

# РОЗРАХУНОК ЗБУДЖЕННЯ АТОМА *Va* ЕЛЕКТРОННИМ УДАРОМ З ОСНОВНОГО ТА МЕТАСТАБІЛЬНОГО СТАНІВ: МЕТОД R-МАТРИЦІ З ПСЕВДОСТАНАМИ

С.П.Богачова, В.Ф.Геден, Т.О.Зацарінна, О.І.Зацарінний\*,  
В.І.Лендель, К.А.Кочер\*\*

Кафедра теоретичної фізики Ужгородського держуніверситету, вул.Волошина, 32,  
Ужгород 294000, Україна

\* Інститут електронної фізики НАН, вул.Університетська, Ужгород 294016, Україна

\*\* Фізичний факультет Університету штату Орегон, Корвалліс, Орегон 97331, США

За допомогою недавно запропонованого методу R-матриці з псевдостанами проведено розрахунки інтегральних перерізів збудження атома барію електронним ударом. Результати отримані (в наближенні 37 станів сильного зв'язку) для переходів як з основного ( $6s^2 \ ^1S^o$ ) так і з збуджених ( $5d6s \ ^1, \ ^3D^o$ ) станів для 16 найнижчих станів мішені (з головними квантовими числами  $n = 5, 6, 7$ ), в тому числі розраховано перерізи пружнього розсіяння. Розрахунки проводилися в діапазоні енергій налітаючого електрона від порогу до  $1 R_y$ . В даній роботі наводяться результати розрахунків інтегральних перерізів пружнього розсіяння ( $6s^2 \ ^1S^o$ ) - ( $6s^2 \ ^1S^o$ ) та збудження резонансного переходу ( $6s^2 \ ^1S^o$ ) - ( $6s6p \ ^1P^o$ ) в припороговій області енергій.

## I. Вступ

Дослідження низькоенергетичних перерізів розсіяння електронів на атомах представляє значний інтерес як для прикладних застосувань (фізика плазми т.ін.), так і для розуміння фундаментальних принципів атомної структури. Дана робота, в якій представлені результати розрахунків інтегральних перерізів збудження атома *Va*, продовжує наші дослідження в області електрон-атомних та електрон-іонних зіткнень, результати яких узагальнені в монографії [1]. Вона є черговим етапом в серії наших останніх обчислень перерізів збудження лужноземельних атомів Mg, Ca, Sr електронним ударом [2-4], та логічним продовженням і розвитком ідей, висловлених у більш ранніх роботах (див. напр. [5, 6]). Зазначимо, що обчислення проводилися на базі створеного одним з авторів комплексу програм [7], з

врахуванням останніх досягнень в області програмного забезпечення електрон-атомних розрахунків [8-11].

Особливість дослідження атома барію, в порівнянні з атомами розглянутими нами раніше, полягає в значному зростанні об'ємів чисельних розрахунків, у зв'язку із зростанням складності досліджуваного об'єкту. До останнього часу експериментальні роботи кінця 70-х - початку 80-х років [12-15] так і не отримали задовільної теоретичної інтерпретації. Розрахунки Фабриканта [16], проведені в наближенні сильного зв'язку (close-coupling) двох каналів (2CC), відповідають тодішньому рівню розвитку комп'ютерних обчислень. Проте саме наближення 2CC є надто спрощеним і не придатне для серйозного розгляду припорогових особливостей перерізів розсіяння електрона на атомі барію. Інтегральні перерізи збудження  $6s6p \ ^1P^o$  -

