

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
ДЕРЖАВНИЙ ВИЩИЙ НАВЧАЛЬНИЙ ЗАКЛАД
«УЖГОРОДСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ»

ГЕДЕОН Сергій Вікторович



УДК 539.186

**МЕТОД R -МАТРИЦІ З B -СПЛАЙНАМИ В ТЕОРІЇ
НИЗЬКОЕНЕРГЕТИЧНОГО РОЗСІЯННЯ ЕЛЕКТРОНІВ НА
СКЛАДНИХ АТОМАХ**

01.04.04 — фізична електроніка

Автореферат
дисертації на здобуття наукового ступеня
кандидата фізико-математичних наук

Ужгород — 2021

Дисертацією є рукопис.

Робота виконана в ДВНЗ «Ужгородський національний університет».

Науковий керівник: доктор фізико-математичних наук, професор
Лазур Володимир Юрійович,
ДВНЗ «Ужгородський національний університет»,
фізичний факультет, декан.

Офіційні опоненти: доктор фізико-математичних наук, старший науковий співробітник
Ремета Євген Юрійович,
Інститут електронної фізики НАН України,
старший науковий співробітник відділу електронних процесів і елементарних взаємодій;
кандидат фізико-математичних наук, старший науковий співробітник
Бобков Валентин Васильович,
Харківський національний університет ім. В.Н. Каразіна, завідувач проблемної науково-дослідної лабораторії іонних процесів, доцент кафедри матеріалів реакторобудування.

Захист відбудеться «12» травня 2021 р. о 10 годині на засіданні спеціалізованої вченої ради Д 61.051.01 ДВНЗ «Ужгородський національний університет» за адресою: 88000, м. Ужгород, вул. Волошина, 54, ауд. 181.

З дисертацією можна ознайомитись у бібліотеці ДВНЗ «Ужгородський національний університет» за адресою: м. Ужгород, вул. Університетська, 14.

Автореферат розісланий «9» квітня 2021 р.

Учений секретар
спеціалізованої вченої ради



Грабар О. О.

ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

Обґрунтування вибору теми дослідження. З часу створення і до цих пір фізика електронних і атомних зіткнень відіграє фундаментальну роль як в розвитку квантової теорії, так і в її численних застосуваннях. Відомості про елементарні процеси взаємодії електронів з атомами та іонами необхідні при розв'язуванні багатьох задач атомної і ядерної фізики, фізики і хімії плазми та керованого термоядерного синтезу, фізики верхніх шарів атмосфери і астрофізики, квантової електроніки та ін. Впродовж тривалого часу вивчення електрон-атомних ($e+A$) зіткнень обмежувалося з'ясуванням принципових особливостей та основних механізмів пружних і непружних процесів, таких як збудження та іонізація найпростіших атомних систем, що містять невелику кількість електронів. Головне завдання теорії полягало насамперед в тому, щоб розрахувати інтегральні перерізи та константи швидкостей реакцій за допомогою відомих квантомеханічних методів: сильного зв'язку каналів (СЗК), R -матриці, спотворених хвиль (СХ), тощо. Втім, необхідні в різних ділянках сучасної фізики і нової техніки відомості про елементарні процеси $e+A$ -зіткнення не обмежуються даними про повні перерізи, але й включають більш детальні характеристики, такі як, наприклад, спектри та кутові розподіли продуктів реакцій. З розвитком техніки фізичного експерименту з'явилася можливість «розгорнути» багато які процеси за енергією та кутом розсіяння. Ці розгортки — диференціальні перерізи розсіяння — нагадують спектрограми, структура яких містить найдетальніші відомості про динаміку процесу зіткнення та про структуру самих атомів та іонів.

Розвиток сучасної техніки експерименту (метод перехресних пучків, техніка збігів, застосування синхротронного випромінювання та ін.) відкрило нові можливості і перспективи дослідження. Значно розширилося коло досліджуваних атомних систем, підвищилася чутливість, точність і детальність вимірювань і, як наслідок, виявилася можливим отримати якісно нову інформацію про властивості взаємодіючих частинок та елементарних процесів з їх участю. Інтенсивні експериментальні дослідження електрон-атомних зіткнень протягом останніх десятиліть вказують на сильну залежність результатів вимірювань від індивідуальних особливостей структури атома-мішені і продуктів реакції. При цьому виявилася, що навіть в добре розроблених областях, таких, як резонансне та пружне розсіяння, є багато невирішених питань. До цих пір немає повної відповіді на вельми загальні питання про роль багатоелектронних кореляцій, поляризаційних явищ та ефектів зв'язку каналів і релаксації квантової

орбіти збуджених електронів у процесах резонансного розсіяння повільних електронів на складних багатоелектронних атомах та іонах. У міру подальшого розвитку теорії ставало все більш очевидним, що прийшов час для розробки нових та удосконалення існуючих методів дослідження процесів $e+A$ -розсіяння, які за своєю точністю задовольняють вимогам сучасного експерименту і найбільш ефективно та повно враховують тонкі деталі структури атома-мішені. Комбінація нових теоретичних підходів, нових обчислювальних методів, реалізація цих методів у вигляді відповідних пакетів прикладних програм, — все це накладає відбиток на всю сучасну діяльність в цій області. Така діяльність виявилася плідною і для нашої дослідницької групи, в результаті чого в наших працях [1–10] було розроблено нову розширену версію R -матричного методу.

Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами, грантами. Дослідження, результати яких включені в дисертаційну роботу, виконані згідно з такими науково-дослідними темами ДВНЗ «Ужгородський національний університет»: «Аналітична теорія процесів з перерозподілом у непружних зіткненнях атомних частинок» (2005–2007 рр., шифр ДБ-521, № ДР-0103U001696), «Релятивістські та квантово-електродинамічні ефекти при взаємодії багатозарядних іонів з важкими атомами та з постійними електричним і магнітним полями» (2012–2014 рр., шифр ДБ-806, № ДР-0112U001552), «Інтегральні рівняння Додда-Грейдера в теорії одно- та двоелектронних процесів з перерозподілом у високоенергетичних іон-атомних зіткненнях» (2015–2017 рр., шифр ДБ-847, № ДР-0115U001099), «Теорія R -матриці і точні чисельні розрахунки елементарних процесів зіткнення електронів і фотонів зі складними атомами» (2018–2020 рр., шифр ДБ-880, № ДР-0118U000173).

Мета і завдання дослідження. Метою дисертаційної роботи є розробка нової БСР-версії R -матричного методу, що базується на застосуванні залежних від терму неортогональних орбіталей та сплайн-представлень для радіальних частин одноелектронних хвильових функцій. На основі розробленої БСР-версії провести систематичні дослідження елементарних процесів взаємодії повільних електронів з атомами Ca і Al та фотонів з від'ємними іонами Ca^- і Al^- . Для досягнення поставленої мети передбачено вирішення таких основних **завдань**:

- розробити новий метод розв'язання задачі $e+A$ -розсіяння у внутрішній R -матричній області, який ґрунтується на одноразовій діагоналізації матриці повного гамільтоніана системи «атом + налітаючий електрон» в базисі, що задається повним скінченним набором B -сплайнів;
- із застосуванням залежних від терму неортогональних орбіталей розро-

бити новий спосіб урахування резонансних ефектів, який дозволяє мінімізувати псевдорезонансну структуру в перерізах розсіяння і не потребує залучення будь-яких кореляційних функцій;

- на основі розвиненої БСР-версії методу R -матриці розробити пакети відповідних прикладних програм для числових розрахунків характеристик $e+A$ -розсіяння та процесів фоторозщеплення від'ємних іонів A^- ;
- провести чисельні розрахунки парціальних, повних та диференціальних перерізів пружного та непружного (збудження та іонізації) розсіяння повільних електронів атомами Ca і Al та фоторозщеплення від'ємних іонів Ca^- і Al^- ;
- провести аналіз впливу резонансних ефектів, електронних кореляцій, поляризаційних явищ, ефектів зв'язку каналів та явища релаксації квантової орбіти збудженого електрона на характеристики розсіяння електронів атомами Ca і Al та фоторозщеплення від'ємних іонів Ca^- і Al^- .

Об'єкт дослідження: процеси низькоенергетичного розсіяння електронів на атомах Ca і Al та фоторозщеплення від'ємних іонів Ca^- і Al^- .

Предмет дослідження: перерізи пружного і непружного розсіяння повільних електронів на атомах, перерізи фоторозщеплення від'ємних іонів, резонансна структура перерізів.

Методи дослідження. В основі розробленої БСР-версії методу R -матриці лежать основні квантовомеханічні принципи, виражені в математично несуперечливій формі. Цим обґрунтовується надійність запропонованої БСР-версії R -матричного методу. Достовірність одержаних результатів і висновків підтверджується порівнянням з результатами розрахунків інших авторів та наявними експериментальними даними. В чисельних розрахунках атомних структур та процесів зіткнення повільних електронів і фотонів з атомами та від'ємними іонами використовувався створений на основі розвиненої БСР-версії ретельно протестований пакет прикладних програм [1*].

Наукова новизна отриманих результатів.

