

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

Кваліфікаційна наукова  
праця на правах рукопису

ГЕДЕОН Сергій Вікторович

УДК 539.186

ДИСЕРТАЦІЯ

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

01.04.04 — фізична електроніка

Подається на здобуття наукового ступеня  
кандидата фізико-математичних наук

Дисертація містить результати власних досліджень. Використання ідей, результатів і текстів інших авторів мають посилання на відповідне джерело.

\_\_\_\_\_ С. В. Гедеон

Науковий керівник: **Лазур Володимир Юрійович**,  
доктор фізико-математичних наук, професор

Ужгород — 2021

## 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  $\text{Ca}^-$  і  $\text{Al}^-$  показано, що пропонувана 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  $\text{Ca}$  та перерізів пружного розсіяння і збудження атома  $\text{Ca}$  електронним ударом. Встановлено, що у випадку складних атомів (таких як  $\text{Ca}$  та  $\text{Al}$ ) перерізи розсіяння значно більш чутливі до електронних кореляцій в мішені, ніж до короткодійних взаємодій з налітаючим електроном. Виявлено складну

резонансну структуру в енергетичних залежностях перерізів фоторозщеплення від'ємного іона  $\text{Al}^-$  в основному та збудженому станах, зумовлену утворенням та розпадом в процесі зіткнення  $h\nu + \text{Al}^-$  автовідривних станів (АВС)  $\text{Al}^-$ . 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.

## 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, Uzhhorod, 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  $\text{Ca}^-$  and  $\text{Al}^-$ , 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  $\text{Al}^-$  anion exhibits complex resonance structure caused by autoionizing states (AIS) of  $\text{Al}^-$ . The positions and the widths of these AIS were obtained along with their classification.

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

### Список публікацій здобувача

1. Low-energy electron scattering from Ca atoms and photodetachment of  $\text{Ca}^-$  / O. Zatsarinny, K. Bartschat, S. Gedeon, V. Gedeon, and V. Lazur // Phys. Rev. A. 2006. Vol. 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. Vol. 40, no. 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. Vol. 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. Vol. 51, no. 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), травень 14–19, 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, Book of 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 квітня, 2008, Дніпропетровськ: НЦАОМУ, Україна. Збірник тез, С. 66.
16. Гедеон С.В., Лазур В.Ю. Розрахунок розсіювання електронів на атомі кальцію при низьких енергіях // XI Міжнародна молодіжна науково-практична конференція «Людина і космос», 8–10 квітня, 2009, Дніпропетровськ: НЦАОМУ, Україна. Збірник тез, С. 52.
  17. Гедеон С.В., Лазур В.Ю. Резонансна структура інтегральних перерізів розсіювання електронів на атомі кальцію в області енергій до 4 еВ // ІЕФ-2009 (Міжнародна конференція молодих учених та аспірантів), травень 25–28, 2009 Ужгород, Україна. Програма і тези доповідей, С. 132.
  18. Гедеон С.В., Лазур В.Ю. Розрахунки перерізів розсіювання електронів на атомі кальцію // XII Міжнародна молодіжна науково-практична конференція «Людина і Космос», 7–9 квітня, 2010, Дніпропетровськ: НЦАОМУ, Україна. Збірник тез. С. 51.
  19. Гедеон С.В., Лазур В.Ю. R-матричні розрахунки розсіювання електронів на атомах кальцію: побудова  $B$ -сплайнових базисів // XIII Міжнародна молодіжна науково-практична конференція «Людина і Космос», 13–15 квітня, 2011. Дніпропетровськ: НЦАОМУ, Україна. Збірник тез. С. 72.
  20. Гедеон С.В., Лазур В.Ю. Розсіювання електронів на атомі кальцію // ІЕФ-2011 (Міжнародна конференція молодих учених та аспірантів), травень 24–27, 2011, Ужгород, Україна. Програма і тези доповідей. С. 69.
  21. Гедеон С.В., Лазур В.Ю. Розрахунки розсіювання електронів на атомі Са: врахування кореляцій // XIV Міжнародна молодіжна науково-практична конференція «Людина і космос», 11–13 квітня, 2012. Дніпропетровськ: НЦАОМУ, 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 квітня, 2013, Дніпропетровськ: НЦАОМУ,

- 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 квітня, 2014, Дніпропетровськ: НЦАОМУ, 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. Vol. 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 розсіювання електронів на складних атомах // ІЕФ-2017 (Конференція молодих учених та аспірантів), травень 23–26, 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. Vol. 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 квітня, 2018, Дніпропетровськ: НЦАОМУ, Україна. Збірник тез. С. 47.
  29. Гедеон С.В., Лазур В.Ю. Диференціальні перерізи пружного розсіювання  $e - \text{Ca}$  // XXII Міжнародна молодіжна науково-практична конференція «Людина і космос», 15–17 квітня, 2020, Дніпропетровськ: НЦАОМУ, Україна. Збірник тез. С. 34.

## ПЕРЕЛІК УМОВНИХ ПОЗНАЧЕНЬ

АВС	— автовідривний стан
АІС	— автоіонізаційний стан
АПЗ	— атомні параметри зіткнення
БКХФ	— багатоконфігураційний Хартрі-Фока метод (multiconfiguration Hartree-Fock — MCHF)
БСР	— $R$ -матриця з $B$ -сплайнами ( $B$ -spline $R$ -matrix — BSR)
ВК	— взаємодія конфігурацій (configuration interaction — CI)
ДП	— диференціальний переріз (differential cross section — DCS)
ДФ	— Дірака-Фока метод (Dirac-Fock — DF)
ЗСЗ	— збіжний сильний зв'язок (convergent close-coupling — CCC)
ІП	— інтегральний/інтегрований переріз (integral/integrated cross section — ICS)
НІСТ	— Національний інститут стандартів і технологій, США (National Institute of Standards and Technology — NIST)
РМ	— $R$ -матриця ( $R$ -matrix — RM)
РМПС	— $R$ -матриця з псевдостаними ( $R$ -matrix with pseudostates — RMPS)
РСХ	— релятивістські спотворені хвилі (relativistic distorted-wave — RDW)
СЗ	— сильний зв'язок (close-coupling — CC)
ХФ	— Хартрі-Фока метод (Hartree-Fock — HF)

## ЗМІСТ

<b>Перелік умовних позначень</b>	<b>8</b>
<b>Вступ</b>	<b>13</b>
<b>Розділ 1. Нові напрямки розвитку теорії розсіювання електронів на атомах та іонах</b>	<b>22</b>
1.1. Резонансні ефекти в процесах розсіювання електронів на атомах та іонах . . . . .	23
1.2. Дискретна квантова теорія розсіювання у термінах власних диференціалів . . . . .	32
1.3. $J$ -матричний метод і його варіації . . . . .	35
1.4. Збіжний метод сильного зв'язку каналів . . . . .	39
Висновки до розділу 1 . . . . .	40
<b>Розділ 2. Метод сильного зв'язку каналів. Метод <math>R</math>-матриці</b>	<b>42</b>
2.1. Метод сильного зв'язку каналів . . . . .	42
2.2. Метод $R$ -матриці та його модифікації . . . . .	49
2.2.1. Задача про $e+A$ -зіткнення у внутрішній області . . . .	51
2.3. БСР-версія $R$ -матричного методу . . . . .	57
2.3.1. Залежні від терму неортогональні зв'язані орбіталі мішені . . . . .	62
2.3.2. Основні відомості та властивості базисних сплайнів .	67
2.3.3. Розв'язування рівняння Шредінгера у зовнішній області	76
Висновки до розділу 2 . . . . .	79
<b>Розділ 3. Розсіювання електронів низьких енергій на атомах Ca та фоторозщеплення іона <math>\text{Ca}^-</math>: головні аспекти</b>	<b>81</b>

3.1.	Стан досліджень процесів низькоенергетичних зіткнень $e+\text{Ca}$ та фоторозщеплення іона $\text{Ca}^-$ . . . . .	81
3.2.	Методика розрахунку структури атома кальцію та процесів низькоенергетичних зіткнень $e+\text{Ca}$ . . . . .	85
3.2.1.	Розрахунки структури атома $\text{Ca}$ . . . . .	85
3.2.2.	Розрахунки зіткнення $e+\text{Ca}$ . . . . .	89
3.3.	Результати розрахунку процесів розсіяння електронів на нейтральному $\text{Ca}$ . . . . .	90
3.4.	Результати розрахунку фоторозщеплення іонів $\text{Ca}^-$ . . . . .	97
3.5.	Обговорення результатів розрахунку низькоенергетичних процесів $e+\text{Ca}$ та $h\nu+\text{Ca}^-$ . . . . .	102
	Висновки до розділу 3 . . . . .	104

#### Розділ 4. Збудження електронним ударом нижчих станів атома $\text{Ca}$ 105

4.1.	Стан досліджень процесів збудження чотирьох нижчих збуджених станів атома $\text{Ca}$ електронами . . . . .	105
4.2.	Методика розрахунку збудження атома $\text{Ca}$ електронним ударом . . . . .	107
4.2.1.	Загальні зауваження до методики розрахунку . . . . .	107
4.2.2.	Розрахунок структури мішені методом БКХФ-БСР34 . . . . .	109
4.2.3.	Розрахунки розсіяння методом БКХФ-БСР34 . . . . .	111
4.2.4.	Розрахунки атомних параметрів зіткнення (АПЗ) . . . . .	112
4.3.	Результати розрахунку ІП збудження $\text{Ca}$ електронами . . . . .	113
4.3.1.	Збудження резонансного переходу $4s^2\ ^1S - 4s4p\ ^1P^o$ . . . . .	113
4.3.2.	Збудження метастабільного стану $4s4p\ ^3P^o$ . . . . .	117
4.4.	Результати розрахунку ДП та параметрів Стокса для збудження $\text{Ca}$ електронами . . . . .	121
4.4.1.	ДП збудження резонансного переходу $4s^2\ ^1S - 4s4p\ ^1P^o$ . . . . .	121

4.4.2.	Переходи з основного стану $4^1S$ атома Ca в стани $4^3P^o$ та $n^1,3D$ ( $n = 3, 4, 5$ ) . . . . .	122
4.4.3.	Розрахунок параметрів Стокса для резонансного пе- реходу $4s^2\ ^1S - 4s4p\ ^1P^o$ . . . . .	125
4.5.	Обговорення результатів розрахунку низькоенергетичного збу- дження атома Ca електронним ударом . . . . .	129
	Висновки до розділу 4 . . . . .	130
<b>Розділ 5. Комплексний характер БСР-розрахунків диферен-</b>		
<b>ціальних та інтегральних характеристик зіткнення</b>		
<b><math>e+Ca</math> та їх експериментальне підґрунтя 131</b>		
5.1.	Вступні зауваження до розділу 5 . . . . .	131
5.2.	Структура диференціальних перерізів розсіяння $e+Ca$ . . .	133
5.2.1.	Пружне розсіяння . . . . .	133
5.2.2.	Розрахунки резонансної структури ІІ розсіяння $e+Ca$	146
5.2.3.	Перерізи розсіяння $e+Ca$ при наднизьких енергіях . .	149
5.2.4.	Розрахунки ІІ для різних серій переходів . . . . .	151
5.2.5.	Ефективні сили зіткнень для розсіяння $e+Ca$ . . . . .	156
	Висновки до розділу 5 . . . . .	157
<b>Розділ 6. БСР-розрахунки низькоенергетичного розсіяння еле-</b>		
<b>ктронів на атомі Al та фоторозщелення іона <math>Al^-</math> 158</b>		
6.1.	Розрахунки збудження та іонізації алюмінію електронним уда- ром методом $R$ -матриці з $B$ -сплайнами і псевдостанами . . .	158
6.1.1.	Вступні зауваження . . . . .	158
6.1.2.	Деталі обчислень структури атома Al та розсіяння $e+Al$	161
6.1.3.	Результати розрахунків зіткнення $e+Al$ . . . . .	167
6.1.4.	Короткий підсумок дослідження розсіяння $e+Al$ . . .	171
6.2.	Низькоенергетичне фоторозщелення зовнішньої оболонки від'єм- ного іона алюмінію . . . . .	173

6.2.1. Вступні зауваження . . . . .	173
6.2.2. Методика комп'ютерних обчислень . . . . .	176
6.2.3. Результати для фоторозщеплення . . . . .	182
6.2.4. Заключні зауваження . . . . .	188
Висновки до розділу 6 . . . . .	189
<b>Висновки</b>	<b>191</b>
<b>Список використаних джерел</b>	<b>194</b>
<b>Додаток А. Список публікацій здобувача за темою дисертації та відомості про апробацію результатів дисертації</b>	<b>213</b>
А.1. Список публікацій здобувача за темою дисертації . . . . .	213
А.2. Відомості про апробацію результатів дисертації . . . . .	216
<b>Додаток Б. Таблиці і графіки</b>	<b>218</b>



## ВСТУП

**Актуальність теми.** 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 квантовомеханічних 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 розсіювання. Ці розгортки — диференціальні перерізи розсіювання — 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, виявилось 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 виявилось, 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 розсіяння електронів на атомах 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 [1–14] 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 перероз-

поділом 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 одного 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 комплексні дослідження елементарних процесів взаємодії повільних електронів з атомами Ca і Al та фотонів з від'ємними іонами  $\text{Ca}^-$  і  $\text{Al}^-$ . 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 скінченим набором  $B$ -сплайнів;
- із застосуванням залежних від терму неортогональних орбіталей розробити 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 характери-

стик  $e+A$ -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 пропонованої 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 розвинутої БСР-версії ретельно протестований пакет прикладних програм [15].

### **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 (іона-

ми) та фотонів з від'ємними іонами. У порівнянні зі стандартним  $R$ -матричним методом пропонована 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 Ca електронним ударом. Результати проведених розрахунків показують, що в діапазоні енергій зіткнення 2–4 еВ визначальний внесок у повний переріз  $e$ +Ca-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  $e$ +Ca-розсіяння. Встановлено також, що поляризація основного стану атома Ca 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 Ca. 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  $e + \text{Al}$  розсіяння, обумовленої утворенням та розпадом в процесі зіткнення  $e + \text{Al}$  автоіонізаційних станів (AIC)  $(3s^23p^2)\ ^1S$  та  $(3s3p^3)\ ^1D^o$  від'ємного іона  $\text{Al}^-$ .
  - б) встановлена визначальна роль  $(3s^23pks)\ ^3P^o$ -каналу та поляризації мішені в пружному розсіянні повільних електронів на атомах Al. Продемонстровано 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 AIC  $(3s3p^2)\ ^2P$  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  $\text{Al}^-$  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  $\text{Al}^-$ . 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  $\text{Al}^-$  в основному стані  $(3s^23p^2) {}^3P$ , зумовлену утворенням та розпадом в процесі розсіяння  $h\nu + \text{Al}^- (3s^23p^2) {}^3P$  автовідривних станів (АВС)  $\text{Al}^-: 3s^24s4p {}^3P^o, (3s3p^3) {}^{3,1}D^o, {}^{3,1}P^o$  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  $\text{Ca}$  і  $\text{Al}$  та фотонів з від'ємними іонами  $\text{Ca}^-$  і  $\text{Al}^-$  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, продукований при спалахах наднових кальцій є найбільш використовуваним елементом для кількісного аналізу спектра зірок. Атоми  $\text{Ca}$  мають привабливі властивості і для їх застосування в оптичних стандартах частоти. В свою чергу, процеси розсіяння електронів атомами  $\text{Al}$  відіграють важливу роль в плазмовому шарі реакторів термоядерного синтезу. Представлені в дисертації результати БСР-розрахунків перерізів  $e + \text{Ca}$  та  $e + \text{Al}$ -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. Зацарінний, Л. Бандурина, В. Гедеон, 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  $e+\text{Ca}^-$  та  $e+\text{Al}$ -розсіяння [1–3, 5–10], а також процесів фоторозщеплення від’ємних іонів  $\text{Ca}^-$  та  $\text{Al}^-$  [1, 4]. Значна частина результатів дослідження резонансної структури перерізів  $e+\text{Ca}$ -розсіяння [6, 7] отримана автором особисто.

**Апробація матеріалів дисертації.** Результати досліджень, що викладені у дисертації, доповідалися або були представлені на таких конференціях: **ЕСАМР IX** — European Conference on Atomic and Molecular Physics (Heraklion, Crete, Greece, May 6–11, 2007), Міжнародна конференція молодих учених та аспірантів **ІЕФ-2007**, **ІЕФ-2009**, **ІЕФ-2011**, **ІЕФ-2017** (Ужгород, Україна, 14–19 травня, 2007; 25–28 травня, 2009; 24–27 травня, 2011; 23–26 травня, 2017), **40-th EGAS** — Annual conference of the European group for atomic systems (Graz, Austria, July 2–5, 2008), **4-th CEPAS** — Conference on elementary processes in atomic systems, (Cluj-Napoca, Romania, June 18–20, 2008), **X–XVI**, **XX**, **XXII** Міжнародна молодіжна науково-практична конференція «Людина і космос» (Дніпро, Україна, 9–11 квітня, 2008; 8–10 квітня, 2009; 7–9 квітня, 2010; 13–15 квітня, 2011; 11–13 квітня, 2012; 10–12 квітня, 2013; 10–12 квітня, 2014; 11–13 квітня, 2018; 15–17 квітня, 2020), **ICPEAC-XXIX**, **ICPEAC-XXX** — International Conference on Photonic, Electronic, and Atomic Collisions (Toledo, Spain, July 22–28, 2015; Cairns, Australia, July 26 – August 1, 2017), **18th STM** — Small Triangle Meeting, (Ptice, Slovakia, October 16–19, 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 імпакт-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.

## РОЗДІЛ 1

### НОВІ НАПРЯМКИ РОЗВИТКУ ТЕОРІЇ РОЗСІЯННЯ ЕЛЕКТРОНІВ НА АТОМАХ ТА ІОНАХ

У цьому розділі коротко розглянемо нові теоретичні методи дослідження процесів розсіювання електронів на атомах та іонах. Ми обмежимося областю малих енергій зіткнення, при яких швидкості налітаючого та розсіяного електронів менші або того ж порядку величини, що і орбітальна швидкість електронів у атомі-мішені.

Найбільш поширеним методом дослідження процесів пружного і непружного розсіювання повільних електронів на складних атомах та іонах є метод сильного зв'язку каналів (СЗК). У рамках цього методу повна хвильова функція системи «налітаючий електрон + атом (іон)» представляється у вигляді розкладу за деяким повним набором базисних хвильових функцій. При цьому вихідне рівняння Шредінгера зводиться до нескінченної системи зв'язаних інтегро-диференціальних рівнянь для коефіцієнтів такого розкладу, які відіграють роль хвильової функції налітаючого електрона. Як правило, фізичні властивості процесу розсіювання дозволяють звести нескінченне число рівнянь до скінченного і розв'язати задачу чисельними методами за допомогою сучасних ЕОМ з одержанням однозначних результатів. Різні модифікації методу СЗК відрізняються одна від одної в основному вибором базисного набору хвильових функцій, який повинен максимально відображати фізику процесу, що розглядається. Запропоновану в наших працях [1–14] версію методу СЗК, яка ґрунтується на використанні неортогональних орбіталей та  $B$ -сплайнів як базисних функцій, ми докладно опишемо у наступному розділі дисертації. А тут насамперед розглянемо деякі особливості резонансного розсіювання електронів на атомах та іонах,

які дозволяють провести найбільш радикальну та чутливу перевірку теорії.

### 1.1. Резонансні ефекти в процесах розсіяння електронів на атомах та іонах

Фізика пружного та непружного розсіяння електронів на багатоелектронній мішені  $A$ , яка може бути атомом чи іоном, має низку цікавих особливостей. Так, наприклад, поряд із прямим потенціальним збудженням мішені існує резонансне збудження, яке пов'язане з утворенням в процесі зіткнення двічі збуджених квазістаціонарних станів системи «мішень + налітаючий електрон». У випадку, коли мішенню  $A$  є однократний додатний іон, такі стани представляють собою двічі збуджені стани нейтрального атома, що розташовані в області неперервного спектра. Їх називають резонансами або автоіонізаційними станами (AIC), так як вони можуть через короткий проміжок часу, спонтанно розпадатися на електрон та іон в основному, чи в збудженому стані. Аналогічні стани можуть утворюватися і при розсіянні електронів на нейтральних атомах. В цьому разі вони представляють собою стани від'ємного іона, які також можуть розпадатися на електрон та атом в основному, чи збудженому стані. В літературі [16–18] їх зазвичай називають автовідривними станами (ABC). Однак і в цьому випадку інколи вживають термін «автоіонізаційні стани». З метою спрощення термінології ми також будемо користуватися цим терміном.

У випадку електрон-атомних зіткнень можуть відбуватися, в залежності від енергії налітаючої частинки  $E$ , крім пружного розсіяння також одночасно процеси збудження та іонізації атома  $A$ . Процеси, дозволені при заданій енергії  $E$ , визначають відкриті канали. Енергетично заборонені (при заданій енергії  $E$ ) процеси визначають закриті канали. Якраз із енергетично відкритими та закритими каналами і пов'язані два механізми виникнення

резонансів: або в одному із відкритих каналів потенціал має специфічну форму — за доволі достатньої глибини і ширини, в якій налітаючий електрон тимчасово зв'язується в АІС, або ж електрон зв'язується в АІС в одному із відкритих каналів.

Резонанси першого типу в атомній фізиці отримали назву резонансів форми, а резонанси другого типу називають резонансами Фешбаха, або ж резонансами закритих каналів. На відміну від резонансів Фешбаха, розташованих під порогами збудження атома-мішені, резонанси форми розташовуються при енергіях, що лише злегка ( $\sim 0.1$  еВ) перевищують поріг процесу, в перерізах якого вони виникають.

Розглянемо тепер більш детально умови, при яких можливий резонанс форми у потенціальному розсіянні. Розпочнемо розгляд з найпростішого випадку — випадку одноканального резонансу при розсіянні частинки на мішені, що має орбітальний момент  $L = 0$ . У цьому випадку в розкладі амплітуди розсіяння [16–19]

$$F(E, \theta) = \sum_{\ell} f_{\ell}(2\ell + 1)P_{\ell}(\cos \theta) \quad (1.1)$$

в околі резонансу  $E_0$  парціальні амплітуди мають вигляд

$$f_{\ell}(E) = f_{\ell}^P(E) + \delta_{\ell\ell_0}f_{\ell_0}^r(E), \quad (1.2)$$

де,  $\delta_{\ell\ell_0}$  — символ Кронекера,  $P_{\ell}(\cos \theta)$  — поліном Лежандра, а

$$f_{\ell}^P(E) \equiv \frac{e^{2i\delta_{\ell}} - 1}{2iK}, K = \sqrt{2mE}, \quad (1.3)$$

$$f_{\ell_0}^r(E) \equiv \frac{e^{2i\delta_{\ell_0}}}{2iK} \cdot \frac{\Gamma/2}{E - E_0 + i\Gamma/2}, \quad (1.4)$$

Тут і нижче використовується атомна система одиниць  $e = m_e = \hbar = 1$ .

Амплітуда розсіяння  $F(E, \theta)$  є функцією енергії зіткнення  $E$  та кута розсіяння  $\theta$  і не залежить від азимутального кута  $\varphi$ . Диференціальний

переріз розсіяння  $d\sigma/d\Omega$  виражається через амплітуду  $F(E, \theta)$  формулою

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |F(E, \theta)|^2. \quad (1.5)$$

Повний переріз розсіяння  $\sigma(E)$  одержують інтегруванням виразу (1.5) за всіма кутами розсіяння  $\theta$ :

$$\sigma(E) = 2\pi \int_0^\pi |F(E, \theta)|^2 \sin \theta d\theta. \quad (1.6)$$

Поведінка повного перерізу розсіяння  $\sigma(E)$  в околі резонансу повністю визначається чотирма параметрами — енергією  $E$  і шириною  $\Gamma$  резонансу, орбітальним моментом  $\ell_0$  резонансно розсіяного електрона і зсувом фази  $\delta_{\ell_0}$  потенціального розсіяння у точці резонансу. Фази  $\delta_\ell$  для реалістичних потенціалів  $V(r)$ , які представляють інтерес з точки зору теорії розсіяння електронів атомами, обчислюють чисельним інтегруванням радіального рівняння Шредінгера

$$\left\{ -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\ell(\ell+1)}{2r^2} + V(r) \right\} \chi_\ell = E \chi_\ell, R_{k,\ell}(r) = \frac{\chi_\ell(r)}{r} \quad (1.7)$$

за змінною  $r$  від початку координат до області  $r \geq r_0$ , де стає справедливим асимптотичне представлення для радіальної функції  $R_{k,\ell}(r)$ :

$$R_{k,\ell}(r) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\sin(kr - \ell\frac{\pi}{2} + \delta_\ell)}{r}, r \rightarrow \infty. \quad (1.8)$$

Тут  $\delta_\ell$  — додаткова фаза, що «набігає» внаслідок дії поля  $V(r)$ . Для вільної частинки, коли  $V(r) = 0$  і нема розсіяння, додаткова фаза  $\delta_\ell = 0$ .

У центральному полі  $V(r)$  момент імпульсу є інтегралом руху, тому стани з різними значеннями орбітального квантового числа  $\ell$  даватимуть у  $e$ -розсіяння незалежні внески. Очевидно, що чим більше парціальних амплітуд враховується у розкладі (1.1), тим детальнішу інформацію про енергетичну залежність повного перерізу  $\sigma(E)$  та енергетично-кутову залежність диференціального перерізу розсіяння  $\frac{d\sigma}{d\Omega}(E, \theta)$  можна дістати

практично при будь-якій заданій енергії  $e$ -А-зіткнення  $E$  лише скінченне число фаз  $\ell$  з  $\ell \leq \ell_{\max}$  дає помітний внесок у формули (1.1), (1.5) та (1.6) для амплітуди і перерізів розсіяння. Більше того, при розсіянні низькоенергетичних електронів атомами суттєво відмінні від нуля лише фази розсіяння  $\delta_\ell$  для кількох найнижчих парціальних хвиль. Зокрема при дуже низьких енергіях помітно відмінна від нуля лише  $s$ -хвильова амплітуда  $f_0(E)$ .

Із формул (1.1)–(1.4) та (1.6) випливає, що в околі резонансу повний переріз (розділений для зручності на  $4\pi/k^2$ ) має вигляд [17, 20]

$$\sigma(E) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sigma_\ell(E) = \sigma^P(E) + s_{\ell_0}(E), \quad (1.9)$$

де практично стала «підкладка»

$$\sigma^P(E) = \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) \sin^2 \delta_\ell, \quad (1.10)$$

а доданок, що описує власне структуру в перерізі

$$s_{\ell_0}(E) \equiv \frac{\Gamma}{2} \cdot \frac{A(E - E_0) + B\Gamma/2}{(E - E_0)^2 + \Gamma^2/4}, \quad (1.11)$$

$$A \equiv -(2\ell_0 + 1) \sin \delta_{\ell_0}, B \equiv (2\ell_0 + 1) \cos^2 \delta_{\ell_0}. \quad (1.12)$$

Із формул (1.9)–(1.12) видно, що інтерференційна структура в перерізах суттєво визначається фазою  $\delta_{\ell_0}$  потенціального розсіяння. Зокрема, якщо ця фаза зникаюче мала, то переріз (1.9) має вигляд симетричного резонансу Брейта-Вігнера. При  $\delta_{\ell_0} \neq 0$  суттєвою стає інтерференція резонансного і потенціального розсіяння, яка проявляється характерним чергуванням мінімумів («вікна прозорості») і максимумів. Найбільш виразно ця інтерференція проявляється при значенні фази  $\delta_\ell = \pi/2$ .

Із формул (1.9)–(1.12) випливає також, що при  $\delta_{\ell_0} \neq 0$  існує таке значення енергії зіткнення  $E$ , а саме  $E = E_1 + E_0 + 0.5\Gamma \cot \delta_{\ell_0}$ , при якому атом

стає повністю «прозорим» для  $\ell_0$ -хвилі, тобто  $\sigma_{\ell_0}(E_1) = 0$  — потенціальне і резонансне розсіяння  $\ell_0$ -хвилі в результаті інтерференції взаємно гасяться.

Цікавим є дослідження диференціального перерізу резонансного розсіяння електронів низьких енергій на атомах та іонах. У цьому випадку задача стає більш складною у двох відношеннях: по-перше, інтерференційна картина суттєво залежить від кута розсіяння  $\theta$ , і, по-друге, резонансне розсіяння в  $\ell_0$ -хвилі інтерферує з потенціально розсіяними хвилями із всеможливими значеннями орбітального квантового числа  $\ell$ , а не тільки з  $\ell_0$ -хвилею, як у випадку повного перерізу. Тому резонанси в диференціальних перерізах  $\frac{d\sigma}{d\Omega}(E, \theta)$  містять в собі більш багату інформацію про природу розсіяння електронів на складних атомах. Одержання такої інформації та її інтерпретація складає зараз цілу область фізики зіткнень, яка називається зіткнувальною спектроскопією. Тому одним з актуальних об'єктів дослідження у фізиці електрон-атомних зіткнень є резонансні ефекти. До таких ефектів відносяться, наприклад, утворення квазістаціонарного стану від'ємного іона чи автоіонізаційного стану при зіткненні електрона з атомом або іоном з ядрами і т.д.

Розглянемо детальніше фізичні причини виникнення квазістаціонарних станів у процесах розсіяння електронів на нейтральних атомах. Ефективний потенціал взаємодії налітаючого електрона з атомом  $U_\ell(r)$  у радіальному рівнянні Шредінгера (1.7) складається з двох частин:

$$U_\ell(r) = V(r) + \frac{\ell(\ell + 1)}{2r^2}. \quad (1.13)$$

Другий доданок у цьому виразі — відцентрова енергія, яка має відштовхувальний характер і не дозволяє частинці впасти на силовий центр. Тимчасовий резонансний зв'язок електрона з нейтральним атомом виникає внаслідок сумарної дії комбінації сил — поляризаційних та обмінних сил притягання електрона до атома і відштовхувальної відцентрової сили. При цьому додатній знак фази розсіяння  $\delta_\ell$  відповідає силам притягання, а

від'ємний — силам відштовхування. Сумісна дія відцентрового відштовхування і далекодійного притягання (пропорційного  $r^{-4}$ ), обумовленого поляризацією атома в полі налітаючого електрона, формує ефективний потенціал  $U_\ell(r)$ , який має вигляд ями, відділеної від зовнішньої області потенціальним бар'єром. У такій ямі, крім дискретних одноелектронних рівнів (із від'ємною енергією), можуть існувати також (квазістаціонарні) рівні з додатною енергією, віддалені від рівнів суцільного спектра центробіжним бар'єром. Якщо налітаючий електрон рухається в полі атома, ефективний потенціал  $U_\ell(r)$  якого має форму ями відділену від зовнішньої області потенціальним бар'єром, то при енергії електрона, яка дорівнює енергії квазістаціонарного рівня у внутрішній ямі, відбувається стрибкоподібна зміна фази розсіяння  $\delta_{\ell_0}$ . При цьому налітаючий електрон захоплюється мішенню з утворенням довгоживучого (короткоживучого) квазістаціонарного стану компаунд-системи «атом+електрон». З класичної точки зору таке захоплення означає, що електрон робить кілька обертів, перш ніж покинути мішень. У рамках квантової механіки можна сказати, що електрон проходить крізь потенціальний бар'єр і на деякий час захоплюється потенціальною ямою, утворюючи з атомом квазістаціонарний стан — резонанс. Резонанси, які виникають в одноканальному пружному розсіянні електронів на атомах, називаються резонансами форми, оскільки вони можливі, лише якщо ефективний потенціал  $U_\ell(r)$  має вищевказану специфічну форму ями, відділеної від зовнішньої області потенціальним бар'єром. Таким чином ефективний потенціал  $U_\ell(r)$ , який приводить до резонансів форми, має відштовхувальний «хвіст», котрий у розглядуваному випадку (див формулу (1.13)) обумовлений центробіжним бар'єром. При цьому орбітальний момент  $\ell$  не дорівнює нулю ( $\ell \neq 0$ ), і завдяки тунельному ефекту падаючий електрон проникає крізь центробіжний бар'єр вигляду  $\ell(\ell + 1)/2r^2$  в область, де домінує притягуючий потенціал  $V(r)$ , обумовлений поляризацією атома в полі налітаючого електрона.



Властивості резонансів форми детально розглядаються в теорії потенціального розсіювання [21, 22] при цьому їх існування пов'язується з нулями функції Йоста в комплексній площині змінної  $k$ . Однак у такому підході мало використовується наочне представлення про ефективний потенціал, а також відповідність між формою бар'єра та ями і поведінкою хвильової функції при резонансній енергії.

Резонанси форми у припороговій області спостерігаються при пружному розсіянні електронів на атомах лужних, лужноземельних, інертних і інших елементів (детальну інформацію можна знайти в огляді [23–25] і оригінальних працях [26, 27]). Хоча одноканальна хвильова функція, яка розрахована з потенціалом Хартрі-Фока чи навіть з потенціалом Хартрі, у деяких випадках дозволяє вивчати резонанси форми в перерізах розсіювання, у більшості випадків при їх теоретичному дослідженні використовується більш точні методи: рівняння сильного зв'язку каналів [23], варіаційний метод [25], а також розроблена в наших працях [1–14] БСР-версія методу  $R$ -матриці з  $B$ -сплайнами.

Як уже зазначалося, резонанси форми при розсіянні електронів на атомах виникають, коли орбітальний момент налітаючого електрона  $\ell \geq 1$ . Чим більший орбітальний момент електрона, а, при даному  $\ell$ , чим менша енергія квазістаціонарного рівня, тим більший бар'єр, котрий перешкоджає руху електрона, і тим гостріший резонанс. Втім потенціальний бар'єр може існувати і у випадку  $p$ -електрона. Це у свою чергу означає, що яскраво виражених резонансних ефектів слід очікувати в процесах низькоенергетичного розсіювання електронів на атомах лужноземельних елементів Mg ( $3s^2$ ), Ca ( $4s^2$ ), Sr ( $5s^2$ ) і Ba ( $6s^2$ ). Тут цікаво зазначити, що в експериментальній [28] і теоретичній [29] працях було встановлено існування стабільного від'ємного іона кальцію  $\text{Ca}^-$  ( $4s^2 4p^2 P$ ) в  $p$ -стані. Все це спонукає до глибшого вивчення резонансних явищ в процесах розсіювання повільних електронів на атомах Ca.

У третьому розділі дисертації з допомогою методу  $R$ -матриці з  $B$ -сплайнами досліджуються процеси пружного й непружного розсіяння низькоенергетичних електронів на атомах Ca. При цьому в системі інтегро-диференціальних рівнянь для радіальних функцій розсіяного електрона  $F_{i\alpha}^{\Gamma}(r_{N+1})$  явно виділені внески в ефективний потенціал від локального прямого, нелокального обмінного та нелокального поляризаційного потенціалів, а також враховані ефекти, що виникають внаслідок електронного захоплення та поляризації атома в полі налітаючого електрона. Проведений в наших працях [1–14] кількісний аналіз цих потенціалів показує, що поле атомів лужноземельних елементів (Mg, Ca, Sr) дуже схоже зі сферичною потенціальною ямою, оточеною центробіжним бар'єром. При цьому виявляється, що у випадку електронних конфігурацій зі збудженим кором стандартне наближення Хартрі-Фока виявляється недостатнім, і слід розв'язувати систему рівнянь Хартрі-Фока для кожного терма. Оскільки форма ефективного потенціалу вельми чутлива до точності урахування поляризаційних та обмінно-кореляційних ефектів, то в наших розрахунках [1–14] властивостей набору базисних функцій методу СЗК ми використовуємо багатоконфігураційний метод Хартрі-Фока (БКХФ) з неортогональними орбіталями, які оптимізуються в незалежних розрахунках для індивідуальних термів; при цьому в прямій та обмінно-кореляційній частинах ефективного потенціалу з'являються додаткові члени, які відіграють істотну роль у його формуванні.

Розглянемо нарешті механізм виникнення резонансу Фешбаха, характерного для багатоканального розсіяння. Позначимо через  $\hat{H}$  гамільтоніан  $(N + 1)$ -електронної системи «мішень+налітаючий електрон». У випадку стаціонарного формулювання задача про розсіяння електрона на  $N$ -електронному атомі зводиться до знаходження розв'язку рівняння Шредингера

$$(\hat{H} - E)\Psi = 0 \quad (1.14)$$

із певними граничними умовами при додатньому значенні енергії системи  $E$ . Нехай  $\varphi_\gamma$  — повна система хвильових функцій мішені (атома чи іона). Тоді розв'язок рівняння (1.14) можна подати у вигляді розкладу

$$\Psi = \sum_{\gamma} A[\varphi_\gamma F_\gamma], \quad (1.15)$$

у якому під підсумовуванням за квантовими числом  $\gamma$  розуміємо також й інтегрування за неперервним спектром. Функція  $F_\gamma$  описує рух розсіяного електрона,  $A$  — оператор антисиметризації. Сума по  $\gamma$  в (1.15) містить як скінчене число членів, що описують відкриті канали, так і нескінченне число членів, що відповідають закритим каналам.

Слідуючи Фешбаху [30], введемо оператор проєкціювання  $\hat{Q}$  на підпростір станів, ортогональних станам  $A[\varphi_\gamma F'_\gamma]$ , де  $\gamma$  відповідає відкритим каналам, а  $F'_\gamma$  — довільна функція з асимптотикою того ж вигляду, що і асимптотика функції  $F_\gamma$ . Тоді оператор  $\hat{P} = 1 - \hat{Q}$  є оператором проєкціювання на підпростір станів відкритих каналів. З допомогою означень операторів  $\hat{P}$  і  $\hat{Q}$  легко показати, що

$$\hat{P}^2 = \hat{P}, \quad \hat{Q}^2 = \hat{Q}, \quad \hat{P}\hat{Q} = \hat{Q}\hat{P} = 0, \quad \hat{P} + \hat{Q} = 1. \quad (1.16)$$

Скориставшись властивостями (1.16) операторів  $\hat{P}$  і  $\hat{Q}$  рівняння Шредингера (1.14) можна переписати у такому вигляді:

$$\hat{P}(\hat{H} - E)(\hat{P} + \hat{Q})\Psi = 0, \quad (1.17)$$

$$\hat{Q}(\hat{H} - E)(\hat{P} + \hat{Q})\Psi = 0. \quad (1.18)$$

Виключаючи  $\hat{Q}\Psi$  із системи рівнянь (1.17), (1.18) дістанемо рівняння

$$[\hat{P}(\hat{H} - E) + \hat{W}]\hat{P}\Psi = 0, \quad (1.19)$$

де

$$\hat{W} = \hat{P}\hat{H}\hat{Q}[\hat{Q}(E - \hat{H})\hat{Q}]^{-1}\hat{Q}\hat{H}\hat{P}. \quad (1.20)$$

Оператор  $\hat{W}$  описує ефект усіх закритих каналів і представляє собою нелокальний, залежний від енергії  $E$ , комплексний потенціал. Його зазвичай називають поляризаційним (або оптичним) потенціалом. Так як за означенням  $\hat{Q}$  виділяє закриті (при заданій енергії  $E$ ) канали, то власні значення неперервного спектра оператора  $\hat{Q}\hat{H}\hat{Q}$  завжди лежать вище  $E$ . Якщо ж оператор  $\hat{Q}\hat{H}\hat{Q}$  має також і дискретні власні значення  $\varepsilon_\mu$ :  $\hat{Q}\hat{H}\hat{Q}\Phi_\mu = \varepsilon_\mu\Phi_\mu$ , то вони відповідають резонансам Фешбаха, тобто автоіонізаційним станам у закритих каналах. Коли енергія налітаючої частинки  $E$  близька до одного із власних значень  $\varepsilon_\mu$ , у поляризаційному потенціалі з'являється великий за величиною доданок, а в перерізах розсіювання резонанс Фешбаха.

## 1.2. Дискретна квантова теорія розсіювання у термінах власних диференціалів

За останні три десятиріччя в квантовій теорії розсіювання було запропоновано багато методів, які спираються на певну схему дискретизації континууму. Розглянемо коротко основні ідеї цих методів і для чого вони потрібні.

Добре відомо, що в квантовій теорії вивчення дискретного спектра (зв'язані стани) і неперервного спектра (стани розсіювання) незіставні за складністю. Для дослідження зв'язаних станів у багаточастинкових квантових системах розвинуто вельми точні кількісні методи (див., наприклад, [31]). У задачах багаточастинкового розсіювання аналогічні ефективні методи відсутні, хоча загальне формулювання задачі розсіювання в системі  $N$  частинок було дано багато років назад у працях Фаддєєва і Якубовського (див. монографію [32], де приведені посилання на оригінальні праці). Ця різка відмінність у складності розв'язання задач для дискретного і неперервного спектрів обумовлена принципово різною поведінкою власних хвильових функцій і різним типом граничних умов. У випадку дискретного спектра усі хвильові функції експоненційно спадають на великих відстанях.

Для неперервного спектра точні хвильові функції простираються до безмежних відстаней і в багаточастинкових задачах відповідають нетривіальним граничним умовам [32]. Тому трактування станів неперервного спектра у реальних квантових системах викликає набагато більше труднощів, ніж урахування дискретного спектра. Це сильно стримує прогрес численних досліджень у різних застосуваннях загальної теорії розсіювання, таких як дослідження пружного й непружного розсіювання електронів на складних атомах та іонах.

Проведений в працях [33–36] аналіз основних рівнянь квантової теорії розсіювання показує, що основні труднощі у трактуванні континууму можна обійти, якщо замість точних хвильових функцій розсіювання використовувати деякі їх середні (по енергії), так звані власні диференціали [37], які локалізовані у просторі і відрізняються (у внутрішній області) від точних хвильових функцій розсіювання лише скінченним нормуванням. За своїм фізичним змістом власні диференціали аналогічні незалежним від часу хвильовим пакетам [37].

Суть методу пакетної дискретизації неперервного спектра в квантових задачах теорії розсіювання продемонструємо на прикладі базової одночастинкової задачі [33, 34]. Розглянемо деякий гамільтоніан

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + V, \quad (1.21)$$

який описує рух частинки у зовнішньому центральном-симетричному полі (або взаємодію двох частинок). Тут  $\hat{H}_0$  — оператор кінетичної енергії,  $V$  — потенціал (оператор) взаємодії частинки з полем (або частинок між собою), форма якого не важлива для даного розгляду.

Нехай  $\Psi_0(E, \ell)$  — повний набір власних станів оператора  $\hat{H}_0$  (ортонормованих на  $\delta$ -функцію від енергії), а  $\Psi^{(\pm)}(E, \ell)$  та  $\Psi(E, \ell)$  — повні набори станів неперервного спектра повного гамільтоніана  $\hat{H}$ , що відповідають відповідно граничним умовам у вигляді розбіжних (+), збіжних (–) і стоячих

ХВИЛЬ.

В основі методу пакетної дискретизації лежить розбиття неперервного спектра гамільтоніанів  $\hat{H}$  і  $\hat{H}_0$  на вузькі енергетичні смуги («біни»):

$$0 = \varepsilon_0 < \varepsilon_1 \dots < \varepsilon_i < \dots < \varepsilon_N, \Delta_i = \varepsilon_i - \varepsilon_{i-1}, \varepsilon_i^* = \frac{1}{2}(\varepsilon_i + \varepsilon_{i-1}). \quad (1.22)$$

Тут вважається, що в границі  $N \rightarrow \infty$ ,  $\varepsilon_N \rightarrow \infty$ . Побудуємо на кожному підінтервалі  $(\varepsilon_{i-1}, \varepsilon_i)$  стаціонарні хвильові пакети  $|X_i\rangle$ ,  $|Y_i^{(\pm)}\rangle$  та  $|Y_i\rangle$  із радіальних частин хвильових функцій вільного руху  $\Psi_0(E, \ell; r)$  та точних функцій розсіювання  $\Psi^{(\pm)}(E, \ell; r)$ ,  $\Psi(E, \ell; r)$ :

$$\begin{aligned} X_i(r) &= \frac{1}{\sqrt{\Delta_i}} \int_{\varepsilon_{i-1}}^{\varepsilon_i} \Psi_0(E, \ell; r) dE, \quad Y_i^{(\pm)}(r) = \frac{1}{\sqrt{\Delta_i}} \int_{\varepsilon_{i-1}}^{\varepsilon_i} \Psi^{(\pm)}(E, \ell; r) dE, \\ Y_i(r) &= \frac{1}{\sqrt{\Delta_i}} \int_{\varepsilon_{i-1}}^{\varepsilon_i} \Psi(E, \ell; r) dE. \end{aligned} \quad (1.23)$$

Ці хвильові пакети (у функціональному аналізі їх ще називають власними диференціалами (ВД) [37]) обмежені і нормовані в просторі квадратично-інтегровних  $(L^2)$  функцій. У працях [33, 34] було показано, що ВД  $X_i(r)$ ,  $Y_i^{(\pm)}(r)$  та  $Y_i(r)$  володіють наступними властивостями:

$$\begin{aligned} \langle X_i | \hat{H}_0 | X_j \rangle &= \varepsilon_i^* \delta_{i,j}, \quad \langle X_i | X_j \rangle = \delta_{i,j}, \\ \langle Y_i | \hat{H}_0 | Y_j \rangle &= \varepsilon_i^* \delta_{i,j}, \quad \langle Y_i | Y_j \rangle = \delta_{i,j}. \end{aligned} \quad (1.24)$$

Таким чином, ВД  $X_i(r)$ ,  $Y_i^{(\pm)}(r)$  та  $Y_i(r)$  представляють собою прямі аналоги власних функцій гамільтоніанів  $\hat{H}_0$  та  $\hat{H}$ , що відповідають дискретному спектру.

У праці [33] в рамках Шредінгерівського формалізму квантової теорії розсіювання одержано скінченновимірні апроксимації для оператора Гріна та позамасової  $T$ -матриці. У наступній праці [34] з використанням техніки

проекційних операторів розвинуто універсальний метод побудови скінченновимірних аналогів основних операторів теорії розсіяння:  $S$ - і  $T$ -матриць, резольвент і хвильових операторів Меллера, а також основних резольвентних тотожностей та рівняння Ліппмана-Швінгера для  $T$ -матриці. В праці [38] метод пакетної дискретизації континууму узагальнюється на випадок симетризації короткодіючого та далекодіючого (кулонівського) потенціалів взаємодії. Тричастинкове узагальнення методу пакетної дискретизації континууму виконано у праці [36]. Ретельно досліджено властивості тричастинкових стаціонарних хвильових пакетів, які будуються в кожному наборі координат Якобі тричастинкової системи. Одержано у явному вигляді скінченновимірні зображення для канальних резольвент у власних пакетних базисах. Показано, що, як і в двочастинковому випадку, ці спектральні представлення зручно використовувати при розв'язанні інтегральних рівнянь для хвильових функцій розсіяння та операторів системи.

До недоліків даного методу слід віднести той факт, що у випадку комплексних або нелокальних операторів взаємодії виникає необхідність працювати з комплексними матрицями великої розмірності, які не є розрідженими. На завершення зазначимо, що на основі описаного вище формалізму хвильових пакетів досі не створено відповідних пакетів прикладних програм для розв'язання багаточастинкових квантових задач розсіяння.

### 1.3. $J$ -матричний метод і його варіації

В останні десятиріччя для аналізу процесів зіткнення були розвинуті алгебраїчні підходи, основані на представленні гамільтоніана квантової системи  $\hat{H}$  у повному базисі квадратично-інтегровних ( $L^2$ ) функцій. Представлення гамільтоніана  $\hat{H}$  в скінченному базисі квадратично-інтегровних функцій давно і широко використовується в атомній і ядерній фізиці для розрахунку структури багаточастинкових квантових систем. Разом з цим

найбільший інтерес при описанні процесів розсіяння представляє  $L^2$ -дискретизація континууму. Представлення неперервного спектра гамільтоніана в контексті повних  $L^2$ -базисів дозволяє використовувати в цих задачах алгебраїчні методи замість розв'язування систем диференціальних рівнянь. Таким очевидним базисом для кутових змінних є сферичні функції тому далі в основному обговорюються базиси для радіальних змінних.

Перші спроби застосування  $L^2$ -базису так званих штурмовських функцій до задачі пружного розсіяння позитронів та електронів на атомі водню здійснено в праці [39]. Існують різні спроби математичного представлення гамільтоніана в скінченному  $L^2$ -базисі. Так, наприклад, в методі псевдостанів і техніки еквівалентних квадратур [40, 41] використовують дискретизацію безпосередньо як спосіб інтерполяції функції спектральної густини. Інша концепція реалізована в так званому методі дискретних базисів [42, 43], що ґрунтується на варіаційному принципі Швінгера [44], в рамках якого далекодіючу частину гамільтоніана намагаються врахувати точно. При цьому представлення далекодіючої частини  $\hat{H}_0$  гамільтоніана  $\hat{H} = \hat{H}_0 + V$  у повному базисі комбінується з апроксимацією короткодійного залишкового потенціалу  $\hat{V}$  в скінченному підпросторі базисних функцій, в якості яких використовуються функції гармонічного осцилятора. В результаті вихідне інтегро-диференціальне рівняння Ліппмана-Швінгера (ЛШ) зводиться до системи алгебраїчних рівнянь відносно елементів  $T$ -матриці ( $K$ -матриці).

До цієї другої групи методів дискретизації континууму відноситься метод  $J$ -матриці, який запропонували Хеллер і Ямані [45], а Брод і Рейнхардт [46] поширили на багатоканальне розсіяння на складних атомах. У рамках цього методу хвильова функція стану неперервного спектра формально представляється у вигляді нескінченного розкладу за власними функціями гармонічного осцилятора (в ядерній фізиці) або за лагєррівськими базисними функціями (в атомній фізиці). Представлення далекодіючої частини  $\hat{H}_0$  гамільтоніана  $\hat{H}$  у цих базисах має вигляд тридіагональної



матриці Якобі. Хоча ця матриця нескінченна вона може бути діагоналізована аналітично при будь-якій енергії, що дозволяє коректно представити асимптотичну форму розв'язку. Таким чином, стаціонарне рівняння Шредингера, що відповідає гамільтоніану  $\hat{H}_0$ , перетворюється в тричленне рекурентне співвідношення для коефіцієнтів розкладу хвильової функції. Цим самим встановлюється зв'язок методу  $J$ -матриці з теорією ортогональних поліномів і відкривається можливість використання цього потужного математичного апарата в теорії розсіяння.

З погляду формалізму і чисельної реалізації метод  $J$ -матриці аналогічний  $R$ -матричній теорії розсіяння (див., наприклад, [47]). У рамках  $J$ -матричного підходу мова конфігураційного простору, на якій сформульована теорія  $R$ -матриці, перекладена на мову простору базисних функцій. Крім цього, як показано в праці [48]), якщо визначити оператор проєкціювання  $\hat{P}_N$  на підпростір перших  $N$  базисних функцій, то точний розв'язок проблеми розсіяння на модельному потенціалі  $\hat{V}^N = \hat{P}_N \hat{V} \hat{P}_N$  може бути одержаний з використанням формалізму Фешбаха [30]. Цим самим була доведена еквівалентність теорії Фешбаха і методу  $J$ -матриці, в рамках якого простір  $L^2$ -функцій з допомогою операторів  $\hat{P}_N$  і  $\hat{Q}_N = \hat{I} - \hat{P}_N$  розділяється на «внутрішню» і «зовнішню» області.

Поряд з цим в працях [49, 50] був запропонований і розвинутий так званий метод сепарабельного розкладу потенціалу (PSE). Якщо відволіктися від деяких математичних тонкощів і технічних відмінностей, то за своєю концепцією даний метод подібний до  $J$ -матричного підходу до проблеми розсіяння. У рамках PSE-методу також використовується представлення оператора потенціальної енергії у скінченному підпросторі  $L^2$ -базисних функцій. У результаті вихідне інтегральне рівняння ЛШ перетворюється в систему лінійних рівнянь відносно невідомих коефіцієнтів розкладу хвильової функції системи за базисними функціями. При вдалому доборі базисних функцій матричні елементи функції Гріна обчислюються аналітично.

У подальшому були розроблені два варіанти PSE-методу.

У працях [51, 52] застосовується так званий кулонівський штурмівський базис, що дозволяє включити далекодійний кулонівський потенціал в функцію Гріна і тим самим якось урахувати кулонівську асимптотику. Цей варіант PSE-методу — так званий «Coulomb-Sturmian separable expansion method» (CSSE) — був узагальнений на випадок кулонівської проблеми трьох тіл, котра розв'язується на підставі рівнянь Фаддєєва [32]. На сьогодні з допомогою цього методу вдалося розв'язати проблему розсіяння в системі трьох тіл при енергії нижче порога тричастинкового розвалу для сил кулонівського відштовхування та притягання.

Очевидно, що PSE-метод еквівалентний методу  $J$ -матриці у тій мірі, в якій рівняння ЛШ еквівалентне рівнянню Шредінгера. Апроксимація потенціалу  $\hat{V}$  його проекцією  $V^N$  на підпростір перших  $N$  базисних функцій, яка застосовується в  $J$ -матричному підході, є одним із способів сепарабельного розкладу потенціалу. У праці [53] проведено порівняння методу  $J$ -матриці з іншими методами  $L^2$ -дискретизації континууму. Зокрема, запропонована  $J$ -матрична інтерпретація додатніх власних значень обрізаної матриці гамільтоніана (псевдостанів). Узагальнення  $J$ -матричної теорії на випадок багатоканального розсіяння у формалізмі сильного зв'язку зі скінченним числом дискретних псевдостанів мішені було виконано в працях [45, 46] і з успіхом застосовано до опису фоторозщеплення  $H^-$  [54].

У працях [55, 56] продемонстровано, що комплексний скейлінг у поєднанні з формалізмом методу  $J$ -матриці дозволяє одержувати ефективну процедуру пошуку резонансних полюсів  $S$ -матриці розсіяння. Показано, що точне урахування оператора кінетичної енергії суттєво підвищує швидкість збіжності результатів у порівнянні зі стандартним методом комплексного скейлінга, в котрому використовується скінченний  $L^2$ -базис. Застосування цієї процедури до розрахунку структури двоатомних молекул розглянуто в [57].

#### 1.4. Збіжний метод сильного зв'язку каналів

Останнім часом в теорії електрон-атомних зіткнень широко використовується різновид методу сильного зв'язку каналів, а саме так званий збіжний метод сильного зв'язку (ЗСЗ) [58–61], який також ґрунтується на інтегральному рівнянні, але при цьому використовує техніку псевдостанів. Оригінальна версія цього методу застосовувалася для розрахунків тричастинкової кулонівської хвильової функції системи  $\text{He}^+ + e$ . Деталі техніки розрахунків ретельно описані в праці [59], і ми не будемо їх тут розглядати. Зупинимось лише на одному принциповому моменті.

Ключовим для методу ЗСЗ є перехід (з допомогою техніки псевдостанів) від рівняння ЛШ до деякого наближеного (матричного) інтегрального рівняння для амплітуди процесу іонізації водневоподібного атома налітаючим електроном. Але з теорії багаточастинкового інтегрального рівняння ЛШ для кулонівських потенціалів випливає [62], що фізична амплітуда не є розв'язком цього рівняння, а зв'язана з ним за допомогою певного коефіцієнта, сингулярність в якому виникає при виконанні закону дисперсії, коли енергія та імпульс зв'язані між собою на енергетичній поверхні. Із схеми ЗСЗ не зрозуміло, чи є взагалі якийсь зв'язок між точним і наближеним (матричним) інтегральними рівняннями. Детальне обговорення цього питання можна знайти в [63] і, особливо, в праці [61], де показано, що згадана трудність методу ЗСЗ пов'язана з тим, що некомпактне ядро рівняння ЛШ було примусово замінено сепарабельним, тобто компактним ядром [32].

Щоб із розв'язку рівняння ЛШ одержати фізичну амплітуду розсіяння, цей розв'язок треба певним чином перенормувати [61,63]. Наприклад, якщо ми розв'язуємо це рівняння методом послідовних наближень, то із кожної ітерації потрібно відповідним чином вилучити розбіжну частину при наближенні до енергетичної поверхні. Більш детально ця процедура описана в працях [60,61,63]. На завершення зазначимо, що при реалізації схеми ЗСЗ

доводиться робити чимало і інших недостатньо обґрунтованих припущень. Але не зважаючи на це, метод ЗСЗ широко застосовується (і у більшості випадків досить успішно) у практиці порівняння теорії з експериментом.

## Висновки до розділу 1

В останні три десятиріччя розвинуто багато перспективних методів розв'язання багаточастинкових задач для дискретного спектра. Зокрема, були виконані реалістичні розрахунки для дискретного та квазідискретного спектрів систем з великим числом ферміонів (нуклонів, електронів). Для бозонних систем на даний час існують методи (типу методу Монте-Карло), які дозволяють точно обчислювати стани систем із сотень чи навіть тисяч взаємодіючих частинок. Однак до цих пір практичне розв'язання багаточастинкових квантових задач розсіяння пов'язане з величезним об'ємом обчислень і тому вимагає застосування найбільш потужних суперкомп'ютерів. Але навіть найсучасніша обчислювальна техніка не в змозі подолати усі чисельні проблеми, які виникають у рамках традиційних підходів. Так, наприклад, при розв'язуванні тричастинкової задачі розсіяння на основі традиційних підходів з великими труднощами удається описати область проміжних енергій внаслідок величезного числа парціальних хвиль, що беруть участь у розсіянні. Тому доводиться відмовитися від парціально-хвильових розкладів і переходити до розв'язання рівнянь Фаддєєва безпосередньо у шестивимірному просторі координат Якобі [32]. Труднощі ще більше посилюються, якщо необхідно враховувати далекодіючу кулонівську взаємодію і тричастинкові сили, особливо, якщо вони залежать від спіну.