стану, отримані Кларком т.ін. [17] в унітаризованому наближенні спотворених хвиль, теж значно перевищують експеримент [12]. Тільки зовсім недавно [18] Фурса і Брей в наближенні збіжного сильного зв'язку (convergence close-coupling) з врахуванням 115 станів (115ССС) отримали непогане узгодження теоретичних інтегральних перерізів збудження  $6s6p \ ^1P^o$  -стану з експериментальними [12]. Проте метод ССС (див. [18] і цитовану там літературу), попри певні свої переваги, поки що більш придатний для розгляду диференціальних перерізів, які вимагають знання матриці розсіяння в незначній кількості точок по енергії, і є практично неприйнятним для чисельних розрахунків енергетичної поведінки інтегральних перерізів в припороговій області, де кількість розрахункових точок по енергії, необхідних для виявлення тонкої резонансної структури, сягає 2.5-3 тисяч! Зауважимо, що у зв'язку з вказаною складністю, більшість експериментальних і теоретичних робіт, які виконувалися по Ва, стосуються саме дослідження диференціальних, а не інтегральних перерізів розсіяння.

В даній роботі з допомогою R-матричного методу з псевдостанами, в наближенні 37 станів сильного зв'язку (16 фізичних станів атома-мішені і 21 псевдостанів), розраховані інтегральні перерізи переходів з основного ( $6s^2 \ ^1S^e$ ) та збуджених ( $5d6s \ ^{1,3}D^e$ ) станів у 16 найнижчих станів мішені (з головними квантовими числами  $n = 5, 6, 7$ ), враховуючи і перерізи пружного розсіяння, в припороговій області енергій до 13.6 еВ.

Отже дана робота є першим прецизійним теоретичним дослідженням припорогової поведінки інтегральних перерізів збудження атома барію електронним ударом.

## II. Особливості розрахунків

Повна хвильова функція, яка використовується в R-матричному методі для описання зіткнення у внутрішній області,  $r < a$ , де обміном між налітаючим електроном та електронами мішені не можна знехтувати, може бути записана у виді розкладу в ряд по базисних функціях

$$\Psi_k(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, \mathbf{r}) = A \sum_{ij} a_{ijk} \Phi_i(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, \hat{\mathbf{r}}, \sigma) \frac{1}{r} u_j(r) + \sum_j b_{jk} \phi_j(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, \mathbf{r}). \quad (1)$$

Тут через  $\Phi_i$  позначено каналні функції, утворені з усіх станів мішені (фізичних і псевдостанів), що включаються в розклад, через  $u_j(r)$  - орбіталі неперервного спектру, які описують поведінку розсіюваного електрона, через  $\phi_i$  -  $(N+1)$ -електронні зв'язані конфігурації, утворені з конфігурацій мішені та інших орбіталей мішені. Друга сума в (1) включає останні з цих конфігурацій, що використовуються для компенсації умов ортогональності, що накладаються на радіальні орбіталі розсіяного електрона  $u_j(r)$ . Нарешті, через  $\hat{\mathbf{r}}$  і  $\sigma$  позначено куту і спінову

координати системи, а оператор А забезпечує повну антисиметризацію хвильових функцій. Коефіцієнти  $a_{ijk}$  та  $b_{jk}$  були отримані шляхом діагоналізації  $(N+1)$ -електронного гамільтоніана в рамках R-матричного підходу, для радіуса  $a$ . Для проведення даних розрахунків по розсіянню нами була використана, як база, програма RMATRIX1 [10].

Інші особливості нашої методики, яка включає багатоконфігураційні розрахунки хвильових функцій та енергій атомних станів мішені, прецизійні розрахунки характеристик зіткнення в R-матричному

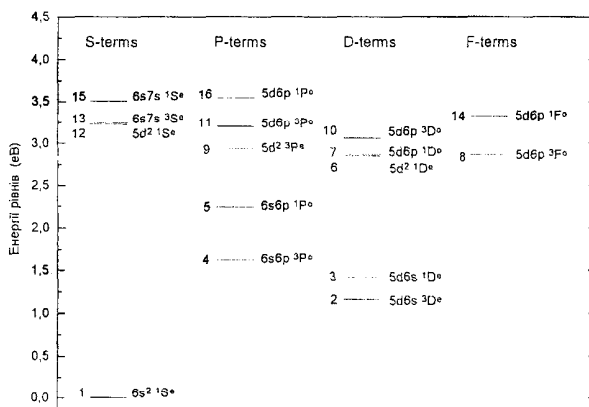
наближенні з використанням псевдостанів т.ін., описані нами в роботах [2-4].