- Із проведеного дослідження можна зробити висновок, що розвинена в дисертації нова БСР-версія теорії R -матриці є вельми універсальним та ефективним методом дослідження елементарних процесів взаємодії повільних електронів зі складними багатоелектронними атомами (іонами) та фотонів з від'ємними іонами. У порівнянні зі стандартним R -матричним методом запропонована БСР-версія має три незаперечні переваги: 1) застосування залежних від терму неортогональних орбіталей є найекономнішим способом урахування резонансних ефектів без залучення будь-яких кореляційних функцій та без збільшення системи інтегро-

диференціальних рівнянь сильного зв'язку; 2) квантовомеханічні оператори після їх дискретизації у B -сплайновому базисі представляються сильно розрідженими стрічковими матрицями скінченного рангу, що суттєво спрощує розв'язання відповідних алгебраїчних рівнянь; 3) локальні властивості та повнота скінченної системи базисних сплайнів забезпечують гарантовану збіжність R -матричного розкладу, що позбавляє нас від необхідності вводити поправки Баттла в діагональні елементи R -матриці.

- В рамках R -матричного підходу запропоновано новий метод дискретизації континууму, який базується на одноразовій діагоналізації матриці повного гамільтоніана системи «атом + налітаючий електрон» у B -сплайновому базисі.

- Вперше обчислено перерізи збудження чотирьох найнижчих станів $4s4p\ ^3P^o$, $3d4s\ ^3D$, $3d4s\ ^1D$ та $4s4p\ ^1P^o$ атома Са електронним ударом. Результати проведених розрахунків показують, що в діапазоні енергій зіткнення 2–4 еВ визначальний внесок у повний переріз e +Са-розсіяння виникає від збудження рівнів $4s4p\ ^3P^o$ (при енергіях $E > 2$ еВ) та $3d4s\ ^3D$ (при $E > 2.5$ еВ). Показано, що при енергіях зіткнення $E > 4$ еВ сильне дипольне збудження $4s4p\ ^1P^o$ -рівня забезпечує основний непружний внесок в повний переріз e +Са-розсіяння. Встановлено також, що поляризація основного стану атома Са значною мірою визначається сильним дипольним збудженням рівня $4s4p\ ^1P^o$.

- Отримано нові результати для інтегрованих за кутом та диференціальних за кутом перерізів збудження оптично дозволеного $4s^2\ ^1S - 4s4p\ ^1P^o$ та забороненого $4s^2\ ^1S - 4s4p\ ^3P^o$ переходів, а також (псевдо-) Стоксових параметрів для переходів з основного у чотири найнижчі збуджені стани атома Са. Проведено аналіз впливу електронних кореляцій, ефектів зв'язку каналів, поляризаційних явищ та каскадних переходів з вищих збуджених станів на перерізи оптично дозволеного $4s^2\ ^1S - 4s4p\ ^1P^o$ та забороненого $4s^2\ ^1S - 4s4p\ ^3P^o$ переходів.

- На основі розвинутої БСР-версії R -матричного методу вперше проведено систематичні розрахунки інтегрованих за кутом перерізів розсіяння електронів на атомах алюмінію і вперше вивчено низку явищ та резонансних ефектів в процесах пружного розсіяння, збудження та іонізації атома Al електронним ударом:

- а) дано кількісне пояснення складної енергетичної залежності перерізу пружного e +Al розсіяння, обумовленої утворенням та розпадом в процесі зіткнення e +Al автоіонізаційних станів (AIC) $(3s^23p^2)\ ^1S$ та $(3s3p^3)\ ^1D^o$ від'ємного іона Al^- .

- б) встановлена визначальна роль $(3s^23pks)\ ^3P^o$ -каналу та поляризації мішені в пружному розсіянні повільних електронів на атомах Al. Проде-

монстровано сильний вплив ефекту Рамзауера на поведінку парціального перерізу в $3P^o$ -хвилі.

в) вперше розраховано і детально проаналізовано енергетичні залежності перерізів для найважливіших дипольно-дозволених, недипольних та обмінних переходів в атомі Al. Виявлено сильний вплив ефектів зв'язку каналів на поведінку перерізів як для переходів з основного стану ($3s^23p$) $2P^o$ атома алюмінію, так і для переходів між збудженими станами.

- Вперше досліджено резонансні ефекти, які пов'язані зі збудженням АІС ($3s3p^2$) $2P$ та $2S$ в атомі алюмінію. Виявлено домінуючу роль ефектів зв'язку каналів в процесах збудження недипольних переходів $3p$ $2P^o$ – np $2P^o$ ($n = 4, 5, 6$), $4s$ $2S$ – ns $2S$ ($n=5,6$) та $3p$ $2P^o$ – $4f$ $2F^o$.

- Вперше розраховано і докладно проаналізовано повні перерізи фоторозщеплення від'ємного іона Al^- у збудженому стані ($3s^23p^2$) $1D$. Встановлено, що помітна резонансна структура в околі 6 еВ зумовлена сукупним внеском двох станів ($3s3p^3$) $1P^o$ та ($3s3p^3$) $1D^o$ від'ємного іона Al^- . Усі інші структури відображають припорогові максимуми, спричинені відкриттям нових каналів.

- Виявлено складну резонансну структуру в енергетичних залежностях повного та парціальних перерізів фоторозщеплення від'ємного іона алюмінію Al^- в основному стані ($3s^23p^2$) $3P$, зумовлену утворенням та розпадом в процесі розсіяння $h\nu + Al^-$ ($3s^23p^2$) $3P$ авторвідривних станів (АВС) Al^- : $3s^24s4p$ $3P^o$, ($3s3p^3$) $3,1D^o$, $3,1P^o$ та $3S^o$, ($3s^24p5s$) $1D^o$, ($3s^23d4p$) $3P^o$. Визначено положення і ширини цих АВС та проведено їх спектроскопічну класифікацію.

Практичне значення отриманих результатів. Отримані в дисертації відомості про характеристики елементарних процесів взаємодії повільних електронів з атомами Ca і Al та фотонів з від'ємними іонами Ca^- і Al^- вкрай необхідні для успішного розвитку багатьох напрямків сучасної фізики і нової техніки, у тому числі фізики плазми, астрофізики, фізики верхніх шарів атмосфери, термоядерної енергетики. Зокрема, продокуваний при спалахах наднових кальцій є найбільш використовуваним елементом для кількісного аналізу спектра зірок. Атоми Ca мають привабливі властивості і для їх застосування в оптичних стандартах частоти. В свою чергу, процеси розсіяння електронів атомами Al відіграють важливу роль в плазмовому шарі реакторів термоядерного синтезу. Представлені в дисертації результати БСР-розрахунків перерізів $e+Ca$ та $e+Al$ -розсіяння неодноразово використовувалися низкою дослідницьких груп для тестування своїх експериментальних результатів. Розроблена нами БСР-версія R-матричного методу може бути використана для розрахунків характеристик розсіяння повільних електронів на інших багатоелектронних атомах.

Особистий внесок здобувача. Особистий внесок здобувача полягає в тому, що він разом з науковим керівником В.Ю. Лазуром та колегами по спільним працям (К. Бартшат, О. Задарінний, Л. Бандурина, В. Геден, Є. Нодь) брав безпосередню участь не тільки у розробці розширеної БСР-версії R -матричного методу, обговоренні результатів та написанні текстів статей, але й у виконанні великого обсягу числових розрахунків характеристик $e+Ca$ - та $e+Al$ -розсіяння [1–3, 5–10], а також процесів фоторозщеплення від'ємних іонів Ca^- та Al^- [1, 4]. Значна частина результатів дослідження резонансної структури перерізів $e+Ca$ -розсіяння [6, 7] отримана автором особисто.

Апробація матеріалів дисертації. Результати досліджень, що викладені у дисертації, доповідалися або були представлені на таких конференціях: **ЕСАМР ІХ** — European Conference on Atomic and Molecular Physics (Heraklion, Crete, Greece, 2007), Міжнародна конференція молодих учених та аспірантів **ІЕФ-2007**, **ІЕФ-2009**, **ІЕФ-2011**, **ІЕФ-2017** (Ужгород, Україна), **40-th EGAS** — Annual conference of the European group for atomic systems (Graz, Austria, 2008), **4-th CEPAS** — Conference on elementary processes in atomic systems, (Cluj-Napoca, Romania, 2008), **X—XVI**, **XX**, **XXII** Міжнародна молодіжна науково-практична конференція «Людина і космос» (Дніпро, Україна, 2008–2014, 2018, 2020), **ICPEAC-XXIX**, **ICPEAC-XXX** — International Conference on Photonic, Electronic, and Atomic Collisions (Toledo, Spain, 2015; Cairns, Australia, 2017), **18th STM** — Small Triangle Meeting, (Pticie, Slovakia, 2016).

Публікації. За результатами дослідження опубліковано 29 наукових праць, у тому числі 10 у фахових періодичних виданнях (з них 4 статті в іноземних журналах з імпаکت-фактором і 6 статей у наукових фахових виданнях України, які входять до переліку ВАК/МОН України), та 19 тез доповідей на наукових конференціях.

Структура та обсяг дисертації. Дисертація складається зі вступу, шести розділів, висновків, списку літератури із 185 найменувань та двох додатків. Робота викладена на 256 сторінках, з яких 171 сторінку становить основний текст дисертації. Вона містить 11 таблиць та 44 рисунки.