Таким чином, існує контраст у складності розв'язування задач для дискретного і неперервного сектрів, а саме: трудомісткості розрахунків однієї й тієї ж фізичної системи (із спільним гамільтоніаном) при різних граничних умовах на хвильові функції відрізняються у сотні і навіть тисячі разів. Тому

природно виникає бажання змінити весь підхід до практичного розв'язання задач розсіювання, зблизивши методи розв'язування задач для неперервного та дискретного спектрів. Практично це можна здійснити шляхом дискретизації неперервного спектра.

Варто відзначити, що ідея дискретизації неперервного спектра при розв'язанні задач розсіювання виникла давно і активно використовується до цих пір. Прямо чи побічно вона застосовується в різних методах, ґрунтованих на розкладанні хвильових функцій розсіювання за  $L^2$ -базисом ( $L^2$ -дискретизація). Найбільш відомі з них — метод пакетної дискретизації спектра, метод ЗСЗ, а також різні варіанти  $J$ -матричного методу. Незважаючи на досягнуті величезні успіхи в дискретизації неперервного спектра, цілий ряд математичних проблем, пов'язаних із застосуванням цих методів до розв'язання конкретних задач теорії розсіювання, залишається відкритим. Особливо це стало зрозуміло, коли метод  $J$ -матриці і метод ЗСЗ стали застосовуватися для розрахунків хвильових функцій з двома чи трьома асимптотично вільними зарядженими частинками. Залишається відкритим і питання збіжності розв'язку рівнянь  $J$ -матричного методу до очікуваного точного та їх співвідношення.

Останніми роками в розрахунках атомної структури та процесів низькоенергетичного розсіювання електронів на складних атомах та іонах інтенсивно використовується метод  $R$ -матриці, який також ґрунтується на ідеї дискретизації неперервного спектра. Пропонована нами в працях [1–14] БСР-версія цього методу фактично об'єднує ідеї послідовної дискретизації неперервного спектра і використання  $B$ -сплайнів як базисних функцій з компактними носіями у внутрішній  $R$ -матричній області.

Як буде показано в наступному розділі дисертації, дискретизація континууму з допомогою базисних сплайнів  $B_i$  має низку переваг над розглянутими в цьому розділі методами.

## РОЗДІЛ 2

### МЕТОД СИЛЬНОГО ЗВ'ЯЗКУ КАНАЛІВ. МЕТОД R-МАТРИЦІ

#### 2.1. Метод сильного зв'язку каналів

Даний розділ дисертації присвячений систематичному викладу фізичних основ методу сильного зв'язку каналів (СЗК) та методу  $R$ -матриці і їх модифікацій, які ґрунтуються на використанні неортогональних орбіталей та  $B$ -сплайнів як базисних функцій. У підрозділі 2.1 в рамках методу СЗК розглядається багатоканальна квантова задача розсіяння повільних електронів на складних атомах. В атомних одиницях ( $e = m_e = \hbar = 1$ ) нерелятивістський гамільтоніан  $(N+1)$ -електронної системи «атом+налітаючий електрон» має вигляд

$$\begin{aligned}\hat{H}(Z, N+1) &= \sum_{i=1}^{N+1} \left( -\frac{1}{2} \Delta_i - \frac{Z}{r_i} \right) + \sum_{i>j=1}^{N+1} \frac{1}{r_{ij}} \\ &= \hat{H}(Z, N) - \frac{1}{2} \Delta_{N+1} - \frac{Z}{r_{N+1}} + \sum_{i=1}^N \frac{1}{r_{i,N+1}},\end{aligned}\tag{2.1}$$

де  $r_{ij}$  — відстань між електронами  $i$  та  $j$ ,  $r_i$  — відстань електрона  $i$  до ядра,  $Z$  — заряд ядра,  $\hat{H}(Z, N)$  — гамільтоніан  $N$ -електронної атомної мішені. 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  $\pi$  — повні орбітальний і спіновий моменти, їх проекції на задану вісь та парність повної  $(N+1)$ -електронної системи відповідно,  $\gamma = L_i S_i M_{L_i} M_{S_i} \pi$  — аналітичний набір квантових чисел мішені  $A$  в  $i$ -му стані. Необхідно знайти повністю антисиметричні розв'язки рівняння Шредінгера

$$\hat{H}(Z, N+1) \Psi_\alpha(\Gamma X, x_{N+1}) = E \Psi_\alpha(\Gamma X, x_{N+1}),\tag{2.2}$$

які задовольняють фізичні граничні умови задачі  $e+A$ -розсіяння. Розв'язок рівняння (2.2), тобто хвильову функцію  $\Psi_\alpha(\Gamma X, x_{N+1})$  повної  $(N+1)$ -електронної системи, часто називають хвильовою функцією зіткнення. Тут  $X \equiv (x_1, \dots, x_N)$  позначає сукупність просторових і спінових координат усіх  $N$  електронів атома  $A$ ,  $x_i \equiv (\vec{r}_i, \sigma_i)$  — просторові та спінові координати  $i$ -го електрона,  $E$  — повна енергія системи  $e+A$ . Нижній індекс  $\alpha$  у функції зіткнення  $\Psi_\alpha(\Gamma X, x_{N+1})$  характеризує початкові умови і зазвичай позначає вхідний канал розсіяння.

Розв'язок рівняння (2.2) повинен задовольняти граничним умовам вхідного хвильового пакета у деякому каналі розсіяння  $\alpha$  і розбіжних хвиль в усіх інших каналах. Хвильову функцію зіткнення  $\Psi_\alpha(\Gamma X, x_{N+1})$  можна представити у вигляді розкладу за повним набором  $N$ -електронних хвильових функцій  $\Phi_i(X) \equiv \Phi_i(x_1, \dots, x_N)$  мішені  $A$ , які є власними станами гамільтоніана  $\hat{H}(Z, N)$ . Коефіцієнти такого розкладу відіграють роль хвильової функції налітаючого електрона. Таким чином в методі СЗК хвильову функцію зіткнення  $\Psi_\alpha$  представляють у вигляді розкладу

$$\Psi_\alpha(\Gamma X, x_{N+1}) = A \sum_{i=1}^n \bar{\Phi}_i^\Gamma(x_1, \dots, x_N; \hat{r}_{N+1}, \sigma_{N+1}) \frac{F_{i\alpha}^\Gamma(r_{N+1})}{r_{N+1}}, \quad (2.3)$$

де  $A$  — оператор антисиметризації,  $n$  — число каналів, а індекс  $i$  позначає номер каналу. На практиці, як правило, в цей розклад включають усі члени, що відповідають відкритим каналам і лише скінчене число членів, які описують енергетично закриті канали.

Позначимо далі через  $k_i \ell_i m_{\ell_i} s_{\ell_i}$  квантові числа налітаючого електрона. Хвильові функції каналів  $\bar{\Phi}_i^\Gamma$  містять у собі атомні хвильові функції  $\Phi_i(x_1, \dots, x_N)$  та спінові  $\chi_{\frac{1}{2}m_{s_i}}$  й кутові  $Y_{\ell_i m_{\ell_i}}$  частини хвильової функції налітаючого електрона, які зв'язані між собою згідно з правилами векторного додавання елементів. У випадку нерелятивістського гамільтоніана  $\hat{H}(Z, N+1)$  цей зв'язок відповідає фіксованим значенням повного орбітального моменту  $L$  та повного спіну  $S$  (кожен з яких комутує із гамільтоніаном

$\hat{H}(Z, N + 1)$ . При цьому розклад функції каналів  $\bar{\Phi}_i^\Gamma$  за станами мішені  $\Phi_i$  можна подати у такому вигляді:

$$\begin{aligned} \bar{\Phi}_i^\Gamma(x_1, \dots, x_N; \hat{r}_{N+1}, \sigma_{N+1}) &= \\ &= \sum_{M_L m_{\ell_i}} \sum_{M_{S_i} m_{s_i}} (L_i M_{L_i}, \ell_i m_{\ell_i} | L M_L) \cdot \\ &\cdot (S_i M_{S_i}, \frac{1}{2} m_{s_i} | S M_S) \Phi_i(x_1, \dots, x_N) Y_{\ell_i m_{\ell_i}}(\hat{r}_{N+1}) \chi_{\frac{1}{2} m_{s_i}}(\sigma_{N+1}), \end{aligned} \quad (2.4)$$

де використано стандартні позначення для коефіцієнтів Клебша-Гордона.

Хвильова функція континууму  $F_{i\alpha}^\Gamma(r)$ , яка описує радіальний рух розсіяного електрона в  $i$ -му каналі, визначається наступним чином:

$$F_{i\alpha}^\Gamma(r) \equiv F_{k_i \ell_i \alpha}^\Gamma(r), F_{i\alpha}^\Gamma(0) = 0, \varepsilon_i = k_i^2/2, \quad (2.5)$$

де повна енергія  $(N + 1)$ -електронної системи  $E = E_i(Z, N) + \varepsilon_i$ , при чому  $E_i(Z, N)$  — енергія стану атома А, що відповідає каналу  $i$ , а  $\varepsilon_i = k_i^2/2$  — кінетична енергія налітаючого електрона (в атомних одиницях). Якщо величина  $(E - E_i)$  додатня, що відповідає відкритому каналу, то функція континууму  $F_{i\alpha}^\Gamma(r)$  на нескінченності містить розбіжну хвилю, в протилежному разі  $(E - E_i) < 0$  функція  $F_{i\alpha}^\Gamma(r)$  квадратично інтегровна.

Розклад повної хвильової функції (2.3)  $(N + 1)$ -електронної системи здійснюється за набором станів і псевдостанів мішені  $\Phi_i(X)$ . У випадку складних атомів та іонів відповідні точні хвильові функції не відомі, тому вони будуються у вигляді лінійної комбінації:

$$\Phi_i(x_1, \dots, x_N) = \sum_j c_{ij} \varphi_j(x_1, \dots, x_N), \quad (2.6)$$

де  $\varphi_j$  — заданий набір антисиметризованих одноконфігураційних функцій, що відповідають повному стану  $L_i S_i \pi$  мішені. Енергетичний спектр  $E_i(Z, N)$  мішені А і коефіцієнти  $c_{ij}$  у розкладі можна визначити із умови діагоналізації  $N$ -електронного гамільтоніана  $\hat{H}(Z, N)$  на функціях вигляду (2.6):

$$\langle \Phi_i | \hat{H}(Z, N) | \Phi_j \rangle = E_i(Z, N) \delta_{ij}. \quad (2.7)$$



У рамках багатоконфігураційного методу Хартрі-Фока (БКХФ) функції конфігурацій  $\varphi_j(x_1, \dots, x_N)$  можна представити у вигляді антисиметризованого добутку одноелектронних хвильових функцій (атомних орбіталей)  $\varphi_{\alpha_j}(x_j)$ . Якщо спін-орбітальна взаємодія несуттєва, то хвильова функція окремого електрона в центральному полі представляється у вигляді добутку просторової та спінової функцій:

$$\varphi_{\alpha_j}(x) = \varphi_{n_j \ell_j m_j}(\vec{r}) \chi(m_S | \sigma) = \frac{1}{r} P_{n_j \ell_j}(r) Y_{\ell_j m_j}(\hat{r}) \chi(m_S | \sigma), \quad (2.8)$$

де  $n_j$ ,  $\ell_j$ , і  $m_j$  — відповідно головне, азимутальне і магнітне квантові числа,  $m_S$  — проекція спіну ( $\alpha_j$  — скорочене позначення набору квантових чисел  $n_j$ ,  $\ell_j$ ,  $m_j$  і  $m_S$ ). Принциповим питанням є вибір типу радіальних одноелектронних хвильових функцій  $P_{n_j \ell_j}(r)$  (аналітичних орбіталей слетерівського типу, хартрі-фоківських у самоузгодженому полі чи радіальних орбіталей  $P_{n_j \ell_j}(r)$  в простих статичних модельних потенціалах) і конфігурацій включених у розклад (2.6) станів і псевдостанів мішені. У підрозділі 2 ми обговоримо всі ці питання і програмні коди, які дозволяють обчислити ці орбіталі і атомні стани.

При використанні розкладу (2.3) методу СЗК проявляється його наступні недоліки:

- 1) Точність розрахунку в методі СЗК можна підвищити шляхом включення в суму (2.3) якомога більшого числа функцій конфігураційних станів, збудження яких енергетично неможливе (закриті канали). Саме із закритими каналами пов'язані резонанси в перерізах розсіювання, що отримали назву резонансів Фешбаха або резонансів закритих каналів. Однак при збільшенні кількості каналів, які враховуються, зростає число рівнянь для радіальних функцій  $F_{i\alpha}^{\Gamma}(r)$ , які підлягають розв'язанню. Очевидно, це число обмежене можливостями обчислювальної техніки. Тому достатньо надійні результати можна дістати лише у тому разі, коли у розкладі (2.3) можна обмежитися урахуванням невеликого числа закритих каналів. Це

має місце, коли поляризація атома зумовлена невеликим числом віртуальних переходів. У більшості же випадків внесок у поляризацію атома дають достатньо багато проміжкових станів. Застосування методу СЗК до таких атомів ускладнено через слабку збіжність розкладу (2.3).

У зв'язку із зазначеними обставинами одна з основних проблем методу СЗК при розрахунках перерізів електрон-атомних зіткнень — це урахування поляризації атома налітаючим електроном.

Одна з можливостей урахування поляризації і, водночас, одна з можливостей підвищення точності розрахунків без помітного збільшення об'єму обчислень ґрунтується на використанні ідеї псевдостанів (див. огляд [64]). В рамках такого підходу з допомогою так званих функцій псевдостанів  $\bar{\varphi}_j(x_1, \dots, x_N)$  послідовно враховується як відмічений вище вплив не включених в розклад (2.6) (і відповідно (2.3)) збуджених станів атома, так і кореляційні ефекти. У задачах з великою розмірністю функції псевдостанів  $\bar{\varphi}_j$  дозволяють ефективно враховувати внесок багатьох закритих каналів, не включених в розклад (2.3). При практичних розрахунках функції  $\bar{\varphi}_j$  добираються так, щоб сімейство врахованих станів  $\varphi_j$  і псевдостанів  $\bar{\varphi}_j$  давало експериментально спостережуване значення поляризованості атома. Однак суттєвим недоліком цього підходу є те, що введення псевдостанів іноді призводить до виникнення хибних резонансів в перерізах розсіювання.

2) В методі СЗК рівняння Шредінгера (2.2) замінюється рівняннями

$$\langle \bar{\Phi}_i^\Gamma | \hat{H}(Z, N+1) - E | \Psi_\alpha \rangle = 0, i = 1, \dots, n. \quad (2.9)$$

Підставляючи розклад (2.3) в рівняння (2.9), можна одержати систему зв'язаних інтегро-диференціальних рівнянь для радіальних функцій  $F_{i\alpha}^\Gamma(r)$ . Розв'язуючи цю систему рівнянь за допомогою відомих чисельних методів, знаходять радіальні хвильові функції континууму  $F_{i\alpha}^\Gamma(r)$  та матрицю розсіювання. Однак, як показано в праці [65], розклад (2.3) не визначає  $F_{i\alpha}^\Gamma(r)$  однозначно, що часто призводить до втрати точності при чисельному ін-

тегруванні рівнянь. Для того, щоб уникнути появи нестійкості в деяких чисельних процедурах інтегрування згаданих вище рівнянь радіальні хвильові функції континууму  $F_{i\alpha}^\Gamma(r)$  вибираються ортогональними усім радіальним орбіталям мішені  $P_{n_j\ell_j}(r)$  тієї ж симетрії:

$$\langle P_{n_j\ell_j} | F_{i\alpha}^\Gamma \rangle = \int_0^\infty P_{n_j\ell_j}(r) F_{i\alpha}^\Gamma(r) dr = 0, \ell_i = \ell_j. \quad (2.10)$$

Поряд з усуненням згаданих вище труднощів методу СЗК вимога ортогональності (2.10) функцій  $F_{i\alpha}^\Gamma(r)$  і  $P_{n_j\ell_j}(r)$  приводить до суттєвого спрощення обчислювальної схеми методу СЗК.

Унаслідок обмежень, що накладаються на функцію зіткнення  $\Psi_\alpha$  (2.3) умовою ортогональності (2.10), налітаючий електрон не може бути віртуально захоплений в одну із незаповнених підболонок, врахованих у розкладі (2.6) станів мішені. У рамках методу СЗК можливість такого захоплення враховується включенням в розклад (2.3) так званих кореляційних функцій  $\chi_j^\Gamma(x_1, \dots, x_{N+1})$ , які будуються із тих самих одноелектронних орбіталей (2.8), що й функції  $\Phi_i(x_1, \dots, x_N)$  станів мішені. Тоді вихідний розклад (2.3) хвильової функції зіткнення  $\Psi_\alpha$  замінюється на більш складний:

$$\begin{aligned} \Psi_\alpha(\Gamma X, x_{N+1}) = & A \sum_{i=1}^n \bar{\Phi}_i^\Gamma(x_1, \dots, x_N; \hat{r}_{N+1}, \sigma_{N+1}) \frac{F_{i\alpha}^\Gamma(r_{N+1})}{r_{N+1}} + \\ & + \sum_{j=1}^m c_j \chi_j^\Gamma(x_1, \dots, x_{N+1}), \end{aligned} \quad (2.11)$$

де індекс  $j$  набуває значень номерів незаповнених електронних підболонок, у які міг би бути захоплений налітаючий електрон.

У випадку розкладу (2.11) рівняння Шредінгера (2.2) приводить до системи зв'язаних інтегро-диференціальних рівнянь для радіальних функцій  $F_{i\alpha}^\Gamma(r)$  і алгебраїчних рівнянь для коефіцієнтів  $c_j$ . Модифікований таким чином метод СЗК отримав назву методу сильного зв'язку каналів з кореляційними функціями (метод СЗККФ).

Другий член в правій частині розкладу (2.11) містить квадратично інтегровні хвильові функції  $\chi_j^\Gamma$ , які описують зв'язані стани усієї  $(N + 1)$ -електронної системи і мають ту ж кутову симетрію, що і  $\Psi_\alpha$ . Ці функції служать для покращення опису системи на малих відстанях від ядра і часто приводять до більш швидкої збіжності розкладу (2.11). З допомогою функцій  $\chi_j^\Gamma$  також можна врахувати вплив окремих автовідривних станів (АВС) від'ємних іонів  $A^-$ , які проявляються в процесах розсіяння електронів на нейтральних атомах. У практичних розрахунках кореляційні функції  $\chi_j^\Gamma$  найчастіше використовують для компенсації дефектів функції зіткнення  $\Psi_\alpha(\Gamma X, x_{N+1})$ , пов'язаних з умовами ортогональності (2.10) та обмеженнями першої суми в розкладі (2.11) скінченним числом доданків. Включення в (2.11) спеціальних додаткових кореляційних функцій  $\chi_j^\Gamma$  означає, що не зважаючи на умову (2.10) розклад (2.11) враховує можливість віртуального захоплення електрона у незаповнені підоболонки. Однак, такий спосіб усунення дефектів функції зіткнення  $\Psi_\alpha$  іноді приводить до виникнення нефізичної структури в перерізах розсіяння та до необхідності сумісного розв'язання громіздкої системи інтегро-диференціальних рівнянь.

Очевидно: для урахування можливості віртуального захоплення налітаючого електрона в незаповнені підоболонки мішені необхідно відмовитися від вимоги (2.10) ортогональності функцій континууму  $F_{i\alpha}^\Gamma(r)$  усім атомним орбіталям  $P_{n_j\ell_j}(r)$  тієї ж кутової симетрії.

Насправді ж ця вимога не є обов'язковою і не впливає із загальних квантовомеханічних принципів. На відміну від електрона у зв'язаному стані, що описується хартрі-фоківською орбіталлю (2.8) мішені, на налітаючий електрон у стані  $F_{i\alpha}^\Gamma(r)$  діє потенціал, створюваний не  $N - 1$  електронами, а всіма  $N$  електронами атома-мішені, тому радіальні хвильові функції континууму  $F_{i\alpha}^\Gamma(r)$  і зв'язані орбіталі  $P_{n_j\ell_j}(r)$  є власними функціями різних гамільтоніанів.

Підставляючи в рівняння Шредінгера (2.2) функцію зіткнення  $\Psi_\alpha(\Gamma X,$

$x_{N+1}$ ) у вигляді (2.11) і проєкціюючи це рівняння по чергово на хвильові функції мішені  $\Phi_i(x_1, \dots, x_N)$  та квадратично інтегровні кореляційні функції  $\chi_j^\Gamma(x_1, \dots, x_{N+1})$  можна одержати таку систему зв'язаних інтегро-диференціальних рівнянь для радіальних функцій  $F_i \equiv F_{i\alpha}^\Gamma(r)$ :

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} - \frac{\ell_i(\ell_i + 1)}{r^2} + \frac{2Z}{r} + k_i^2\right)F_i(r) = 2 \sum_j (V_{ij} + W_{ij} + X_{ij})F_j(r). \quad (2.12)$$

Тут  $k_i^2 = 2[E - E_i(Z, N)]$ ,  $V_{ij}$  — прямий локальний потенціал, а інтегральні оператори нелокального обмінного  $W_{ij}$  та нелокального кореляційного  $X_{ij}$  потенціалів визначаються наступним чином:

$$W_{ij}F_j = \int_0^\infty W_{ij}(r, r')F_j(r') dr', \quad X_{ij}F_j = \int_0^\infty X_{ij}(r, r')F_j(r') dr'. \quad (2.13)$$

Відповідні вирази для операторів  $V_{ij}$ ,  $W_{ij}$  та  $X_{ij}$  вельми громіздкі і в явному вигляді були записані лише для розсіяння електрона на простих атомах. Проте для складних атомів та іонів їх можна сконструювати за допомогою програмного коду (див. [15]).

Одержану систему зв'язаних інтегро-диференціальних рівнянь (2.12) можна розв'язувати чисельно без надмірних труднощів на сучасних ЕОМ з використанням відомих методів: метод алгебраїчних рівнянь [66], неітераційний метод інтегральних рівнянь [67], метод  $R$ -матриці (див. нижче) та наближення збіжного сильного зв'язку [68]. Всі ці методи з великим успіхом використовуються для розв'язування рівнянь (2.12) або в координатному, або ж в імпульсному просторі для кожної енергії зіткнення і для кожного набору квантових чисел  $LS\pi$ .

## 2.2. Метод $R$ -матриці та його модифікації

У цьому підрозділі до розв'язання системи зв'язаних інтегро-диференціальних рівнянь (2.12) застосовується метод  $R$ -матриці та запропонована

в наших працях [1–14] версія цього методу, яка базується на використанні залежних від терму неортогональних орбіталей та  $B$ -сплайнів як базисних функцій. Уперше цей метод було запропоновано Вігнером та Айзенбудом в 1947р. в їх фундаментальній праці [69], присвяченій теорії ядерних реакцій. До задач розсіяння електрона на атомах та іонах цей ефективний і надійний метод був вперше застосований в праці [70].

В описаному в підрозділі 2.1 методі СЗККФ діагоналізація гамільтоніана (2.1) на підпросторі закритих каналів проводиться шляхом розв’язання алгебраїчних рівнянь, тоді як його діагоналізація на підпросторі відкритих і частини закритих каналів, урахованих у першій сумі розкладу (2.11), вимагає розв’язання системи інтегро-диференціальних рівнянь другого порядку (2.12). У методі  $R$ -матриці задача діагоналізації гамільтоніана (2.1) на просторі як закритих, так і відкритих каналів ефективно зводиться до розв’язання системи алгебраїчних рівнянь. Хоча цей метод дозволяє розраховувати зіткнення повільних електронів і фотонів з будь-яким складним атомом чи іоном, подальші дослідження показали, що його узагальнення на область проміжних енергій, при яких можуть збуджуватися усі зв’язані стани і неперервний спектр, вимагає певної модифікації математичного формалізму  $R$ -матричної теорії та удосконалення її обчислювальної схеми.

Відмітна особливість методу  $R$ -матриці полягає в тому, що увесь конфігураційний простір  $(N + 1)$ -електронної системи «атом+налітаючий електрон» 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; тут  $r$  — відстань від електрона до центра атома. Радіус внутрішньої області  $a$  вибирають мінімальним, але таким, щоб усі радіальні хвильові функції  $P_{n_j \ell_j}(r)$  атомних електронів із заданою точністю оберталися в нуль при  $r \geq a$ . При цьому у внутрішній

області  $r \leq a$  важливими є обмінні та кореляційні ефекти, а в зовнішній області  $r > a$  потенціали взаємодії виходять на свої асимптотичні значення, і інтегро-диференціальні рівняння стають просто диференціальними.

Тут важливо розуміти, що мотивацією для розбиття конфігураційного простору  $(N + 1)$ -електронної системи на внутрішню і зовнішню області слугує в значній мірі той добре відомий факт, що із-за граничних умов (наприклад, обертання в нуль хвильової функції поза обмеженим об'ємом простору) розв'язок рівняння Шредінгера існує лише для дискретного набору власних значень. Саме з цієї причини для розв'язування рівнянь задачі розсіяння у внутрішній області  $r \leq a$  доречно використовувати методи, які ґрунтуються на ідеї дискретизації континууму дещо модифікованого гамільтоніану  $H_{N+1}$   $(N + 1)$ -електронної системи. Заміна неперервного спектра дискретним дає певні переваги, оскільки відкриває можливість з невеликими модифікаціями використовувати стандартні програми розрахунку атомних структур. Це в свою чергу дозволяє ефективно звести задачу про розсіяння у внутрішній  $R$ -матричній області до системи алгебраїчних рівнянь.

Тепер ми покажемо, як на підставі ключової ідеї  $R$ -матричного методу про розбиття конфігураційного простору на дві області можна визначити  $R$ -матрицю, а отже,  $K$ - та  $S$ -матриці. Розглянемо насамперед багатоканальну квантову задачу про  $e+A$ -розсіяння у внутрішній області.

**2.2.1. Задача про  $e+A$ -зіткнення у внутрішній області.** Представимо повну хвильову функцію  $(N + 1)$ -електронної системи «атом + налітаючий електрон» при заданій енергії  $E$  у вигляді розкладу

$$\Psi_E^\Gamma = \sum_k A_{Ek}^\Gamma \Psi_k^\Gamma, r < a. \quad (2.14)$$

Подібно до (2.11), сконструюємо для кожного набору квантових чисел

$LS\pi$  незалежний від енергії дискретний базис  $(N+1)$ -електронних функцій

$$\begin{aligned} \Psi_k^\Gamma(X, x_{N+1}) = & A \sum_{i,j} \bar{\Phi}_i^\Gamma(X, \hat{r}_{N+1}, \sigma_{N+1}) \frac{u_j(r_{N+1})}{r_{N+1}} c_{ijk}^\Gamma + \\ & + \sum_i \chi_i^\Gamma(X, x_{N+1}) d_{ik}^\Gamma. \end{aligned} \quad (2.15)$$

Тут  $\bar{\Phi}_i^\Gamma(X, \hat{r}_{N+1}, \sigma_{N+1})$  — скінченний набір функцій, які описують зв'язані стани мішені і включають в себе кутову та спінову частину хвильової функції розсіяного електрона у відповідності з правилами векторного додавання моментів. Кожна функція  $\bar{\Phi}_i^\Gamma$  задає канал і будується із одноелектронних радіальних орбіталей мішені  $P_{n_j \ell_j}(r)$ . Квадратично інтегровні кореляційні функції  $\chi_i^\Gamma(X, x_{N+1})$  мають такий самий зміст, як і в розкладі (2.11), і вважаються зосередженими у внутрішній  $R$ -матричній області. Вони описують стани  $(N+1)$ -електронної системи і також будуються із радіальних орбіталей мішені  $P_{n_j \ell_j}$ . Зазначимо тепер, що в першій сумі правої частини рівності (2.15) ми розклали радіальні орбіталі розсіяного електрона  $F_{i\alpha}^\Gamma$  за базисними функціями  $u_j$ , заданими на скінченному інтервалі  $0 \leq r \leq a$  наступним чином. Функції  $u_j$  відмінні від нуля на межі  $r = a$  внутрішньої області і, таким чином, забезпечують зв'язок між розв'язками у внутрішній і зовнішній областях. Для базисних функцій  $u_j$ , які задовольняють довільним граничним умовам при  $r = a$ , гамільтоніан  $H_{N+1}$  (2.1) 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  $R$ -матричній області зручно користуватися оператором Блоха

$$L_{N+1} \equiv \sum_{i=1}^{N+1} \frac{1}{2} \delta(r_i - a) \left( \frac{d}{dr_i} - \frac{b-1}{r_i} \right), \quad (2.16)$$

який анулює згадані вище поверхневі члени при  $r = a$  (тут  $b$  — довільна фіксована дійсна константа). Отже, оператор  $H_{N+1} + L_{N+1}$  є ермітовим оператором для базисних функцій  $u_j$ , які задовольняють довільним граничним умовам при  $r = a$ . Тепер рівняння Шредінгера (2.2) доцільно тотожно



подати у такому вигляді:

$$(H_{N+1} + L_{N+1} - E)\Psi = L_{N+1}\Psi. \quad (2.17)$$

Але це рівняння у свою чергу можна записати у вигляді однорідного інтегрального рівняння

$$\Psi = (H_{N+1} + L_{N+1} - E)^{-1}L_{N+1}\Psi, \quad (2.18)$$

де  $(H_{N+1} + L_{N+1} - E)^{-1}$  — функція Гріна оператора лівої частини рівняння (2.17). Тут варто зауважити, що рівняння (2.18) та щойно згадана функція Гріна записані в символічній формі. Насправді  $(H_{N+1} + L_{N+1} - E)^{-1}$  — це інтегральний оператор, ядром якого і є функція Гріна оператора лівої частини рівняння (2.17). Для явного запису рівняння (2.18) розкладемо функцію Гріна  $(H_{N+1} + L_{N+1} - E)^{-1}$  у внутрішній області за повним дискретним набором власних функцій  $\Psi_k^\Gamma(X, x_{N+1})$  оператора  $H_{N+1} + L_{N+1}$ . Коефіцієнти  $c_{ijk}^\Gamma$  та  $d_{ik}^\Gamma$  розкладу (2.15) визначаються водночас із власними значеннями енергії  $E_k^\Gamma$  при числовій діагоналізації матриці модифікованого гамільтоніана  $H_{N+1} + L_{N+1}$  на дискретному базисі  $\Psi_k^\Gamma(X, x_{N+1})$  (2.15):

$$\langle \Psi_k^\Gamma | H_{N+1} + L_{N+1} | \Psi_{k'}^\Gamma \rangle_{\text{int}} = E_k^\Gamma \langle \Psi_k^\Gamma | \Psi_{k'}^\Gamma \rangle_{\text{int}}. \quad (2.19)$$

Тут інтегрування по радіальним змінним обмежується внутрішньою  $R$ -матричною областю. Обчислені власні значення  $E_k^\Gamma$  ермітової матриці  $\langle \Psi_k^\Gamma | H_{N+1} + L_{N+1} | \Psi_{k'}^\Gamma \rangle$  є дійсними і утворюють дискретизований континуум; сукупність коефіцієнтів розкладу  $c_{ijk}^\Gamma$  та  $d_{ik}^\Gamma$ , яка відповідає цим власним значенням, однозначно визначає дискретний  $R$ -матричний базис  $(N+1)$ -електронних функцій (2.15). Отже, сам процес розв'язування узагальненої задачі (2.19) на власні значення  $E_k^\Gamma$  у внутрішній  $R$ -матричній області є по суті дискретизацією неперервного спектра повного гамільтоніана  $(N+1)$ -електронної системи (2.1).

Використовуючи позначення (2.16) та розклад функції Гріна  $(H_{N+1} + L_{N+1} - E)^{-1}$  за дискретним базисом  $\Psi_k^\Gamma$ , формальний розв'язок рівняння (2.18) можна записати, як:

$$|\Psi^\Gamma\rangle = \sum_k |\Psi_k^\Gamma\rangle \frac{1}{E_k^\Gamma - E} \langle \Psi_k^\Gamma | L_{N+1} | \Psi^\Gamma \rangle. \quad (2.20)$$

Ураховуючи, що  $\Psi^\Gamma$  задана розкладом (2.14), проєкціюючи рівняння (2.20) на функції каналів  $\bar{\Phi}_i^\Gamma$  і виконуючи обчислення в точці  $r = a$ , можна дістати співвідношення

$$F_i^\Gamma(a) = \sum_j R_{ij}^\Gamma(E) (a \frac{dF_j^\Gamma}{dr_{N+1}} - b F_j^\Gamma)_{r_{N+1}=a}, \quad (2.21)$$

в якому елементи  $R$ -матриці визначаються виразом

$$R_{ij}^\Gamma(E) = \frac{1}{2a} \sum_k \frac{w_{ik}^\Gamma w_{jk}^\Gamma}{E_k^\Gamma - E}. \quad (2.22)$$

Для скорочення запису тут введено позначення для приведених радіальних хвильових функцій  $F_i^\Gamma$  та поверхневих амплітуд  $w_{ik}^\Gamma$ :

$$F_i^\Gamma(r_{N+1}) = r_{N+1} \langle \bar{\Phi}_i^\Gamma | \Psi_k^\Gamma \rangle', w_{ik}^\Gamma = a \langle \bar{\Phi}_i^\Gamma | \Psi_k^\Gamma \rangle'_{r_{N+1}=a}. \quad (2.23)$$

Штрихи на  $\langle \text{бра} | \text{кет} \rangle$ -ах у виразах (2.23) указують, що інтегрування в матричних компонентах  $\langle \bar{\Phi}_i^\Gamma | \Psi_k^\Gamma \rangle'$  функцій  $\bar{\Phi}_i^\Gamma$  слід проводити за просторовими і спіновими координатами усіх електронів, крім радіальної координати розсіяного електрона. Одержані співвідношення для  $R$ -матриці (2.22) та орбіталей неперервного спектра (2.21) описують процес розсіювання електронів на атомах чи іонах у внутрішній  $R$ -матричній області. Разом з виразом для коефіцієнтів  $A_{E_k}^\Gamma$  розкладу (2.14),

$$\begin{aligned} A_{E_k}^\Gamma &= \frac{1}{2a} (E_k^\Gamma - E)^{-1} \sum_\ell w_{ik}(a) (a \frac{dF_i^\Gamma}{dr} - b F_i^\Gamma)_{r=a} \\ &= \frac{1}{2a} (E_k^\Gamma - E)^{-1} \mathbf{w}^T \mathbf{R}^{-1} \mathbf{F}^\Gamma, \end{aligned} \quad (2.24)$$

вони дозволяють обчислити хвильову функцію зіткнення  $\Psi_E^\Gamma$  у внутрішній області для будь-якого значення повної енергії системи  $E$ . Використовуючи співвідношення (2.21)–(2.24), можна коректно визначити  $K$ - та  $S$ -матриці за допомогою процедури зшивання розв’язків у внутрішній області з асимптотичними розв’язками у зовнішній області. Деталі цієї процедури ми ретельно розглянемо нижче в підрозділі 2.4.

При конкретних розрахунках процесів  $e+A$ -розсіяння велика частина машинного часу витрачається на обчислення матричних елементів у рівнянні (2.19) та діагоналізацію гамільтоніана  $H_{N+1} + L_{N+1}$  у дискретному базисі  $\Psi_k^\Gamma$  (2.15). Однак цю трудомістку процедуру необхідно виконати лише один раз, після чого  $R$ -матрицю можна визначити за формулою (2.22) у всьому діапазоні енергій. Енергетична залежність  $R$ -матриці визначається лише енергетичним знаменником у формулі (2.22). Це дозволяє проводити детальні розрахунки в широкому енергетичними інтервалі з дрібним кроком по енергії, практично здійснити вихід в комплексну площину енергій для розрахунку полюсів  $R$ -матриці і т.д.

Сума по  $k$  у формулі (2.22) містить, взагалі кажучи, нескінченне число членів. На практиці можна зберегти лише скінчену суму, що відповідає числу членів, врахованих у правій частині розкладу (2.14). Для швидкої збіжності методу  $R$ -матриці необхідно ретельно вибирати базисні функції  $u_i(r)$ . В задачах розсіяння електронів на атомах та іонах вони вибираються як власні функції деякого модельного гамільтоніана [71, 72], що приводить для кожного стану розсіяння (з орбітальним моментом  $\ell$  та додатною енергією  $\varepsilon_i = k_i^2/2$ ) до одновимірного радіального рівняння вигляду

$$\left[ \frac{d^2}{dr^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} + V(r) + k_i^2 \right] u_i(r) = \sum_n \lambda_{in\ell} P_{n\ell}(r) \quad (2.25)$$

з граничними умовами

$$u_i(0) = 0, a \cdot \frac{du_i}{dr} \Big|_{r=a} = bu_i(a) \quad (2.26)$$

та умовою ортонормування на відрізку  $[0, a]$

$$\int_0^a u_i(r) u_j(r) dr = \delta_{ij}. \quad (2.27)$$

Множники Лагранжа  $\lambda_{in\ell}$  в рівнянні (2.25) вибираються таким чином, щоб базисні функції  $u_i(r)$  були ортогональними радіальним орбіталям і псевдоорбіталям мішені  $P_{n\ell}(r)$  тієї ж симетрії. Такий вибір забезпечує виконання умови (2.10) і для радіальних функцій  $F_{i\alpha}^\Gamma$ , котрі ми розклали в (2.15) за базисними функціями  $u_j(r)$ .

Зазначимо, що складність чисельного розв'язання одновимірного рівняння (2.25) суттєво залежить від характеру поведінки на відрізку  $[0, a]$  потенціалу  $V(r)$ , який моделює поле мішені. Зазвичай припускають, що сингулярність модельного потенціалу  $V(r)$  у точці  $r = a$  слабша, ніж  $r^{-2}$ .

Розглядалися й інші можливості вибору базисних функцій  $u_j(r)$ . Так, наприклад, у працях Фано і Лі [73, 74] на підставі формалізму власних каналів в якості базисних орбіталей були вибрані функції слетерівського типу. Аналітичне представлення таких радіальних орбіталей також можливе і в електрон-молекулярних зіткненнях, оскільки інтеграли в (2.19) можна потім обчислити за допомогою дещо модифікованих стандартних програм розрахунку зв'язаних станів.

Саме така основа робіт з електрон-молекулярного розсіяння, виконаних Берком із співробітниками [72] з використанням методу  $R$ -матриці. Однак накопичується усе більше вказівок на те, що базис чисельних функцій  $u_j(r)$  краще підходить навіть в тому випадку, коли розглядається великий діапазон енергій, оскільки тут важко побудувати достатню кількість лінійно незалежних аналітичних базисних функцій.

Одна з основних проблем  $R$ -матричного методу полягає в збіжності, котра або надто повільна, або взагалі відсутня, особливо поблизу резонансів, які відіграють важливу роль в розсіянні електронів з малою енергією.

У цьому разі безпосереднє розкладання радіальних функцій континууму  $F_{i\alpha}^{\Gamma}(r)$  за базисом чисельних функцій  $u_j(r)$  виявляється неефективним, бо в цьому розкладанні необхідно враховувати майже весь нескінченний ряд, який дуже погано збігається в області енергій, де основний внесок у переріз розсіяння роблять резонансні ефекти. Недостатня збіжність  $R$ -матричних розрахунків затримувала протягом тривалого часу подальший розвиток цього методу. З цієї причини було запропоновано багато способів прискорення збіжності  $R$ -матричного методу (див. [71, 72] і наявні там посилання). Серед них, мабуть, найцікавішим та найуспішнішим виявився метод, розвинутий в праці [75], основний результат якої сформулюємо наступним чином: якщо потенціал  $V(r)$  в рівнянні (2.25) вибрано в зручній локальній формі, яка наближено описує розподіл заряду в мішені, то швидка збіжність досягається завдяки запропонованим Баттлом [75] поправкам, що вносяться у діагональні  $R$ -матричні елементи (2.22). Ці поправки легко обчислюються після розв'язання (2.25) для кожного значення енергії.

### 2.3. БСР-версія $R$ -матричного методу

Описані вище методи, які ґрунтуються на розкладі (2.11) чи (2.15) в принципі можуть дати результати високої точності для нерелятивістських зіткнень електронів з атомами та іонами, якщо враховувати всі відкриті канали. Деякі з цих результатів представлені в монографії [72]. З іншого боку, при при високих енергіях відкрите нескінченне число каналів, але вони слабо зв'язані між собою. У такій ситуації доречно використовувати теорію збурень, базовану на борнівських чи ейкональних рядах [16, 21, 22]. Однак при проміжних енергіях, тобто коли енергія налітаючого електрона порядку першого потенціалу іонізації, ситуація значно складніша, особливо коли заряд іона малий чи дорівнює нулю у випадку нейтрального атома. У цьому разі є надто багато каналів, які необхідно явно враховувати в (2.15),

а зв'язок цих каналів доволі сильний для застосування теорії збурень. У даній області енергій необхідно удосконалювати існуючі або ж розвивати нові теоретичні методи, які б дозволили надійно обчислювати перерізи  $e+A$ -розсіяння.

Нижче ми розглянемо ряд труднощів, з якими стикаються, застосовуючи метод  $R$ -матриці, і покажемо як їх можна подолати при розв'язанні конкретних задач теорії  $e+A$ -розсіяння. В результаті ми сформулюємо нову БСР-версію  $R$ -матричного методу, яка ґрунтується на застосуванні залежних від терму неортогональних орбіталей та  $B$ -сплайнів як базисних функцій.

Весь конфігураційний простір, як і в стандартному варіанті методу  $R$ -матриці, ділиться на внутрішню і зовнішню області. Радіус внутрішньої області  $r = a$  тут також добирається таким чином, щоб обмінні та кореляційні ефекти були несуттєвими при  $r \geq a$ . Так само, як і в розглянутих вище підходах, вихідною точкою в пропонуванні в насі працях [1–14] БСР-версії  $R$ -матричного методу є представлення повної  $(N + 1)$ -електронної хвильової функції системи  $\Psi_E^\Gamma$  у вигляді розкладу (2.14) за дискретним базисом  $\Psi_k^\Gamma$  (2.15), але з іншим розподілом між двома сумами. Тут варто зауважити, що для  $e+A$ -процесів за участю квазістаціонарних автоіонізаційних станів (АІС) досі немає стандартних рецептів побудови фізично прийняттого базису, за яким розкладають хвильову функцію зіткнення  $\Psi_E^\Gamma$ . Структуру розкладу (2.14), (2.15) ми детально обговорили в попередніх підрозділах. А тут слід зважити на те, що  $R$ -матриця (2.22), яка обчислена з використанням дискретного базису (2.15), має низку недоліків. Оскільки в першій сумі по  $i$  не враховано ряд каналів, результати  $R$ -матричних розрахунків процесів розсіяння електронів на атомах чи іонах можна вважати справедливими тільки там, де ці канали закриті і вплив відповідних АІС малий. Очевидно, що з цієї причини область енергій зіткнення, в котрій можна користуватися розкладами (2.14), (2.15) та (2.22), буде обмежена.

Альтернативний підхід, запропонований в наших працях [1–14], ґрунтується на доповненні дискретного базису  $\Psi_k^\Gamma$  (2.15) хвильовими функціями псевдостанів, які імітують невраховану в першій сумі розкладу (2.15) частину дискретного та неперервного спектрів. Такий підхід дозволяє доволі точно врахувати поляризацію мішені в полі налітаючого електрона, що особливо важливо при малих енергіях зіткнення.

У стандартному методі  $R$ -матриці для спрощення обчислень базисні функції  $u_j(r)$ , а отже і радіальні функції континууму  $F_{i\alpha}^\Gamma$  ортогоналізуються з радіальними орбіталями і псевдоорбіталями мішені  $P_{n_j\ell_j}(r)$ , що володіють тією ж кутовою симетрією. Саме із зазначеною обставиною пов'язаний досить серйозний дефект  $R$ -матричного методу: вимога вимушеної ортогональності  $\langle P_{n_j\ell_j} | F_{i\alpha}^\Gamma \rangle = 0$  функцій  $F_{i\alpha}^\Gamma(r)$  щодо зв'язаних орбіталей мішені  $P_{n_j\ell_j}(r)$  фактично означає, що ми з самого початку накладаємо обмеження на можливість віртуального захоплення налітаючого електрона в незаповнені підоболонки мішені. Цей дефект хвильової функції зіткнення  $\Psi_E^\Gamma$  можна компенсувати шляхом включення в другу суму розкладу (2.15) хвильових функцій АІС, тобто спеціальних додаткових кореляційних функцій  $\chi_i^\Gamma(X, x_{N+1})$ , які є багатоконфігураційними хвильовими функціями  $(N+1)$ -електронної системи. Перевагою такого способу урахування резонансних ефектів є простота, а недоліком те, що кореляційні функції  $\chi_i^\Gamma$ , включені в другу суму розкладу (2.15), в деяких випадках призводять до появи псевдорезонансів у перерізах  $e+A$ -розсіяння. Однак ці нефізичні стани не слід плутати з справжніми резонансами, так як поява псевдорезонансів зумовлена невдалим вибором кореляційних функцій  $\chi_i^\Gamma$ . Поряд з цими труднощами включення у вихідний розклад (2.15) кореляційних функцій  $\chi_i^\Gamma$  веде до появи додаткових членів у нелокальному обмінному  $W_{ij}$  та нелокальному кореляційному  $X_i$  потенціалах. А це в свою чергу приводить до істотного ускладнення матричної структури узагальненої алгебраїчної задачі (2.19) на власні значення  $E_k^\Gamma$  та власні функції  $\Psi_k^\Gamma$ .

Таким чином, основним недоліком вказаної вище схеми урахування резонансних ефектів є необхідність введення у вихідний розклад (2.15) спеціальних додаткових кореляційних функцій  $\chi_i^\Gamma$ , що призводить до появи нефізичних псевдорезонансів, пов'язаних з порогами псевдостанів, значного збільшення числа додаткових алгебраїчних рівнянь, які необхідно враховувати для реалістичних розрахунків характеристик розсіяння електронів на складних атомах, та до надмірного ускладнення обчислювальної схеми  $R$ -матричного методу, зумовленого необхідністю працювати з матрицями великої розмірності.

Щоб усунути ці недоліки, збільшити точність теорії та розширити область її застосовності, необхідно відмовитися від умови вимушеної ортогональності  $\langle P_{n_j \ell_j} | F_{i\alpha}^\Gamma \rangle = 0$  функції  $F_{i\alpha}^\Gamma(r)$  щодо зв'язаних орбіталей мішені  $P_{n_j \ell_j}$  тієї ж кутової симетрії. Як зазначалося вище, саме ця умова позбавляє нас можливості враховувати ефекти віртуального захоплення налітаючого електрона в АІС, що власне й спричиняє необхідність введення у вихідний розклад (2.15) додаткових кореляційних функцій  $\chi_i^\Gamma$ . Насправді ж умова  $\langle P_{n_j \ell_j} | F_{i\alpha}^\Gamma \rangle = 0$  носить суто технічний, а не фізичний характер і не впливає із основних принципів квантової теорії, оскільки радіальні функції  $F_{i\alpha}^\Gamma(r)$  і  $P_{n_j \ell_j}(r)$  обчислюються в різних потенціалах.

Щоб зберегти переваги і одночасно усунути вказані вище недоліки стандартного  $R$ -матричного методу, в наших працях [1–14] запропоновано альтернативну модифікацію цього методу — БСР-версію, в якій 1) радіальні функції континууму  $F_{i\alpha}^\Gamma(r)$  не ортогоналізуються з орбіталями і псевдоорбіталями мішені  $P_{n_j \ell_j}$ , 2) резонансні ефекти враховуються без застосування квадратично інтегровних кореляційних функцій  $\chi_i^\Gamma$ , 3) для представлення у внутрішній області  $r \leq a$  як зв'язаних орбіталей мішені  $P_{n_j \ell_j}$ , так і орбіталей розсіяного електрона  $F_{i\alpha}^\Gamma$  виокристовуються  $B$ -сплайни як базисні функції. Насамперед розглянемо більш детально структуру вихідного представлення (2.15) для хвильових функцій базису  $\Psi_k^\Gamma$ . В реальних



$R$ -матричних розрахунках дискретний базис  $\Psi_k^\Gamma$ , як правило, неповний, і результати високої точності можна одержати лише за умови, що базис кореляційних функцій  $\chi_i^\Gamma$  розширено до повноти. Тому наше найголовніше завдання — мінімізувати набір квадратично інтегровних кореляційних функцій  $\chi_i^\Gamma$ , включених в другу суму розкладу (2.15). Зняття обмеження ортогональності  $\langle P_{n_j \ell_j} | F_{i\alpha}^\Gamma \rangle = 0$ , фактично означає, що окремо вводити у другу суму розкладу (2.15) спеціальний набір кореляційних функцій  $\chi_i^\Gamma$ , який ураховує вплив автоіонізаційних станів, немає потреби, оскільки тепер перша сума в (2.15) містить у собі хвильові функції таких станів.

Тому в рамках БСР-версії методу  $R$ -матриці можна обійтися без будь-яких кореляційних функцій  $\chi_i^\Gamma$  або ж використовувати тільки мінімально необхідний набір таких функцій для забезпечення повноти системи базисних функцій  $\Psi_k^\Gamma$ . Отже, застосування неортогональних орбіталей  $F_{i\alpha}^\Gamma$  та  $P_{n_j \ell_j}$  є найекономішнім способом урахування резонансних ефектів без помітного збільшення системи алгебраїчних рівнянь (2.19).

При порівнянні БСР-версії з стандартним методом  $R$ -матриці відзначимо, що обидва підходи ґрунтуються на коректних розрахунках радіальних функцій розсіяного електрона  $F_{i\alpha}^\Gamma$  у внутрішній області  $r \leq a$ . Однак в пропонуваній БСР-версії, як уже зазначалося, більш істотна роль покладається на першу суму в розкладі (2.15), оскільки тепер вона повинна враховувати резонансні ефекти. При цьому суперпозиція конфігурацій в згаданих першій сумі добре пристосована для урахування короткодіючих електронних кореляцій, що виникають внаслідок зв'язку з низьколежачими резонансами. З цією обставиною пов'язані утруднення в стандартному методі  $R$ -матриці при з'ясуванні механізмів утворення і розпаду квазістаціонарних АІС [72]. Завдяки своїй простоті БСР-наближення дозволяє приділяти належну увагу коректному опису станів мішені. З досвіду наших БСР-розрахунків [1–14] відомо, що у випадку складних атомів та іонів перерізи розсіювання дуже чутливі як до кореляційних ефектів у мішені, так і

до короткодійючих взаємодій з налітаючим електроном.

Проведений вище структурний аналіз загальноприйнятого формалізму теорії  $R$ -матриці [71, 72] показує, що застосування неортогональних радіальних функцій континууму  $F_{i\alpha}^\Gamma$  щодо зв'язаних орбіталей мішені  $P_{n_j\ell_j}$  є найефективнішим способом урахування резонансних ефектів без збільшення системи алгебраїчних рівнянь (2.19).

Характерною особливістю БСР-версії  $R$ -матричного методу є використання двох різних наборів неортогональних орбіталей: один з них застосовується для представлення радіальних функцій неперервного спектра  $F_{i\alpha}^\Gamma$  у внутрішній  $R$ -матричній області, а інший — для побудови одноконфігураційних хвильових функцій  $\varphi_j(x_1, x_2, \dots, x_N)$  в розкладі (2.6). Нижче ми з'ясуємо деякі особливості застосування неортогональних зв'язаних орбіталей в рамках пропонованої нами БСР-версії. А тут лише відзначимо, що використання неортогонального набору зв'язаних орбіталей забезпечує більш високу точність опису станів мішені, ніж та, що зазвичай досягається, коли ортогональність є вимушеною. Зупинимось коротко на проблемі ортогональності одноелектронних хвильових функцій (2.8).

**2.3.1. Залежні від терму неортогональні зв'язані орбіталі мішені.** Одним з найбільш універсальних і потужних способів побудови хвильової функції багатоелектронної системи є метод Хартрі-Фока (ХФ). Він ґрунтується на наближенні центрального поля і варіаційному принципі [16, 17, 72]. Однак побудовані таким способом хвильові функції збуджених станів не будуть ортогональними до функції основного стану, так як хвильові функції основного і збуджених станів є власними функціями різних гамільтоніанів. Це можна продемонструвати на прикладі найпростішого багатоелектронного атома — атома гелію.

Розглянемо насамперед основний (синглетний) стан атома гелію з електронною конфігурацією  $(1s^2)$ . На підставі наближення «незалежних» еле-

ктронів координатну хвильову функцію цього стану гелію можна записати у вигляді

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = N\varphi_{1s}(\vec{r}_1)\varphi_{1s}(\vec{r}_2), \quad (2.28)$$

де  $N$  — нормувальний множник. Розглянемо тепер найнижчий збуджений (також синглетний) стан атома гелію з електронною конфігурацією  $1s2s$ . Координатну хвильову функцію цього стану можна подати у вигляді

$$\Psi'(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = N'\{\varphi'_{1s}(\vec{r}_1)\varphi_{2s}(\vec{r}_2) + \varphi_{2s}(\vec{r}_1)\varphi'_{1s}(\vec{r}_2)\}. \quad (2.29)$$

Зазначимо, що одноелектронні хвильові функції  $\varphi_{1s}(\vec{r}_1)$  та  $\varphi'_{1s}(\vec{r}_1)$  різні, оскільки визначаються з різних систем рівнянь ХФ. У зв'язку з цим умова ортогональності повних хвильових  $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$  і  $\Psi'(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$  набуває вигляду

$$2NN'\langle\varphi'_{1s}|\varphi_{1s}\rangle\langle\varphi_{2s}|\varphi_{1s}\rangle = 0. \quad (2.30)$$

Це співвідношення несумісне з умовою ортогональності  $\langle\varphi_{2s}|\varphi'_{1s}\rangle = 0$  хвильових функцій  $\varphi_{2s}$  і  $\varphi'_{1s}$ . Причина в тому, що одноелектронні хвильові функції  $\varphi_{2s}$  та  $\varphi_{1s}$  задовольняють різні системи рівнянь ХФ і тому не є ортогональними одна одній. Нарешті, одноелектронні функції  $\varphi'_{1s}$  та  $\varphi_{2s}$  задовольняють одну і ту ж саму систему рівнянь ХФ і їх можна завжди обрати так, щоб вони були взаємно ортогональними одна одній.

Таким чином, при незалежному знаходженні методом ХФ хвильових функцій двох конфігурацій (наприклад, основної і збудженої) набори базисних одноелектронних функцій  $\varphi_{\alpha_j}$  (2.8), що відповідають цим конфігураціям, розрізняються між собою. У цій і в подібній ситуаціях слід використовувати неортогональні зв'язані орбіталі  $\varphi_{\alpha_j}$ , які оптимізуються в окремих розрахунках для індивідуальних термів.

Для того, щоб працювати з ортогональною системою базисних одноелектронних хвильових функцій, часто вдаються до штучного прийому — вимушеної ортогоналізації базисних функцій  $\varphi_{\alpha_j}(x)$ . Мета цієї процедури — урахувати так званий інтеграл перекриття  $S_{ij} = \langle\varphi_{\alpha_i}|\varphi_{\alpha_j}\rangle$ , який відмінний

від нуля, коли одноелектронні базисні функції  $\varphi_{\alpha_i}$  та  $\varphi_{\alpha_j}$  обчислюються в різних хартрі-фоківських потенціалах. Однак, такий спосіб урахування ефектів неортогональності базисних одноелектронних функцій ускладнює технічно розв'язання задачі про  $e+A$ -розсіяння.

Ще одна можливість забезпечення ортогональності — використання хвильових функцій збуджених станів, одержаних в наближенні «замороженого» остова. У цьому наближенні одноелектронні хвильові функції збуджених станів обчислюються в полі остова, хвильові функції якого не змінюються і беруться такими ж, як і для основного стану. Тоді одноелектронні хвильові функції як основного, так і збуджених станів будуть автоматично ортогональними між собою, так як вони є власними функціями одного й того ж гамільтоніана. Однак, такий метод побудови ортогональної системи базисних функцій  $\varphi_{\alpha_j}$  не гарантує правильний кінцевий результат, так як не враховує вплив збудженого електрона на «заморожений» остов.

Інтенсивні експериментальні дослідження непружних зіткнень низькоенергетичних електронів зі складними атомами та іонами вказують на істотну залежність результатів вимірювань від індивідуальних особливостей структури мішені і продуктів реакції. Для того, щоб забезпечити належний кількісний опис станів мішені і, тим самим, привести у відповідність з сучасним експериментом результати теорії, доводиться враховувати усе більш тонкі деталі структури атома і будови його електронних оболонок. Тому в пропонованій в наших працях [1–14] БСР-версії  $R$ -матричного методу належна увага приділяється коректному урахуванню ефектів неортогональності базисних одноелектронних хвильових функцій  $\varphi_{\alpha_j}$ . В станах, що відповідають різним термам, набори одноелектронних базисних функцій  $\varphi_{\alpha_j}(x)$  оптимізуються незалежно. При розгляді збуджених станів мішені, які володіють тією ж симетрією, що й основний стан, ми маємо справу з неортогональними одноелектронними хвильовими функціями різних станів (тобто термів), завдяки чому високий рівень точності можна

забезпечити з допомогою розкладів компактних взаємодіючих конфігурацій (ВК) [76]. Використання неортогональних зв'язаних орбіталей мішені дозволяє уникнути доволі трудомісткої та часовитратної процедури примусової ортогоналізації базисних одноелектронних функцій  $\varphi_{\alpha_j}(x)$ , що відповідають різним термам. Зняття обмежень, які накладаються на базисні функції  $\varphi_{\alpha_j}(x)$  умовою вимушеної ортогональності, забезпечує роботу з більш простими хвильовими функціями мішені. Проведені в наступних розділах дисертації розрахунки характеристик  $e+A$ -розсіяння показують, що застосування залежних від терму неортогональних базисних одноелектронних функцій  $\varphi_{\alpha_j}$  забезпечує більш швидку збіжність, ніж та, що зазвичай досягається при використанні ортогональних орбіталей.