### III. Результати та обговорення

Схема енергетичних рівнів атома Ва (найнижчі 16 фізичних станів), для яких розраховувалися інтегральні перерізи переходів, наведена на мал. 1. Положення псевдостанів на мал.1 не показане. Ці стани, розташовані як під, так і над порогом іонізації атома барію, включалися в розклад (1) для моделювання впливу всіх інших фізичних станів (включаючи неперервний спектр), які не ввійшли в повний розклад (1).

Перерізи переходів були розраховані для всіх переходів зі станів 1, 2 і 3 у всі 16 фізичних станів, включаючи пружне розсіяння.

Для ілюстрації отриманих даних та з метою порівняння з даними інших авторів, наведемо результати наших розрахунків для двох найбільш досліджених в літературі переходів ( $6s^2 \ ^1S^e$ ) - ( $6s6p \ ^1P^o$ ) та ( $6s^2 \ ^1S^e$ ) - ( $6s^2 \ ^1S^e$ ) (пружне розсіяння). Для інших переходів відсутні більш-менш вивірені експериментальні і теоретичні результати в припороговій області і наші дослідження в цьому плані є піонерськими.



Мал. 1. Спрощена схема енергетичних рівнів атома Ва; покано лише розміщення нижніх 16 фізичних рівнів, які включалися в дані розрахунки.

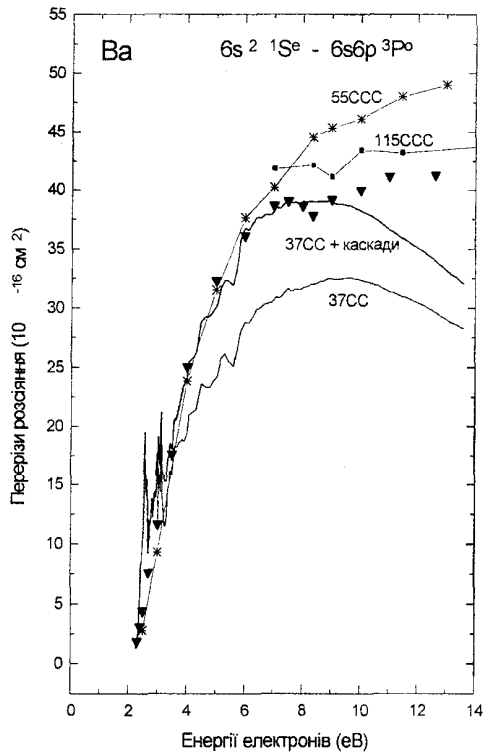
#### А. Перехід ( $6s^2 \ ^1S^e$ ) - ( $6s6p \ ^1P^o$ ).

Резонансний перехід ( $6s^2 \ ^1S^e$ ) - ( $6s6p \ ^1P^o$ ) є чи не найбільш досліджуваним переходом в атомі Ва. На мал.2 наведено порівняння наших результатів (37CC) з експериментом Чена - Галахера [12] та з теоретичними розрахунками Фурси та Брея в наближенні 55CCC та 115CCC [18]. При цьому наші результати наведені як для "чистого" переходу ( $6s^2 \ ^1S^e$ ) - ( $6s6p \ ^1P^o$ ) - нижня суцільна крива, так і з врахуванням каскаду з рівнів ( $5d^2 \ ^1D^o$ ) та ( $5d6p \ ^1D^o$ ) - верхня суцільна крива. Маючи на увазі досить значний можливий вклад каскадів (до 20-25%), результати збудження "чистого" резонансного

переходу, отримані в [18], які, на перший погляд, добре узгоджуються з експериментом [12], є, на нашу думку, дещо завищеними, особливо для випадку 55CCC. В той же час наші розрахунки з врахуванням вказаних каскадів повністю співпадають з експериментом [12] в області енергій від 3.5 до 9 еВ. При більших енергіях, які лежать вище першого порога іонізації, потрібно додатково врахувати вклад відповідних процесів. При енергіях нижче 3.5 еВ дуже суттєвими є резонансні ефекти, які, на жаль, поки що не можуть бути виявлені на експерименті, бо вимагають дуже великої роздільної здатності електронного пучка (менше  $\sim 1$  меВ). Тому при цих енергіях

лише теоретичні розрахунки здатні дати необхідну інформацію про деталі процесів

електрон-атомних зіткнень.