ОСНОВНИЙ ЗМІСТ РОБОТИ

У **вступі** проведено обґрунтування вибору теми дослідження, сформульовано мету і завдання роботи, вказано об'єкт і предмет дослідження. Представлені основні положення щодо новизни отриманих результатів та

відзначена їх практична цінність. Зазначено особистий внесок здобувача, відомості про апробацію роботи, її структуру та обсяг.

Огляду сучасного стану теорії зіткнення повільних електронів з атомами та іонами присвячено **перший розділ** дисертації. В ньому розглянуто ті теоретичні методи, які знайшли широке застосування останнім часом і ґрунтуються на ідеї дискретизації континууму квантовомеханічної системи «атом + налітаючий електрон». На основі цього огляду встановлено, що найбільш ефективним і точним методом дослідження ефектів, що відбуваються при зіткненні повільних електронів з атомами та іонами, є R -матричний підхід, подальше вдосконалення і застосування якого до задач розсіяння електронів на складних багатоелектронних атомах є основною метою даної дисертаційної роботи.

Другий розділ дисертації присвячено систематичному викладу фізичних основ методу сильного зв'язку каналів (СЗК) та методу R -матриці і їх модифікацій, які ґрунтуються на застосуванні залежних від терму неортогональних орбіталей та базисних сплайнів.

У підрозділі 2.1 в рамках методу СЗК розглядається багатоканальна квантова задача розсіяння повільних електронів на складних атомах. В схемі LS -зв'язку стан системи $e+A$ характеризується набором квантових чисел $\Gamma = \gamma L S M_L M_S \pi$, де L , S , M_L , M_S і π — повний орбітальний і спіновий моменти, їх проекції на задану вісь та парність повної $(N+1)$ -електронної системи відповідно, $\gamma = L_i S_i M_{L_i} M_{S_i}$ і π_i — аналогічний набір квантових чисел мішені A в i -му стані. Хвильова функція $\Psi_\alpha^\Gamma(X, x_{N+1})$, що описує розсіяння електрона на N -електронній мішені A , є розв'язком рівняння Шредингера

$$(H_{N+1} - E)\Psi_\alpha^\Gamma(X, x_{N+1}) = 0, \quad H_{N+1} = \sum_{i=1}^{N+1} \left(-\frac{1}{2}\nabla_i^2 - \frac{Z}{r_i}\right) + \sum_{i>j=1}^{N+1} \frac{1}{r_{ij}} \quad (1)$$

з певними граничними умовами задачі $e+A$ -розсіяння. Тут H_{N+1} — гамільтоніан $(N+1)$ -електронної системи «атом + налітаючий електрон», N — число електронів в атомі-мішені A , Z — заряд ядра, E — повна енергія системи $e+A$, $x_i \equiv (\vec{r}_i, \sigma_i)$ — просторові та спінові координати i -го електрона, $X \equiv (x_1, \dots, x_N)$ позначає сукупність просторових і спінових координат усіх N електронів атома-мішені A . Нижній індекс α у функції $\Psi_\alpha^\Gamma(X, x_{N+1})$, яку часто називають хвильовою функцією зіткнення, характеризує початкові умови і зазвичай позначає вхідний канал розсіяння. Хвильову функцію зіткнення $\Psi_\alpha^\Gamma(X, x_{N+1})$ можна представити у вигляді розкладу за повним набором N -електронних хвильових функцій $\Phi(X) \equiv \Phi(x_1, \dots, x_N)$ мішені A , які є власними станами гамільтоніана

H_N N -електронного атома А. Коефіцієнти такого розкладу будуть відігравати роль хвильової функції налітаючого електрона. У практичних розрахунках цей розклад записують в наступному вигляді:

$$\Psi_{\alpha}^{\Gamma}(X, x_{N+1}) = A \sum_{i=1}^{N+1} \bar{\Phi}_i^{\Gamma}(X; \vec{r}_{N+1}, \sigma_{N+1}) \frac{F_{i\alpha}^{\Gamma}(r_{N+1})}{r_{N+1}} + \sum_{j=1}^m c_j \chi_j^{\Gamma}(X, x_{N+1}). \quad (2)$$

Тут A — оператор антисиметризації, n — число каналів, а індекс i позначає номер каналу. На практиці, як правило, в розклад (2) включають усі члени, що відповідають відкритим каналам і лише скінченне число членів, які описують енергетично закриті канали. Функції каналів $\bar{\Phi}_i^{\Gamma}$ містять хвильові функції мішені $\Phi_i(x_1, \dots, x_N)$ та спінові й кутові частини хвильової функції налітаючого електрона, які пов'язані між собою відповідно до правил векторного додавання моментів. У випадку нерелятивістського гамільтоніана H_{N+1} цей зв'язок відповідає фіксованим значенням повного спіну S та повного орбітального моменту L (кожен з яких комутиє з гамільтоніаном H_{N+1}).

Розклад повної хвильової функції (2) $(N+1)$ -електронної системи здійснюється за набором станів і псевдостанів, хвильові функції яких будуються у вигляді лінійної комбінації функцій конфігураційних станів (ФКС) $\varphi_j(x_1, \dots, x_N)$:

$$\Phi_i(X) = \sum_j c_{ij} \varphi_j(x_1, \dots, x_N). \quad (3)$$

У рамках багатоконфігураційного методу Хартрі-Фока (БКХФ) кожен елемент φ_j ФКС-базису відповідає певній електронній конфігурації і представляє собою лінійну комбінацію антисиметризованих добутків одноелектронних атомних орбіталей $\varphi_{\alpha_j}(x_j)$. Якщо спін-орбітальна взаємодія несуттєва, то хвильова функція окремого електрона в центральному полі може бути представлена у вигляді добутку просторової та спінової функцій:

$$\varphi_{\alpha_j}(x) = \varphi_{n_j \ell_j m_j}(\vec{r}) \chi(m_S | \sigma) = \frac{1}{r} P_{n_j \ell_j} Y_{\ell_j m_j}(\hat{r}) \chi(m_S | \sigma) \quad (4)$$

Тут через α_j позначено набір квантових чисел n_j , ℓ_j , m_j і m_S j -го електрона. Енергетичний спектр $E_i(Z, N)$ мішені А і невідомі коефіцієнти c_{ij} розкладу (3) можна визначити шляхом діагоналізації N -електронного гамільтоніана H_N на функціях вигляду (3): $\langle \Phi_i | H_N | \Phi_j \rangle = E_i(Z, N) \delta_{ij}$.

Друга сума в правій частині розкладу (2) містить квадратично інтегровні кореляційні функції $\chi_j^{\Gamma}(x_1, \dots, x_N)$, які описують зв'язані стани $(N+1)$ -електронної системи і мають ту ж кутову симетрію, що і

$\Psi_{\alpha}^{\Gamma}(X, x_{N+1})$. Ці функції служать для покращення опису станів системи на малих відстанях від ядра і часто приводять до більш швидкої збіжності розкладу (2). За допомогою функцій χ_j^{Γ} також можна врахувати вплив деяких автовідричних станів (АВС) від'ємних іонів A^{-} , які проявляються в процесах розсіяння електронів на нейтральних атомах A . У практичних розрахунках кореляційні функції χ_j^{Γ} найчастіше використовують для усунення обмежень, які накладаються на хвильову функцію зіткнення Ψ_{α}^{Γ} умовою ортогональності функції $F_{i\alpha}^{\Gamma}$ усім радіальним орбіталям мішені $P_{n_j \ell_j}$ тієї ж симетрії:

$$\langle P_{n_j \ell_j} | F_{i\alpha}^{\Gamma} \rangle = \int_0^{\infty} P_{n_j \ell_j}(r) F_{i\alpha}^{\Gamma}(r) dr = 0, \text{ при } \ell_i = \ell_j. \quad (5)$$

Умова ортогональності (5) є, безумовно, суто «технічним» припущенням, оскільки радіальні орбітали $P_{n_j \ell_j}$ і $F_{i\alpha}^{\Gamma}$ обчислюються в різних потенціалах. Вона не впливає із основних вимог квантової механіки і була впроваджена в методі СЗК, виходячи з міркувань зручності обчислень. Унаслідок обмежень, що накладаються на функцію зіткнення Ψ_{α}^{Γ} умовою ортогональності (5), налітаючий електрон не може бути віртуально захоплений в одну із незаповнених підоболонок, врахованих у розкладі (3) станів і псевдостанів мішені. У рамках методу СЗК можливість такого захоплення, як зазначалося вище, враховується шляхом включення в розклад (2) спеціальних додаткових кореляційних функцій χ_j^{Γ} . Однак такий спосіб урахування резонансних ефектів не є найбільш економним і часто призводить до появи нефізичної псевдорезонансної структури в перерізах розсіяння та до необхідності розв'язання громіздкої системи зв'язаних інтегро-диференціальних рівнянь для $F_{i\alpha}^{\Gamma}$. Щоб уникнути цих труднощів, збільшити точність теорії і розширити область її застосування, ми повинні відмовитися від умови вимушеної ортогональності (5) функцій континууму $F_{i\alpha}^{\Gamma}$ до радіальних орбіталей мішені $P_{n_j \ell_j}$. При цьому окремо вводити в розклад (2) спеціальний набір кореляційних функцій χ_j^{Γ} , який враховує вплив деяких автоіонізаційних станів, немає потреби, оскільки тепер перша сума в розкладі (2) містить хвильові функції таких станів. Підставляючи в рівняння Шредінгера (1) функцію зіткнення Ψ_{α}^{Γ} у вигляді (2) і проєкціюючи це рівняння по чергово на хвильові функції мішені Φ_i та кореляційні функції χ_j^{Γ} , можна дістати таку систему зв'язаних інтегро-диференціальних рівнянь для функцій континууму $F_i \equiv F_{i\alpha}^{\Gamma}(r)$:

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} - \frac{\ell_i(\ell_i + 1)}{r^2} + \frac{2Z}{r} + k_i^2 \right) F_i(r) = 2 \sum_j (V_{ij} + W_{ij} + X_{ij}) F_j(r), \quad (6)$$

де $k_i^2 = 2[E - E_i(Z, N)]$. Загальні вирази для локального прямого V_{ij} , нелокального обмінного W_{ij} та нелокального кореляційного X_{ij} потенціалів можна сконструювати з допомогою програмного коду [1*].