Необхідність використання залежних від терму неортогональних зв'язаних орбіталей пов'язана з тим, що в непружних процесах  $e+A$ -зіткнення, які досліджуються в наступних розділах дисертації, збуджується величезне число різних атомних станів і кожний конкретний стан входить в розклад (2.6) хвильової функції мішені  $\Phi_i(X)$  з малою вагою.

Для дослідження та діагностики плазми в нових установках керованого термоядерного синтезу необхідно знати численні атомні характеристики та характеристики великої сукупності елементарних процесів взаємодії електронів з атомами та іонами, а саме: енергії зв'язку та енергії збудження атомів, швидкості заселення енергетичних рівнів, інтегральні та диференціальні перерізи  $e+A$ -розсіяння, імовірності одно- та багатеелектронних переходів, обчислених з високою точністю. Останні зазвичай малі і дуже чутливі до наближень, які використовуються при конструюванні хвильових функцій. Так, наприклад, урахування залежності радіальних орбіталей  $P_{n_j\ell_j}$  від терму може призвести (див., наприклад, [24]) до значних змін — від декількох разів, до декількох порядків — різних характеристик електронних переходів, сил осциляторів, електростатичної та спин-орбітальної взаємодії між оболонками, тощо. Вказані зміни найбільш відчутні у тих

випадках, коли характеристики електронних переходів відносно малі і тоді вони вельми чутливі навіть до незначних уточнень хвильової функції.

Ігнорування залежністю радіальних зв'язаних орбіталей  $P_{n_j \ell_j}$  від терму або неповне врахування ефектів неортогональності базисних одночастинкових функцій  $\varphi_{\alpha_j}(x)$  позбавляє можливості розглядати цілий ряд цікавих фізичних явищ. Як характерний приклад, можна навести явище так званого колапсу квантової орбіти збудженого електрона — різної зміни середньої відстані електрона від ядра при зміні його стану [24]. Вказане явище пояснюється тим, що ефективний центрально-симетричний потенціал поля, в якому рухається збуджений електрон, має вигляд двох потенціальних ям, відокремлених потенціальним бар'єром. При обчисленні цього потенціалу слід розв'язувати систему інтегро-диференціальних рівнянь ХФ окремо для кожного терму; при цьому в прямій та обмінній частинах ефективного ХФ-потенціалу з'являються додаткові залежні від терму члени, які відіграють істотну роль в утворенні потенціального бар'єру. Важливу роль у формуванні згаданого ефективного потенціалу подвійної ями з бар'єром можуть грати кореляційні ефекти — це пов'язано з сильним перекриванням хвильової функції колапсуючого електрона з хвильовими функціями електронів остова.

Як впливає з проведеного вище обговорення, техніка залежних від терму неортогональних одноелектронних орбіталей справді дозволяє подолати деякі основні проблеми, притаманні стандартному методу  $R$ -матриці. Використання неортогональних орбіталей протягом тривалого часу уникали із-за необхідності обчислення доволі громіздких матричних елементів операторів фізичних величин, у тому числі й електронних переходів. Як завжди, коли йде мова про обчислення таких матричних елементів, найбільш часо-витратна частина розрахунків пов'язана з інтегруванням за кутовими змінними. Загальні рецепти усунення обчислювальних утруднень, пов'язаних з використанням неортогональних орбіталей, описані в [15].

Оскільки в БСР-наближенні уточненню підлягають лише радіальні орбіталі мішені  $P_{n_j\ell_j}$ , то весь розвинений апарат незвідних тензорних операторів і генеалогічних коефіцієнтів повністю застосовний і в даному випадку. Розроблені на цій підставі в [15] і вперше апробовані в нашій праці [1] пакети прикладних програм дозволяють ефективно обчислювати матричні елементи від операторів різних фізичних величин як з використанням ортогональних, так і неортогональних систем базисних радіальних функцій  $P_{n_j\ell_j}$ . Все це в сукупності дозволяє говорити про реальну можливість застосування техніки залежних від терму неортогональних орбіталей для реалізації послідовних розрахунків властивостей електронної структури атомів та характеристик елементарних процесів взаємодії електронів зі складними атомами та іонами.

### 2.3.2. Основні відомості та властивості базисних сплайнів.

Описана в підрозділі 2.2 схема дискретизації неперервного спектра повного гамільтоніана  $(N + 1)$ -електронної системи ґрунтується на розбитті конфігураційного простору на дві області (внутрішню та зовнішню) та формулюванні самоспряженої задачі про  $e+A$ -розсіяння для внутрішньої області з специфічними граничними умовами (2.26). Одним з ключових моментів при розв'язанні цієї задачі є вибір радіальних базисних функцій континууму  $u_j$  у вихідному розкладі (2.15). Хоча можуть використовуватися елементи будь-якого повного набору функцій  $\{u_j\}$ , що задовольняють довільним граничним умовам, ретельний вибір  $\{u_j\}$  буде прискорювати збіжність розкладу (2.14). У стандартному  $R$ -матричному наближенні [72], розвиненому белфастською групою [71, 72], використовувався базис чисельних функцій  $u_j$ , що задовольняють однорідним крайовим умовам (2.26) при  $r = a$ . Це наближення дає точні результати за умови, якщо включені в діагональні матричні елементи (2.22) поправки Баттла [75] враховують опущені в розкладі (2.22) високо розташовані полюси  $R$ -матриці. Недоліком цього набли-

ження є те, що всі базисні функції  $u_j$  мають однакові (зазвичай нульові) логарифмічні похідні на межі  $r = a$  внутрішньої області. Це призводить до розриву у нахилі результуючих орбіталей континууму  $F_{i\alpha}^\Gamma(r)$ , у тому числі й тих, що включають поправки Баттла.

Згадані вище труднощі теоретичного характеру ведуть до додаткових ускладнень при практичному розв'язанні задачі розсіювання у внутрішній області. Основна причина цих ускладнень пов'язана з неповнотою базису чисельних функцій  $\{u_j\}$ . Справді, якщо система базисних функцій  $\{u_j\}$  не є повною, як це має місце в реальних розрахунках, коли нескінченну суму по  $j$  в розкладі (2.15) обривають і вона охоплює не всі можливі стани розсіяного електрона, а лише деякі, то побудовані на цій «обрізаний» системі  $\{u_j\}$  функції дискретного базису  $\Psi_k^\Gamma$  (2.15) містять в собі не всю необхідну інформацію про можливі результати  $e+A$ -розсіювання і рівняння (2.19) стануть наближеними. Для збільшення точності розрахунків необхідно включити у розклад (2.15) якомога більше базисних функцій  $u_j$ . Але при цьому узагальнена задача (2.19) про знаходження власних функцій  $\Psi_k^\Gamma$  та власних значень  $E_k^\Gamma$  гамільтоніана  $H_{N+1} + L_{N+1}$  зводиться до вельми трудомісткої числової діагоналізації нерозрідженої матриці великої розмірності. А це в свою чергу призводить до виключно складної обчислювальної схеми, яка вимагає застосування потужних ЕОМ.

Згадані вище труднощі стандартного методу  $R$ -матриці [71, 72] можна подолати, використовуючи більш вдалий набір базисних функцій  $u_j$ . Останні вибираються з вельми різних міркувань [71, 72], але для постановки та чисельного розв'язування задачі  $e+A$ -розсіювання у внутрішній  $R$ -матричній області виняткову роль відіграють базисні сплайни  $B_i$  [77] — певним чином сконструйовані кусково-поліноміальні функції в обмеженій області простору.

Ідея застосування базисних сплайнів  $B_i$  в теорії  $R$ -матриці пов'язана з кількома важливими моментами. По-перше математичну основу можли-



вості використання  $B$ -сплайнів як базисних функцій складають 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 розсіювання у внутрішній області  $r \leq a$ . По-друге, використання  $B$ -сплайнів як базисних функцій  $u_j$  аналогічне розв'язанню задачі  $e+A$ -розсіювання на  $R$ -матричному відрізку  $[0, a]$ , поза яким базисні сплайни  $B_i$  дорівнюють нулю. При цьому усі потенціали взаємодії, включаючи прямий, обмінний та кореляційний, проєкціюються на повний  $B$ -сплайновий базис і тим самим природним чином ефективно обрізаються при  $r > a$ . І нарешті, по-третє, скінченний 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  $F_{i\alpha}^\Gamma(r)$  у вигляді скінченних сум, які містять вичерпну інформацію про  $e+A$ -розсіювання у внутрішній  $R$ -матричній області  $r \leq a$ . Це в свою чергу означає, що  $B$ -сплайнове представлення для різних квантовомеханічних операторів буде мати сильно розріджену стрічкову структуру, що істотно спрощує розв'язання відповідних матричних рівнянь. В цьому полягає основна і безперечна перевага базисних сплайнів  $B_i$  в порівнянні з стандартним базисом чисельних функцій [71, 72]. Разом з тим вони ( $B$ -сплайни) найкращим чином підходять для створення обчислювальних методів теорії розсіювання. Крім того, в порівнянні з базисом чисельних функцій  $B$ -сплайни мають кращі апроксимаційні властивості, а алгоритми, базовані на сплайн-апроксимації, вирізняються простотою, гнучкістю та зручністю реалізації на ЕОМ.

Сплайни, отримавши поширення в 1960-х роках, спочатку як засіб інтерполяції складних кривих, стали потужним засобом розв'язання різноманітних задач обчислювальної математики. До таких задач відносяться практично всі задачі, що виникають при чисельному дослідженні проблеми кількох частинок, наприклад задача інтерполяції хвильових функцій, зада-

чі чисельного диференціювання та інтегрування, а також чисельний аналіз інтегральних і диференціальних рівнянь теорії розсіяння. При розв'язанні усіх перерахованих задач добре зарекомендували себе сплайни невисоких степенів. Використовуючи їх, можна оптимальним чином поєднати задовільний порядок сплайн-апроксимації шуканих розв'язків з якомога меншим числом чисельних операцій.

В розрахунки властивостей електронної структури атомів  $B$ -сплайни були введені у 1980-х роках і з тих пір стали широко використовуватися в атомній фізиці завдяки своїм чудовим апроксимаційним властивостям (див., наприклад, огляд [77]). Як уже зазначалось, ключовим прийомом дискретизації неперервного спектра гамільтоніана  $\hat{H}$  (2.1) в  $R$ -матричному методі є розв'язання рівняння Шредінгера (2.2) у внутрішній області  $r \leq a$ , яку можна асоціювати з компактними носіями базисних сплайнів  $B_i$ . Тому можна очікувати, що  $B$ -сплайни будуть ефективно формувати  $R$ -матричний базис  $\{u_j\}$  на скінченному числовому проміжку  $0 \leq r \leq a$ . Використання  $B$ -сплайнів як елементів  $R$ -матричного базису  $\{u_j\}$  вперше здійснив Ван дер Харт [78], який застосував метод  $R$ -матриці до  $e+A$ -розсіяння та отримав чудове узгодження з наявними еталонними результатами. Застосування  $B$ -сплайнів як базисних функцій  $u_j$  виявилось плідним і при дослідженні процесів  $e+A$ -розсіяння в рамках СЗККФ (див. підрозділ 2.1). Представлення зв'язаних орбіталей мішені  $P_{n_j \ell_j}$  та орбіталей розсіяного електрона  $F_{i\alpha}^\Gamma$  в скінченному базисі  $B$ -сплайнів дозволяє використовувати в цих задачах алгебраїчні методи замість розв'язування громіздкої системи зв'язаних інтегро-диференціальних рівнянь (2.12).

Наведемо основні означення та сформулюємо найважливіші властивості базисних сплайнів. Розіб'ємо відрізок  $a \leq r \leq b$  за допомогою точок  $a = t_1 < t_2 < \dots < t_n < t_{n+1} = b$  на  $n$  довільних частинних відрізків  $[t_i, t_{i+1}]$ ,  $i = 1, 2, \dots, n$ . Позначимо через  $h_i = t_{i+1} - t_i$  довжину  $i$ -го частинного відрізка  $[t_i, t_{i+1}]$ ,  $i = 1, 2, \dots, n$ . Сукупність точок  $t_1, t_2, \dots, t_n, t_{n+1}$  по-

значимо через  $\omega_t$  і назвемо сіткою вузлів базисних сплайнів на радіальному відрізку  $a \leq r \leq b$ . В разі необхідності будемо також розглядати розширену сітку  $\Omega_t$ , яка одержується із вихідної сітки  $\omega_t$  додаванням  $k$  додаткових вузлів, розташованих лівіше точки  $r = t_1$ , та  $k$  додаткових вузлів, розташованих правіше точки  $r = t_{n+1}$ . В подальшому за додактові вузли ми добираємо вузлові точки  $t_1 = a$  та  $t_{n+1} = b$ , так що кінцеві точки відрізка  $[a, b]$  стають вузлами кратності  $k$ . Відповідно до цього вибору розширеної сітки  $\Omega_t$   $B$ -сплайни  $B_i^k(r)$  порядку  $k$  (степеня  $k - 1$ ) визначаються через  $B$ -сплайн першого порядку  $B_i^1(r)$  за допомогою наступних рекурентних співвідношень:

$$B_i^k(r) = \frac{r - t_i}{t_{i+k-1} - t_i} B_i^{k-1}(r) + \frac{t_{i+k} - r}{t_{i+k} - t_{i+1}} B_{i+1}^{k-1}(r) \quad (2.31)$$

та

$$B_i^1 \equiv \begin{cases} 1, & r \in [t_i, t_{i+1}], \\ 0, & r \notin [t_i, t_{i+1}]. \end{cases} \quad (2.32)$$

Оскільки  $k$  і  $t$  зазвичай фіксовані, ми будемо нумерувати  $B$ -сплайни  $B_i^k$  лише одним нижнім індексом і позначатимемо символом  $B_i$ . Кожен  $B$ -сплайн  $B_i$  однозначно визначений на інтервалі  $[t_i, t_{i+k}]$ , який містить  $k + 1$  послідовних вузлів, та індексується вузлом, з якого стартує. Щоб забезпечити однакову кількість  $B$ -сплайнів на кожному інтервалі, кратність вузлів у кінцевих точках відрізка  $[a, b]$  зазвичай вибирається як максимально можливе значення, яке дорівнює порядку  $B$ -сплайна  $k$ . Найпоширеніший вибір кратності внутрішніх вузлів — це одиниця, що відповідає максимальній неперервності сплайн-функцій всередині інтервалу. При такому виборі, що використовується в бібліотеці BSPLINE програмного пакету BSR [15], кількість підінтервалів пов'язана з кількістю  $B$ -сплайнів співвідношенням  $n_{\text{int}} = n + 1 - k$ .

Розглянемо тепер найважливіші властивості базисних сплайнів:

- Базисні сплайни  $B_i$  — фінітні функції, які не обертаються в нуль лише на своїх інтервалах носіях:  $\text{supp } B_i = [t_i, t_{i+k}], i = 1, 2, \dots, n$ .
- Кожен  $B$ -сплайн  $B_i$  та його похідні до  $k - 2$  порядку включно дорівнюють нулю поза інтервалом носієм  $[t_i, t_{i+k}]$ :  $B_i = 0$  при  $r \in [t_i, t_{i+k}], i = 1, 2, \dots, n$ .
- На кожному підінтервалі  $[t_i, t_{i+1}]$  точно  $k$   $B$ -сплайнів відмінні від нуля:  $B_j(r) \neq 0$  при  $j = i - k + 1, \dots, i$  та  $\forall r \in [t_i, t_{i+1}]$ ; перший з них — це  $B_{i-k+1}$ -сплайн, який закінчується у вузлі  $t_{i+1}$ , і останній — це  $B_i$ -сплайн, який стартує у вузлі  $t_i$ . Так як при  $|i - j| \geq k$  всі добутки  $B_i(r) \cdot B_j(r) = 0$ , то матриця гамільтоніана в рівнянні (2.19) матиме в  $B$ -сплайновому базисі стрічкову структуру з шириною стрічки  $2k - 1$ .
- У розкладі довільної функції  $f(r)$  за системою базисних сплайнів  $B_i$  міститься лише скінчене число доданків.

Наприклад, якщо  $r \in [t_i, t_{i+1}]$ , то в розклад

$$f(r) = \sum_{j=1}^n c_j B_j(r) = \sum_{j=i-k+1}^i c_j B_j(r) \quad (2.33)$$

ненульовий внесок роблять лише  $k$  членів. Внаслідок цього квантовомеханічні оператори після їх дискретизації у  $B$ -сплайновому базисі представляються сильно розрідженими стрічковими матрицями скінченного рангу, що суттєво спрощує розв'язання відповідних алгебраїчних рівнянь.

- Скінченний набір базисних сплайнів  $B_i, i = 1, 2, \dots, n + k$  з вузлами на довільній сітці  $\Omega_t$  утворює на відрізку  $[a, b]$  повний базис:

$$\sum_{i=1}^{n+k} B_i(r) = 1, r \in [a, b], \text{supp } B_i = [t_i, t_{i+k}] \subset [a, b]. \quad (2.34)$$

Зазначимо, що завдяки повноті скінченної системи базисних сплайнів  $B_i$  немає потреби вводити поправки Баттла [75] в діагональні елементи  $R$ -матриці (2.22).

- Базисні сплайни  $B_i$  володіють яскраво вираженими локальними властивостями. Оскільки  $B$ -сплайни невід'ємні ( $B_i > 0$  при  $t_i \leq r \leq t_{i+k}, i = 1, 2, \dots, n+k$ ) з мінімальними компактними носіями ( $\text{supp } B_i = [t_i, t_{i+k}] \subset [a, b], i = 1, 2, \dots, n+k$ ), коефіцієнти  $c_j$  розкладу (2.33) довільної функції  $f(r)$  близькі до значень цієї функції у вузлах. Локальні властивості  $B$ -сплайнів проявляються в тому, що істотний вплив на величину  $f(r)$  спричиняють тільки ті вузлові значення  $B_i(r = t_j)$ , які задані у вузлах  $r = t_j$ , близьких  $r$ . Тому функція  $f(r)$  в точках, віддалених від кінців відрізка  $[a, b]$ , стійка по відношенню до похибок в заданні крайових умов в граничних вузлових точках  $r = a$  та  $r = b$ . Властивості локальності і стійкості  $B$ -сплайнів представляють великий практичний інтерес.
- Рекурентні співвідношення (2.31) разом з означенням сплайна 1-го порядку  $B_1$  (2.32) однозначно визначають на скінченному інтервалі  $a \leq r \leq b$  повну систему базисних сплайнів  $B_i(r), i = 1, 2, \dots, n+k$  з вузлами на довільній сітці  $\Omega_t$ , що забезпечує зручний та доволі простий алгоритм для їх практичного обчислення на ЕОМ. Зручними є і формули диференціювання базисних сплайнів  $B_i(r)$ . Так, наприклад, похідна  $B$ -сплайна  $k$ -го порядку виражається безпосередньо через  $B$ -сплайн  $(k-1)$ -порядку у вигляді лінійної комбінації

$$DB_i^k(r) = \frac{k-1}{t_{i+k-1} - t_i} B_i^{k-1}(r) - \frac{k-1}{t_{i+k} - t_{i+1}} B_{i+1}^{k-1}(r). \quad (2.35)$$

В лівому кінці відрізка  $[a, b]$  ненульове вузлове значення має лише перший  $B_1$ -сплайн, тоді як усі інші  $B_i$ -сплайни містять множник  $(r-a)^{i-1}$ , який обертається в нуль при  $r = a$ . Аналогічна поведінка  $B$ -сплайнів спостерігається і в правій кінцевій точці  $r = b$ . Відповідно до цього граничні умови у  $B$ -сплайновому базисі визначаються лише першою і останньою базисними функціями. Ця обставина вкрай важлива для постановки граничних умов в кінцевих точках відрізка  $[a, b]$ . Для прикладу граничну умову

$F_{i\alpha}^\Gamma(0) = 0$  для радіальних функцій континууму  $F_{i\alpha}^\Gamma(r)$  в початку координат  $r = 0$  можна задовольнити шляхом вилучення першого  $B_1$ -сплайна із набору базисних сплайнів  $B_i$ .

Вказані вище властивості та зручні для обчислень компактні сплайн-представлення для радіальних функцій  $F_{i\alpha}^\Gamma(r)$  та операторів фізичних величин вигідно вирізняють базисні сплайни  $B_i$  в порівнянні з базисом чисельних функцій  $u_j(r)$ . Справді, розв'язання задачі (2.19) на власні значення  $E_k^\Gamma$  у базисі чисельних функцій  $u_j$  представляє собою складну в обчислювальному плані проблему. Це перш за все пов'язано з тим, що після скінченно-різницевої апроксимації вихідна задача (2.19) зводиться до системи матричних рівнянь, в якій матриця  $\langle \Psi_k^\Gamma | \Psi_{k'}^\Gamma \rangle$  не є одиничною і для обчислення енергетичних рівнів  $E_k^\Gamma$  доводиться розв'язувати не звичайну, а більш складну узагальнену задачу на власні значення. При цьому матриця повного гамільтоніана  $\langle \Psi_k^\Gamma | H_{N+1} + L_{N+1} | \Psi_{k'}^\Gamma \rangle_{\text{int}}$  в (2.19), яка одержується після переходу до скінченно-різницевої апроксимації, не є розрідженою, що веде до великих витрат пам'яті для зберігання цілком заповненої матриці великої розмірності. Незважаючи на граничну простоту методу скінченно-різницевої апроксимації, його використання для розв'язання задачі на зв'язані стани чи задачі розсіювання, коли асимптотики шуканих функцій доволіно спадають або ж осцилюють, вимагає застосування сіток з досить великим числом ( $\sim 1000$ ) вузлів, що знаходиться на межі можливостей сучасної обчислювальної техніки.

Розвинена в наших працях [1–14] обчислювальна схема БСР-версії методу  $R$ -матриці ґрунтується на апроксимації інтегральних і диференціальних операторів за допомогою розкладання радіальних орбіталей  $P_{n_j\ell_j}(r)$  та  $F_{i\alpha}^\Gamma(r)$  за системою базисних сплайнів  $B_i$ , що дозволяє в значній мірі позбутися від перерахованих вище недоліків скінченно-різницевої апроксимації. Тут слід підкреслити, що для збільшення точності розрахунків і ефективної роботи програм вузли сітки  $\Omega_t$  повинні розташовуватися нерівномірно.

Сітка повинна бути щільною в області, що примикає до початку координат, і ставати все більш розрідженою зі зростанням  $r$ . Таке розташування вузлів необхідне для того, щоб достатньо точно описати складну поведінку хвильової функції на малих відстанях  $r$ . Досвід показує, що хороша точність у розрахунках на практиці досягається при використанні експоненціальної сітки вузлів.

Отже, труднощі стандартного методу  $R$ -матриці [70–72], які пов'язані з розв'язуванням задачі розсіювання у внутрішній  $R$ -матричній області, долаються в пропонованій нами БСР-версії [1–14] з допомогою більш вдалого вибору базисних функцій  $u_j(r)$ . Справа в тому, що  $B$ -сплайни мають цілу низку згаданих вище важливих властивостей, немовби спеціально призначених для розв'язання обчислювальних задач теорії  $R$ -матриці. Вони формують повний базис  $B_i$  на скінченному  $R$ -матричному інтервалі  $0 \leq r \leq a$ , мають універсальний характер і вельми зручні в числових обчисленнях, оскільки дозволяють уникнути використання формул скінченних різниць. Основна властивість базисних сплайнів  $B_i$  — фінітність і мінімальність носія. У цій властивості  $B$ -сплайнів знаходить своє вираження та математичне обґрунтування постановка задачі про  $e+A$ -розсіювання у внутрішній  $R$ -матричній області. Тут ми повинні розрізняти використання  $B$ -сплайнів як  $R$ -матричного базису  $u_j(r)$  для представлення одноелектронних радіальних орбіталей континууму  $F_{i\alpha}^\Gamma(r)$  та використання  $B$ -сплайнів для генерування повного псевдоспектра деякого одноелектронного гамільтоніана, як це робиться зазвичай у багатьох розрахунках властивостей атомної структури. Створений на підставі розвиненої в наших працях [1–14] БСР-версії  $R$ -матричного методу пакет прикладних програм BSR [15] передбачає обидві можливості. Ця обставина, зокрема, знаходить своє відображення в тому, що пропонована БСР-версія  $R$ -матричного методу дозволяє на основі одного підходу розв'язувати як задачі  $e+A$ -розсіювання, так і задачі про зв'язані стани багатоелектронних атомних систем. Єдина від-

мінність задачі на зв'язані стани від задачі  $e+A$ -розсіяння полягає в тому, що рівняння (2.39) доповнюється іншою асимптотичною умовою. А саме, на радіальні функції  $F_{i\alpha}^\Gamma(r)$  слід накладати умову спадання до нуля:  $F_{i\alpha}^\Gamma(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} 0, i = 1, 2, \dots, n$ . У цьому випадку одноелектронні радіальні хвильові функції атома розкладаються за базисними сплайнами  $B_i$  на деякому скінченному інтервалі  $0 \leq r \leq a$  з достатньо великим значенням  $R$ -матричного радіусу  $a$ .

**2.3.3. Розв'язування рівняння Шредінгера у зовнішній області.** Для знаходження  $K$ - та  $S$ -матриць і фазових зсувів необхідно розв'язати рівняння Шредінгера (2.2) у зовнішній області і зшити його з розв'язком у внутрішній області. Для цього представимо повну хвильову функцію  $(N+1)$ -електронної системи у зовнішній області у формі подібній до (2.3):

$$\Psi^\Gamma(x_1, \dots, x_{N+1}) = \sum_i \bar{\Phi}_i^\Gamma(x_1, \dots, x_{N+1}; \hat{r}_{N+1}, \sigma_{N+1}) \frac{1}{r_{N+1}} F_i^\Gamma(r_{N+1}), r_{N+1} > a. \quad (2.36)$$

Структуру розкладу (2.36) ми детально обговорили у підрозділі 2.1. В даному випадку для нас важливо те, що функція  $F_i^\Gamma(r_{N+1})$  є аналітичним продовженням у зовнішню область  $r > a$  приведених вище радіальних хвильових функцій (2.23). Зробимо також кілька загальних зауважень стосовно асимптотичного вигляду локального прямого  $V_{ij}(r)$ , нелокального обмінного  $W_{ij}(r)$  та нелокального кореляційного  $X_{ij}(r)$  потенціалів на великих відстанях  $r$ . Асимптотику (при  $r \rightarrow \infty$ ) прямого потенціалу  $V_{ij}(r)$  зручно подати у вигляді мультипольного розкладу

$$V_{ij}(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{N}{r} \delta_{ij} + \sum_{\lambda=1}^{\Lambda} \frac{a_{ij}^{\lambda, \Gamma}}{r^{\lambda+1}}, \quad (2.37)$$



де коефіцієнти

$$a_{ij}^{\lambda,\Gamma} = \langle \bar{\Phi}_i^\Gamma(x_1, \dots, x_N; \hat{r}_{N+1}, \sigma_{N+1}) | \sum_k^N r_j^\lambda P_\lambda(\cos \theta_{kN+1}) | \bar{\Phi}_j^\Gamma(x_1, \dots, x_N; \hat{r}_{N+1}, \sigma_{N+1}) \rangle. \quad (2.38)$$

Тут  $\theta_{kN+1}$  — кут між векторами  $\vec{r}_k$  і  $\vec{r}_{N+1}$ , а  $P_\lambda(x)$  — поліном Лежандра. Інтегрування в (2.38) виконується за всіма просторовими і спіновими електронними координатами, крім радіальної координати розсіяного електрона. Перший член в (2.37) відповідає екрануванню заряду ядра  $N$  електронами мішені. Решта членів в (2.37) — це далекодіючі дипольний, квадрупольний та вищі мультипольні потенціали, які зв'язують канали. Такі потенціали роблять головний внесок в оптично дозволені переходи, викликані налітаючим електроном. В реальних розрахунках коефіцієнти  $a_{ij}^{\lambda,\Gamma}$  в далекодіючих потенціалах (2.37) визначаються, як правило, через коефіцієнти відповідних інтегралів Слетера  $R^k$  [15], які описують пряму взаємодію між каналами у внутрішній  $R$ -матричній області. З іншого боку, нелокальні обмінний  $W_{ij}(r)$  та кореляційний  $X_{ij}(r)$  потенціали спадають експоненціально на нескінченності ( $r \rightarrow \infty$ ). Діапазон їх дії обмежений областю існування функцій мішені  $\Phi_i(x_1, \dots, x_N)$  і кореляційних функцій  $\chi_i^\Gamma(x_1, \dots, x_N)$ , включених в розклад (2.11).

Оскільки за межами внутрішньої області усі короткодійні і обмінні потенціали із заданою точністю обертаються в нуль, то система інтегродиференціальних рівнянь (2.12) для радіальних функцій  $F_i^\Gamma$  значно спрощується у зовнішній області  $r > a$  і її можна записати у вигляді

$$\begin{aligned} & \left( \frac{d^2}{dr^2} - \frac{\ell_i(\ell_i + 1)}{r^2} + \frac{2(Z - N)}{r} + k_i^2 \right) F_i^\Gamma(r) = \\ & = 2 \sum_{j=1}^n \sum_{\lambda=1}^{\Lambda} \frac{a_{ij}^{\lambda,\Gamma}}{r^{\lambda+1}} F_j^\Gamma(r), i = 1, 2, \dots, n; r \geq a. \end{aligned} \quad (2.39)$$

Тут  $n$  — число каналних функцій, утриманих в розкладах (2.11) та (2.36). а  $\ell_i$  та  $k_i$  — орбітальний момент та хвильове число розсіяного електрона

в  $i$ -му каналі. Систему зв'язаних рівнянь (2.39) можна розв'язати точно чисельним інтегруванням, використовуючи, наприклад, програмний код, описаний в [79].

Перейдемо до розгляду граничних умов, яким повинні задовольняти розв'язки системи радіальних рівнянь (2.39). Для цього відновимо у функції  $F_i^\Gamma$  другий нижній індекс  $\alpha$ , який визначає канал падаючої хвилі. Нехай при заданій енергії  $E$  всі  $n$  каналів, включених в розклад (2.36), відкриті, тобто  $k_i^2 > 0$ . Радіальні функції  $F_{i\alpha}^\Gamma$  задовольняють систему  $n$  зв'язаних диференціальних рівнянь другого порядку (2.39), які згідно загальної теорії диференціальних рівнянь мають  $n$  лінійно незалежних розв'язків. Відповідно до цього існує ряд представлень для цих розв'язків, що відповідають їх різним лінійним комбінаціям.

Для визначення  $S$ -матриці радіальні функції  $F_{i\alpha}^\Gamma$  повинні задовольняти граничним умовам

$$F_{i\alpha} \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} k_i^{-1/2} [\delta_{i\alpha} \exp(-i\xi_i) - S_{i\alpha} \exp(i\xi_i)], \quad (2.40)$$

де

$$\xi_i(r) = k_i r - \ell_i \pi / 2 + \eta_i \ln(2k_i r) + \arg \Gamma(\ell_i + 1 - i\eta_i) \quad (2.41)$$

— асимптотична фаза регулярної кулонівської функції з  $\eta_i = -(Z - N)/k_i$ , а  $\arg \Gamma(\dots)$  — фаза  $\Gamma$ -функції комплексного аргументу;  $S_{i\alpha}$  — елементи  $S$ -матриці розсіяння. Зазначимо також, що в лівій частині системи рівнянь (2.39) у явному вигляді виділено кулонівський член  $2(Z - N)/r$ . Саме цей член веде до логарифмічної добавки у виразі (2.41) для фази  $\xi_i(r)$ .

У багатьох випадках зручно використовувати симетричну і дійсну  $K$ -матрицю, яка визначається формулою

$$\mathbf{S} = \mathbf{I} + \mathbf{T} = \frac{\mathbf{I} + i\mathbf{K}}{\mathbf{I} - i\mathbf{K}}, \quad (2.42)$$

де  $\mathbf{T}$  — матриця переходу, а  $\mathbf{I}$  — одинична матриця. Гранична умова при

цьому набуває вигляду

$$F_{i\alpha} \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} k_i^{-1/2} [\delta_{i\alpha} \sin \xi_i(r) - K_{i\alpha} \cos \xi_i(r)], \quad (2.43)$$

де  $K_{i\alpha}$  — елементи  $K$ -матриці. Поряд з  $S$ - та  $K$ -матрицями в теорії розсіювання використовують також залежну від деякої сталої величини  $\tau$  нову  $K(\tau)$ -матрицю [80]:

$$F_{i\alpha} \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} k_i^{-1/2} [\delta_{i\alpha} \sin(\xi_i + \tau_i) - K_{i\alpha}(\tau) \cos(\xi_i + \tau_i)], \quad (2.44)$$

де  $\tau_i$  — довільна фаза. Використання матриці  $K(\tau)$  дозволяє уникнути в деяких чисельних процедурах сингулярності стандартної  $K$ -матриці поблизу полюса (при  $\tau = 0$ ).

Як тільки  $K$ - і  $S$ -матриці обчислені, перерізи розсіювання легко одержати за допомогою методу Блатта і Біденхарна [81] чи Лейна і Томаса [47].

## Висновки до розділу 2

1. За допомогою техніки неортогональних орбіталей та сплайн-представлень базисних функцій розроблено розширену БСР-версію  $R$ -матричного методу, яка дозволяє передбачати результати поточного експерименту з великою точністю. Наша головна мотивація при побудові цієї версії полягала в тому, щоб запропонувати простий і надійний спосіб урахування резонансних ефектів без залучення будь-яких кореляційних функцій, які часто приводять до появи нефізичної псевдорезонансної структури у перерізах розсіювання.

2. В рамках методу  $R$ -матриці запропоновано новий метод дискретизації континууму з використанням  $B$ -сплайнів як базисних функцій. Продемонстровано значні переваги використання такого базису при розв'язуванні задачі  $e + A$ -розсіювання у внутрішній  $R$ -матричній області у порівнянні зі стандартними базисом чисельних функцій.

3. Використання  $B$ -сплайнів як базисних функцій в теорії  $R$ -матриці обумовлено декількома обставинами. По-перше, 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  $R$ -матричній області  $r \leq a$ . По-друге, скінченний набір базисних сплайнів  $B_i$  з вузлами на довільній сітці  $\Omega_t$  утворює на  $R$ -матричному відрізку  $[0, a]$  повний базис. Внаслідок цього квантовомеханічні оператори після їх дискретизації у  $B$ -сплайновому базисі зображаються сильно розрідженими стрічковими матрицями скінченного рангу, що суттєво спрощує розв'язання відповідних алгебраїчних рівнянь. І нарешті, по-третє, швидка збіжність  $R$ -матричного розкладу досягається завдяки повноті скінченної системи  $B$ -сплайнів, що позбавляє нас необхідності вводити так звані поправки Баттла в діагональні елементи  $R$ -матриці.

## РОЗДІЛ 3

### РОЗСІЯННЯ ЕЛЕКТРОНІВ НИЗЬКИХ ЕНЕРГІЙ НА АТОМАХ СА ТА ФОТОРОЗЩЕПЛЕННЯ ІОНА $\text{Ca}^-$ : ГОЛОВНІ АСПЕКТИ

#### 3.1. Стан досліджень процесів низькоенергетичних зіткнень $e+\text{Ca}$ та фоторозщеплення іона $\text{Ca}^-$

З моменту відкриття існування стабільних іонів  $\text{Ca}^-$  [28, 29] у наукових колах зростає інтерес до вивчення зіткнень низькоенергетичних електронів з атомами лужноземельних металів. Різні аспекти цієї проблеми включають низькоенергетичне пружне розсіяння, точне визначення зв'язаних і резонансних станів  $\text{Ca}^-$  та інтерпретацію перерізів фоторозщеплення, які демонструють складну енергетичну залежність.

Експериментальне дослідження низькоенергетичного  $e+\text{Ca}$  розсіяння було проведене Романюк та ін. [82] в області енергій від 0.1 до 10 еВ. Автори виявили сильний пік в околі 0.7 еВ — як основну особливість пружного розсіяння. У той час цей пік був неправильно прийнятий за  $4s^24p\ ^2P^o$ -резонанс у  $\text{Ca}^-$ . На підставі теоретичного передбачення Фабриканта [83] ще один невеликий пік при 1.7 еВ було класифіковано як  $4s^23d\ ^2D$ -резонанс. Пізніше, в експерименті з просвічення електронами парів Са (Джонстон та ін. [84]) в діапазоні енергій 0–4 еВ, було висловлене припущення про існування двох резонансів при 1.1 і 2.75 еВ. Вони були пояснені в термінах сильно змішаних конфігурацій  $4s^23d\ ^2D$  та  $4s4p\ ^2D$  іона  $\text{Ca}^-$ .

В подальшому уточнюючому експерименті Романюк та ін. [85] використовували побудований ними гіпоциклоїдальний електронний спектрометр для уточнення роздільної здатності та калібрування енергій електронів.

Були отримані тільки відносні значення диференціальних перерізів, інтегрованих по вузькому, залежному від енергії діапазону кутів розсіювання. Проте, було виявлено, що у результаті експериментальних уточнень положення головного максимуму має бути зміщене вгору по енергії приблизно на 0.4 еВ. Максимум при 1 еВ був інтерпретований як прояв резонансу форми  $4s^2 3d^2 D$ , і ґрунтувався на обчисленні з використанням методу оптичного потенціалу (описаному пізніше в статті Келемен та ін. [86]). Ще один пік при 0.5 еВ був віднесений до експериментального артефакту, викликаного різким збільшенням кутового сприйняття аналізатора при малих енергіях  $E < 0.6$  еВ.

З теоретичної сторони, дослідження Фабриканта [83] базувалося на наближенні сильного зв'язку з хвильовими функціями мішені, згенерованими на модельному потенціалі. Ці результати, а також інші більш ранні розрахунки (див, наприклад, Лендзел та ін. [87]), передбачали сильний  $p$ -хвильовий резонанс форми у перерізі пружного розсіювання електронів на атомах лужноземельних металів, і саме цей  $p$ -резонанс був ідентифікований з низькоенергетичними особливостями в експериментальних перерізах. Проте, це суперечить наявності стабільного зв'язаного стану  $4s^2 4p^2 P^o$  в  $\text{Ca}^-$ . Пізніше Грібакін та ін. [88] застосували рівняння Дайсона з теорії багатьох тіл для розрахунку пружних  $p$ - і  $d$ -зсувів фаз для  $e+\text{Ca}$ -розсіювання, та тільки в  $d$ -хвилі було виявлено прояви резонансної поведінки. Існування  $d$ -резонансу було також підтверджено Юань та Чжан [89] і Келемен та ін. [86] в їхніх розрахунках на основі феноменологічного наближення модельного потенціалу. Всі ці ранні одноканальні розрахунки передбачали дуже різні положення і ширини для низько-розміщених резонансів. Для вивчення зіткнень низькоенергетичних електронів з атомами  $\text{Ca}$ , Юань і Фріче [90] використовували більш складний метод  $R$ -матриці в наближенні п'яти станів мішені, в якому була повністю врахована кореляція між валентними електронами. Їхні перерізи знаходяться в розумному узгодженні

з ранніми вимірюваннями [82]. Трохи пізніше Юань і Лін [91] повторили ці розрахунки з подальшим поліпшенням станів мішені, які включали в себе також кор-валентну кореляцію. Як було показано, кор-валентна взаємодія є дуже важливою для передбачення ходу перерізів при низьких енергіях, даючи додатковий пік трохи вище нульової енергії. Автори ідентифікували цей пік з пороговим піком в уточнених вимірюваннях Романюк та ін. [85]. Проте, як відзначалося в роботі [85], цей пік є наслідком умов експерименту, а не фізичної структури в пружному перерізі.

Дослідження фоторозщеплення перерізів тісно зв'язане з проблемою розсіяння низькоенергетичних електронів. На додаток до досліджень енергій зв'язку від'ємних іонів [92–94], для дослідження властивостей іона  $\text{Ca}^-$  були виконані кілька експериментів з фоторозщеплення. Ранні вимірювання проводилися Хайніке та ін. [95] більше 30 років тому. Було отримано відносний переріз для енергій від 0.5 до 3.2 еВ, з декількома примітними структурами: мінімумом Купера при 1.2 еВ, і плато трохи вище 2.0 еВ, а також гострим піком близько 3.0 еВ. Оскільки властивості іона  $\text{Ca}^-$  не були відомі в той час, автори не могли дати однозначного пояснення своїм експериментальним результатам. Не так давно, для енергій фотонів від 1.1 до 3.1 еВ Вальтер і Петерсон [96, 97] були виміряні з більш високою роздільною здатністю відносні перерізи, у яких був ідентифікований різкий пік резонансу форми трохи вище  $^1P^o$ -порога. Крім того, були проведені три експерименти для вимірювання абсолютних значень перерізів: Крістенсен та ін. [98], з використанням техніки виснаження селективних станів, при 1.384 і 1.392 еВ, у той час як Лі та ін. [99, 100] для отримання абсолютних значень перерізів при 1.903 і 2.083 еВ використовували метод насичення.

На сьогоднішній день були проведені лише кілька теоретичних досліджень фоторозщеплення  $\text{Ca}^-$ . Грібакін та ін. [88] для генерування початкового зв'язаного стану використовували рівняння Дайсона теорії багатьох тіл, а для опису континуальної хвильової функції вільного електрона

— наближення Хартрі-Фока. Пізніше Фрозе Фішер і Хансен [101] застосували набагато точнішу схему багатоконфігураційного методу Хартрі-Фока як для зв'язаного, так і континуального станів. Обидва розрахунки, однак, були обмежені енергіями фотонів нижче  $4s4p\ ^3P^o$ -порога. Отже, їхні передбачення можна порівняти лише з деякими із експериментальних даних. Останні, проте, проявляють помітну резонансну структуру при більш високих енергіях.  $R$ -матричні розрахунки Юань і Фріче [90] в наближенні СЗ5 покрили діапазон енергій від порога до 4 еВ і відтворили у загальних рисах експериментальні результати Хайніке та ін. [95]. Однак отримана енергетична залежність поблизу порогів збудження  $^3P^o$  та  $^1P^o$  показали великі розбіжності з найостаннішими вимірюваннями Вальтера і Петерсона [96]. У своїх нових розрахунках з поліпшеним описом атомних станів мішені Юань і Лін [91] передбачили мінімум Купера і форму резонансного піку трохи вище  $^1P^o$ -порогу набагато точніше, у той же час залишаючи розбіжність щодо абсолютної величини цього піку. І, нарешті, залишилася помітна розбіжність з експериментальними результатами в енергетичній залежності перерізу фоторозщеплення в області енергій 2.0–2.8 еВ.

У своїй наступній праці Юань [102] використав метод  $R$ -матриці в наближенні п'яти станів ( $^1S$ - $^3P^o$ - $^3D$ - $^1D$ - $^1P^o$ ) сильного зв'язку, з уточненими ще раз хвильовими функціями, для розрахунку фоторозщеплення іона  $\text{Ca}^+$  з енергією фотонів від порога до 4 еВ.

Таким чином, метою представлених у даному розділі досліджень було виконання незалежних розрахунків для низькоенергетичного розсіяння електронів на нейтральному кальції, з використанням дуже точних хвильових функцій мішені і значно розширеними розкладами сильного зв'язку в порівнянні з попередніми працями. Дані розрахунки проводилися за допомогою програмного коду, розроблюваного паралельно з даними обчисленнями на основі методу  $R$ -матриці  $B$ -сплайнами [15]. Попередні версії програмного пакету BSR вже були досить успішно застосовані до деталь-



них досліджень інших квазідвоелектронних мішеней, таких як Mg [103] і Zn [104]. Відмітною особливістю даного методу є використання в описі станів мішені наборів залежних від терму неортогональних орбіталей. Це дозволяє оптимізувати атомні хвильові функції для різних станів незалежно одна від одної, що призводить до більш точних описів мішені, ніж ті, які використовувалися в попередніх працях із зіткнення. Крім того, ми пропонуємо детальний аналіз резонансної структури в області низьких енергій.

Цей розділ організований наступним чином. Після короткого викладу описання структури мішені, ми підсумовуємо найважливіші аспекти розрахунків зіткнення. Це супроводжується представленням інтегрованих по куту повних і парціальних перерізів пружного розсіяння  $e+\text{Ca}$  та процесу фоторозщеплення  $h\nu+\text{Ca}^-$ . При можливості, наші результати порівнюються з іншими теоретичними і експериментальними даними. На закінчення — докладне обговорення низькоенергетичних резонансних особливостей.

### 3.2. Методика розрахунку структури атома кальцію та процесів низькоенергетичних зіткнень $e+\text{Ca}$

**3.2.1. Розрахунки структури атома Ca.** Кальцій з його конфігурацією основного стану  $[1s^2 \dots 3p^6] \times (4s^2) {}^1S$  і одноразово збудженими станами  $[1s^2 \dots 3p^6] \times (4sn\ell, 3dn\ell, 4pn\ell) {}^{3,1}L$  проявляє багато спільного з гелієм, тобто деколи він може розглядатися як два електрони понад аргон-подібним кором  $[1s^2 \dots 3p^6]$ . Для простоти, замкнуті оболонки нижче будуть опущені в позначеннях. Як валентні, так і кор-валентні кореляції — обидві мають важливе значення для основного стану і низько-розміщених збуджених станів Ca. Широко використовуваний спосіб введення кор-валентної кореляції оснований на застосуванні напівемпіричного кор-поляризаційного потенціалу. Хоча такий потенціал значно спрощує розрахунки і може забезпечити точні енергії збудження і сили осцилято-

рів, завжди залишається питання, наскільки добре модельний потенціал може відтворювати всю кор-валентну кореляцію, включаючи недипольні внески. Тому в даному підході ми вирішили включити кор-валентну кореляцію *ab initio* — шляхом додавання конфігурацій мішені зі збудженим кором. Проте, прямі розрахунки багатоконфігураційним методом Хартрі-Фока (БХХФ) у цьому випадку, як правило, призводять до дуже великих розкладів, які навряд чи можуть бути використані в подальших розрахунках розсіяння. З цієї причини для генерування станів мішені ми використовували *B*-сплайновий обмежений в «боксі» метод сильного зв'язку [105].

Зокрема, розрахунок станів мішені включав у себе наступні кроки. Ми розпочинали з генерування орбіталей кора у ХФ-розрахунок для  $\text{Ca}^{2+}$ , а потім отримували валентні  $4s$ ,  $3d$ ,  $4p$ ,  $5s$ ,  $4d$  та  $5p$ -орбіталі з розрахунку із замороженим кором для  $\text{Ca}^+$ . Далі, ми моделювали кор-валентну кореляцію шляхом додавання конфігурацій  $3p^5\bar{n}\ell\bar{n}'\ell'$  у розклад

$$\phi(3p^6n\ell) = a_{n\ell}\phi_{HF}(3p^6n\ell) + \sum_{\bar{n}\ell\bar{n}'\ell'} b_{\bar{n}\ell\bar{n}'\ell'}\chi(3p^5\bar{n}\ell\bar{n}'\ell') \quad (3.1)$$

де риска над символом вказує на кореляційну, а не фізичну орбіталь. Таким чином хартріфоківські хвильові функції  $\phi_{HF}(3p^6n\ell)$  були покращені кореляційними функціями з  $3p$ -збудженим кором. Кореляційні орбіталі були оптимізовані для кожного стану окремо. У даній роботі, всі стани мали один і той же кор, за винятком хвильової функції для  $3p^63d$ . Середній радіус  $3d$ -орбіталі ( $2.34a_0$ ) близький до радіусу  $3p$ -кора  $1.29a_0$ . Це викликає сильні ефекти релаксації для розглядуваного випадку, знижуючи загальну енергію на  $\sim 0.25$  еВ. Тому для  $3p^63d$ -стану ми використовували повністю розморожену  $3p$ -орбіталь. У той час як напівемпіричні поляризаційні потенціали також можуть включати в себе релаксацію в явному вигляді, використання релаксованих неортогональних орбіталей, як видається, є фізично більш виправданим. Оскільки середні радіуси для  $\bar{n}\ell$ -орбіталей

лежать між середніми радіусами кора і валентних орбіталей, цей метод дозволяє нам інкорпорувати (включати) кор-валентну кореляцію з відносно невеликим числом конфігурацій.

Кор-валентно корельовані стани  $\text{Ca}^+$  потім були використані в якості станів мішені у розрахунках зв'язаних станів методом сильного зв'язку з  $B$ -сплайнами — для генерування низькорозміщених станів атома  $\text{Ca}$ . Відповідний багатоканальний розклад має структуру

$$\begin{aligned} \Phi(3p^6 4s n\ell, LS) = & A \sum_{n\ell} \{\phi(3p^6 4s) P(n\ell)\}^{LS} + A \sum_{n\ell} \{\phi(3p^6 3d) P(n\ell)\}^{LS} \\ & + A \sum_{n\ell} \{\phi(3p^6 4p) P(n\ell)\}^{LS} + A \sum_{n\ell} \{\phi(3p^6 5s) P(n\ell)\}^{LS} \\ & + A \sum_{n\ell} \{\phi(3p^6 4d) P(n\ell)\}^{LS} + A \sum_{n\ell} \{\phi(3p^6 5p) P(n\ell)\}^{LS} \end{aligned} \quad (3.2)$$

де  $A$  позначає оператор антисиметризації. Для стислості позначень ми прийняли, що коефіцієнти розкладу інкорпоровані у невідомі функції  $P(n\ell)$  для зовнішнього валентного електрона. Ці функції були розкладені на  $B$ -сплайновому базисі і відповідні рівняння були розв'язані за умови перетворення хвильових функцій в нуль на границі. Ця схема дає набір ортогональних одноелектронних орбіталей для кожного зв'язаного стану, але орбіталі різних наборів не завжди є ортогональними одні до одних. Така процедура часто називається використанням «неортогональних орбіталей» і ми будемо трактувати її нижче саме в такому аспекті.

Кількість фізичних станів, які можуть бути згенеровані за допомогою цього методу залежить від розміру  $a$  «боксу»  $R$ -матриці. Приймаючи  $a = 80a_0$  (де  $a_0 = 0.529 \cdot 10^{-10}$  м, — борівський радіус), ми отримали хороший опис для всіх низько розміщених станів  $\text{Ca}$  аж до  $4s8s\ ^1S$ . Збереження суттєвих каналів у згадуваному вище розкладі сильного зв'язку дозволяє нам включати валентну кореляцію. Нарешті, ми використовували той са-

мий багатоканальний розклад (3.1) як для станів  $4sn\ell$ , так і для всіх станів  $n\ell^2$  з еквівалентними електронами.

У даних розрахунках ми використовували 118  $B$ -сплайнів порядку 8. Оскільки в згаданих вище  $B$ -сплайнових розрахунках зв'язаних станів у рамках сильного зв'язку генеруються різні неортогональні набори орбіталей для кожного атомного стану, їхнє подальше використання, звичайно, є дещо ускладненим. З іншого боку, наші конфігураційні розклади для атомних станів мішені містять тільки від 60 до 120 конфігурацій для кожного стану і, таким чином, можуть бути використані для розрахунків зіткнення при наявності достатньо скромних обчислювальних ресурсів.

Стани мішені, включені в дані розрахунки розсіювання, наведені в таблиці Б.1 (див. Додаток Б), де ми також порівнюємо розраховані енергії зв'язку з експериментальними значеннями [106]. Загальне узгодження між експериментом і теорією є добрим, з відмінностями в похибках по енергії, як правило, меншими за 0.1 еВ, за винятком нижчих станів  $4s^2\ ^1S$  та  $4s4p\ ^3P^o$ . Тут кореляційні поправки, як очікується, будуть найбільш важливими. Точність даних енергій зв'язку є близькою до отриманої в рамках розширених MCHF-розрахунків [107], і даний опис структури є істотно покращеним у порівнянні з використовуваними в попередніх  $R$ -матричних розрахунках [90,91,102]. Це особливо помітно для станів  $3dn\ell$ : пряме включення релаксації кора значно покращує відповідні енергії зв'язку.

Інша оцінка якості нашого опису мішені може бути зроблена шляхом порівняння результатів для сил осциляторів різних переходів з експериментальними даними та іншими теоретичними передбаченнями. Таке порівняння зі значеннями, рекомендованими НІСТ [108], та силами осциляторів з останніх обширних MCHF-розрахунків Froese Fisher and Tachiev [107] наведене в табл. Б.2. У більшості випадків ми бачимо добре узгодження як з теоретичними MCHF-даними, так і з рекомендованими НІСТ значеннями. Точні сили осциляторів є дуже важливими для отримання надійних абсо-

лютних значень перерізів і швидкостей для дипольних переходів. Точність сил осциляторів є також важливою для низькоенергетичного розсіяння, що розглядається у даній роботі, оскільки дозволяє визначати, чи вірно ми враховуємо поляризацію мішені падаючим електроном.

**3.2.2. Розрахунки зіткнення  $e+\text{Ca}$ .** Для розрахунків розсіяння ми використовували створений на основі методу  $R$ -матриці з  $B$ -сплайнами програмний код BSR [15], що розроблювався практично паралельно з даними розрахунками (див. [1]). Деталі наближення БСР, зокрема, у застосуванні до зіткнень електронів з аналогічними квазі-двоелектронними мішенями, можна знайти також у двох публікаціях для  $e+\text{Mg}$  [103] та  $e+\text{Zn}$  [104], що передували виходу нашої праці [1]. Тут ми використовуємо  $B$ -сплайни в якості універсального базису для представлення орбіталей розсіяння у внутрішній області  $r < a$ . Отже, розклад  $R$ -матриці в цій області має вигляд

$$\Psi_k^\Gamma(x_1, \dots, x_{N+1}) = A \sum_{ij} \bar{\Phi}_i^\Gamma(x_1, \dots, x_{N+1}; \vec{r}_{N+1} \sigma_{N+1}) r_{N+1}^{-1} B_j(r_{N+1}) a_{ijk}^\Gamma \quad (3.3)$$

Тут  $\bar{\Phi}_i^\Gamma$  — каналні функції, які утворюються шляхом поєднання кутових  $\vec{r}_{N+1}$  і спінових  $\sigma_{N+1}$  координат налітаючого електрона з  $N$ -електронними станами мішені  $\Phi(x_1, x_2, \dots, x_N)$ , для отримання функцій з квантовими числами комбінованої системи, позначеними через  $\Gamma$ . Крім того, сплайни  $B_j(r)$  представляють континуальні орбіталі. Принциповою перевагою  $B$ -сплайнів є те, що вони утворюють ефективно повний базис і, отже, жодні поправки Баттла до  $R$ -матриці в даному випадку не потрібні. Амплітуди хвильових функцій на границі (внутрішньої області), які необхідні для оцінки  $R$ -матриці, задаються коефіцієнтом останнього сплайна, який є єдиним ненульовим сплайном на цій границі.

Інша важлива особливість цього програмного коду стосується вимог до ортогональності одноелектронних радіальних функцій. Ми не нав'язуємо жодних умов ортогональності для одноелектронних радіальних функцій, використовуваних для представлення різних станів мішені, а, з іншого боку, континуальні орбіталі не повинні бути ортогональними до зв'язаних орбіталей. Використання неортогональних орбітальних наборів дозволяє уникнути введення додаткових  $(N + 1)$ -електронних членів у розклад  $R$ -матриці. Таке введення може призводити до великих багатоконфігураційних розкладів, особливо коли для поліпшення станів мішені використовуються кореляційні псевдоорбіталі (див. обговорення в праці [91]).

Кількість  $B$ -сплайнів і радіус  $R$ -матриці в розрахунках розсіяння були вибрані такими ж, як при розрахунку зв'язаних станів мішені. Ми чисельно розраховували парціально-хвильові внески до  $L = 25$ . Розрахунки перерізу потім були здійснені таким же чином, як і в стандартних  $R$ -матричних розрахунках. Для забезпечення прямого порівняння між експериментом і теорією та точного розрахунку резонансної структури, у розрахунках розсіяння ми використовували експериментальні енергії збудження мішені.

### 3.3. Результати розрахунку процесів розсіяння електронів на нейтральному Са

Отримані в БСР-наближенні результати для низькоенергетичного розсіяння електронів на атомах Са, показані на рис. 3.1. Так, на рис. 3.1а, розраховані нами повні і пружні перерізи порівнюються з експериментальними даними Романюк та ін. [82]. Однак шкала енергій була зсунута на 0.35 еВ вгору від значень в опублікованій версії [82], оскільки є вагомі підстави вважати, що калібрування енергії в оригінальному вимірюванні страждало від систематичної похибки.

По-перше, повторні вимірювання [85] тієї ж групи дали результати (див.