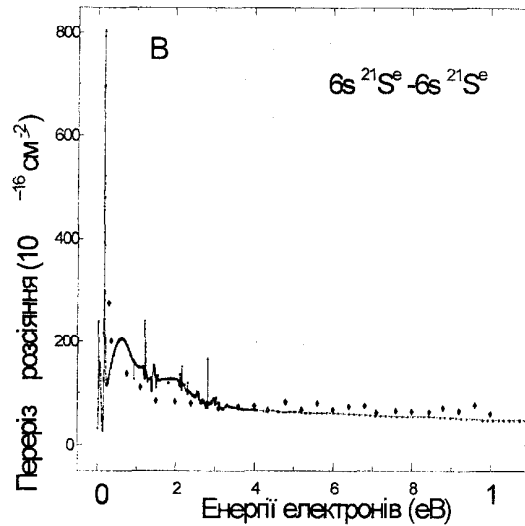


Мал. 2. Порівняння експериментальних перерізів збудження для резонансного переходу ( $6s^2 1S^e$ ) - ( $6s6p 3P^o$ ) в атомі Ва. —, 37CC результати (верхня крива з врахуванням каскадів, нижня - без врахування); —\*—, 55CCC розрахунки [18]; —■—, 115CCC розрахунки

[18]; ▼ - експеримент [12];

**В. Перехід ( $6s^2 1S^e$ ) - ( $6s^2 1S^e$ ) (пружне розсіяння).**

На мал. 2 наведено порівняння результатів наших розрахунків 37CC з експериментом Романюка т.ін. [15]. Різниця між теоретичними і експериментальними результатами (за винятком вузької припорогової області в 0.2 eV) не перевищує експериментальних похибок вимірювання (35%). В припороговій області енергій нами виявлена складна резонансна структура, яка не проявляється на експерименті внаслідок недостатньо тонкої роздільної здатності електронного пучка (~80 меВ). Оскільки в роботі [15] вимірювався повний інтегральний переріз



Мал. 3. Порівняння повного експериментального перерізу збудження атома Ва з перерізом переходу ( $6s^2 1S^e$ ) - ( $6s^2 1S^e$ ) (пружне розсіяння). —, 37CC результати; ◆ -

розсіяння електрона на атомі Ва, а не тільки вклад пружного розсіяння, то неоднорідні структури, які спостерігаються в ході експериментального перерізу [15] в області енергій вище 3 eV, очевидно, зв'язані з вкладом непружних процесів, зокрема резонансного переходу, що розглядався вище. Очевидно також, що для адекватного порівняння теорії з експериментом бажано було б здійснити більш точні експериментальні дослідження, особливо в припороговій області енергій з багатою резонансною структурою.