У підрозділі 2.2 роз'яснено основи стандартного методу R -матриці, в якому задача діагоналізації гамільтоніана на просторі як відкритих, так і закритих каналів зводиться по суті до розв'язування системи алгебраїчних рівнянь. Відмітна особливість цього методу полягає в тому, що увесь конфігураційний простір $(N+1)$ -електронної системи розбивається на дві області: внутрішню $r \leq a$, де усі частинки системи (електрони та ядро) попарно близькі одна до одної і сильно взаємодіють між собою, і зовнішню $r > a$, в якій розсіяний електрон «чутливий» лише до локального потенціалу взаємодії з атомом. Радіус внутрішньої області a вибирається мінімальним, але таким, щоб усі радіальні хвильові функції $P_{n_j l_j}$ атомних електронів із заданою точністю оберталися в нуль при $r \geq a$. В даному методі обчислюється R -матриця, яка визначається із рівняння

$$F_i^\Gamma(a) = \sum_{j=1}^n R_{ij}^\Gamma(E) \left(a \frac{dF_j^\Gamma}{dr_{N+1}} - b_j F_j^\Gamma \right)_{r_{N+1}=a}, \quad i = 1, \dots, n \quad (7)$$

шляхом розв'язання задачі про $e+A$ -зіткнення у внутрішній області $r \leq a$. Тут F_j і dF_j/dr_{N+1} — розв'язки системи рівнянь (6) на межі $r = a$, причому вибір параметрів b_j може бути довільним. Розв'яжемо задачу про $e+A$ -зіткнення у внутрішній області. Для цього представимо повну хвильову функцію $(N+1)$ -електронної системи при заданій енергії E у вигляді розкладу

$$\Psi_E^\Gamma = \sum_k A_{Ek}^\Gamma \Psi_k^\Gamma, \quad r < a. \quad (8)$$

Подібно до (2), сконструюємо для кожного набору квантових чисел $LS\pi$ незалежний від енергії дискретний базис $(N+1)$ -електронних функцій

$$\Psi_k^\Gamma(X, x_{N+1}) = A \sum_{i,j} \bar{\Phi}_i^\Gamma(X; \hat{r}_{N+1}, \sigma_{N+1}) \frac{u_j(r_{N+1})}{r_{N+1}} c_{ijk}^\Gamma + \sum_i \chi_i^\Gamma(X, x_{N+1}) d_{ik}^\Gamma, \quad (9)$$

де функції $\bar{\Phi}_i^\Gamma$ і χ_i^Γ мають такий самий зміст, як і в розкладі (2). Зазначимо тепер, що в першій сумі правої частини рівності (9) ми розклали радіальні орбітали розсіяного електрона $F_{i\alpha}^\Gamma$ за базисними функціями u_j , заданими на скінченному інтервалі $0 \leq r \leq a$ наступним чином. Для базисних функцій u_j , які задовольняють довільним граничним умовам при $r = a$, гамільтоніан H_{N+1} у внутрішній області не є ермітовим унаслідок

того, що поверхневі члени не обертаються в нуль при $r = a$. Тому при розгляді задачі $e+A$ -розсіяння у внутрішній області зручно користуватись оператором Блоха L_{N+1} [2*], який анулює згадані вище поверхневі члени при $r = a$. Використовуючи розклад функції Гріна $(H_{N+1} + L_{N+1} - E)^{-1}$ за дискретним базисом Ψ_k^Γ , формальний розв'язок рівняння Шредінгера (1) можна подати у вигляді

$$|\Psi^\Gamma\rangle = \sum_k |\Psi_k^\Gamma\rangle \frac{1}{E_k^\Gamma - E} \langle \Psi_k^\Gamma | L_{N+1} | \Psi_k^\Gamma \rangle. \quad (10)$$

Проекціюючи це рівняння на функції каналів $\bar{\Phi}_i^\Gamma$, приходимо до формули (7), в якій елементи R -матриці визначаються виразом

$$R_{ij}^\Gamma(E) = \frac{1}{2a} \sum_k \frac{w_{ik}^\Gamma(a) w_{jk}^\Gamma(a)}{E_k^\Gamma - E} \quad (11)$$

і введено поверхневі амплітуди w_{ik}^Γ . Коефіцієнти c_{ijk}^Γ і d_{ik}^Γ розкладу (9) визначаються водночас із власними значеннями енергії E_k^Γ при числовій діагоналізації матриці модифікованого гамільтоніана $H_{N+1} + L_{N+1}$ на дискретному базисі Ψ_k^Γ (9):

$$\langle \Psi_k^\Gamma | H_{N+1} + L_{N+1} | \Psi_{k'}^\Gamma \rangle_{\text{int}} = E_k^\Gamma \langle \Psi_k^\Gamma | \Psi_{k'}^\Gamma \rangle_{\text{int}}. \quad (12)$$

Проведений в підрозділі 2.2 аналіз основних рівнянь теорії R -матриці показує, що основні труднощі цього методу (зокрема, слабка збіжність R -матричного розкладу (8)) можна обійти, якщо замість базису чисельних функцій u_j використовувати базисні сплайни B_i з компактними носіями у внутрішній області. В практичних розрахунках використання B -сплайнів як базисних функцій u_j значно прискорює обчислювальний процес, забезпечуючи при цьому необхідну точність сплайн-апроксимації хвильових функцій. Таким чином можна уникнути необхідності введення в діагональні матричні елементи (11) так званих поправок Баттла. У цьому ж підрозділі запропоновано новий метод дискретизації континууму, який базується на одноразовій діагоналізації матриці повного гамільтоніана $(N + 1)$ -електронної системи «атом + налітаючий електрон» у B -сплайновому базисі. Основна зручність такого базису полягає в тому, що матриця повного гамільтоніана $H_{N+1} + L_{N+1}$ має сильно розріджену, а саме стрічкову структуру, що суттєво спрощує розв'язання відповідної системи алгебраїчних рівнянь. Обчислення матриці гамільтоніана $H_{N+1} + L_{N+1}$ в дискретному базисі (9) і її діагоналізацію можна провести за допомогою програмного коду [1*] для кожного фіксованого набору квантових чисел $LS\pi$.

У підрозділі 2.3 роз'яснено основи нової, так званої БСР-версії методу R -матриці, в якій 1) радіальні функції континууму $F_{i\alpha}^{\Gamma}(r)$ не ортогоналізуються з орбіталами мішені $P_{n_j\ell_j}(r)$, 2) резонансні ефекти враховуються без залучення кореляційних функцій χ_j^{Γ} , 3) використовуються залежні від терму неортогональні орбіталі та B -сплайни як базисні функції. Такий підхід ґрунтується на коректних розрахунках радіальних функцій континууму $F_{i\alpha}^{\Gamma}(r)$ у внутрішній області $r \leq a$. Використання неортогональних (щодо зв'язаних орбіталей мішені $P_{n_j\ell_j}$) хвильових функцій континууму $F_{i\alpha}^{\Gamma}$ позбавляє нас необхідності вводити в другу суму розкладу (9) додатковий набір кореляційних функцій, які, як зазначалося вище, часто приводять до псевдорезонансної структури в перерізах розсіяння. На відміну від стандартного методу R -матриці, в запропонованій БСР-версії радіальні орбіталі мішені $P_{n_j\ell_j}$ оптимізуються для кожного терму незалежно. Використання залежних від терму неортогональних орбіталей забезпечує більш точний опис станів мішені і дає змогу найбільш повно врахувати такі важливі фізичні ефекти, як валентні і кор-валентні кореляції в атомах з незаповненими оболонками та релаксацію квантової орбіти збудженого електрона. У пункті 2.3.2 показано, що базисні сплайни B_i володіють властивостями, немовби спеціально призначеними для вирішення обчислювальних проблем R -матричного методу. Ідея застосування базисних сплайнів B_i в теорії R -матриці пов'язана з кількома важливими моментами. По-перше, математичну основу можливості використання B -сплайнів як базисних функцій u_j становлять їх фінітні властивості. А саме, кожен B -сплайн має асоційований з R -матричним відрізком $[0, a]$ однозначно визначений мінімальний компактний носій, що вельми важливо для коректної постановки задачі розсіяння у внутрішній області $r \leq a$. По-друге, використання B -сплайнів як базисних функцій u_j аналогічне розв'язанню задачі $e+A$ -розсіяння на R -матричному відрізку $[0, a]$, поза яким базисні сплайни B_i дорівнюють нулю. При цьому усі потенціали взаємодії, включаючи прямиий V_{ij} , обмінний W_{ij} та кореляційний X_{ij} , проєкціюються на повний B -сплайновий базис і тим самим природним чином ефективно обрізаються при $r > a$. І нарешті, по-третє, скінчений набір B -сплайнів утворює на відрізку $[0, a]$ повний базис. Ця властивість базисних сплайнів B_i дозволяє будувати оптимальні компактні розклади для радіальних орбіталей розсіяного електрона $F_{i\alpha}^{\Gamma}$ у вигляді скінчених сум. А це в свою чергу означає, що сплайн-представлення для різних квантомеханічних операторів будуть мати сильно розріджену стрічкову структуру, що істотно спрощує розв'язання відповідних рівнянь. Разом з тим B -сплайни найкращим чином підходять для створення обчислювальних методів теорії розсіяння.