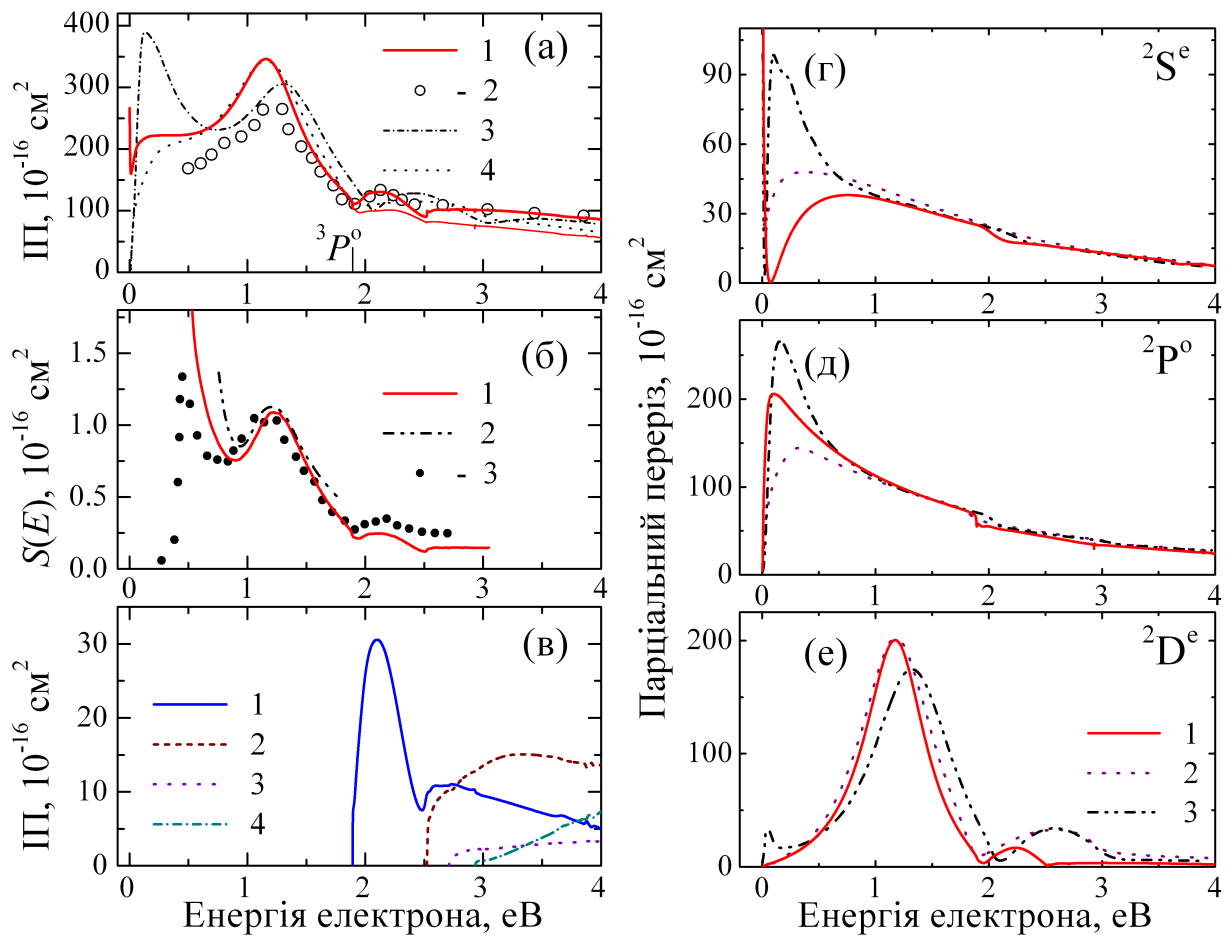


Рис. 3.1: Перерізи розсіювання електронів на атомі кальцію:

- (а) повний і пружний ІП: 1 — наші дані БСР39; 2 — експеримент Романюк та ін. [82]; 3 — РМ5, Юань і Лін [91]; 4 — РМ6, Юань і Фріче [90];
- (б) функція  $S(E)$  (див. текст): 1 — дані БСР39; 2 — експеримент Романюк та ін. [85]; 3 — ОП, Келемен та ін. [86];
- (в) БСР39-перерізи збудження з основного стану Са: 1–4 — ІП збудження станів  $4\ ^3P^o$ ,  $3\ ^3D^o$ ,  $3\ ^1D$  та  $4\ ^1P^o$ , відповідно;
- (г, д, е) — парціальні  $^2S$ ,  $^2P^o$ ,  $^2D$  та  $^2F^o$ -перерізи пружного розсіювання: 1 — наші дані БСР39; 2 — РМ6, Юань і Фріче [90]; 3 — РМ5 — Юань і Лін [91].

рис. 3.1б) з головним максимумом, зміщеним у бік високих енергій на  $\sim 0.35$  еВ. По-друге, існуючі розрахунки підтверджують той факт, що відмітна структура при більш високих енергіях, зумовлена відкриттям нових каналів на порозі збудження  $4s4p\ ^3P^o$ . Відзначимо, що згаданий вище зсув зміщує спостережувані особливості точно до цього порогу (див. рис. 3.1в). Як видно з рис. 3.1б, існує дуже добре узгодження з експериментальними даними за абсолютною шкалою, особливо при вищих енергіях, а також у світлі того факту, що експериментальна невизначеність в абсолютному нормуванні, за оцінками, складає близько 40%.

Збудження інших станів у Са забезпечує значний внесок у повний переріз при більш високих енергіях. Щоб визначити складові цього вкладу, на рис. 3.1в показано передбачувані нами перерізи збудження чотирьох нижніх збуджених рівнів. Основний внесок трохи вище 2 еВ отримується від збудження стану  $4s4p\ ^3P^o$ , в якому домінує сильний пороговий максимум поблизу порогу. Ця особливість відповідає за другий пік в експериментальних даних рис. 3.1а, а також за мінімум у пружному перерізі при відкритті цього каналу, показаний на рис. 3.1б. У перерізі збудження цього стану також спостерігається мінімум, зв'язаний з відкриттям наступних каналів збудження. При енергіях вище 2.5 еВ, основний внесок отримується від збудження рівня  $3d4s\ ^3D$ , у той час як внесок від збудження рівня  $3d4s\ ^1D$  є відносно невеликим. Нарешті, при більш високих енергіях (не показано на рисунку), основний непружний внесок у повний переріз забезпечує сильне дипольне збудження рівня  $4s4p\ ^1P^o$ . Хоча в перерізах збудження помітні інші невеликі резонансні особливості, вони істотно не впливають на повний переріз. Найголовнішим є те, що дані розрахунки, як і попередні  $R$ -матричні праці, не виявили яку-небудь істотну особливість, яка б ототожнювалася з резонансом при 2.75 еВ, про що повідомлялося у вимірюваннях Джонстон та ін. [84].

У ранніх розрахунках головний пік у пружному перерізі був неправиль-



но ідентифікований як резонанс форми  $4s^24p\ ^2P^o$  [87]. Тільки після відкриття стабільного іона  $\text{Ca}^-$  в 1987 році цей максимум віднесли до резонансу форми  $4s^23d\ ^2D$ . Однак слід зазначити, що існуючі розрахунки передбачають дуже різні положення і ширини для нижчих резонансів. Наприклад, Грібакін та ін. [88] використовували рівняння Дайсона теорії багатьох тіл і повідомили значення 1.44 і 1.4 еВ для енергії  $E_r$  і ширини  $\Gamma$ , відповідно. Юань і Чжан [89], використовуючи релятивістське наближення статичного обміну з феноменологічним поляризаційним потенціалом, отримали  $E_r = 1.75$  еВ і  $\Gamma = 3.2$  еВ, у той час як Келемен та ін. [86] передбачили  $E_r = 0.87$  еВ та  $\Gamma = 0.98$  еВ у ще одному одноканальному розрахунку методом феноменологічного комплексного оптичного потенціалу. Єдине експериментальне повідомлення про положення і ширину цього резонансу було дано Джонстон та ін. [84], які проводили вимірювання передачі електронів у парах  $\text{Ca}$ . Вони представили значення  $E_r = 1.1 \pm 0.15$  еВ та  $\Gamma = 0.5 \pm 0.1$  еВ, які дуже сильно відмінні від одноканальних результатів.

Парціальні перерізи, представлені на рис. 3.1г,д,е, дозволяють визначити походження структур у пружному перерізі. Пологі максимуми в  $^2S$  та  $^2P^o$ -симетріях не можуть бути ідентифіковані з резонансами, а обумовлені швидкими змінами зсуву фаз у  $s$ -хвилі та  $p$ -хвилі при низьких енергіях. Зсув фаз для  $s$ -хвилі проходить через нуль при  $\sim 0.07$  еВ, де парціальний  $^2S$ -переріз має мінімум Рамзауера-Таусенда у пружному перерізі. Однак, домінуючий пік при 1.15 еВ вочевидь дає резонанс у парціальному перерізі  $^2D$ , який може бути однозначно ідентифікований з резонансом форми  $4s^23d\ ^2D$ . Зсув фаз у цьому енергетичному діапазоні дійсно змінюється майже на  $\pi = 3.14$ . Має місце також невеликий пік при вищих енергіях між порогами  $4s4p\ ^3P^o$  та  $3d4s\ ^3D$ -збудження. Юань і Лін [91] ідентифікували цей пік як  $4s4p^2\ ^2D$ -резонанс. З іншого боку, наші результати не вказують на чіткий зв'язок цього піку з резонансом. Зсув фаз у  $d$ -хвилі в цій області справді починає зростати як для справжнього резонансу, але

в  $3d4s\ ^2D$ -порозі графік  $d$ -фази швидко стає пологим, даючи повний приріст в області максимуму тільки на  $\pi/4$ . Це виглядає так, ніби можливий резонанс руйнується відкриттям нових каналів розпаду.

Аналіз фазового зсуву в даних БСР-розрахунках дає  $E_r = 1.187$  еВ та  $\Gamma = 0.678$  еВ, у більш близькому узгодженні з експериментом [84], ніж результати одноканальних розрахунків, згадуваних вище. У попередніх статтях з  $R$ -матричними розрахунками відсутні повідомлення про числові параметри для цього резонансу, але з рис. 3.1е видно хороше узгодження наших даних з парціальних  $^2D$ -перерізів із  $R$ -матричними результатами Юань і Фріче [90] і, в меншій мірі, з більш обширним розрахунком Юань і Лін [91]. Ця загальна тенденція проявляється і в інших парціальних хвилях і, отже, у повному перерізі. Розбіжність між різними теоріями при більш високих енергіях, ймовірно, зв'язана з різною точністю теоретичних енергій збудження.

Найбільш помітна розбіжність, однак, стосується сильного додаткового максимуму передбаченого Юань і Лін трохи вище нульової енергії (див. рис. 3.1а). Як видно з рис. 3.1г,д,е, він з'являється у всіх трьох парціальних хвилях, але найбільш помітно в  $^2S$ -симетрії. Вони приписали цей максимум впливу кор-валентної взаємодії, включеної в їхній розширений розрахунок. Проте, ми вважаємо, що це чисельний артефакт. Для того, щоб врахувати кор-валентну кореляцію, Юань і Лін включили в свій  $R$ -матричний розклад  $3p$ -збуджені конфігурації. Для приведення числа конфігурацій до керованої величини, були здійснені деякі обмеження, як це зазначено в їхній «Таблиці 1». Із детального обговорення в [103], можна припустити, що або виник дисбаланс між частинами розладу сильного зв'язку, пов'язаних із розсіянням і зв'язаними станами, або що задача з розрахунку  $N$ -електронної структури і  $(N + 1)$ -електронна задача розсіяння дуже по-різному реагують на сумарно враховувану кореляцію, тим самим призводячи до ефективної перекореляції одна відносно іншої. Зазначимо, що код

BSR, використовуваний у даних розрахунках, менш імовірно зіткнеться з проблемою дисбалансу. Оскільки ми не накладаємо жодних обмежень ортогональності між функціями континууму та атомними орбіталями, ми не повинні компенсувати ці обмеження шляхом додавання  $(N + 1)$ -електронних функцій до нашого розкладу сильного зв'язку. На практиці це призводить до істотного зниження можливості появи псевдорезонансної структури.

Юань і Лін [91] пояснювали появу додаткового резонансу шляхом порівняння своїх результатів з вдосконаленими вимірюваннями Романюк та ін. [85], чії дані також вказують на припороговий максимум. Однак, це вимірювання дає не повний переріз, а скоріше спектральну функцію, яка є результатом реєстрації розсіяних електронів у вузькому, залежному від енергії діапазоні кутів, що визначаються параметрами експериментальної установки. Зокрема, Романюк та ін. виміряли функцію  $S(E)$

$$S(E) = \int_{\theta_1}^{\theta_2} \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega \quad (3.4)$$

де кутове охоплення аналізатора,  $\theta_1 - \theta_2$ , залежить від енергії  $E$  (eV) [86]:

$$\theta_1(E) = \sin^{-1}[(k_1/E)^{1/2}], \theta_2(E) = \sin^{-1}[(k_2/E)^{1/2}], k_1 = 0.482, k_2 = 0.508 \quad (3.5)$$

Залежність  $\theta_1$  і  $\theta_2$  від  $E$  зв'язана з геометрією монохроматора і значеннями електричного і магнітного полів, що використовувалися в експерименті.

На рис. 3.16 розрахована нами функція  $S(E)$  порівнюється з виміряними даними [85] і теоретичними результатами [86], отриманими з використанням феноменологічного модельного потенціалу. Відносні експериментальні дані були нормовані на наші теоретичні значення  $S(E)$  при  $E = 1.8$  eV. Обидва розрахунки вірно відтворюють положення головного максимуму і

зростання  $S(E)$  при менших енергіях, яке обумовлене різким збільшенням кутового охоплення аналізатора зі зменшенням енергії налітаючої частинки. Ми прийшли до висновку, що порівняння функції  $S(E)$  з інтегрованим по кутах пружним перерізом є недоречним і не може розглядатися як підтвердження нового фізичного максимуму в області низьких енергій. Деякі інші аспекти розрахунку функції  $S(E)$  розглянуті нами в розд. 5.

Диференціальні по куту перерізи пружного розсіяння електронів на атомах Са: 3D-поверхня, ракурс зі сторони малих кутів розсіяння.

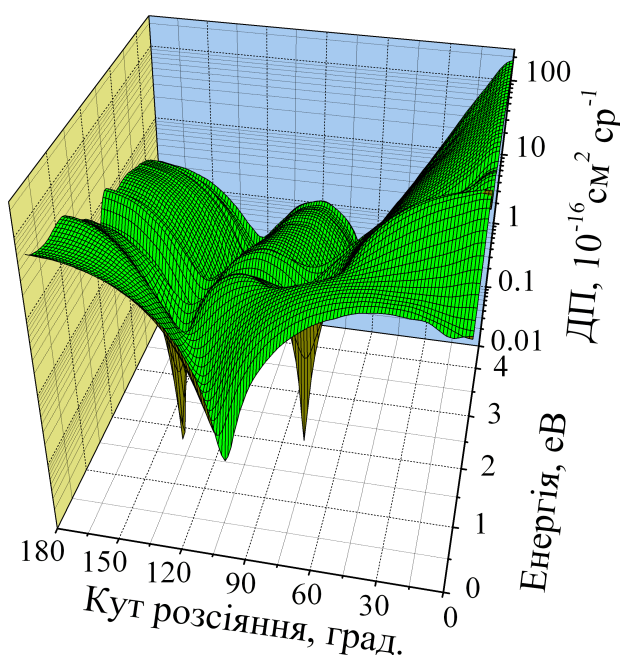


Рис. 3.2: Диференціальні по куту перерізи пружного розсіяння електронів на атомах Са: 3D-поверхня, ракурс зі сторони малих кутів розсіяння.

На рис. 3.2 показані пружні ДП, використовувані для обчислення функції  $S(E)$ , представлені у вигляді 3-вимірної поверхні енергетично-кутових залежностей цих ДП (в подальшому — 3D-поверхня). Помітна структура, що спостерігається як в енергетичній, так і в кутовій залежностях, дозволяє припустити, що переріз пружного розсіяння може слугувати чутливим тестом при порівнянні теорії і експерименту (див. також розд. 5).

### 3.4. Результати розрахунку фоторозщеплення іонів $\text{Ca}^-$

Від'ємний іон кальцію має один слабозв'язаний стан,  $4s^24p\ ^2P^o$ , з такою малою енергією зв'язку електрона, що її дуже важко точно визначити, як з експериментальної, так і з теоретичної точок зору. В 1987 році Пегг та ін. [28] і Фрозе Фішер та ін. [29] надали перший експериментальний і теоретичний доказ існування в  $\text{Ca}^-$  стійкого основного стану  $4s^24p\ ^2P^o$ . Розрахована енергія зв'язку була рівна тільки 45 меВ, що узгоджується з експериментальним результатом  $43 \pm 7$  меВ, отриманим шляхом вимірювань лазерного фоторозщеплення та електронно-спектроскопічних вимірювань. Ці новини мали істотний відгук у наукових колах і багато теоретичних і експериментальних груп присвятили свої дослідження властивостям від'ємних іонів лужно-земельних металів (див., напр., огляд [93] і наявні там посилення). Численні подальші розрахунки споріднення  $\text{Ca}^-$ , однак, дали великий розкид у передбачуваних значеннях енергій зв'язку, показуючи, що точний розрахунок рівнів енергії в таких сильно корельованих системах все ще є складним завданням навіть для найбільш вишуканих методів. Наступні експерименти дали навіть менші енергії зв'язку, аж поки проблема основного стану  $\text{Ca}^-$  не була остаточно з'ясована Петрунін та ін. [92], які застосували в своїх дослідженнях від'ємних іонів резонансно-іонізаційну спектроскопію. Ця техніка усунула багато обмежень, притаманних попереднім дослідженням  $\text{Ca}^-$ , і дозволила отримати точні значення 24.55 та 19.73 ( $\pm 0.10$ ) меВ енергій зв'язку компонент тонкої структури  $4P_{1/2}$  та  $4P_{3/2}$  основного стану іона, відповідно. В наших розрахунках фоторозщеплення хвильові функції початкового стану були отримані з того самого розкладу сильного зв'язку (3.3), який ми використовували для задачі розсіяння  $e+\text{Ca}$ . Наше (нерелятивістське) значення для енергії зв'язку рівне 15 меВ і є близьким до найбільш сучасного експерименту Петрунін та ін. [92]. Це узгодження вказує, що наш  $B$ -сплайновий розклад включає основні коре-

ляційні поправки в системі  $e+\text{Ca}$ . Відмітимо, що ми використовували відносно великий  $R$ -матричний радіус в  $80a_0$ , щоб забезпечити хороший опис дифузного характеру стану  $4s^24p\ ^2P^o$ .

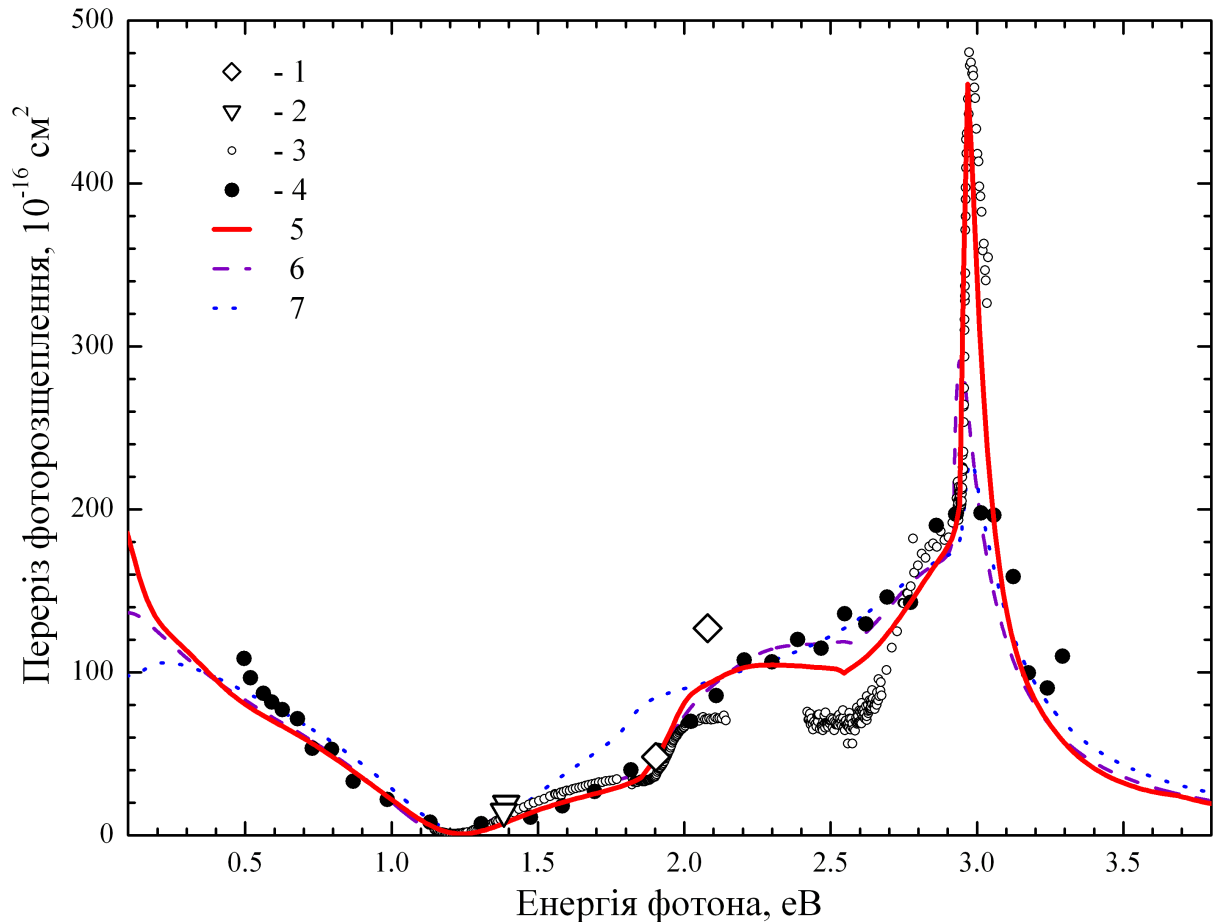


Рис. 3.3: Повний переріз фоторозщеплення  $\text{Ca}^-$  як функція від енергії налітаючого фотона:

експеримент: 1 — Лі та ін. [99]; 2 — Крістенсен та ін. [98]; 3 — Вальтер і Петерсон [97]; 4 — Хейніке та ін. [95]; теорія: 5 — дані нашого розрахунку БСР39; 6 — РМ5, Юань [102]; 7 — РМ6, Юань і Фріче [90].

Результати даних розрахунків для повного перерізу фоторозщеплення показані на рис. 3.3, поряд з наявними експериментальними даними та останніми  $R$ -матричними розрахунками групи Юаня [90, 102]. Ми наводимо тільки перерізи у формі довжини, оскільки наші результати в різних представленнях є дуже близькими одні до одних, за винятком дуже вузь-

ких припорогових областей. Експериментальні дані Хайніке та ін. [95] і Вальтер та Петерсон [96,97] в оригіналі були наведені в умовних одиницях.

Потім Юань [102] провів їх масштабування — для полегшення порівняння з теорією. Ми використовуємо той самий масштаб, оскільки він забезпечує дуже добру візуальну підгонку також і для наших результатів. Як видно з рис. 3.3, головні експериментально спостережувані особливості добре відтворюються за допомогою теорії. На відміну від розрахунків розсіяння, наші перерізи фоторозщеплення краще узгоджуються з останніми  $R$ -матричними розрахунками Юань [102], які включають в себе корвалентну кореляцію, ніж з більш ранніми передбаченнями [90].

Для енергій фотона нижче 2 еВ теоретичні перерізи добре узгоджуються з усіма експериментами. Положення мінімуму Купера при 1.24 еВ передбачається точно в узгодженні з вимірюваннями Вальтера і Петерсена з високою роздільною здатністю по енергії. Недавні вимірювання Крістенсен та ін. [98] і Лі та ін. [99] забезпечили абсолютні перерізи фоторозщеплення у вибраних точках по енергії. Це дозволяє нам перевірити пропонуване калібрування більш ранніх вимірювань. При 1.384 та 1.392 еВ всі теоретичні результати знаходяться в межах похибок абсолютних вимірювань,  $14.4 \pm 3.7$  та  $19.4 \pm 5.8$  Мб, що даються Крістенсен та ін. [98]. Абсолютний переріз,  $48 \pm 5.3$  Мб, що дається Лі та ін. [99] при 1.903 еВ, також добре узгоджується з даним розрахунком та останніми результатами Юань [102], у той час як залишаються деякі розбіжності з експериментальним значенням при 2.083 еВ. Всі більш ранні розрахунки були здійснені в одноканальному наближенні і тому забезпечують менш точні результати. Для прикладу, Грібакін та ін. [88] описували вільний електрон на Хартрі-Фоківському рівні і отримали гладку енергетичну залежність перерізу фоторозщеплення без Куперівського мінімуму. Однак, абсолютні значення їх перерізів при 1 еВ добре узгоджуються з нашими БСР-даними, хоча і мають велику різницю між результатами, отриманими у формах довжини і

швидкості. Набагато більш точні результати були отримані Фрозе Фішер і Хансен [101] з використанням наближення БКХФ. Їхні результати для низьких енергій аж до першого порогу збудження добре узгоджуються з даними  $R$ -матричними передбаченнями. В цілому, отримані ними перерізи є дещо меншими від наших, у той час як положення Куперівського мінімуму є трохи вищим.

При енергії фотонів вище 2 еВ, порогові ефекти і відкриття додаткових каналів фоторозщеплення, що приводять до збудження станів нейтрального Са, ускладнюють задачу і різні теоретичні передбачення починають помітно відрізнятися одні від одних. На жаль, наявні експериментальні дані також «розкидані» навколо трьох наявних наборів, як це показано на рис. 3.3. При енергіях між 2 і 2.8 еВ теоретичні результати найкраще узгоджуються з ранніми результатами Хейніке та ін. [95]. Абсолютне значення  $127 \pm 8$  Мб з відносно недавніх вимірювань Лі та ін. [100]. також підтверджує вищі перерізи фоторозщеплення в цьому діапазоні енергій, ніж ті, що отримуються з енергетичної залежності, встановленої Вальтер та Петерсон [96, 97]. Трохи вище  $4s4p\ ^1P^o$ -порогу вимірювання з високою роздільною здатністю по енергії Вальтера та Петерсона вказують на різкий пік, який був ідентифікований Юань [102] як резонанс форми. Наші розрахунки передбачають ще більш різкий пік, ніж попередні розрахунки, в хорошому узгодженні з експериментом як щодо положення, так і абсолютної величини. Ми ідентифікували цей пік як результат накладання резонансів форми у різних парціальних хвилях. Щоб прояснити природу структур у повних перерізах, на рис. Б.2а представлені перерізи домінуючих каналів у різних парціальних хвилях.

Всі парціальні перерізи, показані на рис. Б.2а, дають суттєвий вклад у повний переріз і проявляють складну енергетичну залежність внаслідок конкуренції каналів у різних енергетичних областях. Наприклад, «плече» при 2 еВ на рис. Б.2а є сумарним вкладом  $(4s4p\ ^3P^o + kp)$ -каналів у всіх



трьох симетріях, у той час як збільшення парціального  $^2P$ -перерізу відповідає за збільшення повного перерізу, починаючи з 2.6 еВ. Плато в повному перерізі нижче 2.6 еВ є результатом компенсації зростання перерізу в парціальній  $^2P$ -хвилі і зменшення перерізу в парціальній  $^2D$ -хвилі. Як правило, існує тільки один домінуючий канал іонізації в кожній з парціальних хвиль при даній енергії, за винятком області в околі 2.2 еВ у парціальній  $^2D$ -хвилі, де канали  $(^1S+kd)$  та  $(^3P^o+kp)$  дають приблизно рівні вклади. Ми інтерпретуємо це як наслідок в загальному слабкої взаємодії каналів, за винятком припорогових областей біля  $^3P^o$  та  $^3D$ -порогів, де подібні до «каспів» особливості вказують на сильну каналну взаємодію. Всі три симетрії дають вклад у різкий пік трохи вище  $4s4p\ ^1P^o$ -порогу. Фазовий аналіз дає наступні параметри для  $4s4p(^3P^o)kp$ -резонансів форми для цього піку:  $E_r = 2.943, 2.936, 2.940$  еВ, та  $\Gamma = 28.9, 21.6, 25.9$  меВ, для парціальних  $^2S, ^2P$  та  $^2D$ -хвиль, відповідно. Всі три резонанси є дуже близькі за своїм енергетичним положенням і шириною, що приводить до сильного і різкого піку у повному перерізі. Цей висновок суперечить початковому віднесенню цього піку до фешбахівського  $4s4p^2$ -резонансу, зробленому Вальтер і Петерсон [96]. У цілому є дуже добре узгодження між даними результатами і такими ж  $R$ -матричними розрахунками Юань [102], за винятком абсолютних значень у пороговому максимумі. Ми пояснюємо ці відмінності впливом закритих каналів, зв'язаних з вищерозміщеними станами мішені, які були включені у дані розрахунки, але опущені Юань [102]. Відмітимо, що на рис. Б.2а показані тільки головні канали іонізації. В цій області енергій є багато інших каналів іонізації, зв'язаних з вільним  $kf$ -електроном і порогами  $3d4s\ ^3D$  та  $^1D$ -збудження. Однак, їхній вклад у повний переріз фоторозщеплення був установлений як, по суті, незначний.

Нарешті, на рис. Б.2б показано перерізи фоторозщеплення, розділені за кінцевими станами нейтрального кальцію. Ми бачимо, що  $4p$ -фоторозщеплення (яке приводить до  $4s^2\ ^1S$ -стану Ca) швидко спадає після того як

відкривається перший канал збудження мішені. Фоторозщеплення  $4s$ , що приводить до стану  $4s4p\ ^3P^o$ , є найбільш важливим у діапазоні енергій від між порогами  $^3P^o$  та  $^1P^o$ -збудження, в той час як  $4s$ -фоторозщеплення, яке дає в результаті кінцевий стан  $^1P^o$ , привертає увагу як сильний припороговий максимум. Внесок у повне фоторозщеплення від каналів, зв'язаних з усіма іншими станами мішені, був установлений як дуже незначний.

### 3.5. Обговорення результатів розрахунку

#### низькоенергетичних процесів $e+\text{Ca}$ та $h\nu+\text{Ca}^-$

Ми представили теоретичні перерізи для зіткнень низькоенергетичних електронів з нейтральним  $\text{Ca}$  і для фоторозщеплення  $\text{Ca}^-$ . Розрахунки проводилися з новою розширеною версією методу  $R$ -матриця (сильний зв'язок), в якій для представлення функцій континууму використовується  $B$ -сплайновий базис. Використання неортогональних орбітальних наборів, як для побудови хвильових функцій мішені, так і для представлення функцій розсіювання, дозволило нам оптимізувати різні атомні хвильові функції незалежно одна від одної, і, отже, отримувати більш точні описи станів мішені, ніж ті, які використовуються в попередніх розрахунках зіткнення. Зокрема, дані хвильові функції мішені містять як валентну, так і кор-валентну кореляції, поряд з ефектами релаксації через сильне проникнення  $3d$ -електрона в кор.

Наші інтегровані по куту перерізи дуже добре узгоджуються з експериментальними даними Романюк та ін. [82, 85], як щодо положення головного максимуму, так і абсолютних значень перерізів. Добре узгодження наших БСР39-розрахунків (з урахуванням 39 станів мішені) із розрахунками Юань і Фріче [90] (з урахуванням 5 станів) вказує на те, що включення у розклад сильного зв'язку п'яти найнижчих станів достатньо для отримання точного опису задачі низькоенергетичного розсіювання. Цей результат

може частково бути зв'язаний з тим, що поляризація основного стану  $\text{Ca}$ , в основному, визначається сильним дипольним збудженням рівня  $4s4p\ ^1P^o$ . У той же час, ми не підтвердили низькоенергетичного порогового максимуму знайденого Юань і Лін [91] в їхніх пізніших  $R$ -матричних розрахунках з включенням кор-валентної взаємодії. Як детально обговорюється в роботі [103], нефізичний максимум може бути викликаний дисбалансом між частинами розрахунків сильного зв'язку, що стосуються розсіювання і зв'язаних станів мішені. Зазначимо, що наш  $R$ -матричний підхід має менше шансів постраждати від подібних ускладнень [15].

Наші розрахунки фоторозщеплення дають перерізи, енергетична залежність яких знаходиться в доброму узгодженні з обома (відносними) експериментами Хейніке та ін. [95] та Вальтер і Петерсон [96], за винятком області від 2.0 до 2.8 еВ, де наші результати підтверджують біль ранні вимірювання Хейніке та ін. Ми також точно відтворили положення мінімуму Купера і порогові резонансні особливості. Останні були проаналізовані з точки зору їх розкладу за каналами і парціальними хвилями. У межах експериментальних похибок було отримано добре узгодження з експериментальними абсолютними перерізами фоторозщеплення Крістенсен та ін. [98] при 1.384 та 1.392 еВ і Лі та ін. [99] при 1.903 еВ. Деякі розбіжності залишаються зі значенням, отриманим в останньому експерименті при 2,083 еВ. Крім того, близьке узгодження з результатами попередніх  $R$ -матричних розрахунків [102] дозволяє припустити, що наше нормування повних експериментальних перерізів фоторозщеплення є дійсно надійним.

І, нарешті, ми надали детальний аналіз резонансних структур в області низьких енергій. Ми підтверджуємо, що домінуючий пік у перерізі пружного розсіювання зв'язаний з резонансом форми  $4s^23d$ , у той час як резонанси форми  $(4s4p\ ^1P^o)kp$  відповідальні за різкі піки в перерізах фоторозщеплення. Дані розрахунки дають значно краще узгодження з абсолютним піковим значенням перерізів фоторозщеплення в порівнянні з попередніми

$R$ -матричними розрахунками. Це може бути зв'язано з впливом закритих каналів, зв'язаними з вищерозміщеними станами мішені, включеними в дану модель. У той же час, наші розрахунки не виявили будь-яких доказів наявності сильного  $4s4p^2\ ^2D$ -резонансу при 2.75 eV, про який повідомлялося у вимірюваннях Джонстон та ін. [84]. Хоча наші результати вказують на наявність набору дуже вузьких і слабких резонансів Фешбаха, вони не мають істотного впливу на пружні перерізи і перерізи збудження при низьких енергіях.

### Висновки до розділу 3

1. Дано парціально-хвильове обґрунтування спостережуваних на експерименті припороговій структурі з двома піками в енергетичній залежності повних ІП розсіяння  $e+\text{Ca}$ . Встановлено, що широкий пік, розміщений від порога реакції і до  $\sim 1.8$  eV є резонансом форми, зв'язаним з утворенням стану від'ємного іона  $4s^24d\ ^2D$  при 1.193 eV, а поява меншого піку зумовлена утворенням квазістаціонарного стану  $4s4p^2\ ^2D$  при 2.004 eV, при цьому можливий резонанс руйнується відкриттям нового каналу розсіяння. Експериментальні ж ІП повинні бути перекалібровані зі зсувом вправо на 0.35 eV.

2. Отримано перерізи фоторозщеплення від'ємного іона  $\text{Ca}^-$ , енергетична залежність яких добре узгоджується з експериментальними даними за винятком окремих областей. Також точно відтворено положення мінімуму Купера і порогові резонансні особливості, проведено їх аналіз з точки зору розкладу за каналами і парціальними хвилями. Крім того, близьке узгодження з результатами попередніх  $R$ -матричних розрахунків [102] дозволяє припустити, що наше нормування повних експериментальних перерізів фоторозщеплення є дійсно надійним.

## РОЗДІЛ 4

### ЗБУДЖЕННЯ ЕЛЕКТРОННИМ УДАРОМ НИЖЧИХ СТАНІВ АТОМА СА

Метод  $R$ -матриці з  $B$ -сплайнами (сильний зв'язок) застосовується для вивчення збудження електронним ударом чотирьох найнижчих збуджених станів кальцію. Результати для інтегрованих по куту і диференціальних по куту перерізів, а також для (псевдо-) стоксових параметрів світла, випромінюваного в оптичному розпаді  $4s4p\ ^1P^o \rightarrow 4s^2\ ^1S$ , порівнюються з різними експериментальними даними і передбаченнями від інших розрахунків методами сильного зв'язку і спотворених хвиль. В загальному, узгодження між нашими результатами і експериментальними даними є добрим, хоча й зберігаються деякі розходження.

#### 4.1. Стан досліджень процесів збудження чотирьох нижчих збуджених станів атома Са електронами

У попередньому розділі 3 (див. також працю [1]), ми використали метод  $R$ -матриці з  $B$ -сплайнами з урахуванням у розкладі сильного зв'язку 39 фізичних станів мішені (БСР39) для вивчення пружного розсіяння електронів на нейтральному кальції і тісно пов'язаного з ним фоторозщеплення іона  $\text{Ca}^+$ . Порівняння теоретичних БСР39-результатів з різними експериментальними даними показало в деяких випадках добре узгодження, в той час як в інших залишилися певні розбіжності. Проте, не відразу є зрозумілим, чи подібне має місце виключно через упущення деяких важливих фізичних аспектів у розрахунковій моделі, або за ці розбіжності можуть бути відповідальними також експериментальні проблеми. Крім того, порівняння

з іншими теоретичними передбаченнями [26, 83, 86, 89–91, 102, 107, 109–120] показали, що чисельні результати можуть бути дуже залежними від моделі. Нарешті, ми класифікували в [1] велику кількість припорогових резонансних особливостей, обговорення який складає окремий інтерес.

Метою цього розділу роботи, як і власне оригінального дослідження [2] (див. також [5–8]), було розширення початкових обчислень [1] на більш високі енергії зіткнення, при яких стають енергетично доступними непружні канали реакції. Подібними питаннями займалися до нас кілька груп дослідників, тим більш цікаво зіставити отримані результати. Зокрема, інтегровані по куту перерізи збудження електронним ударом резонансного переходу  $4s^2\ ^1S \rightarrow 4s4p\ ^1P^o$  були виміряні Елерс і Галлахер [121], у той час як Мілісавлевич та ін. [122] отримали диференціальні по куту перерізи для цього ж переходу при енергіях зіткнення від 10 до 100 еВ. Останні результати були зіставлені в оригінальній праці з теоретичними передбаченнями Срівастава та ін. [113]. Проте в даному розділі роботи розгляду будуть піддані також і подальші теоретичні зусилля Чаухан та ін. [116], які використовували модель релятивістських спотворених хвиль (РСХ) першого порядку, та Кавазое та ін. [119], що застосували до цієї проблеми нерелятивістську  $R$ -матричну (сильний зв'язок) модель з урахуванням 15, 21 та 24-станів. Автори останньої зі згаданих праць також порівняли свої результати для так званих псевдо-стоксових параметрів [123, 124] з РСХ-передбаченнями [116] і вимірюваннями Мюррей і Цвеянович [125]. В останніх експериментах, лінійні поляризації світла  $P_1$  і  $P_2$ , а також кругова поляризація світла  $P_3$ , були отримані в установці зі «зворотним часом», шляхом спостереження електронів, надпружно розсіяних на лазерно-підготовлених збуджених атомах Са у стані  $4s4p\ ^1P^o$ . Вже після опублікування праці [2] вийшла з друку стаття Фурса і Брей [120] де ДП  $4p\ ^1P^o$ -збудження досліджені в наближеннях СЗ та ЗСЗ.

Цей розділ роботи організований наступним чином. Після короткого

огляду нашої головної розрахункової моделі БСР39 [1], ми описуємо також основні засади альтернативного наближення БКХФ-БСР34 [8], у якому хвильові функції мішені атома Са розраховуються не методом БСР (пакет BSR [15]), а за допомогою багатоконфігураційного методу Хартрі-Фока (пакет MCHF [126, 127]) з урахуванням у СЗ-розкладі 34 фізичних станів мішені. Далі ми наводимо результати для інтегрованих по куту перерізів (ІП) для переходів  $4s^2\ ^1S \rightarrow 4s4p\ ^3,1P^o$  і диференціальних по куту перерізів (ДП) для резонансного переходу  $4s^2\ ^1S \rightarrow 4s4p\ ^1P^o$ . Далі розглянуто ДП для заборонених переходів зі стану  $4s^2\ ^1S$  у стани  $4s4p\ ^3P^o$  та  $4s3d\ ^3,1D$ . Хоча для останніх із цих випадків відсутні які-небудь експериментальні дані, цікаво порівняти наші передбачення з результатами інших теоретичних моделей. Завершує розділ представлення (псевдо)стоксових параметрів для збудження резонансного переходу  $4s^2\ ^1S \rightarrow 4s4p\ ^1P^o$ .

## 4.2. Методика розрахунку збудження атома Са електронним ударом

**4.2.1. Загальні зауваження до методики розрахунку.** Основи теорії методу БСР й опис комп'ютерних програм, використаних нами, наведені в розділі 1 та праці [15]. Тут ми тільки фіксуємо модель розрахунку атомної структури і наближення, зроблені спеціально в даному дослідженні щодо кореляційної взаємодії електронів у атомі кальцію, а також щодо конкретної схеми розсіяння  $e+\text{Ca}$  в  $R$ -матричному наближенні з  $V$ -сплайнами. Розрахунки мішені атома Са були здійснені нами послідовно у кількох наближеннях, які відрізнялися способом розрахунку одноелектронних орбіталей у одно- та багатоконфігураційному методах Хартрі-Фока, кількістю врахованих одноелектронних орбіталей спектроскопічних та кореляційних станів у розкладі сильного зв'язку, значеннями врахованих коефіцієнтів у цьому розкладі, розмірами «боксу»  $R$ -матриці, порядком і кількістю врахо-

ваних  $B$ -сплайнів та парціальних хвиль, способом оцінки відсічених «хвостів» у парціальних розкладах тощо. Головне ж, чим відрізнялися різні застосовані нами наближення — це способами урахування міжелектронної кореляції. Повний цикл розрахунків, включаючи розсіяння, був здійснений у двох наближеннях: БСР39 та БКХФ-БСР34. Останній підхід відрізняється від наближення БСР39 способом розрахунку структури мішені (див. нижче підрозділ 4.2.2).

Обчислювальна модель наближення БСР39 була докладно описана в розділі 3 (див також [1]) і, отже, не буде тут повторюватися. Коротко кажучи, ми генеруємо точний опис мішені за допомогою багатоконфігураційного розкладу, що враховує як валентну, так і кор-валентну кореляції. Дуже важливо, що ми використовуємо залежні від терму валентні орбіталі, які індивідуально оптимізовані для різних станів, що представляють інтерес. Ми також враховували релаксацію орбіталей кора, спричинену глибоким заляганням  $3d$ -орбіталі. В результаті, для кожного стану ми отримали набір нормованих ортогональних одноелектронних орбіталей, але орбіталі з різних наборів не утворюють ортонормованого базису.

Ці «неортогональні орбіталі» потім використовуються в описі станів мішені, які тісно зв'язані між собою в трактуванні проблеми зіткнення. Ми використовували новітню версію нещодавно розробленого пакету програм BSR на основі методу  $R$ -матриці з  $B$ -сплайнами [15], в якому  $B$ -сплайни (у числовому представленні) використовуються в якості базисних функцій для опису континуального електрона всередині  $R$ -матричного «боксу» радіусу  $a$ . Зокрема, ми вибрали  $a = 80a_0$ , де  $a_0 = 0.528 \times 10^{-10}$  м — радіус Бора, а радіальна область була охоплена 118 сплайнами порядку 8. Ми включили у розклад сильного зв'язку всі стани аж до  $4s8s\ ^1S$ , тобто 39 спектроскопічних станів, у тому числі деякі двічі збуджені стани  $4p^2$  і  $3d^2$ -конфігурацій за межами аргонподібного кора. Як було сказано вище, ми будемо позначати цю модель як БСР39. Використання 60–120 конфігурації



для кожного стану мішені, разом із залежною від терму оптимізацією одно-електронних орбіталей, поліпшило опис мішені (рівні енергії та сили осциляторів), у порівнянні з тією, яка використовувалася Кавазое та ін. [119]. Подробиці можна знайти в таблицях 1 та 2 нашої зі співавторами праці [1] (див. також таблиці Б.1 та Б.2).

На рис. Б.1 для наочності представлена також схема розміщення 39 нижчих енергетичних рівнів атома Са, що включалися в розклад сильного зв'язку у даних БСР39-розрахунках, з розподілом цих рівнів за термами. Значення рівнів енергій (справа на схемі, рис. Б.1) наведені згідно даних НІСТ [106]. У всіх випадках порядок розміщення розрахованих нами рівнів енергій (табл. Б.1) співпадає з порядком слідування рівнів, наведених у [106]. З вертикальних колонок схеми видно, скільки конфігураційних станів для кожного терму було прийнято до розгляду у даних розрахунках. Конфігурація стану за номером 29 у даних НІСТ [106] не встановлена. З рисунка також видно, що вище енергії  $\sim 4.5$  eV, починаючи зі стану  $3d4p\ ^3F^\circ$  з порядковим номером 8, відбувається різке згущення енергій конфігураційних станів, що потім, як ми побачимо далі, відіб'ється на резонансній структурі перерізів розсіяння  $e+\text{Са}$ .

#### 4.2.2. Розрахунок структури мішені методом БКХФ-БСР34.

На відміну від наближення БСР39 [1] (див. розд. 3.2), даний розрахунок структури  $N$ -електронної мішені Са здійснювався за допомогою пакету програм МСНФ [126, 127], а пакет BSR [15] використовувався вже при розгляді  $(N + 1)$ -електронної системи в задачі розсіяння. Це означає, що характеристики зв'язаних спектроскопічних станів мішені атома Са були отримані не з  $R$ -матричної процедури (див. [1]), а варіаційним чином, шляхом виконання відповідного алгоритму багатоконфігураційного методу Хартрі-Фока [126, 127] для самоузгодженого поля атома-мішені Са. Розклад сильного зв'язку у наближенні БКХФ-БСР34 включав 33 нижні

спектроскопічні стани атома Ca з конфігураціями  $3p^6 4s 4\ell$  ( $\ell = 0, 1, 2, 3$ ),  $3p^6 4sn s$  ( $n = 5, 6, 7$ ),  $3p^6 3d 4\ell$  ( $\ell = 0, 1$ ),  $3p^6 4sn p$  ( $n = 5, 6$ ),  $3p^6 4p^2$ ,  $3p^6 4s 5\ell$  ( $\ell = 2, 3$ ) та  $3p^6 3d^2$ , а також стан  $3p^6 3d^2 \ ^3P$ . Останній був включений у даний розклад з метою порівняння з експериментом [128].

Детальніший опис процедури побудови розкладу сильного зв'язку в наближенні БКХФ-БСР34 з включенням 12 наборів орбіталей, які відповідають різним термам, наведено в нашій праці [8].

Для отримання хорошої точності характеристик розсіяння вище порогу іонізації ( $\sim 6.11$  еВ для Ca), у розклад сильного зв'язку бажано було би включати також автоіонізаційні рівні, розміщені вище цього порогу. Але пряме врахування у нашому розкладі, окрім вказаних 34 конфігураційних станів, що відповідають збудженню валентних електронів, певної кількості станів зі збудженим кором значно ускладнило би розрахунки розсіяння через великий розмір охоплюваних матриць. Тому застосування механізму кор-валентної кореляції, що забезпечує опосередковане врахування станів неперервного спектру у розкладі сильного зв'язку, було ключовою умовою отримання енергій конфігураційних станів хорошої якості для всього розглядуваного енергетичного спектру.

У таблиці Б.3 показане порівняння розрахованого нами спектру енергій кальцію з експериментальними значеннями енергій мультиплетів НІСТ [106], а також з розрахунками інших авторів [90, 91, 102, 107, 112, 119]. Загальне узгодження між експериментом і теорією задовільне, з відхиленнями в значеннях енергій, що не перевищують  $\sim 0.06$  еВ для більшості станів. Максимальне відхилення даної моделі складає 0.218 еВ для енергії збудження стану  $3d 4p \ ^3F^o$ . Це краще, ніж при генеруванні описаних в [90, 91, 102, 112, 119] структур мішені Ca, які застосовувалися до розрахунку електрон-атомного розсіяння. Сказане стосується не тільки величини відхилення теоретичних енергій збудження окремих рівнів від рекомендованих НІСТ [106] значень ( $\Delta E_{\text{збуд}} = E_{\text{теор}} - E_{\text{НІСТ}}$ ), але й різниці між енергіями сусідніх рівнів та

зміни порядку слідування рівнів у порівнянні з даними НІСТ.

При підготовці отриманих зв'язаних станів мішені до використання в розрахунках розсіяння у наближенні БКХФ-БСР34, ми використовували той самий  $B$ -сплайновий базис, що і в наближенні БСР39, тобто 118  $B$ -сплайнів порядку 8, з  $R$ -матричним радіусом  $a = 80a_0$  (де  $a_0 = 0.529 \times 10^{-10}$  м — борівський радіус).

В таблиці Б.4 нами здійснено порівняння сил осциляторів, отриманих у наближенні БКХФ-БСР34, з експериментом [129] (див. також [107]) та іншими теоретичними розрахунками, виконаними у наближеннях БКХФ [107], МП [130] та БКХФ [131]. Як і для випадку БСР39, наші сили осциляторів задовільно узгоджуються з експериментом та структурними розрахунками [107] для більшості переходів (див. [1]).

**4.2.3. Розрахунки розсіяння методом БКХФ-БСР34.** Розрахунки розсіяння, як і для випадку БСР39, були проведені методом  $R$ -матриці з  $B$ -сплайнами (див. розд. 3.2). Для здійснення  $R$ -матричних розрахунків у внутрішній та зовнішній областях були, відповідно, застосовані пакети програм BSR [15] та FARM [79]. У першому з них в якості універсального базису для представлення орбіталей розсіяння в області з  $r \leq a$  використовуються  $B$ -сплайни. Тоді сам  $R$ -матричний розклад у внутрішній області має вигляд співвідношення (3.3), де сплайни  $B_j(r)$  представляють орбіталі континууму.

Кількість  $B$ -сплайнів та  $R$ -матричний радіус у розрахунках розсіяння приймалися такими ж, як і при обчисленні зв'язаних станів мішені. У той час, як у підході БСР39 ми чисельно розраховували парціально-хвильові вклади до  $L = 25$ , у наближенні БКХФ-БСР34 послідовно враховувалися до  $L = 15, 25$  і  $35$  парціальних хвиль, для дослідження впливу їх кількості на диференціальні та інтегральні характеристики зіткнення. Внесок у перерізи від вищих значень  $L$ , що не були розраховані явно, у спін-спін-

дозволених переходах визначався за допомогою процедури «оцінки хвостів».

Як зазначалося вище, розрахунки перерізів були виконанні нами так само, як і в стандартних  $R$ -матричних обчисленнях. Проте, якщо у наших розрахунках розсіяння БСР39 [1] ми використовували експериментальні енергії збудження мішені — це важливо при встановленні параметрів резонансів у перерізах розсіяння, то у підході БКХФ-БСР34 [8] подібне калібрування теоретичних енергій у розрахунках розсіяння не проводилося.

**4.2.4. Розрахунки атомних параметрів зіткнення (АПЗ).** Як зазначалося вище, в роботі Мюррей і Цвєянович [125] з використанням методу надпружного розсіяння для стану  $4^1P_1$  були експериментально визначені псевдостоксові параметри  $P_1^S, P_2^S, P_3^S$  (спрощено  $P_1, P_2, P_3$ ) і параметри  $P_{\text{lin}}^+, L_{\perp}^+, \gamma^+$  та  $P_{\text{tot}}^+$ . Фізичний сенс цих та інших АПЗ можна встановити з роботи [125] та наведених там посилань.

Для отримання чотирьох АПЗ з експерименту по надпружному розсіяню необхідно провести чотири незалежних вимірювання. Три вимірювання здійснюються з лазерним випромінюванням, ортогональним до площини розсіяння, для визначення параметрів  $L_{\perp}^+, P_{\text{lin}}^+$  та  $\gamma^+$ , у той час як четверте вимірювання для визначення  $\rho_{00}$  потрібно робити з лазерним розсіянням у площині розсіяння. В експериментах [125] не було можливості направити пряме лазерне випромінювання в площину розсіяння і тому були визначені тільки параметри  $L_{\perp}^+, P_{\text{lin}}^+$  та  $\gamma^+$ . Щоб визначити ці параметри, в [125] були здійснені експериментальні вимірювання ДП надпружно розсіяних електронів як функції лазерної поляризації, з яких може бути визначений набір псевдостоксових параметрів (див. Андерсен та ін. [123]).

Співвідношення між псевдостоксовими параметрами і «нормальними» параметрами Стокса (а отже і АПЗ) є дуже простими при розрахунках для лазерного збудження із  $S$ -стану в  $P$ -стан, яке не дає вкладу в тонку або

надтонку структуру, які необхідно було би розглядати в процесі оптичної накачки. Співвідношення між цими параметрами має вигляд:

$$\begin{aligned} P_1 &= P_1^S, P_2 = P_2^S, P_3 = P_3^S, P_{\text{lin}}^+ = \sqrt{(P_1^S)^2 + (P_2^S)^2}, \\ \gamma^+ &= \frac{1}{2} \tan^{-1}\left(\frac{P_2^S}{P_1^S}\right), L_{\perp}^+ = -P_3^S, P_{\text{tot}}^+ = \sqrt{(P_1^S)^2 + (P_2^S)^2 + (P_3^S)^2} \end{aligned} \quad (4.1)$$

Порядок отримання теоретичних значень для величин АПЗ наведених, наприклад, у [119], де коротко описані співвідношення між параметрами Стокса  $P_i$  ( $i = 1, 2, 3$ ) і амплітудами розсіяння. Більш розгорнуто методи теоретичних розрахунків параметрів Стокса описані в працях Андерсен та ін. [123], Андерсен та Бартшат [124], Блум [132]. В загальному, отримання цих параметрів здійснюється на основі отриманої раніше в розрахунках розсіяння  $K$ -матриці. Самі ж розрахунки безпосередньо здійснювалися нами за допомогою авторського пакету програм проф. К. Бартшата, створеного на основі згаданих вище співвідношень [123, 124].

### 4.3. Результати розрахунку ІІ збудження Са електронами

**4.3.1. Збудження резонансного переходу  $4s^2 \ ^1S - 4s4p \ ^1P^o$ .** При усьй важливості абсолютної величини ІІ збудження резонансного рівня  $4s4p \ ^1P^o$ , використововуваного для нормування перерізу пружного розсіювання й інших експериментальних перерізів, прямі вимірювання цього перерізу дотепер недоступні. У роботі [121] представлені вимірювання оптичної функції збудження (ФЗ), що є сумою прямого збудження рівня  $4s4p \ ^1P^o$  і вкладу каскаду з розміщених вище рівнів.

На рис. 4.1 показані інтегровані по кутах перерізи для збудження електронним ударом резонансного переходу  $4s^2 \ ^1S - 4s4p \ ^1P^o$  як функції енергії електрона, що налітає. Наші результати є в хорошому, хоча й не чудовому узгодженні з експериментальними перерізами Елерс і Галлахер [121], які

у свій час були трохи відкориговані авторами для врахування поляризаційних ефектів. При енергіях 30–70 еВ представлена нами модель БСР39 стабільно, в межах 15–20%, переоцінює сумарні ІП з урахуванням вкладу каскадів, які головним чином обумовлені збудженням станів з конфігураціями  $4s4d$  та  $4p^2$ . Похибки вимірювання в іншому наборі експериментальних даних, отриманих при інтегруванні диференціальних по куту експериментальних перерізів Мілісавлевич та ін. [122], є суттєво більшими, що не дає можливості детального порівняння теорії з експериментом. Не є дивним, що для цього сильного переходу наші БСР39-передбачення також знаходяться у хорошому (порядку кількох відсотків) узгодженні з  $R$ -матричними результатами з урахуванням 24 станів (PM24) Кавазое та ін. [119]. У той же час дані [119] стабільно перевищують наші результати БКХФ-БСР34 у всьому діапазоні енергій від порогу до їх верхнього значення 25 еВ, і проявляють тенденцію до збільшення розходження з ростом енергії. Отже, можна зробити висновок про трохи краще узгодження наших БКХФ-БСР34-даних з експериментом [121], ніж це досягнуто у роботі [119]. Щодо перерізів, розрахованих у першому борнівському наближенні, то вони є значно більшими за експериментальні дані в області до  $\sim 50$  еВ. Після застосування до цих борнівських перерізів процедури нормування, запропонованої Кім [133], вони значно краще узгоджуються в області низьких енергій як з експериментом, так і нашими розрахунками, рис. 4.1г.

На рис. 4.1а показано порівняння теоретичних та експериментальних ІП резонансного збудження стану  $4^1P^o$  в області енергій до  $\sim 10$  еВ. З рисунка видно абсолютне узгодження спостережуваної на експерименті енергетичної залежності ІП з даними БСР39+каскад при енергіях до  $\sim 9$  еВ. Тобто можна стверджувати, що від порога  $4^1P^o$ -збудження і аж до порогів іонізації зі збудженням  $[\text{Ca II } (^2D_{3/2}) \rightarrow 7.8056, \text{Ca II } (^2D_{5/2}) \rightarrow 7.8131, \text{Ca II } (^2P_{1/2}) \rightarrow 9.2365 \text{ та } \text{Ca II } (^2P_{3/2}) \rightarrow 9.2641]$  (див. [106]) наближення БСР39 найкраще з усіх наявних підходів описує процес резонансного збудження

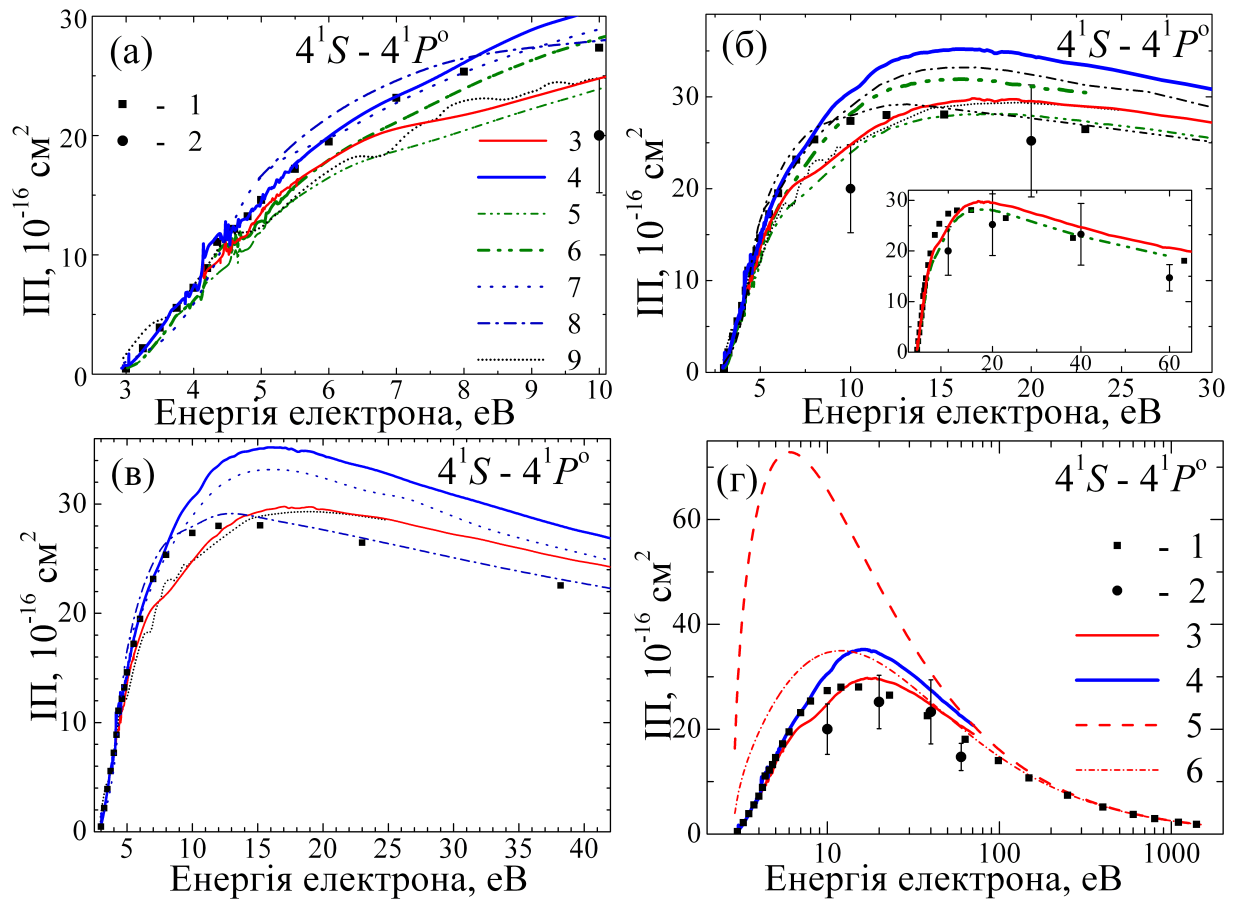


Рис. 4.1: Інтегральні перерізи переходу  $4s^2\ ^1S - 4s4p\ ^1P^o$  в атомі Ca.