З метою дослідження подібних структур нами були виконані розрахунки з

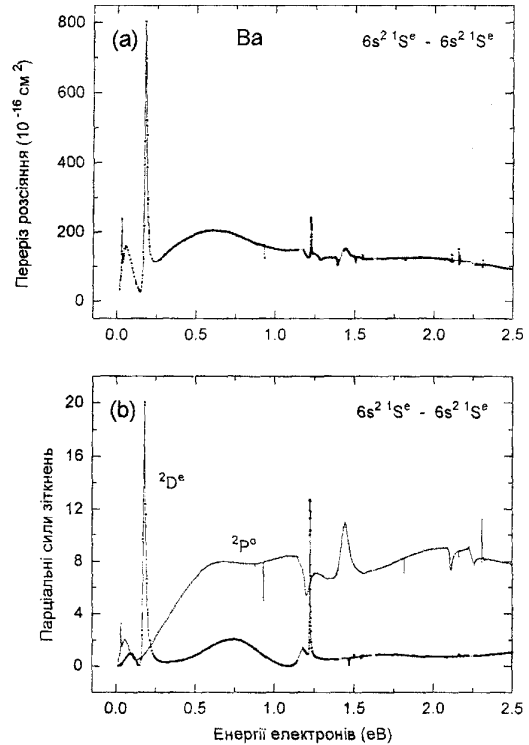
кроком по енергії 0.0078 eV (0.0005 Ry) в області енергій від порога до 3.5 eV. В областях енергій, де проявлялися неоднорідності в перерізах, крок зменшувався в десятки і сотні разів, аж до  $0.1 \cdot 10^{-5}$  Ry.

На мал. 4 (а) наведено отримані нами перерізи пружного розсіяння електрона на атомі Ва в припороговій області енергій. При цьому нами вперше отримано резонанс форми (shape-resonance), який, на відміну від інших лужноземельних атомів (Mg, Ca, Sr, Cd, Hg, Zn), до цього часу не фіксувався для Ва.

Щоб уявити природу цього резонансу форми (пік при  $\sim 0.005$  eV) на мал. 4 (b) наведені парціальні сили зіткнень для  $^2P^o$  та  $^2D^e$  хвиль атома Ва, які несуть детальнішу інформацію відносно фізичної суті спостережуваних резонансів, в порівнянні з інтегральними перерізами. На мал. 4 (b) можна спостерігати тонкий ефект накладання на відносно широкий резонанс форми (shape-resonance) в  $^2P^o$  хвилі (пік при  $\sim 0.005$  eV) дуже вузького фешбахівського резонансу в цій же хвилі (пік при  $\sim 0.003$  eV). Якщо перший з них можна пов'язати з утворенням збудженого стану від'ємного іона барію ( $6s^2 6p \ ^2P^o$ ), то природа фешбахівського резонансу при вказаній енергії вимагає більш детальних досліджень, зокрема з точки зору кореляції з резонансами в інших парціальних хвилях, і їх загального узгодження та ідентифікації з тими чи іншими станами від'ємного іона барію.

Крім резонансів у  $^2P^o$  хвилі, на мал. 4 (b) добре проглядаються також резонанси в  $^2D^e$  хвилі при енергіях  $\sim 0.178$  та  $\sim 1.224$  eV. В парціальних хвилях  $^2S^e$ ,  $^2F^o$  і навіть  $^2G^e$  для збудження з основного рівня теж спостерігаються резонансні структури. Більше того, вони добре узгоджуються з резонансними структурами у відповідних парціальних переходах зі збуджених станів (стани 2 і 3 на мал.1). Попри існуючу можливість прояву псевдорезонансів (що взагалі-то не виключено при розрахунку подібних

характеристик збудження), є надія, що отримані структури зв'язані з реальними фізичними процесами, що мають місце при припороговому розсіянні електрона на атомі барію.



Мал. 4. Резонансні структури в інтегральному перерізі пружного розсіяння  $37\text{CC}$  (а) та в парціальних силах пружного зіткнення для  $^2P^o$  та  $^2D^e$  хвиль (b) атома Ва.