В третьому розділі дисертації з використанням розширеної БСР-версії R -матричного методу проведено систематичне дослідження розсіяння електронів на нейтральному атомі кальцію та фоторозщеплення від'ємного іона Ca^- в низькоенергетичній області від порога до 4 еВ. Для точного представлення хвильових функцій мішені в підрозділі 3.2 використовується багатоконфігураційний метод Хартрі-Фока (БКХФ) з набором залежних від терму неортогональних орбіталей. Розклад сильного зв'язку включає 39 зв'язаних станів нейтрального кальцію, що охоплюють усі стани від основного до $4s8s\ ^1S$. В підрозділі 3.3 детально досліджена складна резонансна структура проінтегрованих за кутом повного та пружного (див. Рис. 1) перерізів розсіяння електронів на нейтральному атомі кальцію. Проведений аналіз фазових зсувів показав, що наявність великого максимуму в перерізах пружного розсіяння є наслідком утворення в процесі $e+\text{Ca}$ -зіткнення резонансу форми $4s^23d\ ^2D$. Розраховані характеристики (положення $E_r = 1.187$ еВ та ширина $\Gamma = 0.678$ еВ) даного резонансу добре узгоджуються з експериментальними даними [4*,7*].

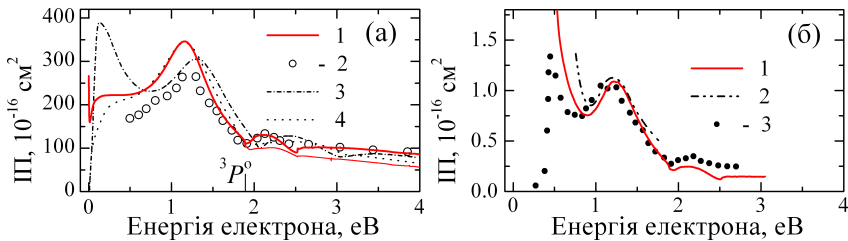


Рис. 1: Перерізи розсіяння електронів на атомі кальцію:

(а) 1 — БСР39; 2 — Романюк та ін. [4*]; 3 — Юань і Ліпін [5*]; 4 — Юань і Фріче [6*]; (б) 1 — БСР39; 2 — Романюк та ін. [7*]; 3 — Келемен та ін. [8*].

Виявлена важлива роль поляризації атомної оболонки Ca при формуванні $4s^23d\ ^2D$ -резонансу форми. Показано, що нефізичний низькоенергетичний (трохи вище нульової енергії) пороговий максимум, виявлений в R -матричних розрахунках Юанем і Ліном [5*], зумовлений дисбалансом між зв'язаними атомними станами та станами розсіяння в їх розкладах сильного зв'язку. Обчислено внески в проінтегрований за кутом переріз пружного розсіяння електронів на атомі Ca від 2S -, $^2P^o$ - і 2D -парціальних хвиль. Це дозволило однозначно ідентифікувати походження характерних структур в енергетичній залежності перерізу пружного $e+\text{Ca}$ -розсіяння, а саме: 1) фазовий зсув для S -хвилі проходить через нуль при 0.07 еВ, де 2S -парціальний переріз спричиняє мінімум Рамзауера-

Таунсенда в перерізі пружного розсіяння; 2) домінуючий пік при 1.15 eВ обумовлений резонансом в 2D -парціальному перерізі, який однозначно можна ідентифікувати як резонанс форми $4s^2 3d {}^2D$; 3) малий пік між порогами збудження $4s4p {}^3P^o$ і $3d4s {}^3D$ слід ідентифікувати як $4s4p^2 {}^2D$ -резонанс, який руйнується внаслідок відкриття нових каналів розпаду.

В підрозділі 3.4 обчислено повний і парціальні перерізи фоторозщеплення від'ємного іона Ca^- , енергетична залежність яких добре узгоджуються з наявними експериментальними даними як за положенням різкого максимуму (трохи вище $4s4p {}^1P^o$ -порога), так і за абсолютними значеннями перерізів. Точно відтворено положення мінімуму Купера і порогові резонансні особливості. Обчислено найбільш важливі парціально-хвильові внески у повний переріз фоторозщеплення Ca^- . Встановлено, що резонанси форми $(4s4p {}^1P^o)kp$ відповідають за різкі піки в ${}^2S^-$, ${}^2P^-$ і 2D -парціальних перерізах фоторозщеплення Ca^- при енергіях $E_r = 2.943, 2.936$ та 2.940 eВ відповідно.

В **четвертому розділі** проведено систематичні дослідження збудження чотирьох нижніх збуджених станів атома кальцію електронним ударом. Отримано нові результати для інтегрованих за кутом та диференціальних за кутом перерізів збудження оптично дозволеного $4s^2 {}^1S - 4s4p {}^1P^o$ та забороненого $4s^2 {}^1S - 4s4p {}^3P^o$ переходів, а також (псевдо-) Стоксових параметрів для збудження електронних ударом чотирьох нижніх збуджених станів атома Ca. Проведено аналіз впливу електронних кореляцій, ефектів зв'язку каналів, поляризаційних явищ та каскадних переходів з вищих збуджених станів на перерізи збудження дозволеного $4s^2 {}^1S - 4s4p {}^1P^o$ та забороненого $4s^2 {}^1S - 4s4p {}^3P^o$ переходів. Встановлено, що: 1) перерізи дозволеного переходу $4s^2 {}^1S - 4s4p {}^1P^o$ значно більш чутливі до кореляційних ефектів в мішені, ніж до короткодючих взаємодій з налітаючим електроном; 2) перерізи забороненого переходу $4s^2 {}^1S - 4s4p {}^3P^o$ дуже чутливі до короткодючих взаємодій та резонансних ефектів; 3) ефекти зв'язку каналів слабше впливають на оптично дозволений перехід $4s^2 {}^1S - 4s4p {}^1P^o$, ніж на заборонений перехід $4s^2 {}^1S - 4s4p {}^3P^o$; 4) непряме заселення рівнів $4s4p {}^{1,3}P^o$ внаслідок каскадних переходів з вищих збуджених станів є більш важливим для забороненого переходу $4s^2 {}^1S - 4s4p {}^3P^o$, ніж для оптично дозволеного $4s^2 {}^1S - 4s4p {}^1P^o$.

В **розділі 5** наведено результати БСР-розрахунків енергетичних, кутових та енергетично-кутових залежностей диференціальних перерізів (ДП) пружного $e+\text{Ca}$ -розсіяння та збудження п'яти нижніх станів $4 {}^3P^o$, $3 {}^3D^o$, $3 {}^1D$, $4 {}^1P^o$ і $5 {}^1S$ атома Ca електронним ударом. Результати розрахунків кутових залежностей ДП пружного розсіяння добре узгоджуються з наявними експериментальними даними для енергій зіткнення 20, 40, 60

та 100 еВ. Підтверджено наявність виявленого в експерименті локального мінімуму (при $\sim 2\text{eV}$) в енергетичній залежності ДП пружного $e+\text{Ca}$ -розсіяння на кут 90° . Відмітною особливістю розрахованих енергетично-кутових залежностей ДП пружного $e+\text{Ca}$ -розсіяння є наявність в їх тривимірних графічних зображеннях — 3D-поверхнях чітких екстремумів поблизу порогів збудження резонансних рівнів, кількість яких при заданій енергії точно корелює з кількістю відкритих каналів розсіяння. Осердя нашого аналізу становлять критичні точки (E_c, θ_c) , в яких ДП розсіяння досягають своїх екстремальних (найбільших чи найменших) значень. Точні значення для критичних точок (E_c, θ_c) є вкрай важливими, оскільки дозволяють провести найбільш радикальну та чутливу перевірку теорії.