а, б, в — порівняння ІП при низьких і середніх енергіях до 60 еВ: 1 — експ. Елерс і Галлахер [121]; 2 — експ. Мілісавлевич та ін. [122]; 3, 4, 5, 6 — наші результати в наближеннях БСР39, БСР39+каскади [5], БКХФ-БСР34, БКХФ-БСР34+каскади [8], відповідно; 7 — СЗ, Фурса і Брей [120]; 8 — ЗСЗ, Фурса і Брей [120]; 9 — РМ24 — Кавазое та ін. [119],  
г — порівняння ІП в діапазоні енергій до 1000 еВ: 1 — експ. Елерс і Галлахер [121]; 2 — експ. Мілісавлевич та ін. [122]; 3, 4 — наші результати в наближеннях БСР39 і БСР39+каскади [5]; 5, 6 — ненормоване і нормоване згідно [133] плоско-хвильові наближення Борна, відповідно.

$4^1P^o$ .

При енергіях вище  $\sim 9$  еВ наближення ЗСЗ, з урахуванням у розкладі сильного зв'язку континууму мішені, дає більш точний прогноз щодо спостережуваної на експерименті [121] поведінки ІП. Ми вже підкреслювали, що всякий раз, коли енергія зіткнення є вищою за поріг іонізації, важливо тим чи іншим способом урахувувати континуум мішені. На рис. 4.2а,б,в це твердження проілюстровано шляхом порівняння теоретичних ІП зі спостережуваним (прямий плюс каскади)  $4^1P$ -перерізом, виміряним Елерс і Галлахер [121]. Ми бачимо типову ситуацію, коли розрахунки у наближенні сильного зв'язку (СЗ) [120], які нехтують континуумом мішені, переоцінюють перерізи, навіть для цього найпотужнішого резонансного переходу. З іншого боку, ЗСЗ-розрахунки [120] дають чудове абсолютне узгодження з експериментом вище  $\sim 9$  еВ. Отже, врахування континуальних станів мішені у розкладі сильного зв'язку є необхідною передумовою для отримання повного узгодження теоретичних ІП зі спостережуваними експериментально. Тим більше це має бути справедливим для слабких та інтеркомбінаційних переходів.

Оскільки загальновизнано, що для випадку збудження резонансного стану  $4s4p^1P^o$  [121] досягнута найвища точність у вимірюванні ІП окремих переходів при розсіянні  $e+Ca$ , є сенс більш детально зупинитися також на питанні точності розрахунків ІП у підході БКХФ-БСР34. На рис. 4.1а,б показано порівняння розрахованих нами перерізів резонансного переходу у підході БКХФ-БСР34 з нашими ж даними БСР39,  $R$ -матричними розрахунками (РМ24) Кавазое та ін. [119], прецизійними обчисленнями ЗСЗ і СЗ — Фурса і Брей [120] та експериментами Елерс та Галлахер [121] і Мілісавлевич та ін. [122]. Наші дані в обох розглянутих підходах наведені як без урахування вкладу каскадів з вищих рівнів, так і з врахуванням таких. Як видно з рис. 4.4а,б, дані БКХФ-БСР34 для збудження резонансного переходу не поступаються за точністю даним, отриманим у наближенні



БСР39, а в деяких областях енергій навіть краще узгоджуються з наявним експериментом. Відрізняючись від підходу БСР способом урахування валентної і кор-валентної кореляцій при розрахунку структури мішені, наближення БКХФ-БСР може розглядатися в якості повноцінного наукового інструмента для розрахунку електрон-атомного розсіяння.

**4.3.2. Збудження метастабільного стану  $4s4p\ ^3P^o$ .** На рис. 4.2 представлені результати досліджень  $4s4p\ ^3P^o$ -збудження атома Са. Зокрема, на рис. 4.2а наведені ІІ збудження електронним ударом забороненого переходу  $4s^2\ ^1S - 4s4p\ ^3P^o$  як функції енергії електрона, що налітає. Не є неочікуваним, що непряме заселення з каскадними переходами є більш важливим для даного стану, ніж для оптично дозволеного переходу  $4s^2\ ^1S - 4s4p\ ^1P^o$ , про який мова йшла вище. Варто відмітити якісне узгодження між нашими БСР39-результатами та даними Юань і Фріче [90] для прямого  $4\ ^3P^o$ -збудження, а також з експериментальними даними Стародуба [134, 135], які включають і каскадні вклади. Однак, як видно з рисунка, має місце дуже велика похибка у визначенні абсолютних значень в експериментальних даних (на рис. 4.2а показано лише кілька типових значень експериментальних помилок). В загальному ж, експериментальна енергетична залежність перерізу  $4\ ^3P^o$ -збудження [134, 135] прийнятно відтворюється теоретичними БСР-розрахунками.

Варто відмітити також, що авторська оцінка [134, 135] відносної важливості каскадного вкладу у переріз переходу  $4s^2\ ^1S - 4s4p\ ^3P^o$  становить всього  $\sim 3\%$ , у той час як наші розрахунки, як видно з рис. 4.2а, дають суттєво більші відносні значення. З рис. 4.2а видно, що сама структура експериментального перерізу з широким піком в області біля 3.5 еВ визначається якраз вкладом каскадів з вище розміщених збуджених рівнів. Наше трактування ролі каскадного вкладу у ФЗ переходу  $4s^2\ ^1S - 4s4p\ ^3P^o$  підтверджується каліброваними (зсувом вправо на 0.68 еВ) даними експе-

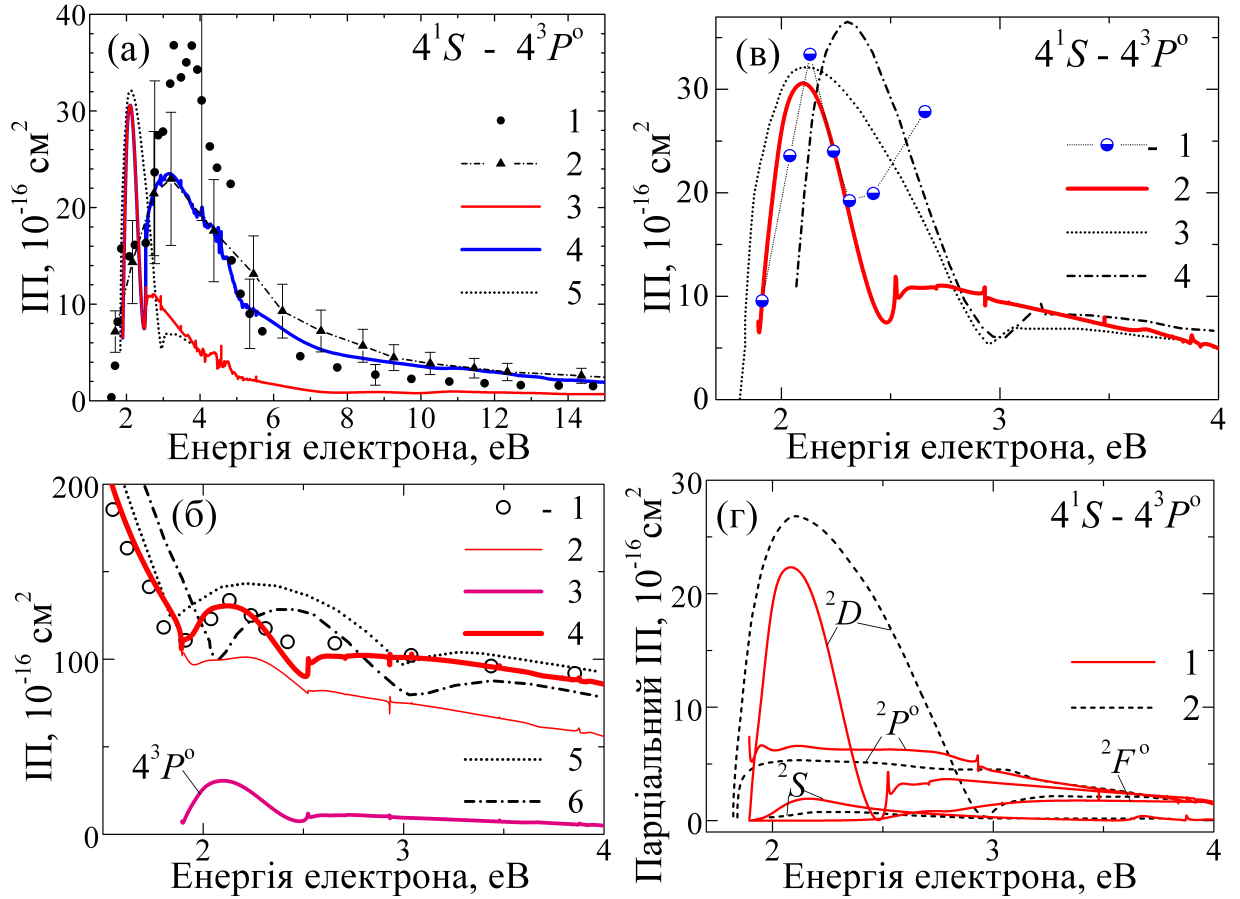


Рис. 4.2: Інтегральні перерізи переходу  $4s^2 1S - 4s4p 3P^o$  в атомі Ca.

а — порівняння ІП при енергіях до 15 еВ: 1 — експ. Стародуб [134,135]; 2 — експ. Добришін та ін. [136]; 3, 4 — наші результати в наближеннях БСР39, БСР39 + каскади, відповідно; 5 — РМ6, Юань і Фріче [90]. Дані [136] відкалібровані нами зі зсувом вліво на 0.68 еВ;

б — вклад ІП збудження стану  $4s4p 3P^o$  у повний ІП розсіяння  $e+\text{Ca}$ : 1 — калібрований згідно [1] експ. Романюк та ін. [82]; 2, 3, 4 — наші БСР39-дані для повного і пружного ІП [1], а також ІП збудження стану  $4s4p 3P^o$  [2], відповідно; 5 — РМ6, Юань і Фріче [90]; 6 — РМ5, Юань і Лін [91];

в — порівняння емпіричного перерізу ( $\sigma_{\text{емп}} = \sigma_{\text{повн\_експ}} - \sigma_{\text{пруж\_БСР39}}$ ) з ІП збудження стану  $4s4p 3P^o$ : 1 —  $\sigma_{\text{емп}}$ ; 2 — наші дані БСР39; 3 — РМ6, Юань і Фріче [90]; 4 — РМ5, Юань і Лін [91];

г — парціальні  $2S$ ,  $2P^o$ ,  $3D$  та  $2F^o$ -перерізи  $4P^o$ -збудження: 1 — БСР39; 2 — РМ6, Юань і Фріче [90].

рименту Добришін та ін. [136], де теж, фактично, замість ФЗ станів  $4^3P_{0,1,2}^o$  вимірювався сумарний вклад цих функцій разом з каскадом з вищих рівнів, насамперед з рівня  $4s3d^3D$ . Майже повний збіг каліброваних експериментальних ФЗ [136] з теоретичними даними БСР39+каскади свідчить про вірність вибраного нами наближення для опису результатів цього вимірювання. Оскільки в експериментах [134, 135] та [136] фактично вимірювався сумарний ІП переходу  $4s^2\ ^1S - 4s4p\ ^3P^o$ , з урахуванням каскадного вкладу, ми не маємо можливості безпосередньо з вимірювання встановити істинне значення ІП прямого збудження стану  $4s4p\ ^3P^o$ . Проте, існує можливість опосередкованої перевірки.

На рис. 4.2в наведені розраховані нами напівемпіричні значення ( $\sigma_{\text{емп}} = \sigma_{\text{повн\_експ}} - \sigma_{\text{пруж\_БСР39}}$ ) ІП прямого збудження станів атома Са, отримані шляхом віднімання пружного БСР39-перерізу ( $\sigma_{\text{пруж\_БСР39}}$ ) від значення каліброваного згідно [1] експериментального повного перерізу [82] ( $\sigma_{\text{повн\_експ}}$ ), рис. 4.2б. Очевидно, що основна похибка при визначенні  $\sigma_{\text{емп}}$  зв'язана з неточностями у визначенні перерізів («вертикальна» шкала), у той час як похибки по енергії («горизонтальна» шкала) після здійснення калібрування даних [82] є менш очікуваними. Зрозуміло також, що в діапазоні енергій між порогами збудження станів  $4^3P^o$  та  $3^3D$  (1.82 та 2.52 еВ, відповідно) переріз  $\sigma_{\text{емп}}$  якраз і буде перерізом прямого збудження стану  $4^3P^o$ . Як видно з рис. 4.2в, структура цього перерізу  $\sigma_{\text{емп}}$  у вказаному діапазоні енергій достатньо точно відтворюється теоретичними БСР39-перерізами переходу  $4s^2\ ^1S - 4s4p\ ^3P^o$ . На рис. 4.2в також представлені  $R$ -матричні ІП прямого збудження  $4^3P^o$ , отримані у наближеннях РМ6, Юань і Фріче [90], та РМ5, Юань і Лін [91]. Для наочної ілюстрації суті отриманого нами  $\sigma_{\text{емп}}$ , на рис. 4.2б наведені: повний і пружний БСР39-перерізи розсіяння  $e+\text{Са}$  [1], а також, для порівняння, — повні перерізи РМ6 [90] та РМ5 [91]. У нижній частині рис. 4.2б для співставлення показано БСР39-переріз прямого збудження стану  $4s4p\ ^3P^o$ . Аналіз рис. 4.2б,в

показує, що наші БСР39-перерізи прямого збудження нижнього метастабільного стану  $4^3P^o$  краще корелюють з експериментом [82], зокрема що стосується положення, висоти і ширини  $^3P^o$ -порогового максимуму, ніж попередні  $R$ -матричні розрахунки [90,91]. Так,  $^3P^o$ -порогові піки в цих РМ6-та РМ5-перерізах, особливо не відрізняючись від даних БСР39 по висоті, у той же час є приблизно в 2 рази ширшими як за відповідну структуру у наших БСР39-перерізах, так і за менший із піків у повному ІІ [82]. Доводиться констатувати, що перерізи [90,91] мають суттєві розбіжності з експериментом [82] щодо структури ІІ у діапазоні енергій  $\sim 1.8 \div 4.0$  еВ і на-вряд чи можуть бути використаними для дослідження тонкої резонансної структури ІІ у цій області. Причина вказаних розбіжностей криється у неточному розрахунку структури мішені. Так у наших БСР39-розрахунках похибка у відносному зміщенні положення рівнів  $4^3P^o$  та  $3^3D$  щодо даних НІСТ [106] складає 0.049 еВ проти  $\sim 0.545$  еВ у [90] та  $\sim 0.382$  еВ у [90]. Одночасно, в [90] і [91] положення рівня  $3^3D$  було завищене в порівнянні з даними НІСТ [106] на  $\sim 0.458$  і  $\sim 0.520$  еВ, відповідно, проти 0.013 еВ у нашому випадку. В результаті, у розрахунках РМ6 та РМ5 збільшилася ширина резонансного піку між порогами  $4^3P^o$ - та  $3^3D$ -збудження на величину вказаних похибок у визначенні відповідних енергій, рис. 4.2б–г. Як буде показано в розд. 5.2, пікова структура, наявна в енергетичних залежностях ІІ розсіяння  $e+Ca$  між порогами збудження станів  $4^3P^o$  та  $3^3D$ , добре проглядається і у відповідних залежностях експериментальних та теоретичних ДП.

Для розуміння парціально-хвильової природи ІІ  $4^3P^o$ -збудження, на рис. 4.2г, представлені парціальні перерізи цього збудження для хвиль  $^2S$ ,  $^2P^o$ ,  $^2D$  та  $^2F^o$  у наближеннях БСР39 та РМ6 [90]. З рисунка видно, що основним джерелом розбіжностей між двома  $R$ -матричними розрахунками є поведінка парціальної  $^2D$ -хвилі, у той час як інші парціальні хвилі досить добре попарно узгоджуються між собою. Як зазначалося в розд. 3.3, поро-

говий пік в ІІ прямого збудження  $4^3P^o$  міг би трактуватися як резонанс форми в  $^2D$ -хвилі, що відповідає квазістаціонарному стану від'ємного іона  $4s4p^2\ ^2D$ , якби його утворенню не перешкоджало відкриття нових каналів розсіяння.

#### 4.4. Результати розрахунку ДП та параметрів Стокса для збудження Са електронами

##### 4.4.1. ДП збудження резонансного переходу $4s^2\ ^1S - 4s4p\ ^1P^o$ .

На рис. 4.3 показані ДП для збудження електронним ударом резонансного переходу  $4s^2\ ^1S - 4s4p\ ^1P^o$  у діапазоні енергій зіткнення від 10 до 60 еВ. Узгодження з експериментальними даними Мілісавлевич та ін. [122] є хорошим, за винятком енергії 40 еВ, при якій наші БСР39-результати, добре співпадаючи з передбаченнями релятивістських спотворених хвиль Чаухан та ін. [116], суттєво відрізняються від експериментальних ДП для кутів розсіяння більших  $30^\circ$ . Ми також спостерігаємо хороше узгодження даних БСР39 з  $R$ -матричними результатами у наближенні 24 станів сильного зв'язку (РМ24) Кавазое та ін. [119] при енергіях 10 та 20 еВ і РСХ-результатами [116] при 60 еВ, відповідно. Для енергій зіткнення 10 та 20 еВ РСХ-результати, як це видно з рис. 4.3, суттєво переоцінюють величину ДП, окрім розсіяння вперед. Порівняння експериментальних та теоретичних ДП для діапазону кутів розсіяння від  $0^\circ$  до  $10^\circ$ , що дають максимальний вклад в інтегральні (по куту) перерізи, представлене у нижній частині рис. 4.3. Для енергій 20 та 40 еВ практично всі розглянуті наближення добре узгоджуються з експериментом [122]. Більш значними є відмінності в значеннях розрахованих ДП для енергій 10 еВ, де розходження виходять за межі експериментальних похибок. Це ще раз підкреслює важливість врахування кореляційних ефектів, які особливо чутливі до вибраного наближення. Нагадаємо, що ДП розсіяння [122], виміряні в двох

діапазонах від  $1^\circ$  до  $10^\circ$  і від  $10^\circ$  до  $150^\circ$ , були екстрапольовані авторами до  $0^\circ$  і  $180^\circ$  для визначення інтегрованого перерізу. Отриманий таким чином інтегрований переріз  $4^1P$  [122] порівняний на рис. 4.1 з інтегральним перерізом Елерс і Галлахер [121], а також з даними БСР39, що обговорювалося в розд. 4.2.1.

Для повноти картини, на рис. Б.3 представлені різні ракурси 3D-поверхні ДП резонансного переходу  $4s^2\ ^1S - 4s4p\ ^1P^o$ , отриманої у наближенні БСР39 з урахуванням парціальних хвиль до  $L = 35$ . З рисунка видно, що до  $\sim 15$  еВ 3D-поверхня ДП є гладкою, а при більших енергіях з'являється незначна збриженість, спричинена урахуванням недостатньої кількості парціальних хвиль. Відмітимо, що при отриманні ДП, представлених на рис. 4.3, для енергій 10 і 20 еВ ми враховували  $L = 50$  парціальних хвиль, а для енергій 40 еВ та 60 еВ  $T$ -матриця була екстрапольована від  $L = 50$  аж до  $L = 150$  та  $L = 200$ , відповідно. З технічних причин врахування такої кількості парціальних хвиль є неможливим при побудові 3D-поверхонь. На рис. Б.3, крім 3D-поверхонь, показано також експериментальні ДП Мілісавлевич та ін. [122] при енергії 10 еВ. На рисунку дуже наочно відтворені особливості структури 3D-поверхні ДП як для їх кутової, так і енергетичної залежностей. Зокрема, на рисунку помітний «дрейф» мінімуму в кутовій залежності ДП: від кутів  $\sim 130^\circ$  у припороговій області до  $\sim 90^\circ$  при енергії  $\sim 10$  еВ та подальше роздвоєння мінімуму при вищих енергіях. Перед цим роздвоєнням «жолобу», на рис. Б.3б видно локальну особливість 3D-поверхні в точці ( $E = 4.60$  еВ;  $\theta = 114.1^\circ$ ), де ДП рівний  $0.583 \times 10^{-18}$  см<sup>2</sup> ср<sup>-1</sup>, й перепад значень ДП у мінімумі і біля «горловини» воронки складає два порядки.

**4.4.2. Переходи з основного стану  $4^1S$  атома Са в стани  $4^3P^o$  та  $n^1,3D$  ( $n = 3, 4, 5$ ).** На сьогоднішній день у літературі наявні лічені приклади розрахунків ДП збудження для переходів, відмінних від резо-

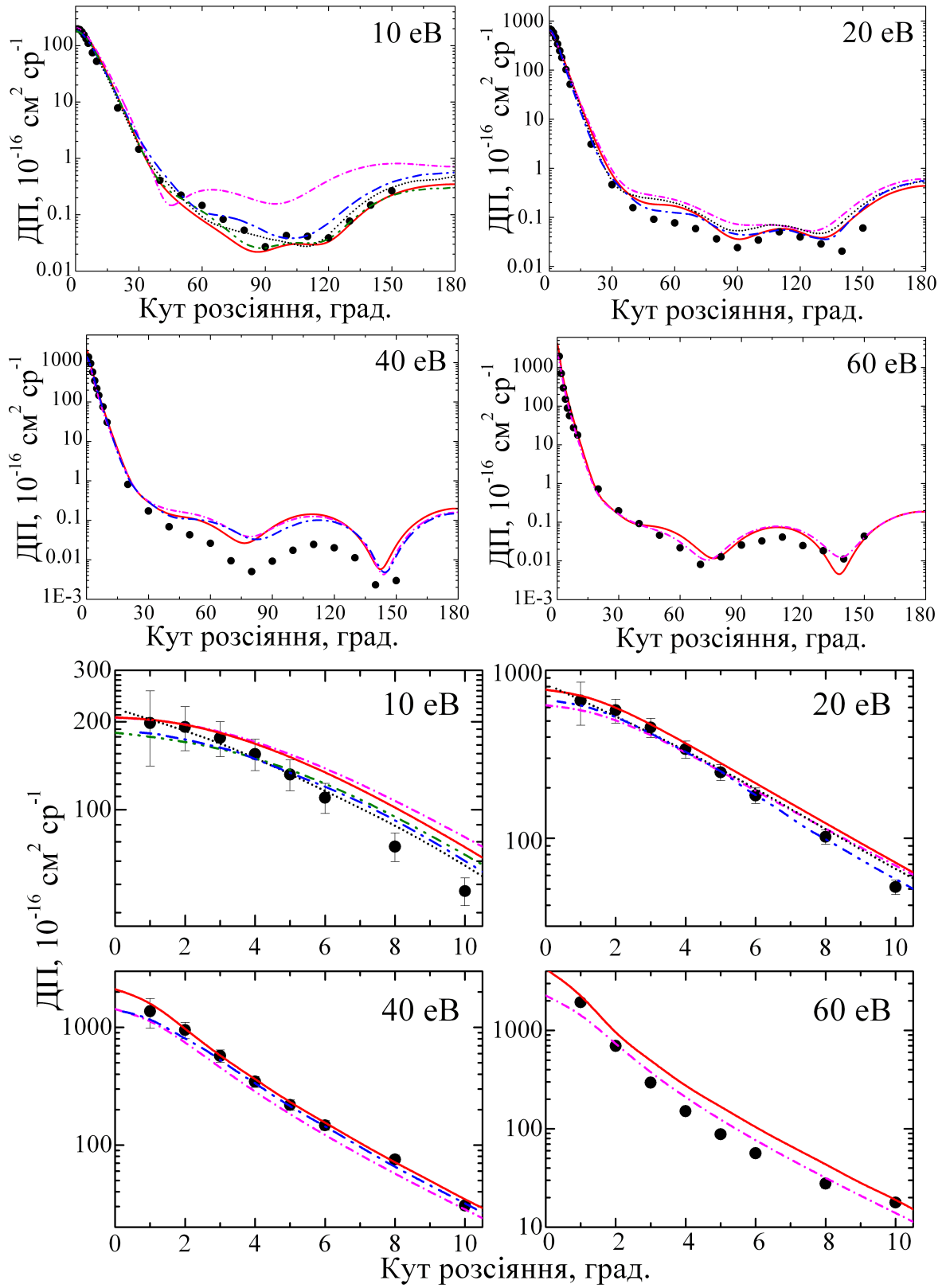


Рис. 4.3: Диференціальні перерізи переходу  $4s^2 \ ^1S - 4s4p \ ^1P^o$  в атомі Ca при енергіях електрона  $E = 10, 20, 40$  та  $60$  eV. Позначення як на рис. 4.1б.

нансного. Деякі з таких ДП збудження представлено на рис. Б.4 та Б.5. Не є неочікуваним, що для цих оптично заборонених переходів значення ДП в загальному набагато менші, ніж для резонансного переходу, і мають місце суттєві відмінності між нашими результатами БСР39 та РСХ-розрахунками Срівастава та ін. [113] і Муктават та ін. [114]. За відсутності експериментальних даних, або еталонних теоретичних досліджень, безпристрасна оцінка точності двох наборів даних є утрудненою. Відмітимо, однак, що пертурбативні моделі, подібні до РСХ, є в загальному більш точними радше для оптично дозволених, ніж для оптично заборонених переходів. Отже, ми маємо підстави стверджувати, що даному випадку наші БСР39-результати є ближчими до реальних значень фізичних величин.

Констатуємо задовільне узгодження наших даних з даними [113] для збудження стану  $4^3P^o$  при енергіях 30 та 40 еВ і серйозні якісні відмінності в кутовій залежності ДП при енергії 60 еВ, рис. Б.4. Для збудження серії  $n^1,3D$  ( $n = 3, 4, 5$ ) наші дані БСР39 у загальному трохи краще узгоджуються з даними Муктават та ін. [114] при енергії 40 еВ, ніж при енергії 20 еВ, а також є більш близькими для синглетних термів, ніж для триплетних, рис. Б.5. Розбіжності в результатах наближень БСР39 та РСХ [114] очікувано зростають з ростом  $n$ .

Підсумовуючи сказане вище про ДП збудження електронами основного стану атома Ca  $4^1S$ , відмітимо значну варіативність поведінки ДП у залежності як від кута розсіяння, так і від енергії зіткнення. Найкраща можливість дослідження подібних залежностей реалізується за допомогою побудови відповідних 3D-поверхонь ДП збудження для певного стану. Тривимірні поверхні ДП дозволяють краще оцінити якість розрахунку перерізів для того чи іншого переходу, виходячи з критеріїв гладкості відповідної 3D-поверхні. Як правило, гладка поверхня ДП є ознакою достатньої кількості врахованих парціальних хвиль, необхідних для збіжності розкладу сильного зв'язку у кожному конкретному випадку. Вона ж свідчить про



відсутність псевдорезонансних структур, порогових викидів, обчислювальних неточностей і т.п. На даний час комплексний аналіз тривимірних поверхонь ДП знаходиться у зародковому стані. Проте інформативний потенціал, закладений у можливостях дослідження 3D-поверхонь, є безсумнівним. На жаль, за браком місця ми позбавлені можливості представити у даній роботі всі наявні 3D-поверхні ДП збудження атома Ca.

**4.4.3. Розрахунок параметрів Стокса для резонансного переходу  $4s^2\ ^1S - 4s4p\ ^1P^o$ .** На рис. 4.4 та 4.5 наведені псевдостоксові параметри  $P_1$ ,  $P_2$  та  $P_3$ , а також параметр  $P_{\text{lin}}$  для збудження електронним ударом резонансного переходу  $4s^2\ ^1S - 4s4p\ ^1P^o$  при енергіях падаючого електрона 10, 20, 25 та 35 еВ. Тут наші БСР39-результати порівнюються з РСХ-розрахунками Чаухан та ін. [116] для всіх чотирьох енергій; порівняння з  $R$ -матричними результатами Кавазое та ін. [119] є можливим для енергій 10, 20 та 25 еВ, а з експериментальними даними Мюррей і Цвеянович [125] — при 20, 25 та 35 еВ. Більш пізні результати Фурса і Брей [120], отримані у прецизійному наближення ЗСЗ з урахуванням 296 станів, також представлені для всіх енергій, але без параметра  $P_{\text{lin}}$ . Експериментальні дані [125] були отримані з використанням техніки надпружнього розсіяння, еквівалентного «реверсу у часі».

Не дивно, що наші результати при нижчих енергіях краще узгоджуються з передбаченнями РМ24, ніж з даними РСХ, з найбільшими відмінностями між результатами, отриманих методами сильного зв'язку і спотворених хвиль, що виникають при найнижчій енергії 10 еВ. Знову ж таки, досвід підказує, що наближення сильного зв'язку є більш надійним методом при низьких енергіях, і це припущення підтверджується кращим узгодженням СЗ-результатів з експериментальними даними при 20 і 25 еВ відповідно. При 35 еВ числові значення результати БСР39 та РСХ дуже добре узгоджуються як між собою, так і з експериментом. Насправді ж,

при цій енергії, РСХ-результати є навіть трохи ближчими до експерименту, ніж передбачення БСР39, як це видно, наприклад, для  $P_2$  в околі  $90^\circ$  та для  $P_3$  поблизу  $60^\circ$ . Варто зазначити, що встановлене нами дуже хороше узгодження нерелятивістських БСР39-результатів з експериментом ставить під деякий сумнів твердження Чаухан та ін. [116], що спостережуване в їх розрахунках покращення результатів розрахунку магнітних підрівнів може бути обумовлене кращим урахуванням релятивістських ефектів. Як показано в ряді інших випадків [137–139], (псевдо)стоксові параметри, здається, не проявляють великої чутливості до релятивістських ефектів у обчислювальній моделі.

Загальне узгодження наших БСР39-даних з більш пізніми ЗСЗ-розрахунками Фурса і Брей [120] псевдостоксових параметрів також є дуже хорошим. Проте в окремих випадках спостерігається помітні відмінності в деталях. Зокрема, це стосується кутів розсіяння, менших за  $\sim 40^\circ$ , при яких вказані параметри в експерименті Мюррей і Цвеянович [125] не вимірювалися. Відмітимо, наприклад, структуру в околі  $\sim 30^\circ$ , спостережувану в енергетичних залежностях (псевдо)стоксових параметрів  $P_2$  та  $P_3$  майже при всіх розглянутих енергіях. Для експериментального вивчення цього діапазону потрібно було би, звичайно, використати установку з магнітною зміною кутів Хассі та ін. [140]. Зупиняючись на  $P_2$ , бачимо, що має місце достатньо неочікуване відхилення ЗСЗ-даних від експерименту при  $90^\circ$  для енергії 35 еВ. Те ж саме спостерігається для параметра  $P_3$  при куті  $70^\circ$  для енергій 25 еВ та 35 еВ. Повертаючись до розгляду  $P_3$  при малих кутах, ми бачимо суттєві відмінності між всіма розглянутими теоріями в околі  $30^\circ$  для всіх енергій. Подібна ситуація з розходженням результатів розрахунків параметрів Стокса різними методами не може вважатися задовільною, тому були би корисні подальші експериментальні і теоретичні дослідження цих величин.

Зазначимо, що у наших БСР39-розрахунках були визначені також ін-

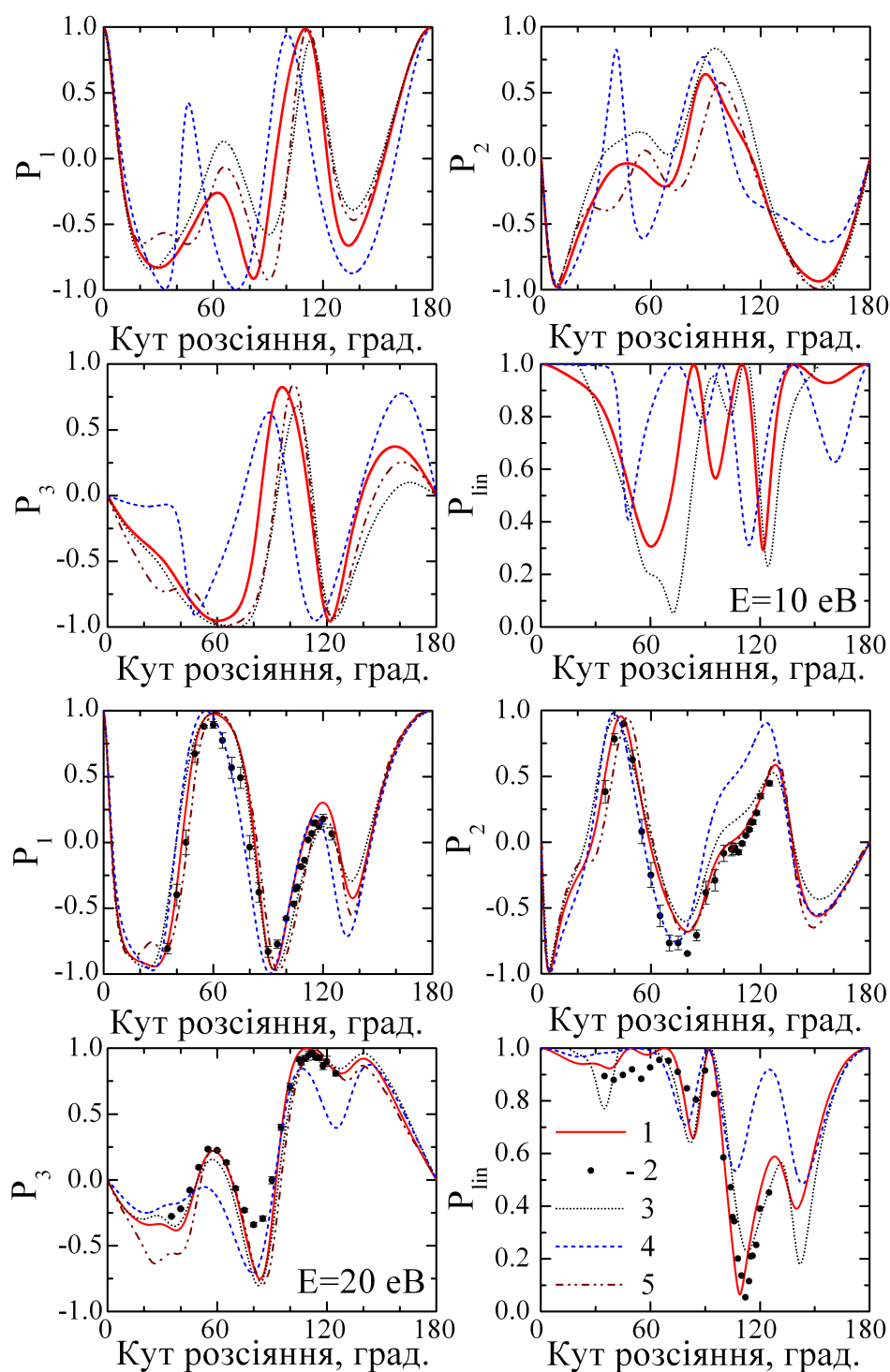


Рис. 4.4: Псевдо-стоксові параметри  $P_1$ ,  $P_2$  і  $P_3$  та параметр  $P_{lin}$  для збудження стану  $4^1P^o$  кальцію при 10 та 20 еВ:

1 — дані БСР39; 2 — експеримент Мюррей і Цвєянович [125]; 3 — РМ24, Кавазое та ін. [119]; 4 — РСХ, Чаухан та ін. [116]; 5 — ЗСЗ, Фурса і Брей [120].

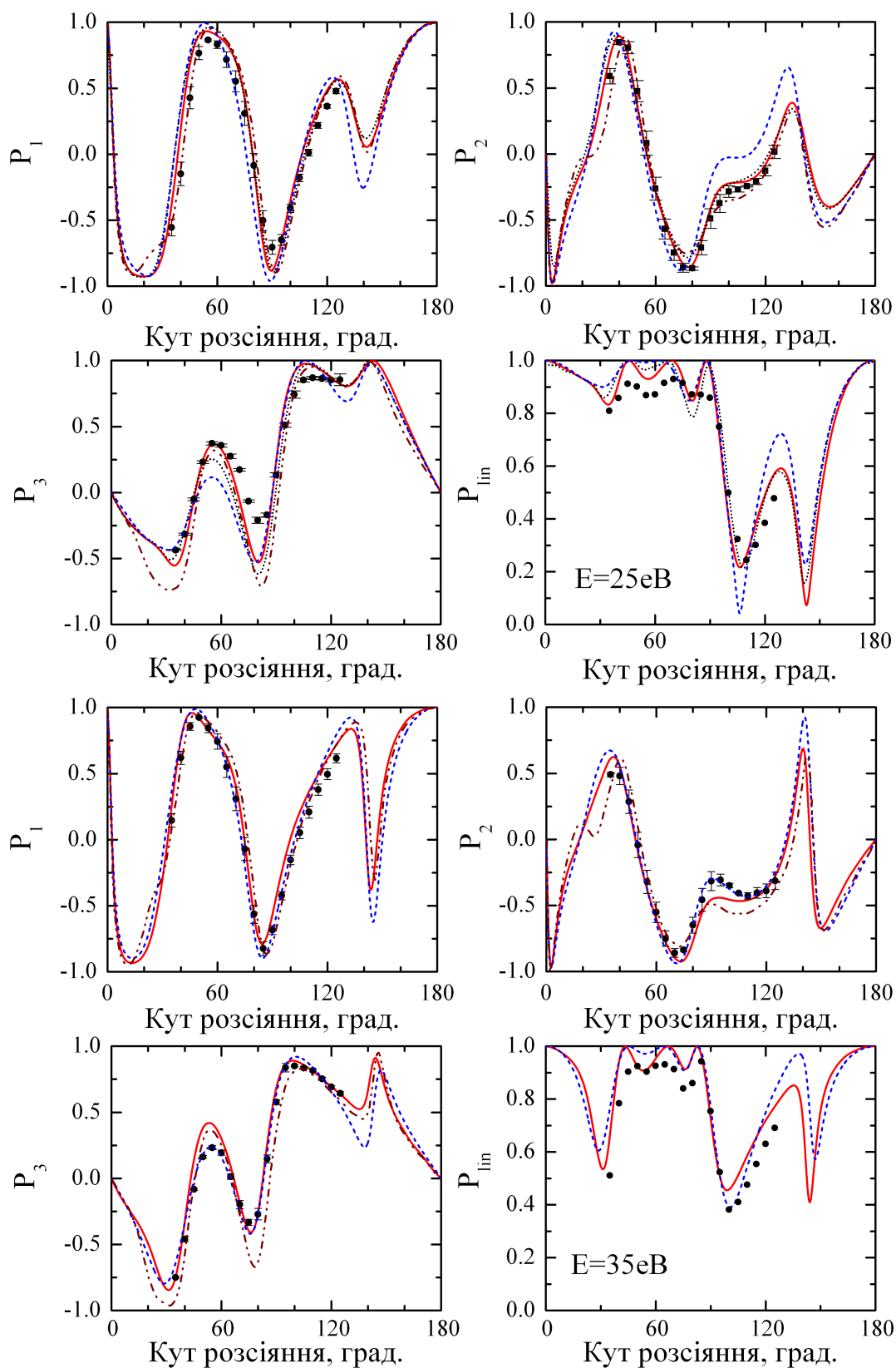


Рис. 4.5: Псевдо-стоксові параметри  $P_1$ ,  $P_2$  і  $P_3$  та параметр  $P_{lin}$  для збудження стану  $4^1P^o$  кальцію при 25 та 35 еВ. Позначення як на рис. 4.4.

ші параметри атомних зіткнень, які вимірювалися на експерименті [125], а саме величини  $L_{\perp}^{+}$ ,  $\gamma^{+}$  та  $P_{\text{tot}}^{+}$  для стану  $4^1P_1$ , значення яких також знаходяться в хорошому узгодженні з даними [125]. Оскільки вони зв'язані простими співвідношеннями [119] з відображеними на рис. 4.4 і 4.5 параметрами  $P_1 = P_1^S$ ,  $P_2 = P_2^S$  та  $P_3 = P_3^S$ , то у даній роботі їхні кутові залежності не наводяться.

#### 4.5. Обговорення результатів розрахунку низькоенергетичного збудження атома Са електронним ударом

Ми представили нові теоретичні результати для інтегрованих по куту і диференціальних по куту перерізів, а також (псевдо-) стоксових параметрів для збудження електронним ударом чотирьох найнижчих збуджених станів в атомі кальцію. Попри значне поліпшення в даній роботі опису мішені і врахуванню більшого числа зв'язаних станів, у порівнянні з попереднім  $R$ -матричним розрахунком 24 станів Кавазое та ін. [119], результати двох  $R$ -матричних підходів, у загальному, дуже добре узгоджуються і, отже, забезпечують незалежну перевірку отриманих результатів. Для оптично дозволеного переходу  $4s^2\ ^1S - 4s4p\ ^1P^o$ , наші результати, як правило, добре узгоджуються також з повністю релятивістськими результатами спотворених хвиль Чаухан та ін. [116]. Значні розбіжності спостерігаються тільки для (псевдо-) стоксових параметрів при 10 еВ і, як і очікувалося, узгодження між наближеннями БСР і РСХ поліпшується зі збільшенням енергії зіткнення. Проте, для оптично заборонених переходів розбіжності є значними. Хоча ми вважаємо, що для обговорюваних випадків наші БСР-результати є кращими, була би дуже бажана експериментальна перевірка зроблених передбачень.

## Висновки до розділу 4

1. Проаналізовано інтегральні перерізи збудження резонансного переходу  $4s^2\ ^1S - 4s4p\ ^1P^o$  в різних діапазонах низьких енергій. Отримано добре узгодження результатів розрахунку в наближеннях БСР39 і БКХФ-БСР34 з результатами експериментальних та інших теоретичних досліджень. Показано, що від порога  $4\ ^1P^o$ -збудження і аж до порогів іонізації зі збудженням (до  $\sim 9$  еВ) наближення БСР39 найкраще з усіх наявних підходів описує процес резонансного збудження  $4\ ^1P^o$ .

2. Представлені результати досліджень  $4s4p\ ^3P^o$ -збудження атома Са. Отримано добре якісне узгодження ІП з експериментальними та іншими теоретичними даними, в той же час показано, що оцінка впливу непрямого заселення з каскадними переходами, яка дана в [134, 135] є набагато нижчою, ніж отримана в наших розрахунках. Також порівняння БСР39-перерізів прямого збудження стану  $4s4p\ ^3P^o$  і парціальних перерізів цього збудження з попередніми R-матричними розрахунками [90, 91] показує кращу кореляцію наших результатів з експериментом [82], що свідчить про більш точний розрахунок структури мішені.

3. Проаналізовано ДП збудження резонансного переходу  $4s^2\ ^1S - 4s4p\ ^1P^o$  у діпазоні енергій зіткнення від 10 до 60 еВ у порівнянні з наявними теоретичними і експериментальними даними. Показано важливість врахування більшої кількості парціальних хвиль при збільшенні енергії для уникнення нефізичної структури в ДП розсіяння. Відмічено задовільне узгодження ДП для переходів з основного стану  $4\ ^1S$  атома Са в стани  $4\ ^3P^o$  та  $n\ ^{1,3}D$  ( $n = 3, 4, 5$ ) з більш ранніми теоретичними даними [113, 114], але наявність деяких якісних розбіжностей підкреслює необхідність проведення експериментів для вказаних переходів.

## РОЗДІЛ 5

# КОМПЛЕКСНИЙ ХАРАКТЕР БСР-РОЗРАХУНКІВ ДИФЕРЕНЦІАЛЬНИХ ТА ІНТЕГРАЛЬНИХ ХАРАКТЕРИСТИК ЗІТКНЕННЯ $E+\text{Ca}$ ТА ЇХ ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНЕ ПІДГРУНТЯ

### 5.1. Вступні зауваження до розділу 5

В працях [1, 2], які лягли в основу розділів 3 і 4 даного дисертаційного дослідження, головне практичне завдання полягало в апробації початкової версії новітнього на той час методу  $R$ -матриці з  $B$ -сплайнами. Розрахунок розсіяння  $e+\text{Ca}$  та фоторозщеплення  $h\nu+\text{Ca}^-$  відкривали для цього широкі можливості і, дійсно, після виходу вказаних праць метод БСР отримав загальне визнання. Розрахунок процесів зіткнення атомів  $\text{Ca}$  з низькоенергетичними електронами, здійснений нами, проходив практично одночасно із завершенням роботи одного з наших співавторів О. Зацарінного над програмним кодом BSR [15] і в значній мірі визначався потребами тестування цього коду. Після отримання результатів перших БСР-розрахунків стало ясно, що метод  $R$ -матриці з  $B$ -сплайнами, поряд з методом збіжного сильного зв'язку [141, 142], може позиціонуватися як найбільш ефективний і прецизійний метод дослідження низькоенергетичного електрон-атомного розсіяння. Оскільки автори наближення ЗСЗ [141, 142] з самого початку запропонували метод ЗСЗ в якості універсального засобу для здійснення розрахунку «повного процесу розсіяння», то аналогічне завдання тут же з необхідністю постало і стосовно альтернативного до наближення ЗСЗ методу БСР. Нагадаємо, що повний розрахунок процесу зіткнення передбачає можливість отримання в одному-єдиному обчисленні деякої ключової

структури («матриці розсіяння»), яка б давала можливість подальшого отримання всіх без винятку інтегральних і диференціальних характеристик розсіяння.

Наше дослідження додаткових (до вже наведених вище) характеристик розсіяння  $e+\text{Ca}$ , здійснене в даному розділі роботи, якраз і повинно підтвердити небезпідставність «претензій» методу БСР як інструменту для реалізації розрахунку «повного процесу розсіяння».

Насамперед, нагадаємо, що в розділах 3 і 4 були наведені численні дані щодо порівняння результатів наших БСР-розрахунків процесів  $e+\text{Ca}$  та  $h\nu+\text{Ca}^+$  з наявним експериментом і розрахунками в інших теоретичних наближеннях. Проте «повнота» розгляду процесу зіткнення електронів з атомом  $\text{Ca}$  вимагає, щоб БСР-результати були порівняні з усіма без винятку експериментальними даними для процесів  $e+\text{Ca}$  і результатами інших розрахунків на предмет підтвердження вказаної повноти.

Роз'яснення, уточнення та БСР-інтепретації вимагають, зокрема, наступні експерименти: Казаков і Христофоров [143] з вимірювання ДП пружного розсіяння  $e+\text{Ca}$  на кут  $90^\circ$ ; Мілісавлевич та ін. [122] з вимірювання ДП пружного розсіяння в діапазоні кутів  $0^\circ\text{--}180^\circ$ ; Романюк та ін. [82] з вимірювання інтегро-диференціальної функції  $S(E)$  при енергіях до  $\sim 2.8$  еВ; Джонстон та ін. [84] з вимірювання похідної струму електронів, пропущених через пари  $\text{Ca}$ ; Гарга та ін. [144] з вимірювання ІП розсіяння серії високорозміщених станів атома  $\text{Ca}$ ; Шафраньош та ін. [128] з вимірювання ІП збудження семи розміщених вище станів атома  $\text{Ca}$  з метастабільного стану  $4^3P^o$ ; Кренделл та ін. [145] з вимірювання ефективних сил зіткнень для резонансного переходу  $4^1S - 4^1P^o$  у розсіянні  $e+\text{Ca}$ . Порівняння наших БСР-даних було би також бажаним з рядом теоретичних наближень, насамперед з релятивістським  $R$ -матричним (RPM22) дослідженням Самсон і Беррінгтон [112], що фактично стало першим систематичним розрахунком енергетичних залежностей ІП розсіяння  $e+\text{Ca}$  для всіх переходів між



22 нижніми станами атома Ca.

В контексті комплексності підходу, окремого розгляду також потребують питання: а) структура 3D-перерізів ДП для пружного розсіювання та збудження різних переходів; б) резонансна структури ІП розсіювання; в) поведінка ІП та ДП розсіювання в ультра-низькоенергетичній області; г) серійні закономірності поведінки ІП та ДП розсіювання; д) ефективні сили зіткнень для розсіювання  $e+Ca$  і т.п. Розгляду всіх цих завдань і буде присвячений даний розділ роботи.

## 5.2. Структура диференціальних перерізів розсіювання $e+Ca$

**5.2.1. Пружне розсіювання.** Як зазначалося вище, в розд. 3.1, у літературі наявні лічені експериментальні результати [82, 85, 143, 146] з вимірювання характеристик пружного розсіювання електронів низьких енергій на атомі кальцію. Експериментальне вивчення ІП розсіювання  $e+Ca$ , здійснене Романюк та ін. [82] в області енергій від 0.1 до 10 eV, розглянуто нами в розд. 3.3. Нижче ми аналізуємо вимірювання ДП пружного розсіювання електронів на атомі Ca, представлені у працях [85, 143, 146], порівнюючи їхні дані з нашими розрахунками [1, 2, 5, 7–9] та іншими теоретичними обчисленнями, зокрема, представленими в працях [113, 117, 118].

**5.2.1.1. Інтегровані у вузьких смугах кутів ДП пружного розсіювання  $e+Ca$ : функція  $S(E)$ .** На рис. 5.1а показано порівняння розрахованих нами за формулами (3.4)–(3.5) значень функції  $S(E)$  з експериментом [85] та теоретичними розрахунками [86] в області енергій до 3 eV. Експериментальні значення функції  $S(E)$  [85] були нормовані нами на відповідні БСР39-значення  $S(E)$  до початку непрямого процесу при  $E=1.8$  eV. З рис. 5.1а видно, що як за абсолютною величиною, так і щодо положення піків/провалів, експериментальна та теоретичні криві досить добре корелюють між собою. Розрахунки  $S(E)$  були здійснені нами також для ряду

інших значень  $\theta_1(k_1)$  та  $\theta_2(k_2)$  з (3.5), зокрема, при  $k_1 = 1.260$ ,  $k_2 = 1.274$  (рис. 5.1, штрихована лінія: БСР39-значення  $S(E)$  при вказаних  $k_1$  та  $k_2$  помножені на фактор 4).

Як видно з рис. 5.1а, енергетичні залежності  $S(E)$ , отримані в розрахунках БСР39 при різних наборах значень параметрів  $\theta_j(k_j)$ , ( $j = 1, 2$ ), значно відрізняються. На рис. 5.1б відображено дві енергетичні залежності параметричних функцій  $\theta_j(k_j)$ , ( $j = 1, 2$ ), що утворюють дві різні області (гіпоциклоїдні смуги) енергій-кутів розсіювання, у яких (смугах) розраховувалися величини  $S(E)$  згідно (3.4)–(3.5) при різних значеннях коефіцієнтів  $k_1$  та  $k_2$ . Для наочності, на рис. 5.1в представлено фрагмент 3D-поверхні ДП пружного розсіювання; на ній знаками «□» відмічено обидві смуги енергій-кутів, на яких розраховувалася функція  $S(E)$  (при  $\theta_1(k_1 = 0.486)$ ,  $\theta_2(k_2 = 0.508)$  та  $\theta_1(k_1 = 1.260)$ ,  $\theta_2(k_2 = 1.274)$ ). Із рис. 5.1а. видно, що функція  $S(E)$  має істотно відмінний характер на кожній із вказаних смуг енергій-кутів, рис. 5.1б, і її вигляд визначається характером 3D-поверхні ДП, рис. 5.1в.

З обговорення також слідує, що функція  $S(E)$  аж ніяк не співпадає з ІП пружного розсіювання, як це інтерпретувалося у праці Юань [102]. Тому порівняння функції  $S(E)$  з ІП пружного чи повного розсіювання має відбуватися з відповідними застереженнями. На рис. 5.1 нами фактично проілюстрована ідея експерименту, який би підтвердив принципову відмінність функції  $S(E)$  від кривих енергетичної залежності ІП розсіювання.

**5.2.1.2. Структура 3D-поверхні ДП пружного розсіювання електронів на атомі Са в основному стані  $4s^2 \ ^1S$ .** На рис. 5.2а розраховані нами БСР39-перерізи порівнюються з експериментальними ДП пружного розсіювання на  $90^\circ$  Казаков і Христофоров [143] у припороговій області енергій до 7 еВ. Дуже добре узгодження наших даних з експериментом [143], нормованим на БСР39-перерізи при 1.8 еВ, спостерігається в діапазоні енергій 1.3–2.8 еВ. При менших енергіях, як зазначалося в [143],

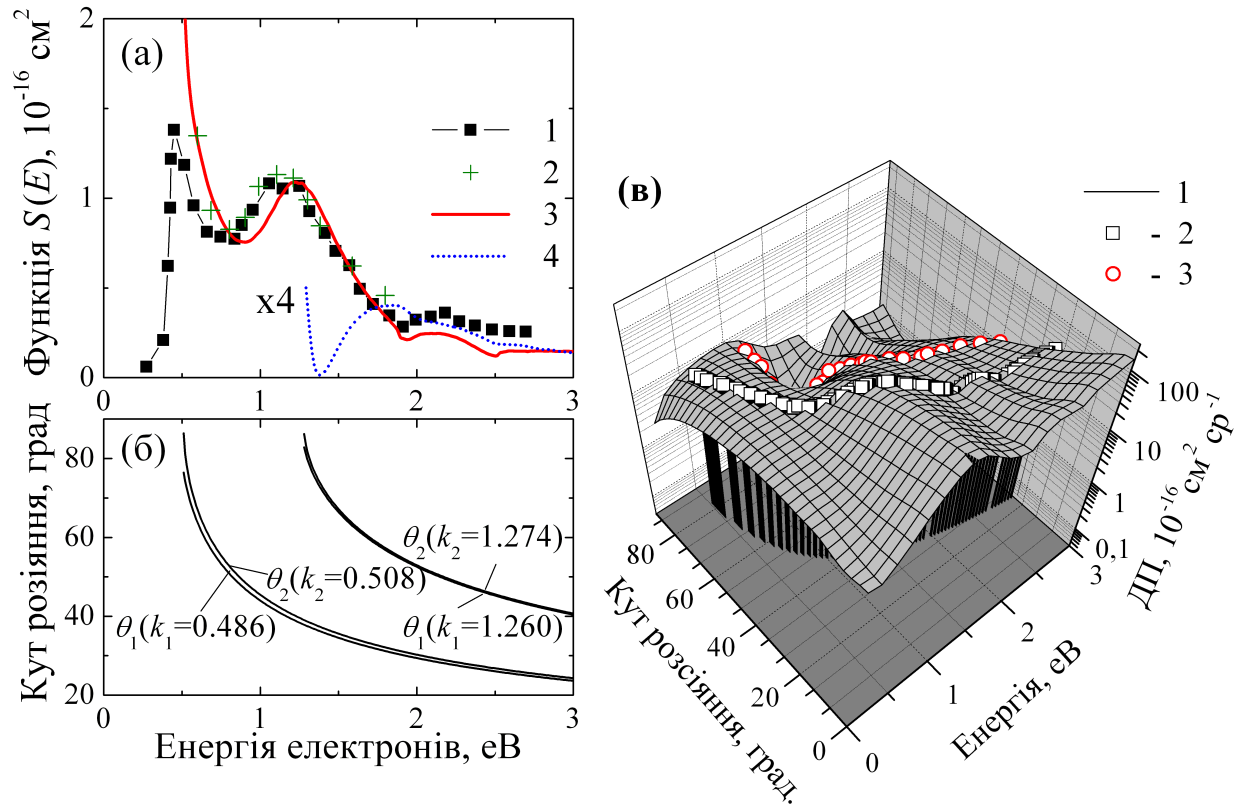


Рис. 5.1: Функції  $S(E)$ ,  $\theta_j(k_i)$ , ( $j, i = 1, 2$ ), та 3D-поверхня ДП пружного розсіювання  $e+\text{Ca}$ :

(а) Частково інтегровані ДП пружного розсіювання, функція  $S(E)$ : 1 — експ. Романюк та ін. [85]; 2 — ОП. Келемен та ін. [86]; 3 — наші дані БСР39 (при  $\theta_1(k_1=0.486)$ ,  $\theta_2(k_2=0.508)$ , згідно [85]); 4 — БСР39 (при  $\theta_1(k_1=1.260)$ ,  $\theta_2(k_2=1.274)$ , наш модельний БСР39-розрахунок;

(б) залежність кутів  $\theta_1$  та  $\theta_2$  від енергії при різних значеннях коефіцієнтів  $k_1$  та  $k_2$  з (3.2);

(в) фрагмент 3D-поверхні ДП пружного розсіювання електронів атомом Ca, БСР39: 1 — 3D-поверхня ДП; 2 — ДП на смузі енергій-кутів [85], тобто при  $\theta_1(k_1=0.486)$ ,  $\theta_2(k_2=0.508)$ ; 3 — ДП на модельній смузі енергій-кутів, тобто при  $\theta_1(k_1=1.260)$ ,  $\theta_2(k_2=1.274)$ . Ракурс зі сторони малих кутів. Показано також проекцію кривої 2 на площину енергій-кутів (порівн. з 5.16).