Як показує практика попередніх розрахунків [2-5, 8, 10], поява псевдорезонансів в R-матричних розрахунках перерізів розсіяння на складних атомах має досить велику імовірність. Щоб в'яснити, чи зв'язана отримана резонансна структура з реальними фізичними процесами, нами тепер провадяться додаткові дослідження з розрахунком власних фаз розсіяння. Результати ідентифікації знайдених резонансів будуть опубліковані найближчим часом

1. V.I. Lengyel, V. Navrotsky, and E. Sabad, *Resonance Phenomena in Electron-Atom Collisions* (Springer, Heidelberg, 1992).
2. V. Gedeon, V. Lengyel, O. Zatsarinny, and C.A. Kocher, *Phys. Rev. A* **59**, 2016 (1999).
3. I.I. Shafranyosh, T.A. Snegurskaya, M.O. Margitich, S.P. Bogacheva, V.I. Lengyel, and O. Zatsarinny, *J. Phys. B* **30**, 2261 (1997).
4. V. Gedeon, V. Lengyel, O. Zatsarinny, and C.A. Kocher, *Phys. Rev. A* **56**, 3753 (1997).
5. O.I. Zatsarinny, V.I. Lengyel, and E.A. Masalovich. *Phys. Rev. A* **44**, 7343 (1991).
6. V.I. Lengyel, V. Navrotsky, and E. Sabad, *J.Phys.B: At.Mol.Phys.* **23**, 2847 (1990)
7. O.I. Zatsarinny, *Comput. Phys. Commun.*, **98**, 235 (1996).
8. K. Bartschat, B. Hudson, P. Burke, M.P. Scott, and V.J. Burke, *J. Phys. B* **29**, 115 (1996).
9. K. Bartschat, P. Burke, and M.P. Scott. *J. Phys. B* **30**, 5915 (1997).
10. K.A. Berrington, W.B. Eissner, and P. Norrington, *Comput. Phys. Commun.* **92**, 290 (1995).
11. C. Froese Fischer, *Can. J. Phys.* **53**, 184, 338 (1975).
12. S.T.Chen and A. Gallagher, *Phys. Rev. A* **14**, 593 (1976).
13. I.S. Aleksakhin, I.P. Zapesochinii, I.I. Garga, and V.P. Starodub, *Opt. Spektrosk.* **38**, 228 (1975) [*Opt. Spectrosc.* **38**, 126 (1975)].
14. I.S. Aleksakhin, S.B. Zagrebin, D.A. Ozolinsh, A.V. Samson, I.I. Shafranosh and T.A. Shishova, *Opt. Spektrosk.* **53**, 375 (1982) [*Opt. Spectrosc.* **53**, 222 (1982)].
15. Н.И.Романюк, О.Б.Шпеник, И.П.Запесочный, *Письма в ЖЭТФ*, **32**, 472 (1980)
16. I.I. Fabrikant, *J. Phys. B* **13**, 603 (1980).
17. R.E. Clark, J. Abdallah, G. Csanak, and S.P. Kramer, *Phys. Rev. A* **40**, 2935 (1989).
18. D.V. Fursa and I. Bray, *Phys. Rev. A* **59**, 282 (1999).

## ACCOUNT OF EXCITATION OF ATOM Ba BY ELECTRONIC IMPACT FROM MAIN AND METASTABLE STATES: R-MATRIXES METHOD WITH PSEUDOSTATES

**S.P.Bogachova, V.F.Gedeon, T.O. Zatsarinna, V.I.Lendyel,  
K.A.Kocher, O.I. Zatsarinny**

Institute of Electron Physics Ukraine Academy of Science,

294016 Universitetska str.,21, Ukraine

The recently developed R-matrix method with pseudo-states (in a 37-state close-coupling approximation, 37CC) has been applied in the calculation of integral cross sections for electron-impact excitation of neutral Ba. Results are obtained for transitions from the ( $6s^2\ ^1S$ ) ground state and the ( $5d6s\ ^1,^3D^e$ ) excited states to the 16 lowest-excited target states (with principal quantum numbers  $n = 3, 4, 5$ ), as well as elastic cross sections. Incident electron energies range from threshold to 13.6 eB. In this work the results of integral cross sections calculations from both the elastic scattering ( $6s^2\ ^1S^e$ ) - ( $6s^2\ ^1S^e$ ) and the resonance transition ( $6s^2\ ^1S^e$ ) - ( $6s6p\ ^1P^o$ ) in the near-threshold region are presented.