В шостому розділі наведено результати розрахунків низькоенергетичного розсіяння електронів на атомі Al та фоторозщеплення від'ємного іона Al^- . Для досягнення хорошого опису структури атома-мішені використовувався комбінований метод БКХФ-БСР з B -сплайнами як базисними функціями, який дозволяє найбільш повно врахувати внутрішньооболонкові кореляції (між $3s$ і $3p$ підоболонками). Розраховані енергії зв'язку основного та 13 збуджених станів атома алюмінію з електронними конфігураціями $3s^2np \ ^2P^o$ ($n = 3, 4, 5, 6$), $3s^2ns \ ^2S$ ($n = 4, 5, 6$), $3s^2nd \ ^2D$ ($n = 3, 4$), $3s3p^2 \ ^4,2P, \ ^2D, \ ^2S$ та $3s^24f \ ^2F^o$ добре узгоджуються з наявними експериментальними даними. Обчислено сили осциляторів для 26 найважливіших переходів в атомі алюмінію. Результати розрахунків сил осциляторів у формі довжини і в формі швидкості практично збігаються і добре узгоджуються з даними, рекомендованими NIST [3*].

Проведено систематичне дослідження процесів розсіяння (пружного та непружного) повільних електронів на атомах Al. Виявлено складну енергетичну залежність перерізів пружного $e+\text{Al}$ розсіяння, зумовлену різними парціально-хвильовими та резонансними внесками. Показано, що при низьких енергіях ($3s^23p^2 \ ^1S$ -резонанс призводить до утворення глибокого мінімуму в енергетичній залежності перерізу, тоді як $(3s3p^3) \ ^3D^o$ -резонанс проявляється у вигляді різкого піку при 3.7 еВ. Проведене в підрозділі 6.1 порівняння результатів чотирьох варіантів БСР-розрахунків (БСР10, БСР32, БСР81 та БСР587) характеристик $e+\text{Al}$ розсіяння демонструє: 1) добре узгодження передбачень двох основних (БСР81 та БСР587) моделей розсіяння; 2) сильну чутливість положень енергетичних рівнів ($3s^23p^2 \ ^3P, \ ^1D$ та 1S від'ємного іона Al^- до балансу кореляційних поправок у хвильових функціях N -електронної мішені та $(N+1)$ -електронної системи розсіяння $e+\text{Al}$; 3) помітний вплив поляризації мішені на перерізи пружного розсіяння, збудження та іонізації атома Al електронним ударом. Встановлено також, що вплив зв'язку дискретних

станів мішені Al з континуумом на перерізи пружного і непружного $e+Al$ розсіяння є значно меншим, ніж для атомів з частково заповненою $2p$ -оболонкою, таких як C, N та F. У цьому ж підрозділі наведено результати БСР-розрахунків енергетичних залежностей перерізів для найбільш важливих дипольно-дозволених $3p\ ^2P^o - ns\ ^2S$ ($n = 4, 5, 6$), $3p\ ^2P^o - nd\ ^2D$ ($n = 3, 4, 5$), $3s^23p\ ^2P^o - 3s3p^2\ ^2S$ та $3s^23p\ ^2P^o - 3s3p^2\ ^2P$, недипольних $3p\ ^2P^o - np\ ^2P^o$ ($n = 4, 5, 6$), $4s\ ^2S - ns\ ^2S$ ($n = 5, 6$), $3p\ ^2P^o - 4f\ ^2F^o$ та обмінних $4s\ ^2S - 3p^2\ ^4P$, $3p^2\ ^4P - 4p\ ^2P^o$, $3p^2\ ^4P - nd\ ^2D$ ($n = 3, 4$) переходів в атомі Al. Виявлено сильний вплив ефектів зв'язку каналів на поведінку перерізів як для переходів з основного стану, так і для переходів між збудженими станами. Вперше досліджено резонансні ефекти, що пов'язані зі збудженням АІС ($3s3p^2$) 2P і 2S . Розраховано положення цих резонансів.

На основі моделі розсіяння БСР587 проведено дослідження іонізації атома Al в основному стані ($3s^23p$) 2P електронним ударом в діапазоні енергій зіткнення від порога до 110 еВ. Показано, що процес прямої іонізації атома Al супроводжується збудженням одного з електронів внутрішньої $3s$ -оболонки, тобто утворенням квазістаціонарних АІС ($3s3p^2$) 2P та 2S , автоіонізаційний розпад яких дає додатковий суттєвий внесок в іонізацію Al. Результати БСР587 розрахунків перерізів іонізації Al електронним ударом добре узгоджуються з наявними експериментальними даними та теоретичними передбаченнями інших авторів.

В підрозділі 6.2 обчислено і докладно проаналізовано повні перерізи фоторозщеплення аніона Al^- в основному ($3s^23p^2$) 3P і збудженому ($3s^23p^2$) 1D станах. Виявлено складну резонансну структуру в енергетичних залежностях повного та парціальних перерізів фоторозщеплення Al^- в основному стані ($3s^23p^2$) 3P , зумовлену утворенням авторвідривних станів (АВС) Al^- : $3s^24s4p\ ^3P^o$, $(3s3p^3)\ ^3,1D^o$, $^3,1P^o$ та $^3S^o$, $(3s^24p5s)\ ^1D^o$, $(3s^23d4p)\ ^3P^o$. Визначено положення і ширини цих АВС та проведено їх спектроскопічну класифікацію. Встановлено також, що помітна резонансна структура в перерізах фоторозщеплення Al^- в збудженому стані ($3s^23p^2$) 1D в околі 6 еВ зумовлена сукупним внеском двох станів ($3s3p^3$) $^1P^o$ та ($3s3p^3$) $^1D^o$ від'ємного іона Al^- . Усі інші структури відображають припорогові максимуми, спричинені відкриттям нових каналів.

ВИСНОВКИ

- Розроблено нову БСР-версію R -матричного методу, яка дозволяє: 1) без залучення будь-яких кореляційних функцій враховувати вплив резонансних ефектів; 2) найбільш повно враховувати тонкі деталі структури атома-мішені; 3) з високою точністю обчислювати атомні характеристики

та характеристики елементарних процесів взаємодії повільних електронів та фотонів з будь-яким складним атомом та від'ємним іоном.

- Запропоновано новий метод дискретизації континууму $(N+1)$ -електронної системи, який базується на одноразовій діагоналізації матриці повного гамільтоніана H_{N+1} у B -сплайновому базисі.
- З використанням залежних від терму неортогональних орбіталей зроблено новий ефективний спосіб урахування резонансних ефектів, який дозволяє мінімізувати псевдорезонансну структуру в перерізах розсіяння.
- На основі розширеної БСР-версії методу R -матриці одержано великий масив даних про енергії рівнів, сили осциляторів та перерізи елементарних процесів взаємодії повільних електронів з атомами Ca і Al та фотонів з від'ємними іонами Ca^- та Al^- . Дані охоплюють пружне розсіяння, передачу імпульсу, збудження та іонізацію атомів Ca і Al електронним ударом, а також процес фоторозщеплення від'ємних іонів Ca^- та Al^- .
- З використанням розширеної версії БСР-версії R -матричного методу проведено систематичне дослідження розсіяння електронів на атомі Ca та фоторозщеплення від'ємного іона Ca^- в області енергій від порога до 4 еВ. Результати наших БСР39-розрахунків інтегрованого за кутом повного перерізу та перерізу пружного $e+\text{Ca}$ -розсіяння добре узгоджуються з наявними експериментальними даними як за положенням основного максимуму, так і за абсолютними значеннями перерізів. Підтверджено, що домінуючий пік в перерізі пружного $e+\text{Ca}$ -розсіяння обумовлений резонансом форми $4s^2 3d^2 D$, тоді як резонанси форми $(4s4p^4 P^o)kp$ відповідають за різкі піки в перерізах фоторозщеплення Ca^- .
- Комбінованим методом БКХФ-БСР, що ґрунтується на концепції «стигнутого атома» та використанні B -сплайнів як базисних функцій, розраховано енергії зв'язку основного та 13 збуджених станів атома Al з електронними конфігураціями $3s2np^2 P^o$ ($n = 3, 4, 5, 6$), $3s^2 ns^2 S$ ($n = 4, 5, 6$), $3s^2 nd^2 D$ ($n = 3, 4$), $3s3p^2^4 P, ^2 D, ^2 S$ та $3s^2 4f^2 F^o$. Результати розрахунків енергій зв'язку зазначених станів атома Al добре узгоджуються з наявними експериментальними даними, рекомендованими NIST.
- Виконано чисельні розрахунки сил осциляторів для найважливіших переходів в атомі Al. Для досягнення хорошого опису структури мішені використовувався комбінований БКХФ-БСР-метод, який дозволяє найбільш повно врахувати внутрішньооболонкові кореляції (між $3s$ і $3p$ підоболонками) для систем з відкритою оболонкою, таких як Al. Результати розрахунків сил осциляторів у формі довжини і в формі швидкості практично збігаються і добре узгоджуються з даними, рекомендованими NIST.
- Вперше проведено систематичне дослідження пружного розсіяння по-

вільних електронів на атомах алюмінію. Виявлено складну енергетичну залежність перерізів пружного $e+Al$ розсіяння, зумовлену різними парціально-хвильовими та резонансними внесками. З'ясовано причини наявних розбіжностей між результатами чотирьох варіантів БСР-розрахунків (БСР10, БСР32, БСР81 та БСР587) перерізів пружного $e+Al$ розсіяння, що відрізняються кількістю врахованих в R -матричному розкладі зв'язаних станів та псевдостанів континууму атома Al . Встановлено, що сукупний вплив поляризації мішені налітаючим електроном та ефектів зв'язку дискретних станів між собою та з іонізаційним континуумом на перерізи пружного $e+Al$ розсіяння зумовлює розбіжності між результатами двох основних БСР81 та БСР587 моделей розсіяння у межах 10%.