зростає ширина апаратної функції, в результаті чого припороговий мінімум, виявлений нами при  $\sim 0.01$  еВ, зміщується на експерименті вправо на  $\sim 0.4$  еВ. При вищих енергіях має місце зростання невизначеності експерименту [143], за рахунок появи нових каналів розсіювання і, відповідно, завищення експериментального ДП над розрахованим нами.

На рис. 5.26 наведена тривимірна поверхня кутової і енергетичної залежностей ДП пружного розсіювання  $e+Ca$  для енергій до 4 еВ. У діапазоні енергій 1.2–3 еВ дуже добре видно характерні поперечні (щодо осі енергій) складки на поверхні ДП, які при цих же енергіях спостерігалися й на експерименті [143], рис. 5.1а, у вигляді хвилеподібної структури. На рис. 5.26 також показана — у вигляді тонкої смуги на поверхні ДП — енергетична залежність наших БСР39-перерізів при куті розсіювання  $90^\circ$ . Незначна візуально спостережувана відмінність цієї смуги від вигляду БСР39-залежності ДП на рис. 5.2а зумовлена логарифмічним масштабом осі ДП на рис. 5.2б. На 3D-поверхні ДП видно також локалізовані воронкоподібні структури, обумовлені, як буде показано нижче, відкриттям нових каналів розсіювання.

Для порівняння даних БСР39 з даними розрахунку ДП пружного розсіювання Келемен та ін. [86] в області енергій до 1.8 еВ, на рис. 5.2в,г представлені дві 3D-поверхні ДП для цих енергій (поверхня на рис. 5.2в змодельована нами на основі даних табл. 8 [86]). Відзначимо достатньо хорошу загальну подібність двох згаданих 3D-поверхонь в їх найбільш загальних параметрах: величині ДП, наявності поздовжніх впадин-жолобів, підвищень і перегинів. Проте БСР39-поверхня більш структурована, на ній, крім згаданих елементів, помітні також три чітко виражені локальні мінімуми-воронки, т.з. «особливі точки» (позначені номерами 1, 2, 3 в порядку зростання енергій). Ясно, що мова йде про достатньо тонкі ефекти, отримані за рахунок використання більш прецизійного наближення БСР39. Енергетичні залежності ДП при куті розсіювання  $90^\circ$  також відтворені на обох поверхнях значками «□» у вигляді поздовжніх смуг.

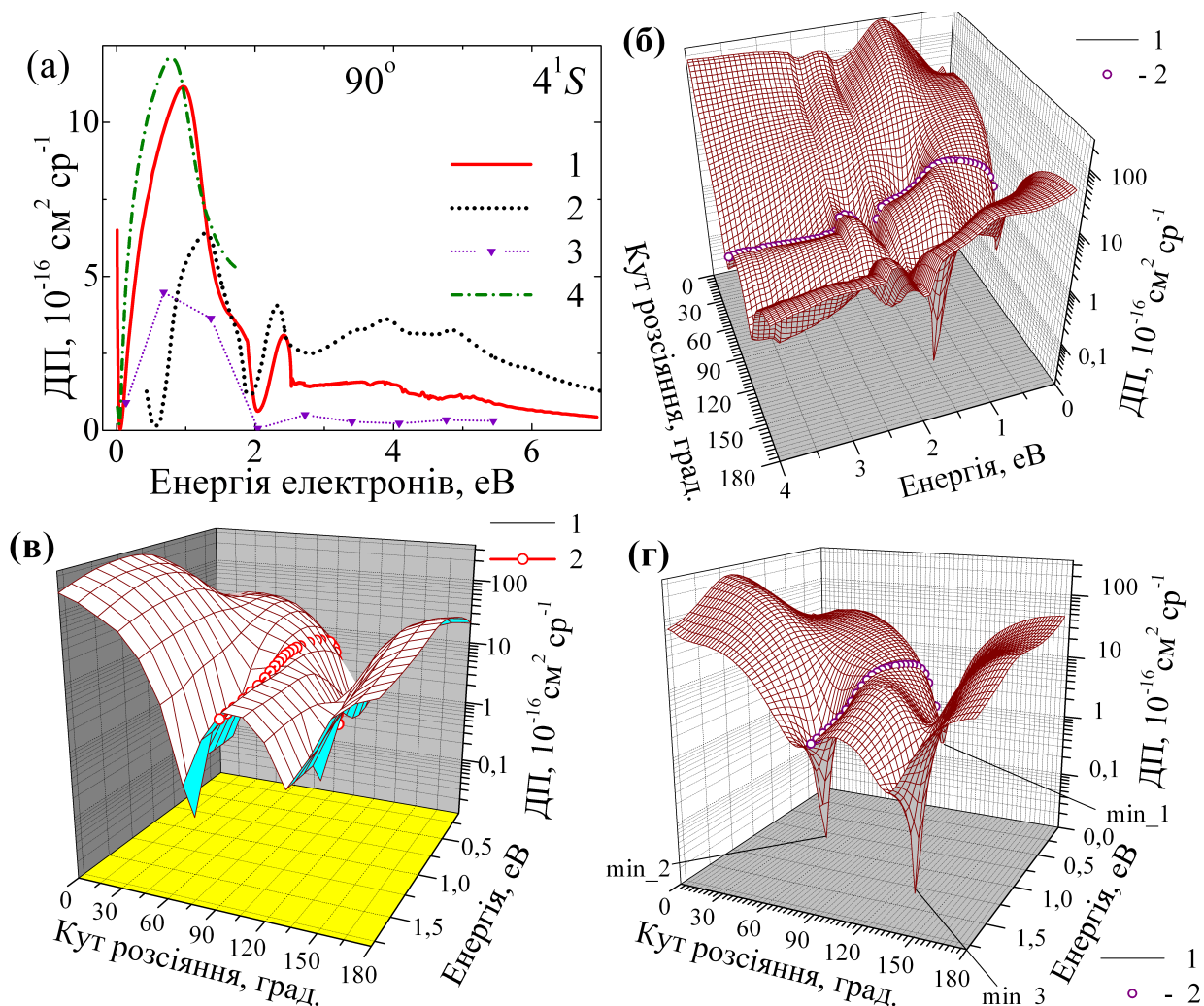


Рис. 5.2: Диференціальні перерізи пружного розсіювання  $e+\text{Ca}$ :

(а) енергетична залежність ДП пружного розсіювання на кут  $90^\circ$ : 1 — наш розрахунок БСР39; 2 — експ. Казаков і Христофоров [143]; 3 — СЗ2, Фабрикант [83]; 4 — ОП, Келемен та ін. [86];

(б) БСР39, фрагмент 3D-поверхні ДП пружного розсіювання для енергій до 4 еВ: 1 — 3D-поверхня; 2 — ДП пружного розсіювання на кут  $90^\circ$ ;

(в) реконструкція 3D-поверхні ДП пружного розсіювання на основі даних [86], до 1.8 еВ: 1 — 3D-поверхня; 2 — ДП пружного розсіювання на кут  $90^\circ$

(г) БСР39, фрагмент 3D-поверхні ДП пружного розсіювання для енергій до 1.8 еВ: 1 — 3D-поверхня; 2 — ДП пружного розсіювання на кут  $90^\circ$ ; показано також точки локальних мінімумів min\_1, min\_2 та min\_3.

Для прояснення структури 3D-поверхні ДП, на рис. 5.3а, в, г показано інші ракурси розрахованої нами в БСР39-наближенні 3D-поверхні ДП пружного розсіяння для енергій до 25 еВ: (а) — вигляд зверху, зі сторони низьких енергій; (в) — 3D-поверхня ДП з інверсованою віссю перерізів; (г) — вигляд зверху, зі сторони високих енергій. На рис. 5.3а точки розміщення локальних мінімумів — воронкоподібних впадин — позначені кружками, пронумеровані і з'єднані між собою лініями за місцем проходження поздовжніх з'єднувальних впадин-жолобів на 3D-поверхні ДП. Проекція схеми розміщення локальних мінімумів і жолобів на площину енергій-кутів показана на рис. 5.3б. На «перевернутій» поверхні ДП, рис. 5.3в, локальні мінімуми-воронки мають вигляд конусоподібних «піків», а впадини-жолоби — вигляд поздовжніх «хребтів».

Параметри особливостей на поверхні ДП пружного розсіяння електронів на Са в основному стані наведені в табл. Б.5: енергія, кут розсіяння та значення ДП у нижній точці воронки ( $E_{\min}$ ,  $\theta_{\min}$ ,  $\sigma_{\min}$ , відповідно), а також оціночне значення ДП біля «горловини» воронки ( $\sigma_{\max}$ ). Особливу увагу привертає точка локального мінімуму за номером 6 ( $E_{\min\_6}=6.12$  еВ;  $\theta_{\min\_6} = 57.8^\circ$ ), поблизу якої відбувається галуження жолобу, що проходить через точки мінімумів 2, 4, 6 та 8 на поверхні ДП, на два рукави (нагадаємо, що енергія іонізації атома Са рівна  $E_{\text{ion},4s}=6.113$  еВ, а кут  $\theta$  близький до 1 радіана —  $57.3^\circ$ ). Як видно з рис. 5.3, табл. Б.1 та Б.5, воронкоподібні особливості на 3D-поверхні ДП пружного розсіяння  $e+\text{Ca}$  з'являються здебільшого безпосередньо перед/після відкриття нового каналу реакції (захоплення електрона, з утворенням квазістаціонарних станів іона  $\text{Ca}^-$ , — збудження — іонізація). Вони також з'являються при зміні напрямку проходження поздовжніх (скісних) впадин-жолобів, що може свідчити про зміну поляризації мішені падаючим електроном. Абсолютний мінімум значень ДП пружного розсіяння досягається в точці з номером 7, табл. Б.5, рис. 5.3, розміщеної трохи вище порогів іонізації Са II  $4p\ ^2P_{1/2}$

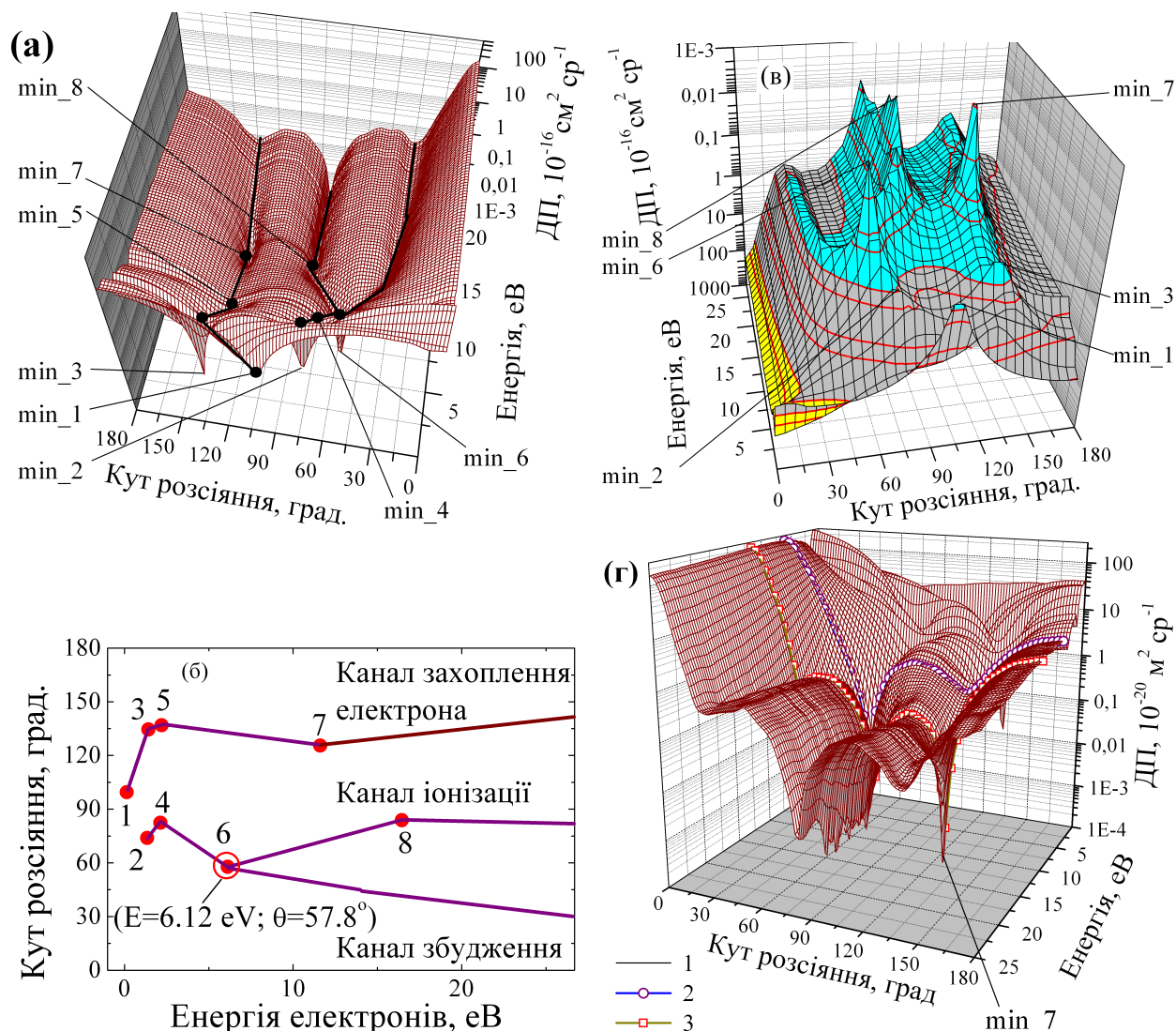


Рис. 5.3: Структура 3D-поверхні ДП пружного розсіяння електронів на Ca:  
 (а) — локальні мінімуми (●) і поздовжні впадини-жолоби (—) на 3D-поверхні ДП. Нумерація мінімумів — за зростанням енергії;  
 (б) — проекція схеми розміщення мінімумів (●) і жолобів (—) у вікні (а) на площину енергій-кутів;  
 (в) — 3D-поверхня ДП з інверсованою віссю перерізів — зображення у вікні (а) повернуте на 180° по осі енергій. «Геодезичне» розфарбування поверхні підкреслює «еквіпотенціальні» ДП;  
 (г) — вигляд 3D-поверхні ДП зі сторони високих енергій: 1 — 3D-поверхня; 2, 3 — кутова залежність ДП при 6.12 та 11.6 еВ, відповідно.



та Ca II  $4p\ ^2P_{3/2}$  ( $E_{\text{іон},4p} = 9.2315$  та  $9.2641$  eV [106]). Як не дивно, мінімум з номером 7 знаходиться в гілці 3D-поверхні ДП, зв'язаній із захопленням електрона. Наразі у нас немає задовільної інтерпретації цього факту. За логікою речей, при вказаній енергії повинно було би ефективно відбуватися утворення збудженого стану від'ємного іона  $\text{Ca}^-$  з тривалим часом життя.

На рис. Б.6 для ілюстрації зв'язку особливостей на 3D-поверхні ДП пружного розсіювання з відкриттям нового каналу розсіювання — збудження (стан  $4^3P^o$ , поріг  $1.892$  eV), наведені кутові залежності ДП при фіксованих значеннях енергії в області до  $\sim 3$  eV. З графіків у лівій частині рис. Б.6а видно, як змінюється характер залежності профілю ДП: від структури з одним «стійким» мінімумом ( $E=0.136$  eV,  $\theta \sim 100^\circ$ ) до структури з двома мінімумами ( $E=3.01$  eV, при кутах  $\theta \sim 82^\circ$  та  $\theta \sim 135^\circ$ ), — через послідовність проміжних резонансно-подібних структур при енергіях в околі  $\sim 1.4$  eV та  $\sim 2.2$  eV, відтворених на графіках правої сторони рис. Б.6а. Тобто поріг збудження метастабільного стану  $4^3P^o$  розміщений якраз поміж особливостями 3D-поверхні з номерами 2, 3 (енергія  $\sim 1.35\text{--}1.40$  eV) та 4, 5 (енергія  $\sim 2.13\text{--}2.20$  eV), табл. Б.5.

Щоб скласти уявлення про важливість кутових розподілів ДП при різних енергіях, поряд з інтегральними по куту перерізами розсіювання, ми розраховували також інтегральні перерізи, отримані інтегруванням ДП пружного розсіювання у певному енергетичному діапазоні. На рис. Б.6в представлена кутова залежність ДП пружного розсіювання, інтегрованих по енергії у діапазоні енергій  $0.0026\text{--}83$  eV. Як видно з порівняння рис. Б.6а,б та Б.6в, профіль кутової залежності інтегрованого по енергії перерізу ближче всього до профілю кутової залежності ДП біля припорогового максимуму в ІП, тобто при  $\sim 1$  eV. Розширення діапазону інтегрування до  $\sim 20$  eV практично не вплинуло на профіль вказаної залежності.

При всій наочності представлення результатів розрахунків ДП у вигляді 3D-поверхні, пряме порівняння ДП, отриманих при різноманітних енергі-



ях/кутах різними авторами, у такому випадку поки що неможливе. Тому на рис. Б.7а наведені набори кутових залежностей ДП пружного розсіяння електронів на Са при фіксованих значеннях енергії (в еВ), а на рис. Б.7б — набори енергетичних залежностей цих ДП при фіксованих значеннях кутів (у град.). З аналізу характеру особливостей на енергетичних та кутових перетинах 3D-поверхні ДП пружного розсіяння, рис. 5.3, табл. Б.1 та Б.5, можна зробити висновок щодо їх кореляції з відкриттям інших каналів розсіяння (захоплення електрона — збудження — іонізація). Глибина поздовжніх впадин-жолобів, вочевидь, характеризує відносну важливість того чи іншого каналу розсіяння. Ключовим доказом вказаної кореляції, як зазначалося вище, є галуження впадини-жолобу, що починається в точці мінімуму 2 (перед відкриттям каналу збудження), на два окремі жолоби при енергії  $\sim 6.12$  еВ, близькій до енергії іонізації. Це галуження починається з особливо глибокої і різко вираженої воронки на 3D-поверхні ДП (точка мінімуму 6, рис. 5.3).

Звичайно, природа появи локальних особливостей-воронок на 3D-поверхні ДП пружного розсіяння до кінця нами ще не з'ясована: подібні тривимірні структури у дослідженнях інших авторів, наскільки нам відомо, не обговорювалися. Хоча ці особливості не чинять істотного впливу на ІП розсіяння, проте можуть суттєво впливати на енергетичні/кутові залежності ДП, як це показано на рис. 5.3, Б.6 та Б.7.

**5.2.1.3. Кутові залежності ДП пружного розсіяння.** На відміну від експериментів для пружного розсіяння  $e+\text{Ca}$  із вимірюванням енергетичних залежностей ІП [82], ДП при  $90^\circ$  [143] та ДП, інтегрованих у смугах кутів (функція  $S(E)$ ) [85], виконаних на початку 80-х та 90-х років, у ближчому до нас у часі експерименті Мілісавлевич та ін. [146] були виміряні кутові залежності ДП пружного розсіяння електронів на Са при енергіях 10, 20, 40, 60 та 100 еВ і, на цій основі, визначені відповідні ін-

тегровані по кутах пружні перерізи. Точність ДП, отриманих у [146] за допомогою пересічних електронного і атомного пучків, дозволяє зробити більш детальне і достовірне порівняння теоретичних і експериментальних перерізів при вказаних енергіях в області кутів розсіяння  $\theta$  від  $10^\circ$  до  $150^\circ$ .

На рис. 5.4 зображено кутові залежності ДП пружного розсіяння при енергіях падаючого електрона 10, 20, 40, 60 і 100 еВ. Крім порівняння з експериментом Мілісавлевич та ін. [146], наші дані БСР39 порівнюються також з теоретичними розрахунками Кхаре та ін. [118], Юань [111], Радж і Кумар [117] та з даними, розрахованими методом статично-обмінного оптичного потенціалу [146]. Як видно з рис. 5.4, найбільші розбіжності у кутових залежностях ДП, розрахованих за допомогою різних наближень, спостерігаються при енергії 10 еВ.

Найкраще ж узгодження теоретичних даних як між собою, так і з експериментом має місце при енергії 20 еВ. Відмітимо, що для всіх указаних енергій дані БСР39 є у цілому найближчими до експерименту [146] у порівнянні з даними інших розрахунків. Прослідковується, правда, незначна тенденція до зменшення відносної точності БСР39-обчислень з ростом енергії, що, вочевидь, зв'язано з необхідністю врахування більшої за  $L = 50$  кількості парціальних хвиль у розкладах сильного зв'язку. Відзначимо також найкращий з наразі досягнутих у розрахунках збіг даних БСР39 з експериментом [146] у вузькому діапазоні кутів розсіяння вперед (до  $30^\circ$ ), особливо для енергії 10 еВ. Оскільки ДП для малих кутів розсіяння дають максимальний вклад в інтегрований переріз, то, скоріше за все, і розраховані нами ІП пружного розсіяння  $e+Ca$  є найбільш точними з наявних теоретичних результатів. При енергіях 60 і 100 еВ, рис. Б.9, спостерігається досить значне розходження, як в сторону завищення, так і заниження значень ДП всіх приведених теоретичних даних з експериментом [146] у діапазоні кутів  $70^\circ$ – $110^\circ$ .

На рис. 5.5а,б зображено кутові залежності ДП пружного розсіяння

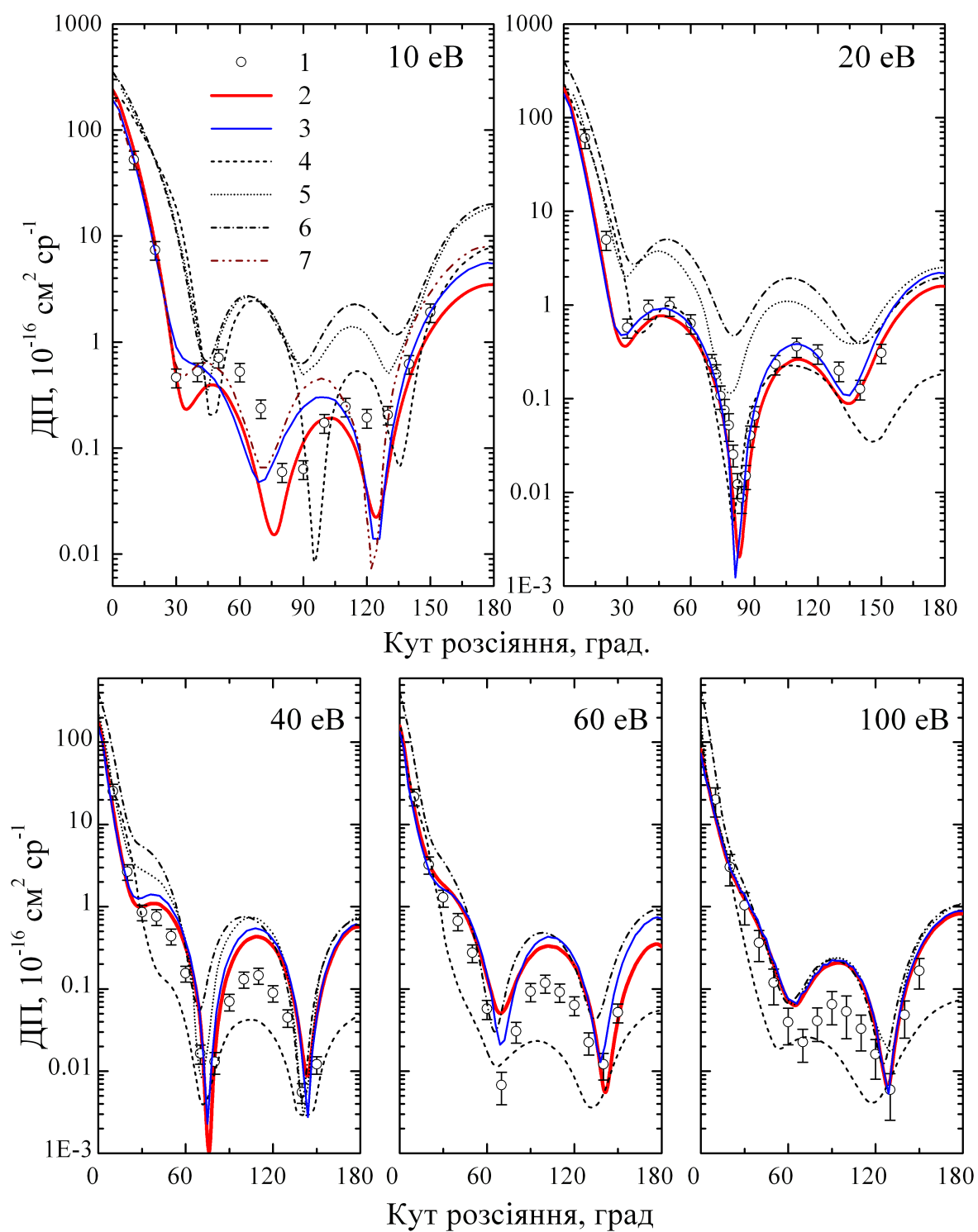


Рис. 5.4: Кутові залежності ДП пружного розсіяння для енергій 10, 20, 40, 60 і 100 еВ:

1 — експ. Мілісавлевич та ін. [146]; 2 — БСР39 [1]; 3 — БСР5; 4 — Радж і Кумар [117]; 5 — ОП, Кхаре та ін. [118]; 6 — СООП, [146]; 7 — Юань [111].

при енергіях електронів 10 і 20 еВ, розраховані в рамках методу БСР але з різною кількістю врахованих станів мішені у розкладі сильного зв'язку: 1, 5 та 39 станів (наближення БСР1, БСР5 та БСР39, відповідно), та методом БКХФ-БСР34. Тут же показана 3D-поверхня пружного розсіювання у наближенні БКХФ-БСР34, рис. 5.5в.

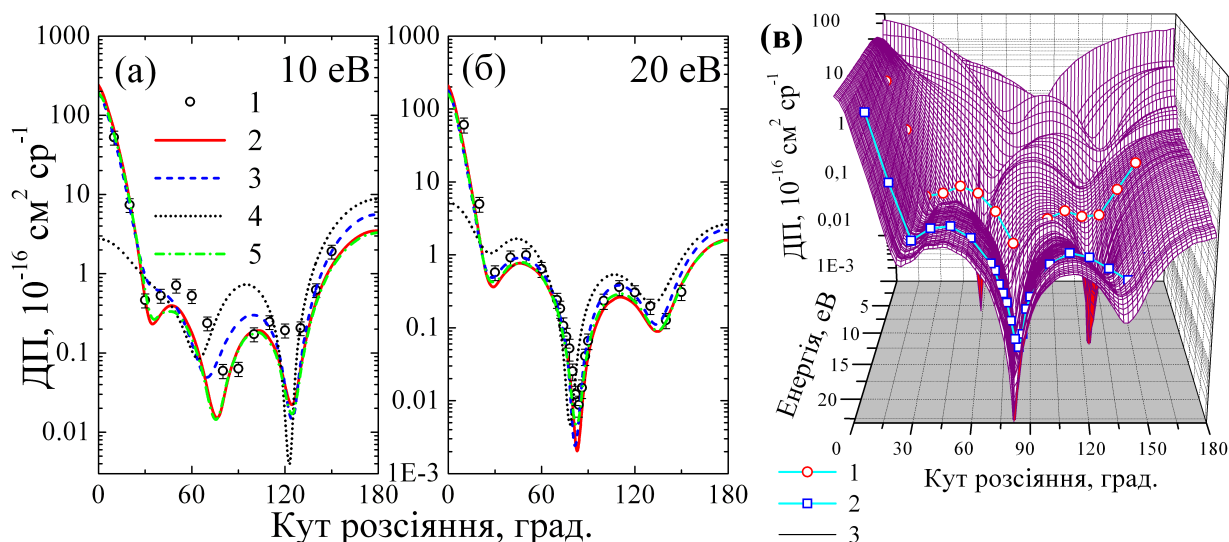


Рис. 5.5: Кутові залежності ДП пружного розсіювання в різних наближеннях: (а)–(б) ДП при енергіях 10 і 20 еВ: 1 — експ. Мілісавлевич та ін. [146]; 2 — БСР39; 3 — БСР5; 4 — БСР1; 5 — БКХФ-БСР34; (в) 1, 2 — експ. Мілісавлевич та ін. [146] при енергіях 10 і 20 еВ, відповідно; 3 — 3D-поверхня ДП у наближенні БКХФ-БСР34.

Як видно з рис. 5.5, кутові залежності ДП, розраховані у різних варіантах методу БСР, мають більші розбіжності при меншій з енергій, тобто при 10 еВ. При цьому наближення БСР1 практично непридатне для достовірної оцінки ДП, особливо при малих кутах розсіювання. Але вже при 20 еВ результати наближень БСР5 та БСР39 є близькими одні до одних, і у значному діапазоні кутів майже співпадають. Отже, наближення БСР5 є цілком достатнім для отримання точних значень ІІ та ДП пружного розсіювання при енергіях більших  $\sim 15$ –20 еВ. Відмітимо, що дані БСР5 для 10 еВ, рис. 5.4, дуже близькі до даних Юань [111], також розрахованих у

наближенні п'яти станів сильного зв'язку,  $5S3$ . Із рис. 5.5 також видно, що дані підходу БКХФ-БСР34 для обох розглянутих енергій практично збігаються з даними БСР39, тому на рис. 5.4 окремим пунктом нами не виділялися. В якості ілюстрації узгодження перерізів БКХФ-БСР34 з експериментом [146], на рис. 5.5в зображена 3D-поверхня розрахованих нами в цьому підході ДП пружного розсіювання, на яку нанесені експериментальні точки кутових залежностей ДП [146] при енергіях 10 і 20 еВ.

Пружний та повний ІП розсіювання  $e+Ca$  у діапазоні енергій від порогу реакції до 100 еВ зображено на рис. Б.9. Інтегральні БСР39-перерізи розсіювання  $e+Ca$  порівнюються з перекаліброваними (див. розд. 4.1) повними експериментальними ІП Романюк та ін. [82], інтегрованими перерізами пружного розсіювання з експерименту Мілісавлевич та ін. [146] та розрахунками Келемен та ін. [86].

Детальне порівняння наших ІП повного розсіювання з даними Романюк та ін. [82] наведено у розд. 3.3. Узгодження даних БСР39 з інтегрованими перерізами пружного розсіювання [146], рис. Б.9, теж є хорошим: теоретичні результати не виходять за рамки експериментальних похибок, а при енергіях 10 та 40 еВ чи не повністю збігаються з даними [146]. Дещо несподіваним на цьому фоні є найбільше розходження вказаних ІП для енергії 20 еВ, при якій досягається найкраще якісне та кількісне узгодження теоретичних та експериментальних ДП, рис. 5.4. Можливо, подібне пов'язане з неточностями здійсненої в [146] екстраполяції експериментальних ДП в область малих кутів — розсіювання вперед дає максимальний вклад у відповідні ІП. Відмітимо, що фрагментарні дані ОП-розрахунків [86], досить суттєво відрізняючись від результатів БСР39, теж майже не виходять за межі експериментальних похибок інтегрованих перерізів [146].

**5.2.1.4. ДП пружного розсіювання електронів на Ca в збуджених станах  $4^3P^o$ ,  $3^3D$ ,  $3^1D$  та  $4^1P^o$ .** Крім дослідження структури 3D-поверхні

ДП пружного розсіяння електронів на атомі Са в основному стані  $4^1S$ , подібні ж розрахунки були здійснені нами і для атома Са у чотирьох нижніх збуджених станах  $4^3P^o$ ,  $3^3D$ ,  $3^1D$  та  $4^1P^o$ , рис. Б.8. На рисунку представлено порівняння кутових залежностей відповідних ДП (за винятком стану  $3^1D$ ), а також 3D-поверхня ДП пружного розсіяння на Са в початковому стані  $3^1D$ , на якій відтворена ще й кутова залежність ДП при значенні енергії 18.1 еВ. З рис. Б.8 можна зробити висновок про зростання подібності кутових залежностей ДП пружного зіткнення електронів з Са у різних збуджених станах із ростом енергії зіткнення. Тобто з ростом енергії падаючого електрона (практично при енергії 20–25 еВ) кутова залежність ДП пружного розсіяння  $e+Ca$  перестає залежати від структурних особливостей мішені. Це у певній мірі пояснює можливість застосування достатньо простих теоретичних наближень до розрахунку ЕА-розсіяння при таких енергіях.

З рисунка також видно, що при низьких енергіях ДП пружного розсіяння з основного стану  $4^1S$  є більш структурованими, у їхніх кутових залежностях спостерігаються помітні (з перепадом значень у 3–4 порядки) локальні мінімуми, відсутні при розсіянні на збуджених станах Са. Структура 3D-поверхонь для розсіяння на збуджених станах  $4^3P^o$ ,  $3^3D$ ,  $3^1D$  та  $4^1P^o$  містить дуже багато однотипних елементів, подібних до деталей 3D-поверхні ДП розсіяння на атомі у стані  $3^1D$ , рис. Б.8б. Всі ці поверхні послідовно прорізаються одним – двома – трьома поздовжніми /скісними жолобами, кожен з яких з'являється при відкритті нового каналу розсіяння, як було вказано вище для розсіяння на атомі в основному стані  $4^1S$ .

### 5.2.2. Розрахунки резонансної структури ІІІ розсіяння $e+Ca$ .

У процесах, що відбуваються при зіткненні електронів з атомами й іонами у низькотемпературній плазмі, важливу роль відіграють квазістаціонарні автоіонізаційні стани (АІС) системи «мішень + налітаючий електрон»,

оже-розпад яких призводить до складної резонансної структури в перерізах розсіювання. «Механізм» появи резонансів у перерізах пружного розсіювання і збудження атомів електронним ударом, в основному, зумовлений інтерференцією дискретного АІС квазістаціонарної системи з прилеглим континуумом від'ємного іона. Вивчення резонансів надає інформацію про внутрішню структуру мішені, а також дає можливість оцінити точність і вірність використовуваних у дослідженні наукових підходів. Ясно, що велика різноманітність елементарних процесів, які супроводжують зіткнення електронів з атомами та іонами і призводять до виникнення резонансів, вимагає використання в розрахунках особливо вишуканих і прецизійних теоретичних наближень і чисельних алгоритмів. Розглядуваний нами підхід БСР якраз і є одним з тих методів розрахунку, що дозволяють відносно швидко й просто отримати ІП розсіювання електронів на атомах у значній кількості точок по енергіях, — це конче необхідно для отримання детальної резонансної структури ІП.

До цього часу в науковій літературі питання дослідження резонансів у ІП зіткнення  $e + \text{Ca}$  зводилося, головним чином, до прояснення ситуації з кількома особливо помітними структурами (піками) в ІП пружного розсіювання, чи в повному перерізі, про що вже йшлося в розд. 3. Наші розрахунки виявили виражену резонансну структуру для більшості індукованих електронних переходів в атомі кальцію при низьких енергіях. Резонансні особливості спостерігаються, для переходів як з основного, так і з метастабільного станів. Для прикладу, на рис. Б.10 зображено розклад за парціальними хвилями  $^2S$ ,  $^2P^o$ ,  $^2D$  і  $^2F^o$  ІП пружного розсіювання електронів на кальції в основному стані  $4^1S$  та ІП збудження з цього ж стану нижніх рівнів  $4^3P^o$ ,  $3^3D$ ,  $3^1D$ ,  $4^1P^o$  і  $5^3S$  атома Ca. В енергетичних залежностях всіх ІП помітні явно виражені структури, які могли б трактуватися як резонанси. Енергетична залежність ІП пружного розсіювання електронів на атомі Ca у метастабільному стані  $4^3P^o$  і розклад цього ІП за парціальними хвилями

наведені на рис. Б.11.

При всій наочності парціальних розкладів ІІ окремих переходів, рис. Б.10 та Б.11а, більш інформативним для виявлення природи тієї чи іншої резонансної особливості є так званий парціально-фазовий аналіз, окремі графічні елементи для якого представлені на рис. Б.11б (на прикладі парціальних  ${}^2D$ -перерізів). Співвідносячи особливості у парціальних перерізах з відповідним стрибком фази, можна зробити попередні висновки щодо наявності чи відсутності резонансу в розглядуваній парціальній хвилі при даній енергії. Детальний опис цієї процедури можна знайти у нашій праці [7].

У таблиці Б.6 наведені результати ідентифікації найбільш чітко виражених резонансних особливостей ІІ, отриманих у даних БСР39-розрахунках в області енергій до 4.3 еВ.

Розглянемо тепер найбільш помітні з резонансів, що згадуються у літературі (див. також розд. 3). Від’ємний іон кальцію має зв’язаний стан  $4s^2 4p\ {}^2P^\circ$ , розміщений нижче основного стану кальцію  $4s^2\ {}^1S$  на  $\sim 0.01\text{--}0.07$  еВ, тобто стан, спорідненість якого, згідно різних джерел, складає не більше 70 меВ (див., напр. [84,90,91,102]). Таким чином, енергія зв’язаного стану може бути використана для перевірки якості хвильових функцій мішені і моделі розсіювання. Терм  ${}^2D$  конфігурації  $4s^2 3d$  є незв’язаним, але, як було встановлено в багатьох попередніх розрахунках (див., наприклад, [90,91,102]), трактується як резонанс форми. Наші розрахунки вказують на положення цього резонансу форми в пружному перерізі у вигляді піку при 1.193 еВ, рис. Б.10.

Порівняння енергетичних залежностей значень похідних від повного перерізу, отриманих на експерименті [84] та розрахованих нами, рис. Б.18, показує на більшу структурованість теоретичних результатів у припороговій області. Зокрема, прослідковується наявність у згаданих енергетичних залежностях не двох, а трьох чітко виражених особливостей у вигляді широкіх потужних структур, що могли би трактуватися як надпорогові ре-



зонанси форми. Крім того, на два останні пологі виступи накладаються характерні вузькі піки резонансів Фешбаха. При ще вищих енергіях прослідковується поява значної кількості вузьких резонансних піків, які поки що неможливо зафіксувати на експерименті. Виявлена нами резонансна структура у певній мірі підтверджується даними розрахунків [91, 102].

Більшість резонансних особливостей у перерізах розсіювання  $e+\text{Ca}$  виявлені і попередньо класифіковані нами вперше: 11 чітко окреслених резонансів, біля 20 менш явно виражених, та близько 25 резонансних особливостей, що «проявляють» себе лише у процесі проведення лоренц-підгонки. Детальний аналіз та можливу класифікацію виявлених резонансів наведено у нашій праці [7].

**5.2.3. Перерізи розсіювання  $e+\text{Ca}$  при наднизьких енергіях.** У даному підрозділі розглянуті деякі проблемні питання розсіювання електронів на кальції при наднизьких енергіях. У зв'язку з появою роботи Фелфлі та ін. [109] питання поведінки перерізів розсіювання  $e+\text{Ca}$  в ультрахолодній області знову набуло актуальності. В представлених у роботі [109] ІП розсіювання проявляється високий пік при енергії  $\sim 0.022$  еВ, який автори інтерпретують як свого роду реакцію системи на утворення стійкого стану  $4s^24p\ ^2P^o$  аніона кальцію. Енергію, при якій з'являється пік у повному ІП розсіювання  $e+\text{Ca}$ , вони прямо пов'язують з енергією спорідненості аніона Ca. Вказаний результат був отриманий у [109] з використанням техніки полюсів Редже; атом-мішень моделювався за допомогою потенціалу Томаса-Фермі, що, як відомо, набагато поступається точністю розрахунковій БСР-моделі. Не маючи змоги в даній роботі розглянути всі теоретичні аспекти проблеми, зауважимо наступне.

Проведені нами ab initio розрахунки ІП в наближенні БСР39 не вказують на наявність у розглядуваній області енергій якогось піку у перерізі розсіювання. Згідно БСР39, стан  $4s^24p\ ^2P^o$  є зв'язаним станом від'ємного іона

$\text{Ca}^-$ , з енергією спорідненості 0.015 еВ. Отже, він не дає вклад в ІІ розсіяння  $e+\text{Ca}$ . Це узгоджується з  $R$ -матричними із псевдостанами (РМПС) розрахунками Бартшат і Садегповр [147] і даними методу Дірака-Фока (ДФ) Юань [90].

У той же час, проведені нами паралельно з БСР39 розрахунки структури мішені у наближенні БКХФ-БСР34 не призвели до утворення зв'язаного стану  $4s^24p\ ^2P^o$  іона  $\text{Ca}^-$ . Оскільки це суперечить відомим експериментам і розрахункам, перевага у подальших детальних обчисленнях розсіяння, зокрема щодо резонансної поведінки перерізів, була віддана наближенню БСР39. Так от, в ІІ розсіяння, отриманих нами у відхиленому з вказаних міркувань підході БКХФ-БСР34 для даної області енергій, якраз і з'являється припороговий пік, аналогічний до виявленого у роботі [109].

На рис. Б.12а показані ІІ розсіяння у припороговій області, отримані у підходах БСР39, БКХФ-БСР34, РМПС [147], ДФ [111] та методі полюсів Редже [109]. З рисунка видно, що різниця у поведінці розрахованих нами в підходах БСР39 та БКХФ-БСР34 перерізів спостерігається тільки при енергіях, нижчих за  $\sim 0.4$  еВ. При вищих енергіях ІІ, отримані у цих підходах, практично ідентичні. Пороговий пік, що спостерігається у даних [109] при енергії в околі 0.022 еВ, є значно ширшим, ніж той, що отриманий нами в наближенні БКХФ-БСР34 при енергії  $\sim 0.005$  еВ. Проте, на нашу думку, і перший, і другий є проявом певної неадекватності вибору фізичної моделі і/або чисельної процедури розрахунку структури атома  $\text{Ca}$  і, відповідно, перерізів розсіяння. Зокрема, в підході БКХФ-БСР34 відбувається «зміщення» енергії зв'язаного стану  $4s^24p\ ^2P^o$  від'ємного іона  $\text{Ca}^-$  вище порогу реакції, і цей зв'язаний стан іона проявляється як квазістаціонарний з усіма відповідними наслідками: у перерізі розсіяння з'являється припороговий резонансний пік, рис. Б.12а. Причини появи подібного ж піку у праці [109] вимагають додаткового аналізу. У будь-якому випадку ясно, що експеримент з визначення перерізів розсіяння  $e+\text{Ca}$  в області енергій до

0.5 еВ був би дуже доречним.

Непрямым підтвердженням того, що обговорювані резонансні піки спричинені зсувом зв'язаного стану  $4s^2 4p \ ^2P^o$  від'ємного іона  $\text{Ca}^-$  у квазістаціонарну область слугують енергетичні залежності парціальних перерізів розсіяння, наведені на рис. Б.12в. З рисунка видно, що основні відмінності між даними БКХФ-БСР34 і БСР39, а також даними наближення РМПС [147] викликані поведінкою парціального перерізу  $\ ^2P^o$ . Парціальні ж перерізи для хвиль  $\ ^2S$  та  $\ ^2D$ , розраховані у вказаних наближеннях, практично співпадають.

На рис. Б.12б–г показано порівняння енергетичних залежностей ДП та фазових сум, отриманих у вказаних трьох підходах при наднизьких енергіях. Детальне обговорення особливостей поведінки цих характеристик розсіяння у вказаній області енергій дано в наших працях [7] та [6].

**5.2.4. Розрахунки ІІ для різних серій переходів.** Крім розрахунків перерізів збудження окремих станів, великий інтерес являють теоретичні дослідження різноманітних серій переходів. Вони дозволяють виявити закономірності у зміні характеристик розсіяння в залежності від головного  $n$  і орбітального  $\ell$  квантових чисел, терму, мультиплетності, теоретичного підходу etc.

**5.2.4.1. Переходи з основного стану  $4s^2 \ ^1S$  атома  $\text{Ca}$  в п'ять нижніх збуджених станів  $4s4p \ ^3P^o$ ,  $3d4s \ ^3D$ ,  $3d4s \ ^1D$ ,  $4s4p \ ^1P^o$  та  $4s5s \ ^3S$ .** На рис. Б.13 проведене порівняння наших БСР39-результатів з теоретичними ІІ збудження Самсон і Беррінгтон [112], розрахованими в  $R$ -матричному наближенні РМ22. Представлені перерізи переходів з основного стану  $\text{Ca } 4s^2 \ ^1S$  на рівні  $4s4p \ ^3P^o$ ,  $3d4s \ ^3D$ ,  $3d4s \ ^1D$ ,  $4s4p \ ^1P^o$  та  $4s5s \ ^3S$  в припороговій області енергій до 6–7 еВ. У нижньому правому графічному вікні рис. Б.13 показані наші ІІ переходів із метастабільного стану  $4s4p \ ^3P^o$  атома  $\text{Ca}$  в останні чотири з перелічених рівнів. З рис. Б.13

видно, що енергетичні залежності теоретичних перерізів, розрахованих у наближеннях БСР39 та РМ22 [112], досить добре узгоджуються між собою тільки для збудження станів  $4^{1,3}P^o$ . У перерізах переходів у стани  $3^3D$ ,  $3^1D$ ,  $4^1P^o$  та  $5^3S$ , розрахованих у цих двох  $R$ -матричних наближеннях, спостерігаються суттєві розходження, зв'язані, насамперед, зі способами розрахунку мішені. Структура наших рівнів енергії є набагато ближчою до експерименту [106], ніж представлена в роботі [112]. Як видно з рисунка, БСР39-перерізи більш гладкі, вони розраховані з більшою густиною точок по енергії та у ширшому діапазоні енергій, у загальному вони менші за абсолютними значеннями. Багато структурних елементів, помітних в енергетичних залежностях перерізів [112], у наших розрахунках не підтверджені. Однак, якщо певні особливості наявні в ІІІ обох наближень, то з достатньо великою імовірністю можна стверджувати, що вони мають під собою реальне фізичне підґрунтя.

**5.2.4.2. Розрахунки збудження серій  $n^{1,3}L$  ( $n = 3, \dots, 8$ ;  $L = S, P, D, F$ ).** На рис. Б.14–Б.15 наведені ІІІ збудження електронами атома Са як в основному, так і в збуджених станах, згруповані за окремими серіями. Розглядаються, наприклад, ІІІ збудження окремо триплетних і синглетних термів для конфігурацій з різними значеннями головних квантових чисел  $n$  ( $n = 3, 4, 5, 6, 7, 8$ ) і однаковим  $L$  ( $L = S, P, D, F$ ); або різних термів однієї конфігурації, наприклад,  $3d4p$   $^3, ^1P, D, F^o$ . У кожному графічному вікні наведені спектроскопічні позначення кінцевого стану та енергетичні залежності ІІІ збудження як з основного  $4^1S$ , так і метастабільного  $4^3P^o$  станів, а також вказані коефіцієнти нормування. Як видно з рисунків, криві ІІІ збудження деяких слабких переходів та переходів у стани з великими номерами не задовольняють критеріям гладкості при енергіях порядку  $\sim 15$ – $20$  еВ, а деколи і  $\sim 10$ – $12$  еВ. Тому, більшість «пилкоподібних» структур, що порушують плавний хід кривих енергетичних залежностей ІІІ збудже-

ння в цих областях енергій, слід вважати проявами псевдорезонансів. До уваги має братися тільки основа, «підкладка» кривих ІП, яка, здебільшого, досить добре відтворюється за загальною поведінкою цих перерізів у областях енергій, де вони не спотворені псевдорезонансними структурами. З рисунків також видно, що прояви псевдорезонансів для станів однієї серії зростають з ростом головного квантового числа  $n$ , у той час як значення самих перерізів спадають з ростом  $n$ . Дослідження особливостей кожної з розглянутих серій переходів є самостійною складною задачею, яка наразі виходить за рамки нашої роботи.

Зупинимося тільки на основних моментах. В літературі з електрон-атомних зіткнень загальним місцем стало твердження, що перерізи збудження на мішені у метастабільного стані на порядок-два перевищують ІП збудження з основного стану атома. З рис. Б.14–Б.15 ясно видна неоднозначність подібного твердження: ІП окремих переходів в атомі під дією електронного удару залежать не стільки від початкового стану мішені, як від виду спектроскопічного переходу (дипольного, квадрупольного, інтеркомбінаційного) між початковим і кінцевим станами атома. При цьому перерізи дипольних переходів можуть у кілька разів — але не на два порядки! — перевищувати ІП слабких, або інтеркомбінаційних переходів при збудженні одного і того ж кінцевого стану з різних початкових станів.

Порівняння БСР39-перерізів з ФЗ давнішого експерименту Гарга та ін. [144] для дипольного збудження з основного рівня  $4^1S$  серії  $np\ ^1P^o$  ( $n = 4, 5, 6, 7$ ) вказує на їх прийнятне узгодження, за винятком областей енергії до  $\sim 15$  еВ. Наявні відмінності викликані, на нашу думку, вкладом каскадів з автоіонізаційних станів (AIC) у спостережувані на експерименті ФЗ. Аналогічною є ситуація з узгодженням даних БСР39 зі спостережуваними ФЗ [144] для збудження серій  $3^1D - nf\ ^1F^o$  ( $n = 4, 5$ ),  $3^1D - np\ ^1P^o$  ( $n = 5, 6, 7$ ),  $3^1D - 3d4p\ ^1L$  ( $L = P^o, F^o$ ) та переходу  $4^1P^o - 4p^2\ ^1D$ , рис. Б.11. Порогові піки, які мають місце на більшості ФЗ, не є характерними для ди-

польного збудження, а радше пов'язані з інтеркомбінаційними переходами. У той же час для дипольних переходів  $4^1P^o - nd\ ^1D$  ( $n = 5, 6$ ) теоретичні ІП практично співпадають з нормованими на них спостережуваними ФЗ [144]. Звернемо також увагу на відсутність помітного вкладу каскадів у розглянуті теоретичні ІП, за винятком збудження  $3^1D - 5^1P^o$ . Це свідчить, скоріше за все, про недостатню величину розкладу сильного зв'язку для даних переходів. У загальному, для розглянутих серій можна констатувати необхідність проведення наступного етапу теоретичних БСР-розрахунків, які б включали у розклад сильного зв'язку також і АІС. У свою чергу, наявні експериментальні ФЗ [144] окремих переходів, отримані в середині 70-х років, є надто неточними, позбавляючи теоретиків стимулу для застосування в розрахунках вказаних ІП все більш прецизійних методів.

**5.2.4.3. Переходи з метастабільного  $4s4p\ ^3P^o$  стану атома Са в стани  $4s5s\ ^3S$ ,  $4s4d\ ^3D$ ,  $4p^2\ ^3P$ ,  $3d4p\ ^3P$ ,  $3d4p\ ^3P$ ,  $4s5f\ ^3F$  та  $4d^2\ ^3P$ .** На рис. Б.16 наведено порівняння теоретичних ІП з даними експерименту Шафраньош та ін. [128] для збудження електронним ударом атома Са в метастабільному стані  $4s4p\ ^3P^o$  у сім вище розміщених станів:  $4s5s\ ^3S$ ,  $4s4d\ ^3D$ ,  $3d4p\ ^3D^o$ ,  $4p^2\ ^3P$ ,  $3d4p\ ^3P^o$ ,  $4s5f\ ^3F^o$  та  $3p^63d^2\ ^3P$ . На рисунку представлені наші результати БСР39 (як з урахуванням вкладу каскадів з вищих рівнів, так і без урахування) та БКХФ-БСР34 (без вкладу каскадів). Наводяться також ІП, отримані в наближеннях сильного зв'язку шести каналів (6СЗ) [128] та методу РСХ [148]. Експериментальні функції збудження [128] нормовані нами на перерізи БСР39 (без урахування каскадів) для отримання якнайкращого візуального узгодження з ходом теоретичних ІП.

Як видно з рис. Б.16, наші ІП, отримані без врахування каскадів у наближеннях БСР39 та БКХФ-БСР34, є достатньо близькі, іноді навіть тотожні між собою, за винятком ІП збудження стану  $4s5f\ ^3F^o$ . Втрата точності перерізу БКХФ-БСР34 для цього стану, очевидно, зв'язана з тим,

що рівень  $4s5f\ ^3F^o$  знаходиться на верхній межі врахованих нами у розкладі сильного зв'язку спектроскопічних станів. У той же час, для рівня  $3p^63d^2\ ^3P$ , який не був включений у розклад БСР39, розрахунки збудження у підході БКХФ-БСР34 дають хороше узгодження з експериментом [128] за винятком вузької припорогової області  $\sim 6\text{--}9$  еВ. Тут на експериментальній залежності ІІ спостерігається помітний пік, відсутній у наших обчисленнях. З іншого боку, у наведеному у роботі [128] 6СЗ-перерізі, пороговий пік є в наявності, проте загальний хід енергетичної залежності ІІ збудження 6СЗ значно відрізняється від експериментального.

З рис. Б.16 видно, що теоретичні розрахунки у наближенні 6СЗ дають завищені на 10–70% значення у порівнянні з даними БСР39 для всіх переходів, крім збудження рівня  $4s5f\ ^3F^o$ , де результати цих розрахунків дуже близькі одні до одних. Що стосується наближення РСХ, то ІІ збудження для всього розглядуваного діапазону енергій (від  $\sim 5$  до 30 еВ) наводяться в [148] лише для станів  $4s5s\ ^3S$ ,  $4s4d\ ^3D$  та  $4p^2\ ^3P$ . Для станів  $3d4p\ ^3D$ ,  $3d4p\ ^3P^o$  та  $4s5f\ ^3F^o$  РСХ-перерізи наведені тільки для енергій більших 15 еВ. У припороговій області енергій ( $\sim 5\text{--}10$  еВ) РСХ-перерізи [148] проявляють тенденцію до сильного — аж до фактора 2 — завищення у порівнянні з даними БСР39.

Як видно з рис. Б.16, дані БСР39 достатньо добре узгоджуються зі спостережуваними ФЗ [128] при всіх енергіях, за винятком припорогових областей для збудження станів  $4s5s\ ^3S$  та  $4s4d\ ^3D$ . Тут в експериментальних ФЗ [128] при  $\sim 5\text{--}10$  еВ спостерігаються досить потужні піки, відсутні на відповідних теоретичних залежностях, в т.ч. розрахованих і в наближеннях 6СЗ та РСХ. Пояснити вказані структури вкладом каскадів з вищих рівнів наразі не вдається, оскільки врахування каскадного вкладу за рахунок дипольних переходів, як видно з рис. Б.16а,б призводить тільки до загального збільшення БСР39-перерізу на 10–20% без якісної зміни характеру його енергетичної залежності. Як і для випадку ФЗ [128], ці структури ви-

ще порогу іонізації, певно, викликані вкладом каскадів з вищих рівнів за рахунок розпаду АІС. Зауважимо також, що при порівнянні даних наших  $LS$ -обчислень з експериментом [128] треба брати до уваги той факт, що оригінальні експериментальні дані вимірювалися тільки для домінуючих переходів між мультиплетними станами триплетів.

**5.2.5. Ефективні сили зіткнень для розсіяння  $e+\text{Ca}$ .** В таблиці Б.7 представлені ефективні сили зіткнень для переходів з основного стану  $4s^2\ ^1S$  у всі стани, включені в даний розклад сильного зв'язку в області температур, важливій для моделювання плазми. Аналогічні результати для збудження з метастабільних рівнів  $4s4p\ ^3P^o$  та  $4s3d\ ^3D$  за браком місця тут не наводяться. Щоб розрахувати ефективні сили зіткнень для високих температур, ми екстраполювали перерізи в область великих енергій електронів, використовуючи їх відомі асимптотичні форми, зокрема  $\ln(E)/E$  для дипольно-дозволених переходів,  $1/E$  для спін-дозволених, дипольно-заборонених переходів, та  $1/E^3$  для спін-заборонених переходів. Виявлена резонансна структура також може давати вклад в ефективні сили зіткнень для слабких переходів при низьких температурах.

Порівняння розрахованих нами ефективних сил зіткнень для переходу  $4s^2\ ^1S - 4s4p\ ^1P$  з розрахунками Самсон і Беррінгтон [112] та експериментальними вимірюваннями Кренделл та ін. [145] представлене на рис. Б.17. Як видно з рисунка, у широкому діапазоні температур електронів ефективні сили зіткнень, розраховані в наближенні БСР39, практично співпадають з  $R$ -матричними даними РМ22 [112]. У той же час, обидва  $R$ -матричні розрахунки дають ефективні сили зіткнень, які на 5–10% перевищують дані експериментальних вимірювань [145]. При електронних температурах нижчих за 1000К, ефективні сили зіткнень у наближенні БСР39 трохи перевищують значення РМ22, проте у цьому діапазоні енергій відсутні відповідні експериментальні дані. Оскільки наші ІІ для резонансного переходу, як



було показано вище, чудово узгоджуються з експериментом [121] при низьких енергіях, це дає певні підстави сподіватися на «добротність» отриманих нами даних і з ефективних сил зіткнень.

