розрахунків.

Література

1. 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.
2. 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.
3. Filipovic D.M., Predojevic B., Pejcev V., Ševic 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.
4. Predojevic B., Pejcev V., Filipovic D.M., Ševic 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.
5. Predojevic B., Pejcev V., Filipovic D.M., Ševic 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).
6. 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.
7. 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.
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. 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.
 10. 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.
 11. 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.
 12. 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).
 13. 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).
 14. 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.
 15. 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).
 16. Zatsarinny Oleg. BSR: B-spline atomic R-matrix codes // *Comput. Phys. Commun.* – 2006. – V.174. – P.273-356.
 17. Zatsarinny O., Bartschat K., Bandurina L., and Gedeon V. Electron-impact excitation of carbon // *Phys. Rev. A.* – 2005. – V.71. – P.042702 (9pp).
 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. Froese Fischer C. The MCHF atomic-structure package // *Comput. Phys. Commun.* – 1991. – V.64. – P.369-398.
 21. Froese Fischer C., Brage T., Jonsson O. Computational Atomic Structure. An MCHF Approach // London: Institute of Physics Publishing, Bristol, 1997. – 279 p.
 22. 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.
 23. Zatsarinny Oleg and Froese Fischer Charlotte. Oscillator strengths for transitions to high-lying excited states of carbon // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* – 2002. – V.35. – P.4669-4683.
 24. Froese Fischer C. Theoretical oscillator strengths for $nP - nD$ transitions in Mg // *Can. J. Phys.* – 1975. – V.53. – P. 184-191; Froese Fischer C. Theoretical oscillator strengths // – 1975. – V.53. – P.338.
 25. (a) Liljeby L., Lindgard A., Manervik S., Veje E., and Jelemkovic B., *Phys. Scr.* – 1980. – V.21. – P.805. (b) Kelly F. M. and Mathur M.S., *Can. J. Phys.* – 1980. – V.58. – P.1980; (c) Lundin L., Engman B., Hilke J., and Martinson I., *Phys. Scr.* – 1973. – V.8. – P. 274; (d) Smith W. W. and Gallagher A., *Phys. Rev.* – 1966. – V.145. – P.26; (e) Smith W.W. and Liszt H.S., *J. Opt. Soc. Am.* – 1971. – V.61. – P.938; (f) Andersen T., Sesesquelles J., Jessen K.A., and Sorenson G., *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.* – 1970. – V.10. – P. 1143; (g) Mitchell C.J., *J. Phys. B.* – 1975. – V.8. – P.25; (h) Schaefer A., *Astrophys. J.* – 1971. – V.163. – P.411.
 26. Burke V.M. and Noble C.J. FARM: The atomic R-matrix program // *Comp. Phys. Commun.* – 1995. – V.85. – P.471-500.

THE DIFFERENTIAL CROSS SECTIONS OF ELECTRON-IMPACT SCATTERING ON MAGNESIUM

V. Gedeon¹, S. Gedeon¹, O. Zatsarinny², V. Lazur¹, E. Nagy¹

¹Uzhhorod National University, 54 Voloshyna str., Uzhhorod, 88000

²Drake University, Des Moines, Iowa, 50311, USA

The B-spline R-matrix method is used to *ab initio* calculations of electron scattering differential cross sections from neutral magnesium. The elastic electron scattering from 3^1S ground state of Mg and the excitation of spectroscopic 3^1P^o , 3^3P^o , 4^1S , 3^1D and 4^1P^o states of magnesium at incident energies 10, 15, 20, 40, 60 and 80 eV is considered. 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 29 bound states of neutral magnesium, covering all states from the ground state to $2p^63p^2\ ^3P$. The present calculations of differential cross sections yield good agreement with the few available experimental data.