- Вперше проведено систематичні розрахунки енергетичних залежностей перерізів для найбільш важливих дипольно-дозволених, недипольних та обмінних переходів в атомі Al . Виявлено сильний вплив ефектів зв'язку каналів на поведінку перерізів як для переходів з основного стану, так і для переходів між збудженими станами. Вперше досліджено резонансні ефекти, що пов'язані зі збудженням АІС ($3s3p^2$) 2P , 2S в атомі алюмінію. Розраховано положення цих резонансів.

- На основі моделі розсіяння БСР587 проведено дослідження іонізації атома Al в основному стані ($3s^23p$) 2P електронним ударом в діапазоні енергій зіткнення від порога до 110 еВ. Показано, що процес прямої іонізації атома Al супроводжується утворенням квазістаціонарних АІС ($3s3p^2$) 2P та 2S , автоіонізаційний розпад яких дає додатковий суттєвий внесок в іонізацію Al . Результати БСР587-розрахунків перерізів іонізації Al добре узгоджуються з наявними експериментальними даними та теоретичними передбаченнями інших авторів.

- Розраховано і докладно проаналізовано перерізи фоторозщеплення від'ємного іона Al^- в основному ($3s^23p^2$) 3P і збудженому ($3s^23p^2$) 1D станах. Виявлено складну резонансну структуру в енергетичних залежностях повних та парціальних перерізів фоторозщеплення Al^- ($3s^23p^2$) 3P та Al^- ($3s^23p^2$) 1D , зумовлену утворенням автовідривних станів Al^- .

СПИСОК ЦИТОВАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

- 1*. Zatsarinny O. BSR: B-spline atomic R-matrix codes // Comput. Phys. Commun. 2006. Vol. 174, no. 4. P. 273–356.
- 2*. Burke P.G. The R-Matrix Theory of Atomic Processes / P.G. Burke, W.D. Robb // Adv. At. Mol. Opt. Phys. 1976. V. 11. P. 143–214.
- 3*. NIST Atomic Spectra Database. URL: <https://physics.nist.gov/asd> .

- 4*. Романюк Н., Шпенник О., Запесочный И. Сечения и особенности рассеяния электронов на атомах кальция стронция и бария // Письма в ЖЭТФ. 1980. Т. 32. С. 472–475.
- 5*. Yuan J., Lin C. D. Effect of core-valence electron correlation in low-energy electron scattering with Ca atoms // Phys. Rev. A . 1998. Vol. 58. P. 2824–2827.
- 6*. Yuan J., Fritsche L. Electron scattering by Ca atoms and photodetachment of Ca^- ions: An R-matrix study // Phys. Rev. A . 1997. Vol. 55. P. 1020–1027.
- 7*. Дослідження низькоенергетичного розсіювання електронів на атомах Mg та Ca з використанням оптимізованого трохойдного спектрометра / Н.І. Романюк, О.Б. Шпенник, Ф.Ф. Папп та ін. // Укр. фіз. журн. 1992. Т. 37, № 11. С. 1639–1647.
- 8*. Kelemen V., Remeta E., Sabad E. Scattering of electrons by Ca, Sr, Ba and Yb atoms in the 0-200 eV energy region in the optical potential model // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 1995. V. 28, No 8. P. 1527–1546.

СПИСОК ПУБЛІКАЦІЙ ЗДОБУВАЧА ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ

1. Low-energy electron scattering from Ca atoms and photodetachment of Ca^- / O. Zatsarinny, K. Bartschat, S. Gedeon, V. Gedeon, and V. Lazur // Phys. Rev. A. 2006. V. 74. P.052708.
2. Electron-impact excitation of calcium / O. Zatsarinny, K. Bartschat, L. Bandurina, S. Gedeon // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 2007. V. 40, N. 20. P. 4023-4031.
3. *B*-spline *R*-matrix-with-pseudostates calculations for electron collisions with aluminum / V. Gedeon, S. Gedeon, V. Lazur, E. Nagy, O. Zatsarinny, and K. Bartschat // Phys. Rev. A. 2015. V. 92. P. 052701.
4. Low-energy outer-shell photodetachment of the negative ion of aluminum / V. Gedeon, S. Gedeon, V. Lazur, E. Nagy, O. Zatsarinny and K. Bartschat // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 2018. V. 51, N. 3. P. 035004
5. Розсіяння електронів на атомі кальцію / О. Зацарінний, К. Бартшат, Л. Бандуріна, С. Гедеон, В. Лазур // Наук. вісник УжНУ. Серія Фізика. 2007. Т. 21. С. 205-214.
6. Гедеон С. Розсіяння електронів на кальції при наднизьких енергіях // Наук. вісник УжНУ. Серія Фізика. 2008. Т. 23. С. 53-57.
7. Гедеон С., Лазур В. BSR-розрахунки розсіяння електронів на атомі кальцію та їх експериментальне підґрунтя // Наук. вісник УжНУ. Серія Фізика. 2011. Т. 29. С. 210-216.

8. Гедеон С. Резонансна структура інтегральних перерізів розсіяння електронів на атомі кальцію в області енергій до 4.3 еВ // Наук. вісник УжНУ. Серія Фізика. 2009. Т. 24. С. 239-249.
9. Гедеон С., Лазур В. Розрахунки перерізів розсіяння електронів на атомі Са // Наук. вісник УжНУ Серія Фізика . 2009. Т. 25. С. 130-140.
10. Нодь Є., Гедеон С., Лазур В. Збудження електронним ударом нижчих рівнів атомів Mg, Ca та Sr // Наук. вісник УжНУ. Серія Фізика . 2016. Т. 40. С. 122-129.
11. Gedeon S., Gedeon V., Lazur V. and Bandurina L. Partially integrated differential cross-sections of $e+Ca$ scattering // ECAMP IX (European Conference on Atomic and Molecular Physics) May 6–11, 2007, Heraklion (Crete) Abstracts, p.Tu1-59.
12. Зацарінний О., Бартшат К., Бандурина Л., Гедеон С., Лазур В. Розсіяння електронів на атомі кальцію // ІЕФ-2007 (Конференція молодих учених та аспірантів), 14–19.05, 2007 Ужгород (Україна). Програма та тези доповідей. с. 126.
13. Gedeon S. and Lazur V. Low-energy electron scattering from calcium // 40-th EGAS (Annual conference of the European group for atomic systems), Graz, Austria, July 2–5, 2008. Europhysics Conference Abstracts. CP 36.
14. Gedeon S. and Lazur V. Low-energy electron scattering from calcium // 4-th CEPAS (Conference on elementary processes in atomic systems), Cluj-Napoca, Romania, June 18–20, 2008, Abstracts, We-4, p. 62.
15. Гедеон С.В., Лазур В.Ю. Комплексні дослідження атома Са методом R -матриці з B -сплайнами // X Міжнародна молодіжна науково-практична конференція «Людина і космос», 9–11.04, 2008, Дніпропетровськ, Україна. Збірник тез, С. 66.
16. Гедеон С.В., Лазур В.Ю. Розрахунок розсіяння електронів на атомі кальцію при низьких енергіях // XI Міжнародна молодіжна науково-практична конференція «Людина і космос», 8–10.04, 2009, Дніпропетровськ, Україна. Збірник тез, С. 52.
17. Гедеон С.В., Лазур В.Ю. Резонансна структура інтегральних перерізів розсіяння електронів на атомі кальцію в області енергій до 4 еВ // ІЕФ-2009 (Міжнародна конференція молодих учених та аспірантів), 25–28.05, 2009, Ужгород, Україна. Програма і тези доповідей. С. 132.
18. Гедеон С.В., Лазур В.Ю. Розрахунки перерізів розсіяння електронів на атомі кальцію // XII Міжнародна молодіжна науково-практична конференція «Людина і Космос», 7–9.04, 2010, Дніпропетровськ, Україна. Збірник тез. С. 51.