## Висновки до розділу 5

1. Встановлено, що 3D-поверхня ДП пружного розсіювання  $e+\text{Ca}$  являє собою складну структуру з поздовжніми/скісними максимумами, плато, впадинами-жолобами, поперечними складками, а також локальними конусоподібними впадинами-воронками. Розкрито зв'язок появи жолобів на 3D-поверхні з відкриттям нових каналів розсіювання (захоплення електрона, збудження, іонізація). Встановлена наявність енергетично-кутових областей, у яких домінують процеси, альтернативні до пружного розсіювання, — що може дати механізм ефективного впливу на перебіг цих елементарних процесів.

2. Встановлено суттєві відмінності у вигляді спектральних функцій  $S(E)$ , отриманих для різних енергетично-кутових діапазонів їх визначення. Запропоновано експеримент з перевірки якісних відмінностей  $S(E)$  для різних смуг кутів-енергій і вказано на недоречність наявного в літературі прямого порівняння ІП пружного розсіювання та функції  $S(E)$ .

3. Підтверджена наявність поперечної (щодо осі енергій) складки у ДП пружного розсіювання на  $90^\circ$  в області енергій від  $1.8 \div 2.6$  еВ, отримуваної на експерименті. Показано її зв'язок з резонансноподібною структурою в повному ІП розсіювання між порогами збудження станів  $4^3P^o$  та  $3^3D$ .

4. Кутові розподіли ДП пружного розсіювання електронів на  $\text{Ca}$  в основному стані  $4^1S$  та збуджених станах  $4^3P^o$ ,  $3^3D$ ,  $3^1D$  та  $4^1P^o$  проявляють тенденцію до зближення значень з ростом енергій, аж до практично повного злиття при  $E > 20$  еВ. Це може свідчити про «нерозрізнення» падаючим електроном початкового стану атома-мішені при високих енергіях.

## РОЗДІЛ 6

### БСР-РОЗРАХУНКИ НИЗЬКОЕНЕРГЕТИЧНОГО РОЗСІЯННЯ ЕЛЕКТРОНІВ НА АТОМІ AL ТА ФОТОРОЗЩЕЛЕННЯ ІОНА $Al^-$

#### 6.1. Розрахунки збудження та іонізації алюмінію електронним ударом методом $R$ -матриці з $B$ -сплайнами і псевдостанами

У даному підрозділі представлено результати систематичного вивчення інтегрованих по куту перерізів розсіяння електронів на нейтральному алюмінії, викладені в нашій праці [3]. Розрахунки охоплюють пружне розсіяння, збудження 14 станів  $3s^2np\ ^2P^o$  ( $n = 3, 4, 5, 6$ ),  $3s^2ns\ ^2S$  ( $n = 4, 5, 6$ ),  $3s^2nd\ ^2D$  ( $n = 3, 4$ ),  $3s3p^2\ ^4,2P, ^2D, ^2S$  та  $3s^24f\ ^2F^o$  атома алюмінію, а також іонізацію електронним ударом. Чутливість результатів до змін у теоретичній моделі перевірялася шляхом порівняння передбачень, отриманих у різних наближеннях, у тому числі великомасштабній моделі з більше ніж 500 континуальними псевдостанами. Поточні результати, як очікується, мають точність на рівні кількох відсотків і являють собою достатньо великий набір даних з електронних зіткнень для більшості застосувань моделювання за участю нейтрального алюмінію.

**6.1.1. Вступні зауваження.** Зіткнення електронів з атомом алюмінію та його сполуками знаходять застосування в різних галузях науки і промисловості. Наприклад, електрони, що падають на металоподібний алюміній, служать важливими інструментами в електронній мікроскопії, електронній спектроскопії поверхні, мікролітографії і електронно-зондовому

мікроаналізі, — щоб назвати тільки деякі з них. Їхнє моделювання методом Монте-Карло вимагає надійних перерізів [149]. Крім того, дослідження за допомогою іонізації електронним ударом молекул оксидів металів з Al є важливими при дослідженні різних матеріалів. Алюміній також виявлений у вигляді домішки в плазмовому шарі реакторів термоядерного синтезу [150], таких як Медісонський симетричний тор [151], зі стінками з Al. Взаємодії плазми зі стінками в термоядерних пристроях вивільняють домішки і моделювання можливого перенесення домішок вимагає точних значень швидкостей іонізації та рекомбінації [152].

До цього часу зіткнення електронів з атомами алюмінію ще не були ретельно досліджені, — як через експериментальні, так і теоретичні проблеми. Ми знаємо тільки, що вимірювання перерізу були представлені для оптично дозволених переходів  $3s^23p - 3s^24s$  та  $3s^23p - 3s^23d$  у праці [153], а для процесу іонізації — у праці [154]. Через відсутність експериментальних даних, на даний час дослідники в області моделювання плазми повинні повністю покладатися на теоретичні передбачення. З цієї причини важливою є оцінка точності доступних теоретичних даних. Однак теоретичних досліджень розсіяння електронів на Al також дуже мало. Багато років тому Рябих і Фабрикант [155] провели розрахунок для низькоенергетичних пружних перерізів у наближенні двох станів сильного зв'язку ( $C32$ ), результати яких використовуються до цих пір. Іонізація Al електронним ударом була вивчена більш докладно. Так, Кім і Стоун [156] передбачили перерізи прямої іонізації для Al, Ga та In, опираючись на напівемпіричній моделі бінарних збігів Бете (БЗБ). Вони також виявили, що для цих атомів є істотним внесок від процесів автоіонізаційного збудження. Відносно нещодавно іонізація атома алюмінію ретельно досліджувалася Лок та ін. [157] у рамках більш сучасних підходів: методу  $R$ -матриці з псевдостанами (РМПС) і залежного від часу методу сильного зв'язку (ЗЧСЗ). У той же час, в літературі відсутні повідомлення про докладні дослідження пружного розсіяння

і процесів збудження для  $e+Al$  зіткнень.

Таким чином, метою наших досліджень, описаних в даному підрозділі, було всебічне вивчення зіткнень електронів з нейтральним алюмінієм, у тому числі ретельний аналіз чутливості теоретичних передбачень у залежності від деталей обчислювальної моделі. Такий аналіз має вирішальне значення у світлі все зростаючого попиту на оцінку теоретиками (причому, в будь-якій формі) невизначеності їхніх результатів [158, 159]. У якості побічного продукту цих досліджень були отримані і стали доступними для широкого загалу великі набори даних щодо зіткнень електронів на нейтральному алюмінії, в тому числі для пружного розсіяння, передачі імпульсу, збудження, а також іонізації з основного стану.

Розрахунки, представлені нижче, були проведені за допомогою програмного коду BSR [15], оснований на методі  $R$ -матриці з  $B$ -сплайнами (сильний зв'язок). Розрахунки для багатьох нейтральних атомів-мішеней є досить складним завданням через труднощі, з якими дослідник стикається вже на стадії отримання хорошого опису структури мішені. Але особливо важкими вони є для систем з відкритими оболонками, таких як Al, де важливими є внутрішньоболонкові кореляції (тут мова йде про підоболонки  $3s$  та  $3p$ ). Відмітною особливістю підходу BSR та відповідного загального комп'ютерного коду BSR є його здатність використовувати в описі станів мішені залежні від терму набори неортогональних орбіталей. Це дозволяє нам незалежно оптимізувати окремі атомні хвильові функції і, таким чином, генерувати більш точний опис станів мішені, ніж ті, що, як правило, можливі при накладанні обмежень ортогональності. За останнє десятиліття, код BSR (поряд з його повною релятивістським розширенням, DBSR [160]) був успішно застосований до ряду мішеней (див. [161]) і, як було показано, в багатьох випадках перерізи є більш точними, ніж ті, що отримувалися з використанням стандартної  $R$ -матричної техніки. Зауважимо, що набір програм BSR узагальненим програмним засобом для

багатоелектронних мішеней. Його переваги особливо помітні у випадках розсіяння електронів на системах зі складною конфігураційною структурою, в тому числі при наявності кількох відкритих оболонок [161]. Його застосування у великомасштабному непертурбативному режимі із залученням псевдостанів (РМПС) зазвичай вимагає масового використання запаралелених комп'ютерів.

Цей підрозділ організовано наступним чином: після обговорення опису структури мішені, ми підсумовуємо найбільш важливі аспекти розрахунків зіткнення. Огляд результатів супроводжується представленням перерізів для найбільш важливих переходів, починаючи з пружного розсіяння електронів на Al у його основному стані, за яким слідує опис переходів між окремими дискретними станами і, нарешті, дані з іонізації. Порівняння результатів, отриманих за допомогою різних моделей, забезпечує оцінку ймовірної точності обговорюваного набору даних.

### **6.1.2. Деталі обчислень структури атома Al та розсіяння $e+Al$ .**

**6.1.2.1. Розрахунки структури.** Стани мішені атома Al у даних розрахунках генерувалися шляхом поєднання багатоконфігураційного методу Хартрі-Фока і  $B$ -сплайнового обмеженого в боксі методу сильного зв'язку [162]. Атом алюмінію трактувався як система трьох активних електронів над замороженим кором  $1s^2 2s^2 2p^6$ . Оскільки релятивістські ефекти для алюмінію відносно малі, ми використовували нерелятивістське наближення  $LS$ -зв'язку. Основний стан Al має головну конфігурацію  $3s^2 3p$  і спектр зв'язаних станів, очевидно, має просту структуру  $3s^2 n\ell$ . Однак, рідбергівські серії  $3s^2 3d$ , сильно збуджуються  $3s$ -збудженими станами  $3s 3p^2 {}^2D$ . Це є класичним прикладом надзвичайно сильної взаємодії між пертурбаціями та рідбергівськими серіями, коли пертурбація втрачає ідентичність і «розмазується» по всій серії [163]. Незважаючи на свій одноелектронний характер, стани  $3s 2n\ell$  також є радше корельованими станами через значне

конфігураційне змішування зі станами  $3p2n\ell$  і глибоке дипольне проникнення  $3s$ -електрона в  $3p$ -оболонку.

Щоб охопити всі ці ефекти, структура багатоканального розкладу мішені була обрана у вигляді

$$\begin{aligned} \Phi(3s^2n\ell, LS) = & \sum_{n\ell} (\phi(3s^2P(n\ell)))^{LS} + \sum_{n\ell, L'S'} (\phi(3s3p, L'S')P(n\ell))^{LS} \\ & + \sum_{n\ell, L'S'} (\phi(3p^2, L'S')P(n\ell))^{LS} + a\varphi(3s^23p)^2P^0 + b\varphi(3s3p^2)^{LS} \end{aligned} \quad (6.1)$$

Тут  $P(n\ell)$  позначає орбіталь зовнішнього валентного електрона, в той час як  $\phi$  і  $\varphi$  - функції, що відображають розклади конфігураційної взаємодії (ВК) необхідних іонних та конкретних атомних станів, відповідно. Ці розклади були отримані в окремих БКХФ-розрахунках для кожного стану, використовуючи програму MCHF [126, 127]. Вони включають всі одноразові і подвійні збудження  $3s$ - та  $3p$ -орбіталей на кореляційні  $4\ell$ -орбіталі ( $\ell = 0, 1, 2, 3$ ). Ці хвильові функції забезпечують належне включення важливих короткодійних кореляційних ефектів.

Розклад (6.1) можна розглядати як модель для всіх рідбергівських серій  $3s^2n\ell$  спектру алюмінію, в тому числі континуальних псевдостанів, що лежать вище границі іонізації. Розклад може також забезпечувати хороше наближення для  $3s^23p$ -конфігурації основного стану, як і для станів  $(3s3p^2)LS$  зі збудженим кором. Альтернативно, ми можемо вибрати використання окремих ВК-розкладів для цих станів шляхом прямого включення релаксаційних ефектів через одноелектронні орбіталі з визначеними станами. Останній шлях є прийнятнішим і дозволяє контролювати точність цих високорельованих станів за допомогою більш розширених ВК-розкладів. Це є, зокрема, важливим у випадку сильної взаємодії пертурбації з рідбергівськими серіями, де невелика зміна пертурбаційного розкладу може призвести до радикальних змін її положення відносно інших станів.

Невідомі функції  $P(n\ell)$  для зовнішнього валентного електрона були розкладені за  $B$ -сплайновим базисом, а відповідні рівняння були розв'язані за умови, що хвильові функції обертаються в нуль на границі.  $B$ -сплайнові коефіцієнти для валентних орбіталей  $P(n\ell)$ , разом з коефіцієнтами  $a$  і  $b$  (при потребі для конкретного  $LS$  симетрії), були отримані шляхом діагоналізації  $N$ -електронного атомного гамільтоніана. Кількість спектроскопічних зв'язаних станів, які можуть бути отримані у наведеній вище схемі, залежить від радіуса  $B$ -сплайнового «боксу». У більшості даних розрахунків останній був прийнятий рівним  $50a_0$ , де  $a_0 = 0.529 \times 10^{-10}\text{м}$  — радіус Бора. Це дозволило нам отримати хороший опис станів атома алюмінію з головним квантовим числом для валентного електрона до  $n = 6$ . Решта вісім псевдостанів з від'ємною енергією (див [164] для загального обговорення базових ідей) є — в цьому підході з обмеженими в боксі псевдостанами — наближеним способом урахування нескінченного числа рідбергівських станів.

Розклад (6.1) також здатний генерувати континуальні псевдостани, що лежать вище порогу іонізації. Густина і кількість цих станів головним чином залежить від радіуса боксу і, меншою мірою, від інших параметрів  $B$ -сплайнів, таких як їх порядок або розподіл по сітці інтервалів. Такий підхід є водночас найпростішим і найбільш загальним способом отримання континуального псевдоспектру. Це забезпечує чудову гнучкість щодо його якості, дозволяючи нам вибирати різні радіуси боксу або змінювати щільність  $B$ -сплайнового базису. Однак, оскільки ці розрахунки генерують різні неортогональні набори орбіталей для кожного стану атома, їх подальше використання вимагає вміння поводитися з неортогональними орбіталями у загальному вигляді. Така можливість якраз і забезпечується використанням коду BSR.

В таблиці Б.8 порівнюється розрахований нами спектр алюмінію з експериментальними значеннями [163] для різних  $LS$ -мультиплетів, включе-

них у розрахунки розсіяння (див нижче). Загальне узгодження між експериментом і теорією є добрим, з відхиленнями у значенні енергії, що становить менше 42 меВ для всіх станів, включаючи важливі стани  $3s3p^2$  зі збудженим кором. Особливої уваги, зокрема, заслуговує стан  $3s3p^2\ ^2D$ . Завдяки сильній взаємодії з рідбергівськими  $3s^1nd$ -серіями, стан  $3s3p^2\ ^2D$  повністю втрачає свою ідентичність і «розмазується» по всій серії. Наприклад, його домішки до кількох перших рівнів енергії рівні 21%, 23%, 14% і 10% для станів  $3d$ ,  $4d$ ,  $5d$  і  $6d$ , відповідно. Таким чином, відповідно до аналізу [163] жодний зі станів серії  $^2D$  не можна однозначно ідентифікувати зі станом  $3s3p^2\ ^2D$ . Цей висновок підтверджується також шляхом визначення кількості вузлів у відповідних  $nd$ -орбіталах. У цьому відношенні маркування « $3d$ ,  $nd$ ,  $4d$ ,  $5d$ ,  $6d$ » відповідних станів у НІСТ-компіляції [165], як вбачається, не є гарним вибором. Ми пропонуємо замінити спірний маркер « $nd$ » на « $4d$ », а потім почергово зменшити головні квантові числа для наступних рівнів цієї серії.

Якість нашого опису мішені може бути додатково оцінена шляхом порівняння результатів сил осциляторів різних переходів з експериментальними даними та іншими теоретичними передбаченнями. Точні сили осциляторів дуже важливі для отримання достовірних абсолютних значень перерізів збудження, особливо для оптично дозволених переходів при високих енергіях електронів. У таблиці Б.9 наведено порівняння наших сил осциляторів з компільованими даними, рекомендованими НІСТ [165]. Значення сил осциляторів у  $f$ -представленні для переходів між рівнями тонкої структури були перетворені до мультиплетних  $LS$  значень. Ми бачимо добре узгодження з експериментом для всіх цих переходів, з середньою розбіжністю в процентному вираженні у 5% відсотків.

У таблиці Б.9 також наведені відношення між теоретичними силами осциляторів, отриманими у формі довжини і швидкості оператора електричного диполя. Це відношення можна, у певній мірі, вважати також показни-



ком точності для обчислених  $f$ -значень. Для більшості переходів, значення у формі довжини ( $f_L$ ) і швидкості ( $f_V$ ) узгоджуються в межах кількох відсотків. Винятками є переходи  $3s^24p\ ^2P - 3s^25s\ ^2S$  та  $3s^24d\ ^2D - 3s^26p\ ^2P$ , де відхилення між значеннями в двох формах перевищують 10%.

**6.1.2.2. Розрахунки зіткнення.** Для того, щоб перевірити чутливість результатів до розміру розкладу сильного зв'язку ми провели ряд розрахунків з різною кількістю станів мішені. Ми починали з найпростішої моделі обчислень, що включала перші десять спектроскопічних станів алюмінію, які переважно і являють практичний інтерес. Ця модель буде позначатися як БСР10. Потім ми включали всі стани аж до автоіонізаційного стану  $3s3p^2\ ^2P$ , щоб перевірити вплив важливих внутрішньооболонкових збуджень  $3s - 3p$  (модель БСР32). В якості основної моделі, ми здійснили розрахунки із зовнішніми 81-станами (модель БСР81). Ця модель додатково включає у себе континуальні псевдостани аж до 10 еВ вище порогів іонізації. Як правило, вважається, що цього достатньо для врахування впливу основного зв'язку з континуумом мішені. Ми також здійснили ряд розрахунків у наближенні двох станів, які (розрахунки) близькі до наближення спотворених хвиль. Всі ці обчислення, як і раніше, можна здійснити на стандартних однопроцесорних комп'ютерах.

З іншого боку, опис *ab initio* процесів іонізації вимагає врахування набагато більше континуальних псевдостанів. Щоб мати змогу у більшій степені перекрити континуум мішені, ми зменшили радіус боксу до  $30a_0$  і розглянули модель БСР587 — з 13-ма станами, що представляють зв'язаний спектр і рештою 574-ма станами континууму мішені, що відповідають іонізації  $3p$  і  $3s$ -підоболонки. Ми включили всі дублетні і кватетні стани мішені конфігурацій  $3s^2n\ell$  і  $3s3p\ (^1,^3P)n\ell$  з орбітальним моментом  $\ell = 0, 1, 2, 3$  для зовнішнього електрона і повним орбітальним моментом  $L = 0, 1, 2, 3, 4$ . Псевдостани континууму в цій моделі охоплюють область енергій до 60 еВ

вище границі іонізації. Ця модель вимагає розпаралеленої версії програмного коду для запуску на суперкомп'ютерах із сотнями процесорів.

Рівняння сильного зв'язку були розв'язані за допомогою методу  $R$ -матриці, з використанням послідовної або паралельної версії програмного коду BSR [15]. Відмінною особливістю методу є використання  $B$ -сплайнів в якості універсального базису для представлення орбіталей розсіяння у внутрішній області  $r \leq a$ . Отже, розклад  $R$ -матриці в цій області має вигляд

$$\begin{aligned} \Psi_k(x_1, \dots, x_{N+1}) = A \sum_{ij} \bar{\Phi}_i(x_1, \dots, x_{N+1}; \vec{r}_{N+1}, \sigma_{N+1}) r_{N+1}^{-1} B_j(r_{N+1}) a_{ijk} \\ + \sum_i \chi_i(x_1, \dots, x_{N+1}) b_{ik} \end{aligned} \quad (6.2)$$

Тут  $\bar{\Phi}_i$  позначають каналні функції, побудовані з  $N$ -електронних станів мішені, в той час як сплайни  $B_j(r)$  представляють орбіталі континууму. Функції  $\chi_i$  — це додаткові  $(N + 1)$ -електронні зв'язані стани. У стандартних  $R$ -матричних розрахунках [72] останні включають одну конфігурацію, щоб забезпечити повноту загальної пробної хвильової функції і компенсувати обмеження ортогональності на континуальні орбіталі. З іншого боку, використання в методі БСР неортогональних одноелектронних радіальних функцій дозволяє повністю позбутися цих конфігурацій для компенсації обмежень ортогональності. Ця процедура має практичні переваги в зменшенні псевдорезонансної структури в розв'язках розсіяння (див., для прикладу, обговорення в праці [166]). Як правило, зв'язані канали в БСР-розрахунках використовуються для більш точного опису дійсно зв'язаних станів у системі зіткнення.

У даних розрахунках зв'язані канали були використані тільки для точного опису  $3s^2 3p^2 {}^3P$ ,  ${}^1D$ , і  ${}^1S$ -станів від'ємного іона. Ці стани знаходяться дуже близько до основного стану і, отже, їхнє положення є дуже чутли-

вим до балансу кореляційних поправок у  $N$ -електронній функції мішені і  $(N + 1)$ -електронній функції розсіяння. Для підтримки цього балансу багатоконфігураційні розклади для  $3s^23p^2$ -станів були отримані в тому ж наближенні, що і для станів мішені алюмінію. Ми включили всі одноразові і подвійні збудження  $3s$ - та  $3p$ -орбіталей на  $4\ell$ -кореляційні орбіталі. Наші значення спорідненості  $-0.404$  та  $-0.093$  еВ для  $3s^23p^2$   $^3P$  і  $^1D$  станів добре узгоджуються з експериментальними значеннями  $-0.433$  та  $-0.095$  еВ, відповідно [167]. Стан  $3s^23p^2$   $^1S$  є резонансом від'ємного іона і, за нашими розрахунками, він лежить на  $0.333$  еВ вище основного стану Al.

У даних розрахунках  $B$ -сплайновий базис з боксом розміру  $r = 50a_0$  ( $30a_0$ ) містить 111 (77) сплайнів порядку 8. Максимальний інтервал в обох сітках складав  $0.65a_0$ , що є достатнім для доброго представлення хвильової функції розсіяного електрона при енергіях до 150 еВ. Модель зіткнення БСР587 містить до 1515 каналів розсіяння, що призводить до узальнених задач на власні значення з розмірами матриць аж до 100 000 у  $B$ -сплайновому базисі. Прямі числові розрахунки були виконані для парціальних хвиль із повним орбітальним моментом до  $L \leq 25$ . Приймаючи до уваги повний спін і парність, у цілому отримуємо 104 парціальні хвилі. Розрахунок для зовнішньої області було виконано за допомогою розпаралеленої версії програми STGF [168], у якій, при необхідності, були використані т. з. «top-up»-процедури для оцінки вкладу від більш високих значень  $L$ .

**6.1.3. Результати розрахунків зіткнення  $e + \text{Al}$ .** Перерізи пружного розсіяння, показані на рис. 6.1, проявляють складну енергетичну залежність завдяки різноманітним парціально-хвильовим і резонансним вкладам. Зокрема, «плече» при низьких енергіях обумовлене  $3s^23p^2$   $^1S$ -резонансом, у той час як гострий пік при 3.7 еВ обумовлений  $3s3p^3$   $^3D^0$ -резонансом. Переріз пружного розсіяння поблизу порогу в основному визначається  $3s^23pks$   $^3P^0$ -каналом, з передбачуваною довжиною розсіювання

$-2.33a_0$ . Ця  $^3P^o$ -парціальна хвиля також має мінімум Рамзауера.

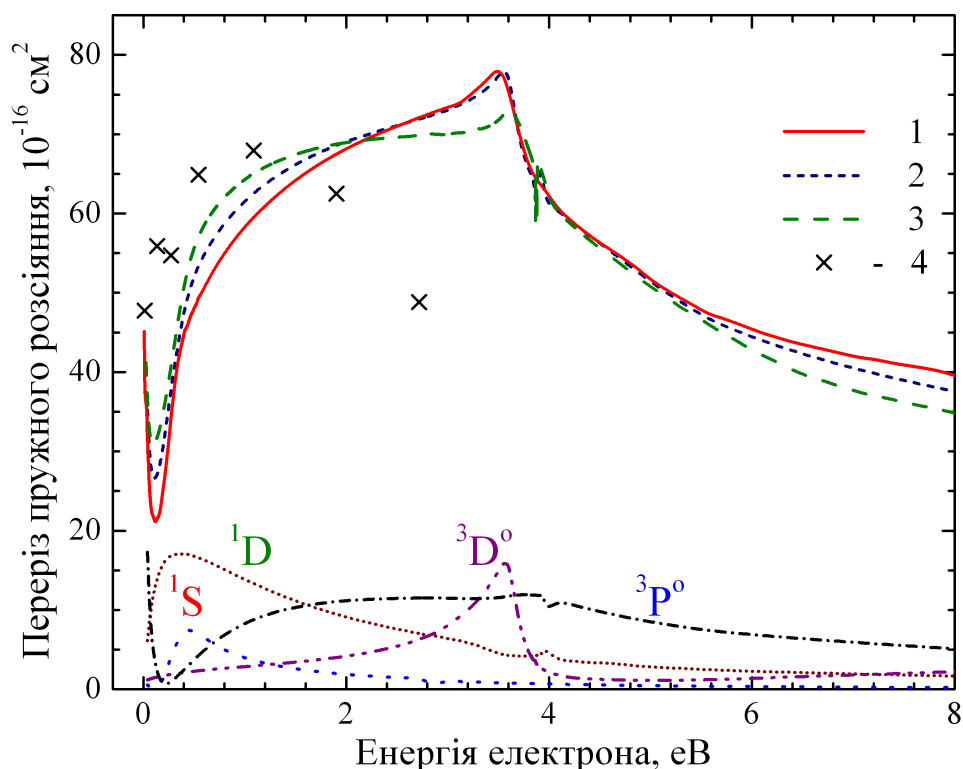


Рис. 6.1: Перерізи пружного розсіяння електронів на атомах алюмінію в їх основному стані  $3s^2 3p \ ^2P^o$ :

1–3 — результати даних розрахунків [3] у наближеннях БСР587, БСР81 та БСР32, відповідно; 4 — наближенні двох станів сильного зв'язку Рябих і Фабрикант [155].

Для наближення БСР587 показано також внесок домінуючих парціальних хвиль  $^1S$ ,  $^3P^o$ ,  $^1D$  та  $^3D^o$ .

Порівняння результатів від різних моделей вказує на повільну збіжність для пружних перерізів при низьких енергіях. Включення континуальних псевдостанів у моделі БСР587 призводять до змін порядку 10% у порівнянні з передбаченнями БСР81. Почасти цей результат пов'язаний з мірою урахування поляризації зарядової хмарки мішені розсіюваним електроном. Розклад БСР587 дає поляризованість основного стану  $58.5a_0^3$ , що добре узгоджується з іншими наявними розрахунками [169], котрі передбачають

поляризованість у діапазоні  $55a_0^3$ – $60a_0^3$ . Результати наближення двох станів сильного зв'язку (С32) Рябих і Фабрикант [166] більш-менш узгоджуються з нашими БСР-перерізами десь до 2 еВ, але при вищих енергіях зіткнення енергетичні залежності вказаних наближень значно відрізняються.

На рис. Б.19–Б.21 представлені енергетичні залежності ІІ для найважливіших дипольно-дозволених, недипольних та обмінних переходів, відповідно, як з основного стану  $3p\ ^2P^o$  атома Al, так і з двох нижніх збуджених станів  $4s\ ^2S$  та  $3s3p^2\ ^4P$ . Через майже повну відсутність інших теоретичних і експериментальних даних, ми порівнюємо між собою наші передбачення, отримані за допомогою різних моделей, які відрізняються мірою включення континуальних псевдостанів. Це дозволяє нам перевірити збіжність розкладу сильного зв'язку.

Як видно з рис. Б.19, більш повне врахування зв'язку каналів приводить до значного зменшення передбачуваних перерізів при низьких і проміжних енергіях електронів. Це стосується зв'язку як для зв'язаних станів, так і для континуальних псевдостанів. Зв'язок між дискретними станами ілюструється порівнянням моделей БСР10 і БСР2, остання із яких близька до наближення спотворених хвиль. Цей зв'язок значно знижує перерізи в області припорогових енергій. Включення автоіонізаційних  $3s3p^2$ -станів і кількох низькорозташованих континуальних псевдостанів у наближенні БСР32 додатково знижує максимальний переріз, але при цьому сильно залежить у деталях від розглядуваного переходу. Більш помітний ефект був виявлений для переходів  $3p - ns$ , ніж для переходів з  $3p - nd$ . Включення додаткових псевдостанів у моделі БСР81 додатково знижує перерізи при проміжних енергіях, але це зниження є меншим за величиною. Як показано на прикладі збуджень  $3p - 4s$  та  $3p - 3d$ , подальше включення псевдостанів у моделі БСР587 не приводить до помітної зміни перерізів. Відповідно, ми розглядаємо результати БСР81 як збіжні, з точністю на рівні кількох відсотків. На рис. Б.19 також показані важливі збудження

автоіонізаційних станів  $3s3p^2\ ^2P$  та  $^2S$ . Це є сильні переходи, які в значній мірі сприяють іонізації Al (див нижче). Наші БСР-передбачення добре узгоджуються з перерізами, отриманими у борнівському наближенні плоских хвиль (ПХБ) [156] після масштабування останніх за допомогою експериментальних сил осциляторів і зсуву максимуму за допомогою емпіричної процедури, описаної в [133]. Сильний вплив зв'язку каналів також встановлено для недипольних переходів, представлених на рис. Б.20.

Тут великі поправки, пов'язані з ефектами сильного зв'язку, проявляються для переходів з основного стану, а також для переходів між збудженими станами. Деякі з цих переходів є відносно сильними, і порівнянними по величині з дипольними збудженнями. Порівняння моделей БСР10, БСР32 і БСР81 показує, що зв'язок між зв'язаними станами є домінуючим, а вплив континуальних псевдостанів відносно невеликий. Це може бути пояснено припущенням, що недипольні переходи можуть містити великий внесок від двох віртуальних дипольних переходів через проміжний стан. Для збудження  $3p - 4p$  моделі БСР81 і БСР587 забезпечують дуже близькі результати, підтверджуючи тим самим повну збіжність наших перерізів.

Всі обмінні переходи, показані на рис. Б.21, зв'язані з метастабільним станом  $3s3p^2\ ^4P$ . Всі обмінні перерізи мають сильний низькоенергетичний максимум і швидко спадають з ростом енергії налітаючих електронів. Ефекти сильного зв'язку тут набагато менш помітні, з більш сильним впливом зв'язку дискретних станів, ніж впливом континуальних псевдостанів.

Результати для перерізів іонізації наведено на рис. Б.22. Результати для БСР587 були отримані як сума перерізів збудження всіх автоіонізаційних станів алюмінію і континуальних псевдостанів. Ми припустили, що радіаційним розпадом автоіонізаційних станів можна знехтувати в порівнянні з автоіонізаційним каналом, за винятком стану  $3s3p^2\ ^2P$ . Тут ми використовували значення коефіцієнта автоіонізаційного розгалуження, рівне 0.9, відповідно до розрахунків ширини автоіонізації в праці [156]. Наші резуль-

тати БСР587 добре узгоджуються з експериментальними даними [3] для всіх енергій електронів. РМПС-перерізи [157] наведені тільки для малих енергій до 30 еВ. На рис. Б.22 також представлено переріз прямої іонізації. Його відмінність від повного перерізу іонізації показує на істотний внесок автоіонізаційного збудження, яке в основному зумовлене сильним внутрішньоболонковим збудження  $3s - 3p$  у стани  $3s3p^2\ ^2P$  та  $^2S$ . Звернемо увагу на те, що модель ЗЧСЗ не включає ці важливі внески від автоіонізаційного збудження і, отже, її передбачення є занадто малими. Близьке узгодження також виявлено з БЗБ-розрахунками [156]. Як уже згадувалося вище, це частково пояснюється використанням для збудження  $3s3p^2$ -станів наших перерізів, які перебувають у близькому узгодженні з результатами методу масштабованого ПХБ, використовуваного у БЗБ-розрахунках.

Нарешті, на рис. Б.23 представлено сумарний повний переріз зіткнення електронів з атомами алюмінію в їх основному стані  $3s^23p$ , тобто суму інтегрованих по кутах перерізів пружного розсіювання, збудження та іонізації. У той час як переріз пружного розсіювання забезпечує найбільший внесок при низьких і середніх енергіях, іонізація домінує при енергіях 30 еВ і вище. В цілому, процеси збудження, складають менше 10% від сумарного повного перерізу.

Оскільки переріз переносу імпульсу, як правило, є важливішим за пружний переріз при моделюванні плазми, він також показаний на рис. Б.23. Різниця між перерізами пружного розсіювання та переносу імпульсу є істотною у всьому діапазоні енергій. Отже, пряме використання перерізу пружного розсіювання не рекомендується в якості заміни перерізу передачі імпульсу, якщо результати для останнього недоступні.

#### 6.1.4. Короткий підсумок дослідження розсіювання $e+\text{Al}$ .

Ми представили великий набір даних з розсіювання електронів на нейтральному алюмінії, в тому числі для пружного розсіювання, передачі імпульсу,

процесів збудження та іонізації основного стану.

Перерізи збудження були отримані для всіх переходів між 14 станами алюмінію, а результати були представлені і обговорені для вибраних переходів. Розрахунки проводилися за допомогою програмного коду BSR [15], в якому для представлення функцій континууму всередині  $R$ -матричної сфери використовувався  $B$ -сплайновий базис. Відмінною особливістю БСР-розрахунків є використання неортогональних орбіталей як при побудові хвильових функцій мішені, так і представлення функцій розсіяння. Цей метод дозволяє генерувати точний опис мішені і мінімізувати псевдореzonансну структуру при вищих енергіях. Зокрема, ми точно представили сильну взаємодію стану  $3s3p^2\ ^2D$  з рідбергівськими серіями  $3s^2nd$ , які є розрізняваною особливістю спектру Al. Враховуючи відсутність доступних експериментальних і теоретичних даних, важливим є той факт, що теоретичні передбачення перевірялися кількома шляхами. Наші найбільш обширні розрахунки включали 587 станів. Для перевірки таких важливих ефектів, як поляризації мішені і збудження континууму мішені, ми порівняли ці результати з більш обмеженими моделями, в які входять тільки зв'язані та автоіонізаційні стани. Було встановлено, що вплив континууму мішені є набагато меншим, ніж той, який був виявлений раніше (у тому числі й нами) для атомів з частково заповненою  $2p$ -оболонкою, таких як C [170], N [171] та F [13]. Близьке узгодження наших моделей БСР81 та БСР587 показує, що дані перерізи можна розглядати як збіжні з точністю до кількох відсотків. Переріз пружного розсіяння має при низьких енергіях кілька відмітних резонансних особливостей. Збіжність розкладу сильного зв'язку в цьому випадку є повільнішою, ніж для перерізів збудження. Переріз переносу імпульсу, який зазвичай використовується при моделюванні плазми, істотно відрізняється від перерізу пружного розсіяння. Ми також отримали добре узгодження з експериментом для перерізу іонізації. Це гарантує нам, що БСР-наближення (сильний зв'язок) з псевдо-



станами працює дуже добре, як було ще раз показано в даному підрозділі дисертації. Отримання в результаті єдиного розрахунку одразу цілої сукупності характеристик пружного розсіювання, збудження та іонізації при зіткненні  $e+Al$  фактично підтверджує статус методу БСР, як інструменту для здійснення «повного» розрахунку розсіювання. Єдине, що наразі дещо обмежує потенційно можливий комплексний характер нашого дослідження зіткнень  $e+Al$ , — це практично повна відсутність експериментальних вимірювань характеристик розсіювання електронів на атомі  $Al$ .

## 6.2. Низькоенергетичне фоторозщеплення зовнішньої оболонки від'ємного іона алюмінію

У цьому підрозділі ми досліджуємо фоторозщеплення від'ємного іона алюмінію, насамперед як у основному стані  $Al^- (3s^2 3p^2) ^3P$ , так і в збудженому  $^1D$  стані. Для генерування точних хвильових функцій початкового зв'язаного стану та кінцевого континуального стану використовується метод Хартрі-Фока з неортогональними, залежними від терму орбіталями. Зіткнення вибитого електрона в полі залишкового іона описується методом  $R$ -матриці з  $B$ -сплайнами в діапазоні енергій фотона від порога до 12 еВ. У розклад сильного зв'язку включені всі канали розсіювання для фоторозщеплення як з  $3p$ -, так і з  $3s$ -орбіталей. Ми передбачаємо ряд помітних резонансних особливостей, перевірка яких призводить до нових викликів у вивченні цього високочорельованого процесу. При класифікації резонансної структури обговорюються парціальні перерізи, разом із внесками основних каналів розсіювання. Передбачені перерізи, як очікується, є найбільш повним і точним, із наразі доступних, набором даних для фоторозщеплення  $Al^-$  при низьких енергіях.

**6.2.1. Вступні зауваження.** Фоторозщеплення від'ємного іона є високочорельованим процесом, який забезпечує строге випробування теорії та

обчислювальних методів, тим самим спонукаючи їх до подальшого розвитку. Процес, що включає від'ємний іон, принципово відрізняється від іонізації нейтрального атома. Зокрема, відсутність далекодієвої кулонівської взаємодії між вибитим електроном і отриманим нейтральним атомом дає унікальну можливість вивчення електронних кореляцій. Збуджені стани від'ємних іонів можуть проявлятися як помітні особливості в спектрі фоторозщеплення, тим самим виявляючи деталі структури та динаміки цих іонів. Завдяки своїм унікальним властивостям, від'ємні іони були об'єктом численних експериментальних і теоретичних досліджень [94].

Як відомо від'ємні іони з групи ІІВ періодичної системи мають конфігурацію основного стану  $(ns^2np^2)^3P$ , а фотозбудження  $ns$ -електрона призводить до помітних  $nsnp^3$ -резонансів (див. [172, 173]). Точний опис цих резонансів є головним завданням для теорії. Як показано в нещодавньому дослідженні фоторозщеплення  $B^-$  [172] та  $Ga^-$  [173], їх інтерпретація не є тривіальною і призвела до різних уточнень у результатах попередніх розрахунків.

Від'ємний іон алюмінію був предметом суттєвої експериментальної та теоретичної роботи з особливими зусиллями, спрямованими на точне визначення електронної спорідненості. Використовуючи електронну спектроскопію для лазерного фоторозщеплення, Feigerle та ін. [174] виміряли спорідненість електронів  $Al^-$  442 (10) меВ, а також встановили наявність рівня  $Al^- (^1D_2)$  з енергією зв'язку 110 (10) меВ. Останнє значення для рівня  $^1D_2$  узгоджується з результатом, отриманим через дисоціацію електричного поля Oprin та ін. [175], де була отримана енергія зв'язку 95 меВ. Пізніше Calabrese та ін. [176] виміряли відносний переріз фоторозщеплення  $Al^-$  у вузькій припороговій області від 0.440 до 0.512 еВ за допомогою коаксіального іонно-лазерного пучкового апарату з пересувним регульованим  $F$ -центровим лазером. Шляхом підгонки даних з перерізів до Вігнерівського порогового закону, значення електронної спорідненості  $Al$  було визначене

як 440.94 (+0.66 / -0.48) меВ. Всі ці ранні вимірювання не змогли розділити відповідну тонку структуру та дослідити цікаву для нас порогову область. Тонка структура основного стану  $\text{Al}^- (3s^2 3p^2) {}^3P_J$  вперше була розрізнена Scheer та ін. [167], з використанням налаштовуваної інфрачервоної лазерної спектроскопії. Було встановлено покращене значення спорідненості електрона, яке рівне 3491.0 (4)  $\text{cm}^{-1}$  (або 432.83 (5) меВ), а для розщеплення  $J = 0, 1$  та  $J = 1, 2$  були встановлені значення 22.7 (3) і 45.7 (2)  $\text{cm}^{-1}$ , відповідно. Ці результати для значень електронної спорідненості містять істотні поправки у порівнянні з попередніми вимірюваннями.

З теоретичної сторони, розрахунки були зроблені Arnau та ін. [177], які застосували метод взаємодії конфігурацій (ВК) з псевдопотенціалами, Woon and Dunning [178], які застосовували метод ВК з кореляційно-последовними базисними наборами, і Wijesundera [179], який застосував багатоконфігураційний метод Дірака-Фока. Вони отримали значення 450 меВ [177], 437 меВ [178], 433 меВ [179], відповідно. Ми відзначаємо дуже близьке узгодження повністю релятивістських *ab initio* передбачень [179] з останніми експериментальними даними [167].

Існує обмежена кількість прямих досліджень фоторозщеплення  $\text{Al}^-$ . На додаток до вищезгаданих вимірювань [176] поблизу порогу відриву, фоторозщеплення  $\text{Al}^- (3s^2 3p^2) {}^3P$  поблизу першого збудженого стану нейтрального алюмінію,  $\text{Al} (3s^2 4s) {}^2S$ , вивчалася як експериментально, так і теоретично Девіс та ін. [180]. Масово-розділений пучок  $\text{Al}^-$  енергією 19 кеВ перетинався з частотно-подвоєним, легованим неодимом, ітрієво-алюмінієво-гранатово накачаним забарвленим лазерним променем, і були виявлені швидкі атоми, створювані в результаті процесів розщеплення. Вимірювання в області енергій трохи нижче порога  $\text{Al} (3s^2 4s) {}^2S$ , виявили великий резонансний пік у сигналі розщеплення. Розрахунок власних каналів  $R$ -матриці генерував резонансну структуру, якісно подібну до цих даних, й ідентифікував великий резонансний пік як такий, що виникає внаслідок

док подвійного збудження стану від'ємного іона, переважно  $(3s^2 4s 4p) \ ^3P^o$ -характеру. Форма теоретичної кривої для цього резонансу якісно узгоджувалася з експериментом, але була значно вузкою. Розрахунки виконувалися в рамках моделі, в якій лише два зовнішні електрони вважалися активними, і тим самим не враховувалися міжоболонкові переходи, що включали би підоболонку  $3s$ . Таке допущення якраз і було визначене в якості можливої причини відмінностей між теорією та експериментом.

Мета даного підрозділу роботи полягала у забезпеченні ретельного та всебічного дослідження фоторозщеплення  $Al^-$  при низьких енергіях. Це включає в себе аналіз раніше спостережуваних резонансів, а також класифікацію додаткових резонансних особливостей, які передбачаються на основі попередніх розрахунків для інших іонів з групи ІІІВ періодичної системи [172,173]. Дані розрахунки виконувалися за допомогою програмного коду  $R$ -матриці з  $B$ -сплайнами (BSR) [15], де  $B$ -сплайновий базис використовується для представлення функцій континууму. В рамках цього методу неортогональні набори орбіталей широко використовуються як для опису мішені, так і для представлення функцій розсіювання. Вищезгадана методика дозволяє залежну від терму оптимізацію зв'язаних орбіталей. У поєднанні з багатоконфігураційними розкладами мішені, це забезпечує систематичний спосіб врахування різних кореляцій та ефектів релаксації кору, які, як очікується, відіграють важливу роль у процесах фоторозщеплення. Крім того, скасування обмежень ортогональності (що зазвичай вводяться з обчислювальних, а не з фізичних міркувань) для орбіталей розсіювання в методі БСР гарантує чисельно-послідовну обробку  $N$ -електронної мішені та  $(N + 1)$ -електронної задачі зіткнення. Це дуже важливо для точного опису припорогової резонансної структури.

### 6.2.2. Методика комп'ютерних обчислень.

**6.2.2.1. Структурні розрахунки.** Стани мішені алюмінію в даних розрахунках були генеровані шляхом поєднання багатоконфігураційного методу Хартрі-Фока (MCHF) та обмеженого в боксі методу сильного зв'язку з  $B$ -сплайнами [162]. Окрім зв'язаних станів, цей метод також генерує неперервний спектр мішені в наближенні з псевдостанами. Структура багатоканального розкладу мішені мала таку ж форму, як і в наших розрахунках електронного розсіювання на нейтральному Al [3], і з деталями можна ознайомитися там. Атом алюмінію ефективно розглядався як система трьох активних електронів над замороженим кором  $1s^2 2s^2 2p^6$ . Оскільки релятивістські ефекти в алюмінії відносно невеликі, ми використовували нерелятивістське наближення  $LS$ -зв'язку. У таблиці Б.10 наведені стани мішені нейтрального алюмінію, використані в поточних розрахунках фоторозщеплення. Основний стан Al має головну конфігурацію  $3s^2 3p$ , і багато збуджених станів мають очевидно просту структуру  $3s^2 n\ell$ . Однак рідбергівська серія  $3s^2 nd$  сильно збурюється  $3s$ -збудженим станом  $(3s3p^2) {}^2D$ . Це класичний приклад надзвичайно сильної взаємодії між пертурбацією і рідбергівською серією, коли пертурбація втрачає свою ідентичність і «розмазується» по всій серії [163]. Тому жоден зі станів серії  ${}^2D$  не може бути чітко ідентифікований як  $(3s3p^2) {}^2D$ -стан. Незважаючи на свій квазі-одинелектронний характер, стани  $3s^2 n\ell$  сильно корельовані через значні домішки конфігурацій  $3p^2 n\ell$  та сильного дипольного просування  $3s$ -електрона до підоболонки  $3p$ . У таблиці Б.10 порівнюється розрахований спектр нейтрального алюмінію з експериментальними значеннями [165] для різних  $LS$ -мультиплетів. Загальне узгодження між експериментом та теорією дуже добре, з відхиленням у розщепленні енергії меншим 42 меВ для всіх станів, включаючи також важливі  $3s3p^2$ -стани зі збудженим кором. Як буде показано нижче, включення станів зі збудженим кором має вирішальне значення для правильного опису резонансної структури фоторозщеплення. Дані розклади сильного зв'язку набагато менші, ніж ті, що використовувалися для роз-

гляду задачі розсіяння  $e + \text{Al}$  [3], де ми включили до 587 станів мішені (як фізичних, так і псевдостанів неперервного спектру). Такі обширні зусилля були необхідними для коректного опису процесу іонізації. З іншого боку, як показано в порівняльному БСР-аналізі різних моделей процесу фоторозщеплення  $\text{V}^-$  [172], розклади сильного зв'язку для вибитого електрона швидко збігаються. Зокрема, було встановлено, що вплив континууму мішені є незначним, за винятком автоіонізаційних станів  $nsnp^2$ , які представляють пряме  $ns$ -фоторозщеплення аніонів  $ns^2np^2$ . Отже, стани, включені в таблицю Б.10, вважаються достатніми для точного опису процесу фоторозщеплення. Для подальшого підвищення точності кінцевих перерізів у наших розрахунках фоторозщеплення, описаних у наступному розділі, ми застосували експериментальні енергії мішені. Визначені пороги енергій фотонів (які були отримані з нашою спорідненістю та експериментальними енергіями збудження) наведені в таблиці Б.10.

**6.2.2.2. Розрахунки фоторозщеплення.** Розрахунки фоторозщеплення були виконані за допомогою коду BSR [15]. Оскільки основна теорія була детально описана в [181], ми наводимо тут лише короткий опис. У  $R$ -матричному підході хвильова функція  $(N + 1)$ -електронної системи у внутрішній області з  $0 < r < a$  розкладається за енергетично незалежними базисними функціями

$$\begin{aligned} \Psi_k(x_1, \dots, x_{N+1}) = A \sum_{i,j} \bar{\Phi}_i(x_1, \dots, x_{N+1}; \vec{r}_{N+1}, \sigma_{N+1}) \frac{u_j(r_{N+1})}{r_{N+1}} a_{ijk} \\ + \sum_i \chi_i(x_1, \dots, x_{N+1}) b_{ik} \end{aligned} \quad (6.3)$$

Тут  $\bar{\Phi}_i$  позначають канальні функції, побудовані з  $N$ -електронних станів мішені, а  $u_j$  — радіальні базисні функції, що описують рух розсіяного (тут — вибитого) електрона.  $\chi_i$  — додаткові  $(N + 1)$ -електронні зв'язані стани. В стандартних  $R$ -матричних розрахунках [72] останні включають одну

конфігурацію і, водночас, забезпечують повноту загальної хвильової функції розсіяння та компенсують обмеження ортогональності, накладені на орбіталі континууму. З іншого боку, використання у методі БСР неортогональних одноелектронних радіальних функцій, дозволяє нам уникати цих конфігурацій виключно для компенсації обмежень ортогональності. Незважаючи на це, в існуючих розрахунках БСР були використані деякі зв'язані канали  $\chi_i$  у розкладі (6.3) для більш точного опису станів  $3s^23p^2$  і  $3s3p^3$   $\text{Al}^-$ . Для цих станів ми також використовували окремі багатоконфігураційні розклади з одно-, дво- та трикратним збудженням з  $3s$ - і  $3p$ -рівневих підболонок. Важливе питання стосується вибору параметрів відсікання в цих розкладах. Щоб зберегти розумний розмір остаточних розкладів для атомних станів, всі ВК-розклади були обмежені шляхом відкидання конфігурацій з коефіцієнтами, меншими за параметр відсікання 0.01. Зазначимо, що збіжність для станів від'ємного іона набагато повільніша, ніж для нейтрального атома. Вибравши менший параметр відсікання (0.005) для цих станів, ми одержали спорідненість електрона 0.437 еВ, що дуже близько до експериментального  $LS$ -значення 0.440 еВ, отриманого як різниця між усередненими по  $J$  енергіями мультиплетів  $\text{Al}^- (3s^23p^2) {}^3P_J$  [167] та  $\text{Al} (3s^23p) {}^2P_J$  [165]. Той же параметр відсікання використовувався для всіх інших станів  $3s^23p^2$  та  $3s3p^3$  іона  $\text{Al}^-$ . Відокремлений розгляд станів від'ємного іона також дозволяє нам акуратно врахувати релаксаційні ефекти, які, як очікується, повинні бути важливими. У нашій реалізації методу  $R$ -матриці радіальні функції  $u_j$  для розсіяного електрона розкладені за сплайновим базисом як

$$u_j(r) = \sum_l c_{lj} B_l(r) \quad (6.4)$$

де коефіцієнти  $c_{lj}$ , так як і коефіцієнти  $a_{ijk}$  та  $b_{ik}$  у рівнянні (6.3), визначаються шляхом діагоналізації загального  $(N+1)$ -електронного гамільтоніана

всередині  $R$ -матричного боксу радіусу  $a$ . Використання  $B$ -сплайнового базису призводить до узагальненої задачі на власні значення вигляду

$$\mathbf{H}\mathbf{c} = E\mathbf{S}\mathbf{c} \quad (6.5)$$

де  $\mathbf{S}$  — матриця перекриття. Ми не накладаємо жодних граничних умов на функції  $u_j$  на зовнішньому краю боксу. Натомість додається оператор Блоха [72], щоб зробити матрицю взаємодії ермітовою у внутрішній області. Тоді амплітуди хвильових функцій розсіяння в різних каналах на межі, необхідні для побудови  $R$ -матриці, задаються коефіцієнтом останнього сплайна, який є єдиним ненульовим сплайном на межі. У даних розрахунках ми використовували радіус  $R$ -матриці  $a = 40a_0$ , де  $a_0 = 0.529 \cdot 10^{-10}\text{м}$  — радіус Бора. Ми використали 111  $B$ -сплайнів порядку 8, щоб перекрити цей радіальний діапазон напівекспоненціальною сіткою вузлів. Це дозволило нам отримати хороші описи зв'язаних станів з основним квантовим числом валентного електрона аж до  $n = 6$ . Модель розсіяння у даних розрахунках містить всі стани мішені, наведені в таблиці Б.10. Вона об'єднує дев'ять станів мішені  $3s^2n\ell$  і три стани зі збудженим кором  $3s3p^2$ . Таким чином, рівняння сильної взаємодії, в загальному, містять 12 станів мішені, що дає в результаті до 21 каналу розсіяння (для парціальної хвилі  $^3P$ ). З обчислювальної точки зору, це проста модель, і всі розрахунки виконувалися на звичайному портативному комп'ютері (ноутбучі). Тим не менше, очікується, що ця модель точно описує фоторозщеплення як з  $3p$ -, так і з  $3s$ -підоболонки разом з точним МСНФ описом як атомних станів, так і станів від'ємного іона. В теорії  $R$ -матриці переріз фоторозщеплення визначається через дипольні матричні елементи між початковим станом  $\Psi_0$  і базисними станами  $R$ -матриці  $\Psi_k$ , за умови, що всі радіальні орбіталі початкового стану добре обмежені внутрішньою областю. Загальний переріз фотоіонізації (в одиницях  $a_0^2$ ) для енергії фотонів (у Рідбергах) та поча-



ткового стану з сумарним орбітальним кутовим моментом  $L_0$  задається у вигляді

$$\sigma(\omega) = \frac{8}{3}\pi^2\alpha\omega^{\pm 1}\frac{1}{2L_0 + 1}\sum_j |(\Psi_j^-||D||\Psi_0)|^2 \quad (6.6)$$

де  $\alpha \approx 1/137$  — константа тонкої структури, а  $D$  — електричний дипольний оператор. Степені  $\omega$  (+1 або -1) відповідають формам довжини та швидкості. Індекс  $j$  пробігає всі різноманітні відкриті канали. Розкладаючи  $\Psi_j^-$  за станами  $R$ -матриці, знаходимо

$$(\Psi_j^-||D||\Psi_0) = \frac{1}{a}\sum_k \frac{(\Psi_k||D||\Psi_0)}{E_k - E_0 - \omega} \mathbf{w}_k^T \mathbf{R}^{-1} \mathbf{F}_j^-(a) \quad (6.7)$$

де  $(\Psi_k||D||\Psi_0)$  — редуковані матричні елементи між початковим станом та базисними функціями  $R$ -матриці,  $\mathbf{w}_k^T$  позначає поверхневу амплітуду розв'язків у внутрішній області при  $r = a$ , а матриця  $\mathbf{R}^{-1}$  є оберненою до  $R$ -матриці [15]. Енергії  $E_k$  і  $E_0$  також задаються в Рідбергах. Якщо всі канали відкриті (про необхідні модифікації у випадку закритості деяких каналів, докладніше див. [72]), асимптотичні форми радіальних хвильових функцій  $F_i(r)$  для розсіяного електрона можуть бути виражені у вигляді

$$\mathbf{F}(r) \sim \mathbf{k}^{-1/2}(\mathbf{S} + \mathbf{CK}) \quad (6.8)$$

Тут ми записали імпульс каналу,  $\mathbf{k}$ , як діагональну матрицю. Діагональні матриці  $\mathbf{S}$  та  $\mathbf{C}$  відповідають регулярним і нерегулярним функціям Кулона (або Ріккати-Бесселя) у кожному каналі розсіювання. Асимптотичний вираз (6.8) визначає реактансну  $\mathbf{K}$ -матрицю,  $\mathbf{K}$ , яка підходить для граничних умов стоячої хвилі. З іншого боку, для фоторозщеплення розв'язки відповідають асимптотичним умовам з плоскою хвилею в напрямку імпульсу  $\mathbf{k}$  вибитого електрона і розбіжним хвилям у всіх відкритих каналах. Відповідні радіальні функції  $\mathbf{F}^-$  відносяться до  $\mathbf{F}$  із асимптотичної форми  $\mathbf{K}$ -матриці як

$$\mathbf{F}^- = -i\mathbf{F}(1 - i\mathbf{K})^{-1} \quad (6.9)$$

Для генерування асимптотичних розв'язків **F** була використана програма ASYPSK [182].

### 6.2.3. Результати для фоторозщеплення.

**6.2.3.1. Результати  $^3P$ -фоторозщеплення.** На рисунку 6.2 показані наші результати для повного перерізу фоторозщеплення  $\text{Al}^- (3s^2 3p^2) ^3P$  у діапазоні енергій фотонів від порога до 12 еВ. Як видно з рисунка, наші передбачення у формі довжини і у формі швидкості дуже добре узгоджуються між собою при всіх енергіях, причому відмінності не перевищують 15%. Хоча подібне не є строгим доказом, але це сильний індикатор загальної високої якості хвильових функцій, що використовуються в розрахунках. Відмінності, що залишаються, зв'язані з обмеженнями, накладеними на розклади мішені. Енергетична залежність перерізів фоторозщеплення проявляє помітну структуру з декількома максимумами та мінімумами, як вузькими, так і широкими.

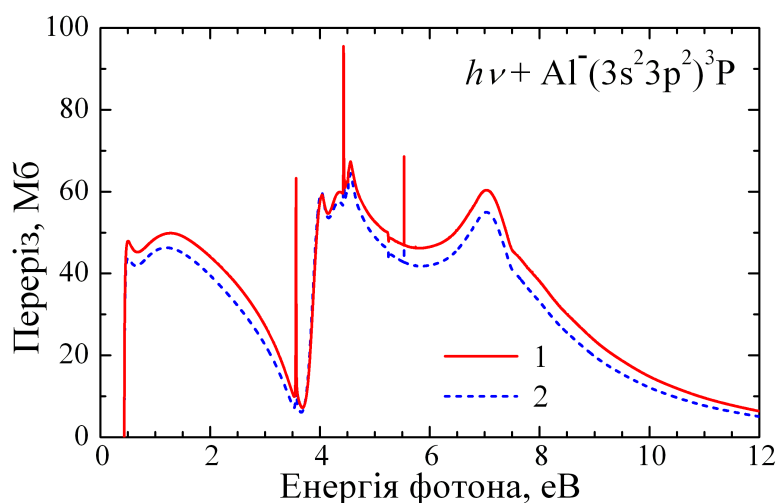


Рис. 6.2: Повний переріз фоторозщеплення  $\text{Al}^- (3s^2 3p^2) ^3P$ :

1 — переріз, отриманий у формі довжини електричного дипольного оператора; 2 — переріз, отриманий у формі швидкості.

Нижче ми класифікуємо більшість цих особливостей як можливі резонанси від'ємного іона або як такі, що зв'язані з відкриттям каналів при різних по-

рогах. Це буде зроблено шляхом ретельного аналізу парціально-хвильових перерізів і внесків домінуючих індивідуальних каналів іонізації.