19. Гедеон С.В., Лазур В.Ю. R-матричні розрахунки розсіяння електронів на атомах кальцію: побудова B-сплайнових базисів // XIII Міжнародна молодіжна науково-практична конференція «Людина і Космос», 13–15.04, 2011, Дніпропетровськ, Україна. Збірник тез. С. 72.
20. Гедеон С.В., Лазур В.Ю. Розсіяння електронів на атомі кальцію // ІЕФ-2011 (Міжнародна конференція молодих учених та аспірантів), 24–27.05, 2011, Ужгород, Україна. Програма і тези доповідей. С. 69.
21. Гедеон С.В., Лазур В.Ю. Розрахунки розсіяння електронів на атомі Са: врахування кореляцій // XIV Міжнародна молодіжна науково-практична конференція «Людина і космос», 11–13.04, 2012, Дніпропетровськ, Україна. Збірник тез. С. 52.
22. Микулін Н.В., Гедеон С.В., Нодь Е.А. Розрахунки спектру енергії атома алюмінію // XV Міжнародна молодіжна науково-практична конференція «Людина і космос», 10–12.04, 2013, Дніпропетровськ, Україна. Збірник тез. С. 60.
23. Микулін Н.В., Гедеон В.Ф., Гедеон С.В., Нодь Е.А. Особливості розрахунків спектру атома алюмінію // XVI Міжнародна молодіжна науково-практична конференція «Людина і космос», 10–12.04, 2014, Дніпропетровськ, Україна. Збірник тез. С. 59.
24. Electron scattering from aluminum: B-spline R-matrix calculations / O. Zatsarinny, K. Bartschat, E. Nagy, S. Gedeon, V. Gedeon and V. Lazur // Journal of Physics: Conference Series . 2015. V. 635, no. 5. P. 052012.
25. Nagy E.A., Gedeon S.V., Gedeon V.F., Lazur V.Yu. // The 18th Small Triangle Meeting of theoretical physics. October 16–19, 2016, Pticie, Slovakia. Proceedings. P. 161–172.
26. Гедеон С.В., Лазур В.Ю. Метод R-матриці з B-сплайнами в теорії низькоенергетичного розсіяння електронів на складних атомах // ІЕФ-2017 (Конференція молодих учених та аспірантів), 23–26.05, 2017, Ужгород, Україна. Програма і тези доповідей, С. 111.
27. Low-energy outer-shell photodetachment of the negative ion of aluminum / O. Zatsarinny, K. Bartschat, E. Nagy, S. Gedeon, V. Gedeon and V. Lazur // Journal of Physics: Conference Series . 2017. V. 875. P. 022003.
28. Гедеон С.В., Лазур В.Ю., Гедеон В.Ф., Нодь Є.А. Особливості розрахунків спектру атома алюмінію // XX Міжнародна молодіжна науково-практична конференція «Людина і космос», 11–13.04, 2018, Дніпро, Україна. Збірник тез. С. 47.
29. Гедеон С.В., Лазур В.Ю. Диференціальні перерізи пружного розсіяння $e - \text{Ca}$ // XXII Міжнародна молодіжна науково-практична конференція «Людина і космос», 15–17.04, 2020, Дніпро, Україна. Збірник тез. С. 34.

АНОТАЦІЯ

Геден С. В. Метод R -матриці з B -сплайнами в теорії низькоенергетичного розсіяння електронів на складних атомах. — Кваліфікаційна наукова праця на правах рукопису.

Дисертація на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.04 — фізична електроніка. — ДВНЗ «Ужгородський національний університет», Ужгород, 2021.

Розроблено нову БСР-версію методу R -матриці, яка базується на використанні базисних сплайнів та залежних від терму неортогональних орбіталей. Дана БСР-версія дає змогу досліджувати як електронну структуру складних атомів та іонів, так і елементарні процеси (пружного розсіяння, збудження та іонізації) їх взаємодії з фотонами та повільними електронами. На прикладі низькоенергетичного розсіяння електронів на атомах кальцію і алюмінію та фоторозщеплення від'ємних іонів Ca^- і Al^- показано, що пропонується БСР-версія дає результати високої точності для нерелятивістських зіткнень електронів та фотонів з атомами і від'ємними іонами, якщо в розкладі сильного зв'язку врахувати всі відкриті канали, а в базис функцій конфігураційних станів включити електронні конфігурації з одно- та двократно збудженим кором. Показано, що урахування (з допомогою техніки залежних від терму неортогональних орбіталей) явища релаксації квантової орбіти $3d$ -електрона значно поліпшує узгодження з експериментом обчислених енергій зв'язку збуджених станів атома Ca та перерізів пружного розсіяння і збудження атома Ca електронним ударом. Встановлено, що у випадку складних атомів (таких як Ca та Al) перерізи розсіяння значно більш чутливі до електронних кореляцій в мішені, ніж до короткодіючих взаємодій з налітаючим електроном. Виявлено складну резонансну структуру в енергетичних залежностях перерізів фоторозщеплення від'ємного іона Al^- в основному та збудженому станах, зумовлену утворенням та розпадом в процесі зіткнення $h\nu + \text{Al}^-$ автовідривних станів (АВС) Al^- . Визначено положення і ширини цих АВС та проведено їх спектроскопічну класифікацію.

Ключові слова: електрон, атом, від'ємний іон, розсіяння, збудження, іонізація, метод R -матриці з B -сплайнами, неортогональні орбіталі.

АННОТАЦИЯ

Геден С. В. Метод R -матрицы с B -сплайнами в теории низкоэнергетического рассеяния электронов на сложных атомах. — Квалификационный научный труд на правах рукописи.

Диссертация на соискание научной степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.04 — Физическая электроника. — ГВУЗ «Ужгородский Национальный университет», Ужгород, 2021.

Разработано новую БСР-версию метода R -матрицы, которая базируется на использовании базисных сплайнов и зависимых от терма неортогональных орбиталей. Данная БСР-версия позволяет исследовать как электронную структуру сложных атомов и ионов, так и элементарные процессы (упругого рассеяния, возбуждения и ионизации) их взаимодействия с фотонами и медленными электронами. На примере низкоэнергетического рассеяния электронов на атомах кальция и алюминия и фоторасщепления отрицательных ионов Ca^- и Al^- показано, что предложенная БСР-версия дает результаты высокой точности для нерелятивистских столкновений электронов и фотонов с атомами и отрицательными ионами, если в разложении сильной связи учитывать все открытые каналы, а в базис функций конфигурационных состояний включить электронные конфигурации с возбужденным кором. Показано, что учет (с помощью техники зависимых от терма неортогональных орбиталей) явления релаксации квантовой орбиты $3d$ -электрона значительно улучшает согласование с экспериментом рассчитанных энергий связи возбужденных состояний атома Ca и сечений упругого рассеяния и возбуждения атома Ca электронным ударом. Выяснено, что в случае сложных атомов (таких как Ca и Al) сечения рассеяния значительно более чувствительны к электронным корреляциям, чем к короткодействующим взаимодействиям с налетающим электроном. Выявлена сложная резонансная структура в энергетических зависимостях сечений фоторасщепления отрицательного иона Al^- в основном и возбужденном состояниях, обусловленную образованием и распадом в процессе столкновения $h\nu + \text{Al}^-$ автоотрывных состояний (АОС) Al^- . Определены положения и ширины этих АОС и проведена их спектроскопическая классификация.

Ключевые слова: электрон, атом, отрицательный ион, рассеяние, возбуждение, ионизация, метод R -матрицы с B -сплайнами, неортогональные орбитали.

ABSTRACT

Gedeon S. V. The B -spline R -matrix method in theory of low-energy electron scattering on complex atoms. — Qualification scientific work in the form of manuscript.

Thesis for candidate of physical and mathematical sciences degree in speciality 01.04.04 — Physical Electronics. — Uzhhorod National University, Uzh-

horod, 2021.

We developed the new BSR version of R -matrix method, based on the use of basis splines and term-dependent non-orthogonal orbitals. This version allows to investigate both an electronic structure of complex atoms and the elementary processes (such as elastic scattering, excitation and ionization) of their interaction with photons and slow electrons. Using the example of low-energy electron scattering on calcium and aluminium as well as photodetachment of negative ions Ca^- and Al^- , we have shown, that proposed BSR approach allows one to obtain highly accurate results for non-relativistic collisions of electrons and photons with atoms and negative ions. To achieve this the close-coupling expansion must include all open channels. Also the basis set of configuration state functions should contain the electron configurations with excited core. It was shown, that the inclusion of core relaxation effects (using the term-dependent non-orthogonal orbitals) can significantly improve the corresponding binding energies as well as cross sections of elastic scattering and electron impact excitation of Ca atoms. We have determined that for the complex atoms (such as Ca and Al) the scattering cross sections are more sensitive to the electron correlations in the target, than to the short-range interactions with the incident electron. We found, that the energy dependence of the photodetachment cross section of Al^- negative ion exhibits complex resonance structure caused by autoionizing states (AIS) of Al^- . The positions and the widths of these AIS were obtained along with their classification. The predicted photodetachment cross sections provide new opportunities for future experimental and theoretical studies of the Al^- negative ion.

A large array of data for the scattering characteristics is obtained: integral and differential cross sections for elastic scattering and electron impact excitation of Ca and Al atoms, atomic collision parameters (so-called pseudo-Stokes parameters), oscillator strengths of selected transitions, electron impact ionization cross sections, cross sections of photodetachment of negative ions Ca^- and Al^- . The obtained results are in good agreement with the available experimental and theoretical data. The present calculations shown significantly better agreement with the absolute peak value of the Ca^- photodetachment cross sections than other R -matrix calculations.

Comparison of results obtained in our BSR-models with different numbers of target states provides an estimate regarding the likely accuracy of the present cross sections, which considered as converged to an accuracy of a few percent.

Key words: electron, atom, negative ion, scattering, excitation, ionization, B-spline R -matrix method, non-orthogonal orbitals.

Підписано до друку 5.04.2021 р. Формат 60×90/16.
Папір офсет. Друк цифр. Ум. друк. арк. 0,9.
Наклад 100. Зам. №

Видано та віддруковано в ТОВ «Поліграфцентр «Ліра»:
88000, м. Ужгород, вул. Митрака, 25.

Свідоцтво про внесення до Державного реєстру видавців,
виготівників і розповсюджувачів видавничої продукції
Серія ЗТ №24 від 7 листопада 2005 року.