Щоб правильно розрізнити можливі резонансні структури, у даних розрахунках ми використовували невеликі кроки  $10^{-4}$  Ry при зміні енергії падаючих фотонів. Резонанси відповідають тимчасовому захопленню електрона з утворенням короткоживучого квазізв'язаного стану, і вони є ключовими особливостями, необхідними для розуміння багатьох процесів електрон-атомного розсіяння при малих енергіях. У безпосередній близькості від резонансу переріз часто різко змінюється з енергією, а власна фазова сума змінюється на  $\pi$  радіан у відносно вузькому енергетичному діапазоні.

Для отримання резонансних параметрів ми спочатку використовували стандартну процедуру, в якій ширина резонансу визначається з інверсії похідної по енергії від фазового зсуву при резонансній енергії, припускаючи постійним фоновий зсув фази [183]. Аналізуючи суми власних фаз для заданої парціальної хвилі, ми отримали параметри резонансів (положення та ширину), наведені у таблиці Б.11, разом із їх попередньою класифікацією.

Ця процедура, однак, є дещо неоднозначною у випадку широких резонансів, коли енергетична залежність фазового зсуву може значно відрізнятися. Для додаткової перевірки точності резонансних параметрів ми також використовували метод матриці часової затримки [184]. У цьому методі матриця часової затримки [185] використовується для встановлення додаткового часу польоту налітаючої частинки через її взаємодію з мішенню. Поблизу резонансу, час затримки виявляє форму лоренціана, який може бути підігнаний для встановлення резонансних параметрів. Резонанси переважають найдовшу часову затримку настільки, що фон, насправді, взагалі можна розглядати як константу. Однак, як зазначалося вище, в інтерпретації слід проявляти особливу обережність, коли резонанс є широким і перекриває один або навіть кілька порогів. Параметри резонансів, визначені методом часової затримки, порівнюються з даними зсуву фаз у таблиці

Б.11. Як і очікувалося, найбільші відмінності між результатами, отриманими двома методами, були виявлені для широких  $(3s3p^3)$ -резонансів, за винятком найвищих  $^3S^o$ -термів, де фоновий внесок невеликий. Згадані вище розбіжності можуть служити оцінкою точності резонансних параметрів.

Тепер ми проаналізуємо та прокоментуємо результати для кожної парціальної хвилі окремо. Відповідно до правил дипольного відбору, фоторозщеплення основного стану  $Al^- (3s^23p^2) ^3P$  призведе до трьох результуючих станів неперервного спектру із загальною симетрією  $^3D^o$ ,  $^3P^o$  або  $^3S^o$ , відповідно. На рисунку Б.24 видно парціальний переріз для переходу  $^3P^e \rightarrow ^3D^o$  та відповідних домінантних каналів. Перший широкий пік у парціальному перерізі походить від каналу розсіяння  $3s^23p (^2P^o) kd$ , який є домінуючим каналом для цієї парціальної хвилі. На переріз для цього каналу сильно впливає широкий резонанс  $Al^- (3s3p^3) ^3D$  при 3.870 еВ. Цей сильно асиметричний резонанс Фано має віконну особливість при 3.658 еВ і закінчується при відкритті нового порогу збудження мішені  $Al (3s3p^2) ^4P$ . Цей резонанс є основною загальною особливістю у фоторозщепленні атомів з групи ІІВ. Його було також виявлено в БСР-дослідженнях фоторозщеплення  $B^-$  [172] та  $Ga^-$  [173]. Всі інші особливості цієї парціальної хвилі пов'язані з відкриттям нових каналів. Зокрема, широкий максимум при 7.73 еВ пов'язаний з відкриттям каналу  $3s3p^2 (^2P) kp$ . Загалом ми виявили, що пряме фоторозщеплення через переходи  $3s \rightarrow kp$  та  $3p \rightarrow kd$  відображає домінуючі процеси. Всі інші канали розсіювання дають лише дуже малі внески.

На рисунку Б.25 ми показуємо переріз, що призводить до кінцевої симетрії  $^3P^o$ . Крутий підйом біля порогу зумовлений каналом  $3s^23p (^2P^o) ks$ , який демонструє характеристики  $s$ -хвильового розсіювання. Зі збільшенням енергії фотонів, канал  $3s^23p (^2P^o) kd$  підвищує інтенсивність і стає домінуючим. Перший різкий резонансний пік, розташований при 3.56 еВ, ідентифікується як  $(3s^24s4p) ^3P^o$  резонанс Фано і буде обговорюватися пізніше у порівнянні з експериментом.

Другий гострий пік при 4.424 еВ, трохи нижче стану мішені  $3s^23d$ , пов'язаний з резонансом  $(3s^23d4p) \ ^3P^o$ . Широка віконна структура при 4.055 еВ та наступним піком пов'язана з іншим асиметричним резонансом Фано основної конфігурації  $(3s3p^3) \ ^3P^o$ . Його параметри наведені в таблиці Б.11. Ліве «крило» цього резонансу сильно збуджується багатьма іншими відкритими каналами, тим самим приводячи до додаткових невеликих структур. Два максимуми при більш високих енергіях пов'язані з відкриттям каналів  $3s3p^2 \ (^2S) \ kp$  та  $3s3p^2 \ (^2P) \ kp$  через  $3s$ -фоторозщеплення. Подальша автоіонізація цих  $3s3p^2$ -станів призводить до подвійного фоторозщеплення та, зрештою, до  $Al^+$ .

На рисунку Б.26 показані парціальні перерізи для симетрії  $^3S^o$ . Ця парціальна хвиля включає в себе лише два стани мішені  $Al \ (3s3p^2) \ ^4P$  та  $Al \ (3s3p^2) \ ^2P$ , а в перерізі переважає сильний широкий пік при 7.062 еВ. Ми класифікуємо цю особливість як резонанс  $Al^- \ (3s3p^3) \ ^3S^o$ . Він лежить між своїми «батьківськими» станами з основною конфігурацією  $3s3p^2$  і, отже, не може розглядатися як звичайний резонанс Фешбаха. У нейтральних атомах або додатних іонах фешбахівські резонанси часто можуть бути представлені батьківськими станами плюс захоплений електрон. Однак для квазізв'язаних станів від'ємних іонів така фізична картина не працює, оскільки за рахунок слабого кулонівського притягання ядра захоплений електрон може значно впливати на орбіталі в батьківських станах, особливо у випадку еквівалентних електронів. У нашому випадку, наприклад, середній радіус  $3p$ -електрона змінюється з  $3.24a_0$  в початкових станах  $Al \ (3s3p^2)$  до  $4.37a_0$  у станах  $Al^- \ (3s3p^3)$ . Це призводить до значної зміни в силі електрон-електронної взаємодії між валентними електронами, що, в свою чергу, може збільшити енергію результуючого квазізв'язаного стану від'ємного іона. Ще одним наслідком є те, що такий клас резонансів не може бути добре описаний у «чистому» розкладі сильного зв'язку з фіксованими хвильовими функціями мішені.

На рисунку Б.27 представлені перерізи фоторозщеплення для окремих залишкових станів мішені. Як і очікувалося, основний внесок отримується від відриву  $3p$ -електрона, залишаючи, таким чином, мішень в основному стані  $\text{Al } (3s^2 3p) \ ^2P^o$ , у той час як  $3s$ -відрив залишає мішень у збуджених станах  $\text{Al } (3s 3p^2) \ ^4P^o$  і  $\text{Al } (3s 3p^2) \ ^2P^o$ . В околі резонансу  $\text{Al}^- (3s 3p^3) \ ^3S^o$   $3s$ -фоторозщеплення навіть стає домінуючим. Всі інші канали роблять практично незначні внески, за винятком каналів, що ведуть до кінцевого стану  $\text{Al } (3s^2 4p) \ ^2P^o$ , де за процесом фоторозщеплення відбувається струс електрона  $3p$  до орбіталі  $4p$ .

Порівняння з наявними теоретичними та експериментальними даними наведено на рисунку Б.27. Розрахунок у наближенні власних каналів  $R$ -матриці Девіс та ін. [180] включає лише  $3p$ -фоторозщеплення. Хоча в припороговій області результати тісно узгоджуються з нашими перерізами, відмінності значно зростають при підвищенні енергії, особливо поблизу 3.5 еВ. Як обговорювалося вище, ця область сильно впливає на резонанс  $\text{Al}^- (3s 3p^3) \ ^3D^o$ , що з'являється завдяки  $3s$ -фоторозщепленню. Нехтування цим процесом у попередньому розрахунку [180] пояснює різницю між результатами у вказаній енергетичній області.

Обидва розрахунки передбачають сильний вузький резонанс,  $\text{Al}^- — (3s^2 4s 4p) \ ^3P^o$ , розташований трохи нижче першого порогу збудження  $\text{Al } (3s^2 4s)$ . Цей резонанс також був виявлений при відносних вимірах Девіс та ін. [180]. Права вставка на рисунку 6 показує експериментальні перерізи, нормовані для отримання найкращого візуального узгодження з поточними розрахунками. Хоча щодо позиції цього резонансу є добре узгодження, ми бачимо помітні відмінності між їх експериментальними та теоретичними ширинами. Експериментальна ширина 13 меВ майже вдвічі перевищує нашу величину 7 меВ. Розрахунок власних каналів [180] також передбачає значно вужчий резонанс, ніж експериментальне значення.

Як можливу причину цієї невідповідності автори [180] запропонували

розглядати нехтування переходами між оболонками, що включають  $3s$ -підоболонку. Наші розрахунки, однак, включають в себе  $3s$ -підоболонку, проте й вони все ще передбачають вузьку ширину. На рисунку Б.28 також показані відносні вимірювання Calabrese та ін. [176] у припороговій області. Загалом енергетичні залежності перерізів у цій енергетичній області добре узгоджуються, проте експериментальні перерізи показують більш крутий підйом, а наше значення порогу 437 меВ, трохи нижче, ніж експериментально визначений поріг 441 меВ. Як згадувалося вище, пізніші вимірювання Scheer та ін. [167] запропонували нижчий поріг фоторозщеплення. Ще більш детальне обговорення порогової області, однак, вимагає розділення тонкої структури рівнів  $Al$  та  $Al^-$ . Це виходить за межі даної теоретичної моделі.

**6.2.3.2. Результати  $^1D$ -фоторозщеплення.** Згідно з нашими розрахунками,  $Al^-$  має збуджений зв'язаний стан  $(3s^23p^2) ^1D^e$  з енергією зв'язку 0.097 еВ. Таким чином, цей стан може робити вклад у повне фоторозщеплення  $Al^-$ , і відповідні перерізи є необхідними для інтерпретації будь-яких експериментальних вимірювань. Повний та парціальні перерізи фоторозщеплення для початкового стану  $^1D^e$  представлені на рисунку Б.29.

У порівнянні з результатами для основного стану  $^3P^e$ , перерізи є більшими і також мають помітні резонансно-подібні структури. Однак не всі піки можуть бути пов'язані з певними резонансами. Аналіз власних фаз показує, що лише два піки (при 5.629 еВ для парціальної хвилі  $^1D^o$  та 6.076 еВ для парціальної хвилі  $^1P^o$ ) обумовлені відповідними станами від'ємного іона  $3s3p^3$  (див. Таблицю Б.11). Всі інші структури відображають близькі до порогових максимуми, викликані відкриттям нових каналів. Найбільш помітними є припорогові максимуми в каналах  $3s^23pks$ ,  $3s^24skp$  та  $3s3p^2 (^2P) kp$  для парціальної хвилі  $^1P^o$ , каналі  $3s3p^2 (^2P) kp$  для парціальної хвилі  $^1D^o$  та каналах  $3s^23pkd$  і  $3s^23dkp$  для парціальної хвилі  $^1F^o$ . Звернемо увагу, що

багато піків розташовані над порогом іонізації Al при 5.96 меВ (відносно основного стану Al) і пов'язані з кінцевими станами мішені  $3s3p^2$ . Подальша автоіонізація цих станів призведе до подвійного фоторозщеплення, що приводить до додатного іона  $Al^+$  як кінцевого продукту реакції.

**6.2.4. Заклучні зауваження.** Ми провели детальне вивчення фоторозщеплення  $Al^-$  і представили результати для повних, а також парціальних перерізів для основних каналів розсіювання. Розрахунки проводилися за допомогою методу БСР, у якому використання неортогональних наборів орбіталей дозволяє забезпечити високу гнучкість і, отже, точність при побудові хвильових функцій мішені. Для цієї задачі дуже важливою є можливість індивідуальної оптимізації одноелектронних орбіталей для кожного вибраного стану, особливо через те, що ми виявили значну орбітальну релаксацію під час процесу фоторозщеплення. Наші результати, отримані в формі довжини та швидкості електричного дипольного оператора, дуже добре узгоджуються між собою.

Енергетична залежність перерізу фоторозщеплення має кілька помітних особливостей. Для уточнення порогу та резонансної структури детально проаналізовані як парціальні перерізи, так і основний внесок окремих каналів іонізації в парціальні перерізи. Ми підтверджуємо вузький резонанс  $Al^- (3s^24s4p) ^3P^o$  визначений експериментально [180], але ми отримуємо ширину резонансу значно меншу, ніж в експерименті.

Найголовніше, що наші розрахунки показують сильний вплив  $3s$ -фоторозщеплення, що, в свою чергу, призводить до яскраво виражених  $3sp^3$ -резонансів. Ці резонанси відповідальні за відзначені особливості низькоенергетичного фоторозщеплення з основного стану  $(3s^23p^2) ^3P$  та збудженого стану  $(3s^23p^2) ^1D$  іона  $Al^-$ . Ці особливості повинні бути виявлені експериментально. Отже, передбачувані перерізи фоторозщеплення дають нові можливості для майбутніх досліджень від'ємного іона  $Al^-$ . Нарешті, від-



значимо дуже близьку схожість резонансної структури, виявленої у фоторозщепленні  $\text{Al}^-$  із резонансними структурами  $\text{B}^-$  та  $\text{Ga}^-$ , розглянутими раніше [172, 173]. Порівняння та аналіз цих результатів разом проливають більше світла на кореляції у від'ємних іонах групи ІІВ.

## Висновки до розділу 6

1. Вперше проведено систематичне дослідження пружного розсіяння повільних електронів на атомах алюмінію. 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. З'ясовано причини наявних розбіжностей між результатами чотирьох варіантів БСР-розрахунків (БСР10, БСР32, БСР81 та БСР587) перерізів пружного  $e+\text{Al}$  розсіяння, що відрізняються кількістю врахованих в  $R$ -матричному розкладі спектроскопічних зв'язаних станів та псевдостанів континууму атома  $\text{Al}$ . Встановлено, що сукупний вплив поляризації мішені налітаючим електроном та ефектів зв'язку дискретних станів між собою та з іонізаційним континуумом на перерізи пружного  $e+\text{Al}$  розсіяння зумовлює розбіжності між результатами двох основних БСР81 та БСР587 моделей розсіяння у межах 10%.

2. 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 станів  $(3s^23p^2) {}^3P$ ,  ${}^1D$  та  ${}^1S$  від'ємного іона  $\text{Al}^-$  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.

3. Вперше проведено систематичні розрахунки енергетичних залежностей перерізів для найбільш важливих дипольно-дозволених  $3p\ ^2P^o - ns\ ^2S$  ( $n = 4, 5, 6$ ),  $3p\ ^2P^o - nd\ ^2D$  ( $n = 3, 4, 5$ ),  $3s^2 3p\ ^2P^o - 3s 3p^2\ ^2S$  та  $3s^2 3p\ ^2P^o - 3s 3p^2\ ^2P$ , недипольних  $3p\ ^2P^o - np\ ^2P^o$  ( $n = 4, 5, 6$ ),  $4s\ ^2S - ns\ ^2S$  ( $n = 5, 6$ ),  $3p\ ^2P^o - 4f\ ^2F^o$ , 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 досліджені резонансні ефекти, що пов'язані зі збудженням АІС  $(3s 3p^2)\ ^2P$ ,  $^2S$  в атомі алюмінію. Розраховано положення цих резонансів.

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

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

## ВИСНОВКИ

В дисертаційній роботі отримано такі результати:

1. 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.

2. Запропоновано новий метод дискретизації неперервного спектра  $(N+1)$ -електронної системи «атом + налітаючий електрон», який базується на одноразовій діагоналізації матриці повного гамільтоніана  $H_{N+1}$  у  $B$ -сплайновому базисі.

3. З використанням залежних від терму неортогональних орбіталей розроблено новий ефективний спосіб урахування резонансних ефектів, який дозволяє мінімізувати псевдорезонансну структуру в перерізах розсіювання.

4. 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  $\text{Ca}^-$  та  $\text{Al}^-$ . Дані охоплюють пружне розсіювання, передачу імпульсу, збудження та іонізацію атомів Ca і Al електронним ударом, а також процес фоторозщеплення від'ємних іонів  $\text{Ca}^-$  та  $\text{Al}^-$ .

5. З використанням розширеної версії БСР-версії  $R$ -матричного методу проведено систематичне дослідження розсіювання електронів на атомі Ca та фоторозщеплення від'ємного іона  $\text{Ca}^-$  в області енергій від порога до 4 еВ. Результати наших БСР39-розрахунків інтегрованого за кутом повного перерізу та перерізу пружного  $e+\text{Ca}$ -розсіювання 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  $4s^2 3d\ ^2D$ , тоді як резонанси форми  $(4s4p\ ^1P^o)kp$  відповідають за різкі піки в перерізах фоторозщеплення  $\text{Ca}^-$ .

6. Комбінованим методом БКХФ-БСР, що ґрунтується на концепції «стиснутого атома» та використанні  $B$ -сплайнів як базисних функцій, розраховано енергії зв'язку основного та 13 збуджених станів атома  $\text{Al}$  з електронними конфігураціями  $3s2np\ ^2P^o$  ( $n = 3, 4, 5, 6$ ),  $3s^2 ns\ ^2S$  ( $n = 4, 5, 6$ ),  $3s^2 nd\ ^2D$  ( $n = 3, 4$ ),  $3s3p^2\ ^4,2P, ^2D, ^2S$  та  $3s^2 4f\ ^2F^o$ . Результати розрахунків енергій зв'язку зазначених станів атома  $\text{Al}$  добре узгоджуються з наявними експериментальними даними, рекомендованими НІСТ.

7. Виконано чисельні розрахунки сил осциляторів для найважливіших переходів в атомі  $\text{Al}$ . 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  $\text{Al}$ . Результати розрахунків сил осциляторів у формі довжини і в формі швидкості практично збігаються і добре узгоджуються з даними, рекомендованими НІСТ.

8. Вперше проведено систематичне дослідження пружного розсіяння повільних електронів на атомах алюмінію. Виявлено складну енергетичну залежність перерізів пружного  $e+\text{Al}$  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  $e+\text{Al}$  розсіяння, що відрізняються кількістю врахованих в  $R$ -матричному розкладі зв'язаних станів та псевдостанів континууму атома  $\text{Al}$ . Встановлено, що сукупний вплив поляризації мішені налітаючим електроном та ефектів зв'язку дискретних станів між собою та з іонізаційним континуумом на перерізи пружного

жного  $e+Al$  розсіяння зумовлює розбіжності між результатами двох основних БСР81 та БСР587 моделей розсіяння у межах 10%.

9. 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.

10. 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.

11. 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 ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. Low-energy electron scattering from Ca atoms and photodetachment of  $\text{Ca}^-$  / Oleg Zatsarinny, Klaus Bartschat, Sergey Gedeon et al. // Phys. Rev. A. 2006. Vol. 74. P. 052708.
2. Electron-impact excitation of calcium / Oleg Zatsarinny, Klaus Bartschat, Ludmila Bandurina, Sergey Gedeon // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 2007. Vol. 40, no. 20. P. 4023–4031.
3. *B*-spline *R*-matrix-with-pseudostates calculations for electron collisions with aluminum / Viktor Gedeon, Sergej Gedeon, Vladimir Lazur et al. // Phys. Rev. A. 2015. Vol. 92. P. 052701.
4. Low-energy outer-shell photo-detachment of the negative ion of aluminum / Viktor Gedeon, Sergej Gedeon, Vladimir Lazur et al. // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 2018. Vol. 51, no. 3. P. 035004.
5. Розсіяння електронів на атомі кальцію / О. Зацарінний, К. Бартшат, Л. Бандуріна та ін. // Науковий вісник Ужгородського університету. Серія Фізика. 2007. Т. 21. С. 205–214.
6. Гедеон С. В. Розсіяння електронів на кальції при наднизьких енергіях // Науковий вісник Ужгородського університету. Серія Фізика. 2008. Т. 23. С. 53–57.
7. Гедеон С. Резонансна структура інтегральних перерізів розсіяння електронів на атомі Кальцію в області енергій до 4.3 еВ // Науковий вісник Ужгородського університету. Серія Фізика. 2009. Т. 24. С. 239–249.
8. Гедеон С., Лазур В. Розрахунки перерізів розсіяння електронів на атомі Ca // Науковий вісник Ужгородського університету. Серія Фізика. 2009. Т. 25. С. 130–140.

9. Gedeon S., Lazur V. BSR-розрахунки розсіяння електронів на атомі кальцію та їх експериментальне підґрунтя // Науковий вісник Ужгородського університету. Серія Фізика. 2011. Т. 29. С. 210–216.
10. Нодь Є., Гедеон С., Лазур В. Збудження електронним ударом нижчих рівнів атомів Mg, Ca та Sr // Науковий вісник Ужгородського університету. Серія Фізика. 2016. Т. 40. С. 122–129.
11. Cross sections for electron scattering from magnesium / O. Zatsarinny, K. Bartschat, S. Gedeon et al. // Phys. Rev. A. 2009. Vol. 79. P. 052709.
12. Electron scattering from silicon / V. Gedeon, S. Gedeon, V. Lazur et al. // Phys. Rev. A. 2012. Vol. 85. P. 022711.
13. *B*-spline *R*-matrix-with-pseudostates calculations for electron-impact excitation and ionization of fluorine / V. Gedeon, S. Gedeon, V. Lazur et al. // Phys. Rev. A. 2014. Vol. 89. P. 052713.
14. Electron-impact excitation of  $5^1S - 5^1P^o$  resonance transition in Sr atom / E. Nagy, V. Gedeon, S. Gedeon, V. Lazur // Ukr. J. Phys. 2018. Vol. 63, no. 1. P. 11–24.
15. Zatsarinny O. BSR: B-spline atomic R-matrix codes // Comput. Phys. Commun. 2006. Vol. 174, no. 4. P. 273–356.
16. Мотт Н., Месси Г. Теория атомных столкновений. Издание 3-е, перераб. и доп. изд. М. : Мир, 1969.
17. Ву Т. Ю., Омура Т. Квантовая теория рассеяния. М. : Наука, 1969.
18. Лендъел В. И., Навроцкий В. Т., Сабад Е. П. Теория резонансных явлений в электрон-атомных столкновениях. Київ : Наукова думка, 1988.
19. Бэрк Ф. Д. Потенциальное рассеяние в атомной физике. М. : Атомиздат, 1980. Пер. с англ., США, 1977.
20. Медведев С. Ю., Кривский И. Ю. Об интерференции резонансного и потенциального рассеяний. I. Одноканальный резонанс. К. : Институт ядерных исследований, 1982. Препринт КИЯИ-82-16.

21. Тейлор Д. Теория рассеяния. Квантовая теория нерелятивистских столкновений. М. : Мир, 1975. Пер. с англ.
22. Ньютон Р. Теория рассеяния волн и частиц. М. : Мир, 1969.
23. Гайлитис М. К. Метод сильной связи в теории электронно-атомных столкновений // Усп. физ. наук. 1975. Т. 116, № 8. С. 665–686.
24. Каразия Р. И. Коллапс орбиты возбужденного электрона и особенности атомных спектров // Усп. физ. наук. 1981. Т. 135, № 9. С. 79–115.
25. Лендшел В. И., Навроцкий В. Т., Сабад Е. П. Резонансы в рассеянии электронов на атомах и ионах // Усп. физ. наук. 1987. Т. 151, № 3. С. 425–468.
26. Ремета Е. Ю. Потенциально-резонансные характеристики процесса упругого рассеяния медленных электронов атомами кальция // Журнал технической физики. 2006. Т. 76, № 6. С. 25–31.
27. Контрош Е. Э., Чернышева И. В., Шпеник О. Б. Упругое рассеяние низкоэнергетических электронов атомами кадмия // Журнал технической физики. 2003. Т. 73, № 8. С. 25–29.
28. Evidence for a stable negative ion of calcium / D. J. Pegg, J. S. Thompson, R. N. Compton, G. D. Alton // Phys. Rev. Lett. 1987. Vol. 59. P. 2267–2270.
29. Fischer C. F., Lagowski J. B., Vosko S. H. Ground states of  $\text{Ca}^-$  and  $\text{Sc}^-$  from two theoretical points of view // Phys. Rev. Lett. 1987. Vol. 59. P. 2263–2266.
30. Feshbach H. Unified theory of nuclear reactions // Annals of Physics. 1958. Vol. 5, no. 4. P. 357–390.
31. Попл Д. А. Квантово-химические модели // УФН. 2002. Т. 172, № 3. С. 349–356.
32. Меркурьев С., Фаддеев Л. Квантовая теория рассеяния для систем нескольких частиц. М. : Наука, Главная редакция физико-математической литературы, 1985.



33. Кукулин В. И., Рубцова О. А. Формулировка квантовой теории рассеяния в терминах собственных дифференциалов (стационарных волновых пакетов) // ТМФ. 2002. Т. 130, № 1. С. 64—86.
34. Кукулин В. И., Рубцова О. А. Дискретная квантовая теория рассеяния // ТМФ. 2003. Т. 134, № 3. С. 460—486.
35. Кукулин В. И., Рубцова О. А. Конечномерные аппроксимации операторов теории рассеяния в представлении волновых пакетов // ТМФ. 2004. Т. 139, № 2. С. 291—306.
36. Кукулин В. И., Померанцев В. Н., Рубцова О. А. Метод пакетной дискретизации континуума для решения трехчастичной задачи рассеяния // ТМФ. 2007. Т. 150, № 3. С. 473—497.
37. Мессиа А. Квантовая механика / Под ред. Л.Д. Фадеева. М. : Наука, 1978. Т. 1, 2. Перевод с франц. В.Т. Хозяинова.
38. Кукулин В. И., Рубцова О. А. Решение задачи рассеяния заряженных частиц с помощью пакетной дискретизации континуума // ТМФ. 2005. Т. 145, № 3. С. 393—410.
39. Rotenberg M. Application of sturmian functions to the Schroedinger three-body problem: Elastic  $e^+$ -H scattering // Annals of Physics. 1962. Vol. 19, no. 2. P. 262–278.
40. Yamani H., Reinhardt W.  $L^2$  discretizations of the continuum: Radial kinetic energy and Coulomb Hamiltonian // Phys. Rev. A. 1975. Vol. 11. P. 1144–1156.
41. Kaufmann K., Baumeister W., Jungen M. Universal Gaussian basis sets for an optimum representation of Rydberg and continuum wavefunctions // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 1989. Vol. 22, no. 14. P. 2223–2240.
42. Rescigno T., McCurdy C., McKoy V. Discrete basis set approach to nonspherical scattering // Chemical Physics Letters. 1974. Vol. 27, no. 3. P. 401–404.

43. McCurdy C. W., Rescigno T. N. Complex-basis-function calculations of resolvent matrix elements: Molecular photoionization // Phys. Rev. A. 1980. Vol. 21. P. 1499–1505.
44. Зубарев А. Вариационный принцип Швингера в квантовой механике. М. : Энергоиздат, 1981.
45. Heller E., Yamani H. New  $L^2$  approach to quantum scattering: Theory // Phys. Rev. A. 1974. Vol. 9. P. 1201–1208.
46. Broad J. T., Reinhardt W. P. J-matrix method: multichannel scattering and photoionization // J. Phys. B: Atom. Mol. Phys. 1976. Vol. 9, no. 9. P. 1491–1502.
47. Lane A. M., Thomas R. G. R-matrix theory of nuclear reactions // Rev. Mod. Phys. 1958. Vol. 30. P. 257–353.
48. Yamani H. The equivalence of the Feshbach and J-matrix methods // Journal of Mathematical Physics. 1982. Vol. 23, no. 1. P. 83–86.
49. Gareev F., Gizzatkulov M., Revai J. A new method for solving the two-center problem with realistic potentials // Nuclear Physics A. 1977. Vol. 286, no. 3. P. 512–522.
50. Pal K. F. Orthogonality condition model for bound and resonant states with a separable expansion of the potential // Journal of Physics A: Mathematical and General. 1985. Vol. 18, no. 10. P. 1665–1674.
51. Papp Z. Bound and resonant states in Coulomb-like potentials // Journal of Physics A: Mathematical and General. 1987. Vol. 20, no. 1. P. 153–162.
52. Kónya B., Lévai G., Papp Z. Continued fraction representation of the Coulomb Green's operator and unified description of bound, resonant and scattering states // Phys. Rev. C. 2000. Vol. 61. P. 034302.
53. Yamani H. The J-matrix reproducing kernel: Numerical weights at the harris energy eigenvalues // Journal of Mathematical Physics. 1984. Vol. 25, no. 2. P. 317–322.

54. Broad J., Reinhardt W. P. One- and two-electron photoejection from  $h^-$ : A multichannel  $J$ -matrix calculation // Phys. Rev. A. 1976. Vol. 14. P. 2159–2173.
55. Yamani H. A., Abdelmonem M. S. A simple method to extract resonance information from the Harris energy eigenvalues and eigenvectors // Journal of Physics A: Mathematical and General. 1993. Vol. 26, no. 22. P. L1183–L1187.
56. Yamani H. A., Abdelmonem M. S. The complex-scaling method using a complete  $L^2$ -basis // Journal of Physics A: Mathematical and General. 1996. Vol. 29, no. 21. P. 6991–6998.
57. The rotating morse potential model for diatomic molecules in the tridiagonal  $J$ -matrix representation: I. Bound states / I Nasser, M S Abdelmonem, H Bahlouli, A D Alhaidari // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 2007. Vol. 40, no. 21. P. 4245–4257.
58. Bray I., Stelbovics A. Explicit demonstration of the convergence of the close-coupling method for a Coulomb three-body problem // Phys. Rev. Lett. 1992. Vol. 69. P. 53–56.
59. Bray I. Convergent close-coupling method for the calculation of electron scattering on hydrogenlike targets // Phys. Rev. A. 1994. Vol. 49. P. 1066–1082.
60. Попов Ю. В., Зайцев С. А., Виноцкий С. И.  $J$ -матричный метод вычисления трехчастичных кулоновских функций и сечений физических процессов // Физика элементарных частиц и атомного ядра. 2011. Т. 42. С. 1311–1370.
61. Bray I., Stelbovics A. T. Comment on “status of the convergent close-coupling method within the framework of the rigorous Coulomb scattering theory” // Phys. Rev. A. 2002. Vol. 66. P. 036701.
62. Борновский ряд в теории ионизации атома электронным ударом / В. Л. Шаблов, П. С. Виноцкий, Ю. В. Попов и др. // Физика эле-

- ментарных частиц и атомного ядра. 2010. Т. 41. С. 607–650.
63. Shablov V. L., Bilyk V. A., Popov Y. V. Status of the convergent close-coupling method within the framework of the rigorous Coulomb scattering theory // *Phys. Rev. A*. 2002. Vol. 65. P. 042719.
  64. Stelbovics A. Pseudo-state close coupling in electron-atom collisions // *Australian Journal of Physics*. 1991. Vol. 44. P. 241–258.
  65. Norcross D. W. Uniqueness of solutions of the close-coupling equations for electron scattering // *J. Phys. B: Atom. Mol. Phys.* 1969. Vol. 2, no. 12. P. 1300–1303.
  66. Crees M., Seaton M., Wilson P. Impact, a program for the solution of the coupled integro-differential equations of electron-atom collision theory // *Comput. Phys. Commun.* 1978. Vol. 15, no. 1. P. 23–83.
  67. Henry R. J., Rountree S., Smith E. R. A general program to calculate atomic continuum processes using the niem method // *Comput. Phys. Commun.* 1981. Vol. 23, no. 3. P. 233–273.
  68. Electrons and photons colliding with atoms: development and application of the convergent close-coupling method / I Bray, D V Fursa, A S Kheifets, A T Stelbovics // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 2002. Vol. 35, no. 15. P. R117–R146.
  69. Wigner E. P., Eisenbud L. Higher angular momenta and long range interaction in resonance reactions // *Phys. Rev.* 1947. Vol. 72. P. 29–41.
  70. Burke P. G., Hibbert A., Robb W. D. Electron scattering by complex atoms // *J. Phys. B: Atom. Mol. Phys.* 1971. Vol. 4, no. 2. P. 153–161.
  71. Burke P.G.; Berrington K. Atomic and molecular processes: an R-matrix approach. Bristol : Institute of Physics Publishing Ltd, 1993.
  72. Burke P. G. R-Matrix Theory of Atomic Collisions. Berlin : Springer-Verlag, 2011.
  73. Fano U., Lee C. M. Variational calculation of  $R$  matrices. application to Ar photoabsorption // *Phys. Rev. Lett.* 1973. Vol. 31. P. 1573–1576.

74. Lee C. M. Spectroscopy and collision theory. III. Atomic eigenchannel calculation by a Hartree-Fock-Roothaan method // Phys. Rev. A. 1974. Vol. 10. P. 584–600.
75. Buttle P. J. A. Solution of coupled equations by *R*-matrix techniques // Phys. Rev. 1967. Vol. 160. P. 719–729.
76. Lackenby B. G. C., Dzuba V. A., Flambaum V. V. Theoretical study of the electron structure of superheavy elements with an open *6d* shell: Sg, Bh, Hs, and Mt // Phys. Rev. A. 2019. Vol. 99. P. 042509.
77. Applications of B-splines in atomic and molecular physics / H Bachau, E Cormier, P Decleva et al. // Reports on Progress in Physics. 2001. Vol. 64, no. 12. P. 1815–1943.
78. van der Hart H. B-spline methods in R-matrix theory for scattering in two-electron systems // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 1997. Vol. 30, no. 3. P. 453–465.
79. Burke V., Noble C. Farm – a flexible asymptotic R-matrix package // Comput. Phys. Commun. 1995. Vol. 85, no. 3. P. 471–500.
80. Saraph H. E., Seaton M. J., Shemming J. Excitation of forbidden lines in gaseous nebulae I. Formulation and calculations for 2pq ions // Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences. 1969. Vol. 264, no. 1149. P. 77–105.
81. Blatt J. M., Biedenharn L. C. The angular distribution of scattering and reaction cross sections // Rev. Mod. Phys. 1952. Vol. 24. P. 258–272.
82. Романюк Н., Шпеник О., Запесочный И. Сечения и особенности рассеяния электронов на атомах кальция стронция и бария // Письма в ЖЭТФ. 1980. Т. 32. С. 472–475.
83. Фабрикант . Столкновение медленных электронов с атомами щелочноземельных элементов // В сб. «Атомные процессы». Рига: «Зинатне», 1975. С. 80–123.

84. Johnston A. R., Gallup G. A., Burrow P. D. Low-lying negative-ion states of calcium // *Phys. Rev. A*. 1989. Vol. 40. P. 4770–4773.
85. Дослідження низькоенергетичного розсіювання електронів на атомах mg та ca з використанням оптимізованого трохіідного спектрометра / Н.І. Романюк, О.Б. Шпеник, Ф.Ф. Папп та ін. // *Укр. фіз. журн.* 1992. Т. 37, № 11. С. 1639–1647.
86. Kelemen V. I., Remeta E. Y., Sabad E. P. 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. Vol. 28, no. 8. P. 1527–1546.
87. Lengyel V. I., Navrotsky V. T., Sabad E. P. Resonance Phenomena in Electron-Atom Collisions. Berlin: Springer-Verlag, 1992.
88. Interaction of an alkaline-earth atom with an electron: scattering, negative ion and photodetachment / G F Gribakin, B V Gultsev, V K Ivanov, M Y Kuchiev // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 1990. Vol. 23, no. 24. P. 4505–4519.
89. Yuan J., Zhang Z. Alternative static-exchange formalism: Low-energy electron scattering with heavy alkaline-earth atoms // *Phys. Rev. A*. 1990. Vol. 42. P. 5363–5373.
90. 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.
91. 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.
92. Structural properties of the negative calcium ion: binding energies and fine-structure splitting / V. V. Petrunin, H. H. Andersen, P. Balling, T. Andersen // *Phys. Rev. Lett.* 1996. Vol. 76. P. 744–747.

93. Structure and dynamics of the negative alkaline-earth ions / T Andersen, H H Andersen, P Balling et al. // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 1997. Vol. 30, no. 15. P. 3317–3332.
94. Andersen T. Atomic negative ions: structure, dynamics and collisions // Physics Reports. 2004. Vol. 394, no. 4. P. 157–313.
95. Photodetachment of negative calcium ions / E. Heinicke, H.J. Kaiser, R. Rackwitz, D. Feldmann // Physics Letters A. 1974. Vol. 50, no. 4. P. 265–266.
96. Walter C. W., Peterson J. R. Shape resonance in  $\text{Ca}^-$  photodetachment and the electron affinity of  $\text{Ca}(^1\text{s})$  // Phys. Rev. Lett. 1992. Vol. 68. P. 2281–2284.
97. Peterson .  $\text{Ca}^-$  and its elusive properties // Australian Journal of Physics. 1992. Vol. 45, no. 5. P. 293–308.
98. State-selective depletion spectroscopy of negative ions: First observation of the  $^4P$  state in  $\text{Ca}^-$  and  $\text{Sr}^-$  / P. Kristensen, C. A. Brodie, U. V. Pedersen et al. // Phys. Rev. Lett. 1997. Vol. 78. P. 2329–2332.
99. Lee D. H., Pegg D. J., Hanstorp D. Fast ion-beam photoelectron spectroscopy of  $\text{Ca}^-$  : cross sections and asymmetry parameters // Phys. Rev. A. 1998. Vol. 58. P. 2121–2127.
100. Photodetachment of the  $\text{Ca}^-$  ion at the  $^3p_{\text{kp}}$  threshold / D. H. Lee, M. B. Poston, D. J. Pegg et al. // Phys. Rev. A. 1999. Vol. 60. P. 715–718.
101. Fischer C., Hansen J. E. Photodetachment cross section for  $\text{Ca}^-$  // Phys. Rev. A. 1991. Vol. 44. P. 1559–1564.
102. Yuan J. Core-valence electron correlation effects in photodetachment of  $\text{Ca}^-$  ions // Phys. Rev. A. 1999. Vol. 61. P. 012704.
103. On the convergence of close-coupling results for low-energy electron scattering from magnesium / K Bartschat, O Zatsarinny, I Bray et al. // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 2004. Vol. 37, no. 13. P. 2617–2639.

104. Zatsarinny O., Bartschat K. Benchmark calculations for electron collisions with zinc atoms // *Phys. Rev. A*. 2005. Vol. 71. P. 022716.
105. Zatsarinny O., Fischer C. Oscillator strengths for transitions to highly excited states of carbon // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 2002. Vol. 35, no. 22. P. 4669–4683.
106. Kramida A., Yu. Ralchenko, Reader J., and NIST ASD Team. NIST Atomic Spectra Database (ver. 3.0.2), [Online]. Available: <https://physics.nist.gov/asd> [2005, April 1]. National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD. 2005.
107. Fischer C. F., Tachiev G. Allowed and spin-forbidden electric dipole transitions in  $\text{Ca I}$  // *Phys. Rev. A*. 2003. Vol. 68. P. 012507.
108. Wiese W. L., Fuhr J. R., Deters T. M. Atomic transition probabilities of carbon, nitrogen, and oxygen : a critical data compilation. 1996. Provided by the SAO/NASA Astrophysics Data System.
109. Felfli Z., Msezane A. Z., Sokolovski D. Simple method for electron affinity determination: results for  $\text{Ca}$ ,  $\text{Sr}$  and  $\text{Ce}$  // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 2008. Vol. 41, no. 4. P. 041001.
110. Yuan J., Zhang Z. Enhanced spin polarization of elastic electron scattering from alkaline-earth-metal atoms in Ramsauer-Townsend and low-lying shape resonance regions // *Phys. Rev. A*. 1993. Vol. 48. P. 2018–2023.
111. Yuan J. Intra-atomic relativistic effects on the spin polarization in low-energy electron scattering from  $\text{Ca}$ ,  $\text{Sr}$ ,  $\text{Ba}$ , and  $\text{Yb}$  atoms // *Phys. Rev. A*. 1995. Vol. 52. P. 4647–4655.
112. Samson A. M., Berrington K. A. Electron impact excitation cross sections and rates from the ground state of atomic calcium // *Atomic Data and Nuclear Data Tables*. 2001. Vol. 77, no. 1. P. 87–95.
113. Excitation of the  $1,3p1$  states of calcium, strontium and barium in the relativistic distorted-wave approximation / R Srivastava, T Zuo,



- R P McEachran, A D Stauffer // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 1992. Vol. 25, no. 17. P. 3709–3720.
114. Muktavat K., Srivastava R., Stauffer A. D. Electron excitation of the  $1,3d$  states of calcium and strontium // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 2002. Vol. 35, no. 23. P. 4797–4807.
  115. Saxena S., Muktavat K., Srivastava R. Electron impact excitation of the  $d$  states of  $mg$ ,  $ca$  and  $sr$  atoms: Complete experiment results // Pramana – J. Phys. B. 2004. Vol. 63, no. 5. P. 977–991.
  116. Chauhan R. K., Srivastava R., Stauffer A. D. Electron impact excitation of the  $41p1$  state of calcium // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 2005. Vol. 38, no. 14. P. 2385–2394.
  117. Raj D., Kumar A. Cross sections for electron scattering by a  $ca$  atom at intermediate energy // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 2007. Vol. 40, no. 15. P. 3101–3113.
  118. Khare S. P., Kumar A., Vijayshri. Elastic scattering of electrons and positrons by the  $ca$  atom // J. Phys. B: Atom. Mol. Phys. 1985. Vol. 18, no. 9. P. 1827–1840.
  119. Excitation of the  $41p$  state of calcium by electron impact / S. Kawazoe, T. Kai, R.K. Chauhan et al. // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 2005. Vol. 39, no. 3. P. 493–503.
  120. Fursa D. V., Bray I. Calculation of electron-impact  $41p$  excitation of calcium // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 2008. Vol. 41, no. 14. P. 145206.
  121. Ehlers V. J., Gallagher A. Electron excitation of the calcium  $4227\text{-}\text{\AA}$  resonance line // Phys. Rev. A. 1973. Vol. 7. P. 1573–1585.
  122. Differential and integrated cross sections for the electron excitation of the  $41p$  state of calcium atom / S. Milisavljević, D.ević, V. Pejčević et al. // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 2004. Vol. 37, no. 18. P. 3571–3581.
  123. Andersen N., Gallagher J. W., Hertel I. V. Collisional alignment and orientation of atomic outer shells i. direct excitation by electron and

- atom impact // Physics Reports. 1988. Vol. 165, no. 1. P. 1–188.
124. Andersen N., Bartschat K. Polarization, Alignment, and Orientation in Atomic Collisions. New York: Springer, 2001.
  125. Murray A. J., Cvejanovic D. Low energy superelastic scattering from the 41p1state of calcium in an (e, 2e) spectrometer // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 2003. Vol. 36, no. 24. P. 4889–4910.
  126. Fischer C. The MCHF atomic-structure package // Comput. Phys. Commun. 2000. Vol. 128, no. 3. P. 635–636.
  127. Fischer C., Brage T., Jönsson P. Computational Atomic Structure: An MCHF Approach. CRC Press, 1997.
  128. Excitation of the ca atom from the metastable states by electron impact / I I Shafranyosh, T A Snegurskaya, N A Margitich et al. // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 1997. Vol. 30, no. 9. P. 2261–2285.
  129. Mitroy J. Energy levels and oscillator strengths for neutral calcium // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 1993. Vol. 26, no. 21. P. 3703–3718.
  130. Energy levels, wavefunction compositions and electric dipole transitions in neutral ca / J.E. Hansen, C. Laughlin, H. W. van der Hart, G. Verbockhaven // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 1999. Vol. 32, no. 9. P. 2099–2137.
  131. Fischer C. F., Hansen J. E. MCHF calculations for 1s and 1p rydberg states in ca i // J. Phys. B: Atom. Mol. Phys. 1985. Vol. 18, no. 20. P. 4031–4046.
  132. Blum K. Density Matrix Theory and Applications. Berlin: Springer, 2012.
  133. Kim Y.-K. Scaling of plane-wave born cross sections for electron-impact excitation of neutral atoms // Phys. Rev. A. 2001. Vol. 64. P. 032713.
  134. Стародуб В. Физические процессы в активных средах плазмодинамических лазеров на парах металлов и галогенидных инертных газов :

- дис. ... д-ра наук / В.П. Стародуб ; ИЭФ НАН Украины. Ужгород, 1999. 332 с.
135. Стародуб В. Эффективные сечения возбуждения  $n3p1$ -уровней щелочноземельных атомов // Опт. и спектр. 1998. Т. 85, № 1. С. 24–26.
  136. Добрышин В., Раховский В., Шустряков В. Измерения абсолютных сечений возбуждения  $4^3P_{0,1,2}$  состояний кальция электронным ударом // Опт. и спектр. 1982. Т. 52, № 4. С. 609–613.
  137. Andersen N., Bartschat K. Search for relativistic effects in electron-impact s  $\rightarrow$  p excitation of heavy alkali atoms: polarization, alignment and orientation in cs // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 2002. Vol. 35, no. 21. P. 4507–4525.
  138. Fursa D. V., Bray I. Electron scattering from the ground state of mercury // AIP Conference Proceedings. 2003. Vol. 697, no. 1. P. 175–180.
  139. Superelastic electron scattering from laser-excited cesium atoms / D. S. Slaughter, V. Karaganov, M. J. Brunger et al. // Phys. Rev. A. 2007. Vol. 75. P. 062717.
  140. Low energy super-elastic scattering studies of calcium over the complete angular range using a magnetic angle changing device / M. Hussey, A. Murray, W. MacGillivray, G. King // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 2008. Vol. 41, no. 5. P. 055202.
  141. Bray I., Fursa D. Convergent close-coupling method: A “complete scattering theory”? // Phys. Rev. Lett. 1996. Vol. 76. P. 2674–2677.
  142. Bray I., Stelbovics A. T. Convergent close-coupling calculations of electron-hydrogen scattering // Phys. Rev. A. 1992. Vol. 46. P. 6995–7011.
  143. Казаков . Резонансное рассеяние электронов малых энергий атомами кальция // ЖТФ. 1985. Т. 55. С. 795–797.
  144. Возбуждение щелочноземельных атомов электронным ударом. IV. Кальций / И.И. Гарга, И.С. Алексахин, И.П. Запесочный, В.П. Ста-

- родуб // Опт. и спектр. 1974. Т. 37, № 5. С. 843–849.
145. Rate Coefficients for Electron Excitation of the First Resonance Transition in h, Li, Na, Ca,  $\text{Ca}^+$ , and  $\text{Ba}^+$  Calculated from Experimental Data / D. H. Crandall, G. H. Dunn, A. Gallagher et al. // Astrophys. J. 1974. Vol. 191. P. 789–794.
  146. Differential and integrated cross sections for the elastic electron scattering by calcium atom / S Milisavljević, D Šević, R K Chauhan et al. // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 2005. Vol. 38, no. 14. P. 2371–2384.
  147. Bartschat K., Sadeghpour H. R. Ultralow-energy electron scattering from alkaline-earth atoms: the scattering-length limit // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 2002. Vol. 36, no. 1. P. L9–L15.
  148. Sharma L., Srivastava R., Stauffer A. D. Electron excitation of the 4s4p3p metastable state of calcium // Journal of Physics: Conference Series. 2007. Vol. 80. P. 012020.
  149. Chaoui Z., Bouarissa N. Monte carlo simulation of slow electrons impinging on metals // Physics Letters A. 2002. Vol. 297, no. 5. P. 432–435.
  150. Calculated absolute electron-impact ionization cross sections for alo, al<sub>2</sub>o, and wox (x=1–3) / H. Deutsch, K. Hilpert, K. Becker et al. // Journal of Applied Physics. 2001. Vol. 89, no. 3. P. 1915–1921.
  151. The madison symmetric torus / R. N. Dexter, D. W. Kerst, T. W. Lovell et al. // Fusion Technology. 1991. Vol. 19, no. 1. P. 131–139.
  152. Behaviour of carbon and boron impurities in the madison symmetric torus / S T A Kumar, D J Den Hartog, R M Magee et al. // Plasma Physics and Controlled Fusion. 2011. Vol. 53, no. 3. P. 032001.
  153. Шимон Л., Непийпов Е., Запесочный И. Возбуждение атомов алюминия электронным ударом // УФЖ. 1975. Т. 20, № 2. С. 229–232.
  154. Cross-section measurements for electron-impact ionization of atoms / R. S. Freund, R.C. Wetzel, R.J. Shul, T.R. Hayes // Phys. Rev. A. 1990. Vol. 41. P. 3575–3595.

155. Ryabikh Y. I., Fabrikant I. I. Partial-wave analysis of low-energy electron scattering by aluminium atoms // J. Phys. B: Atom. Mol. Phys. 1981. Vol. 14, no. 2. P. 349–356.
156. Kim Y.-K., Stone P. M. Ionization of boron, aluminum, gallium, and indium by electron impact // Phys. Rev. A. 2001. Vol. 64. P. 052707.
157. Electron-impact ionization of al / S D Loch, C P Ballance, D Wu et al. // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 2012. Vol. 45, no. 6. P. 065201.
158. The Editors. Editorial: Uncertainty estimates // Phys. Rev. A. 2011. Vol. 83. P. 040001.
159. Chung H., Bartschat K., Tennyson J., Schultz D. R. Uncertainty assessment for theoretical atomic and molecular scattering data. INDC(NDS)-0669 report. 2014. Report of an IAEA-ITAMP Technical Meeting, 7-9 July 2014, Cambridge, MA, USA.
160. Zatsarinny O., Bartschat K. Relativistic *B*-spline *R*-matrix method for electron collisions with atoms and ions: Application to low-energy electron scattering from cs // Phys. Rev. A. 2008. Vol. 77. P. 062701.
161. Zatsarinny O., Bartschat K. The *B*-spline *R*-matrix method for atomic processes: application to atomic structure, electron collisions and photoionization // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 2013. Vol. 46, no. 11. P. 112001.
162. Zatsarinny O., Fischer C. Atomic structure calculations using mchf and bsr // Comput. Phys. Commun. 2009. Vol. 180, no. 11. P. 2041–2065.
163. Weiss A. W. Series perturbations in atomic spectra: Superposition-of-configurations calculations on al i and al ii // Phys. Rev. A. 1974. Vol. 9. P. 1524–1536.
164. Bray I., Bartschat K., Stelbovics A. T. Box-based convergent close-coupling method for solving coulomb few-body problems // Phys. Rev. A. 2003. Vol. 67. P. 060704.

165. Kramida A., Yu. Ralchenko, Reader J., and NIST ASD Team. NIST Atomic Spectra Database (ver. 4.1.0), [Online]. Available: <https://physics.nist.gov/asd> [2011, May 1]. National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD. 2011.
166. Tayal S. S., Zatsarinny O. Excitation cross sections for electron scattering from  $k^+$  ions // Phys. Rev. A. 2008. Vol. 78. P. 012713.
167. Threshold photodetachment of  $al^-$  : electron affinity and fine structure / M. Scheer, R. C. Bilodeau, J. Thøgersen, H. K. Haugen // Phys. Rev. A. 1998. Vol. 57. P. R1493–R1496.
168. Badnell N. R. A perturbative approach to the coupled outer-region equations for the electron-impact excitation of neutral atoms // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 1999. Vol. 32, no. 23. P. 5583–5591.
169. The CTCP table of experimental and calculated static dipole polarizabilities for the electronic ground states of the neutral elements. [Online] / Centre for Theoretical Chemistry and Physics, Part of the New Zealand Institute for Advanced Study at Massey University, Albany Campus, New Zealand. 2015. Access mode: <http://ctcp.massey.ac.nz/dipole-polarizabilities>.
170. Wang Y., Zatsarinny O., Bartschat K. *B*-spline *R*-matrix-with-pseudostates calculations for electron-impact excitation and ionization of carbon // Phys. Rev. A. 2013. Vol. 87. P. 012704.
171. Wang Y., Zatsarinny O., Bartschat K. *B*-spline *R*-matrix-with-pseudostates calculations for electron-impact excitation and ionization of nitrogen // Phys. Rev. A. 2014. Vol. 89. P. 062714.
172. Wang K., Zatsarinny O., Bartschat K. Low-energy outer-shell photodetachment of the negative ion of boron // Eur. Phys. J. D. 2016. Vol. 70. P. 72.
173. Wang K., Zatsarinny O., Bartschat K. Low-energy photodetachment of  $Ga^-$  and elastic electron scattering from neutral ga // Phys. Rev. A.

2016. Vol. 94. P. 023402.
174. Feigerle C. S., Corderman R. R., Lineberger W. C. Electron affinities of B, Al, Bi, and Pb // The Journal of Chemical Physics. 1981. Vol. 74, no. 2. P. 1513–1515.
  175. Negative ion excited states and the determination of their binding energy by electron detachment by an electric field / V.A. Oparin, R.N. Il'in, I.T. Serenkov, E.S. Solov'ev // JETP. 1974. Vol. 39, no. 6. P. 989.
  176. Near-threshold infrared photodetachment of  $\text{Al}^-$ : A determination of the electron affinity of aluminum and the range of validity of the wigner law / D. Calabrese, A. M. Covington, J. S. Thompson et al. // Phys. Rev. A. 1996. Vol. 54. P. 2797–2804.
  177. Arnau F., Mota F., Novoa J. Accurate calculation of the electron affinities of the group-13 atoms // Chemical Physics. 1992. Vol. 166, no. 1. P. 77–84.
  178. Woon D. E., Dunning T. H. Calculation of the electron affinities of the second row atoms: Al–Cl // The Journal of Chemical Physics. 1993. Vol. 99, no. 5. P. 3730–3737.
  179. Wijesundera W. P. Theoretical study of the negative ions of boron, aluminum, gallium, indium, and thallium // Phys. Rev. A. 1997. Vol. 55. P. 1785–1791.
  180. Resonance feature in  $\text{Al}^-$  photodetachment below the  $\text{Al}(3s^2 4s^2 S)$  threshold / B. J. Davies, C. W. Ingram, D. J. Larson et al. // Phys. Rev. A. 1997. Vol. 56. P. 378–385.
  181. Zatsarinny O., Fischer C. The use of basis splines and non-orthogonal orbitals in R-matrix calculations: application to Li photoionization // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 2000. Vol. 33, no. 3. P. 313–341.
  182. Crees M. Asypck, a program for calculating asymptotic solutions of the coupled equations of electron collision theory // Comput. Phys. Commun.

1980. Vol. 19, no. 1. P. 103–137.
183. Calculations for electron-impact excitation and ionization of beryllium / O. Zatsarinny, K. Bartschat, D.V. Fursa, I. Bray // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 2016. Vol. 49, no. 23. P. 235701.
184. Smith F. T. Lifetime matrix in collision theory // Phys. Rev. 1960. Vol. 118. P. 349–356.
185. Stibbe D. T., Tennyson J. Timedel: A program for the detection and parameterization of resonances using the time-delay matrix // Comput. Phys. Commun. 1998. Vol. 114, no. 1. P. 236–242.



## Додаток А

**Список публікацій здобувача за темою дисертації  
та відомості про апробацію результатів дисертації**

**А.1. Список публікацій здобувача за темою дисертації**

1. Low-energy electron scattering from Ca atoms and photodetachment of  $\text{Ca}^-$  / O. Zatsarinny, K. Bartschat, S. Gedeon, V. Gedeon, and V. Lazur // Phys. Rev. A. 2006. Vol. 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. Vol. 40, no. 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. Vol. 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. Vol. 51, no. 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 еле-

- ктронів 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  $e+\text{Ca}$  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), травень 14–19, 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, Book of 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 квітня, 2008, Дніпропетровськ: НЦАОМУ, 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 квітня, 2009, Дніпропетровськ: НЦАОМУ, Україна. Збірник тез, С. 52.

17. Гедеон С.В., Лазур В.Ю. Резонансна структура інтегральних перерізів розсіювання електронів на атомі кальцію в області енергій до 4 еВ // ІЕФ-2009 (Міжнародна конференція молодих учених та аспірантів), травень 25–28, 2009 Ужгород, Україна. Програма і тези доповідей, С. 132.
18. Гедеон С.В., Лазур В.Ю. Розрахунки перерізів розсіювання електронів на атомі кальцію // XII Міжнародна молодіжна науково-практична конференція «Людина і Космос», 7–9 квітня, 2010, Дніпропетровськ: НЦАОМУ, Україна. Збірник тез. С. 51.
19. Гедеон С.В., Лазур В.Ю. R-матричні розрахунки розсіювання електронів на атомах кальцію: побудова B-сплайнових базисів // XIII Міжнародна молодіжна науково-практична конференція «Людина і Космос», 13–15 квітня, 2011. Дніпропетровськ: НЦАОМУ, Україна. Збірник тез. С. 72.
20. Гедеон С.В., Лазур В.Ю. Розсіювання електронів на атомі кальцію // ІЕФ-2011 (Міжнародна конференція молодих учених та аспірантів), травень 24–27, 2011, Ужгород, Україна. Програма і тези доповідей. С. 69.
21. Гедеон С.В., Лазур В.Ю. Розрахунки розсіювання електронів на атомі Са: врахування кореляцій // XIV Міжнародна молодіжна науково-практична конференція «Людина і космос», 11–13 квітня, 2012. Дніпропетровськ: НЦАОМУ, 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 квітня, 2013, Дніпропетровськ: НЦАОМУ, 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 квітня, 2014, Дніпропетровськ: НЦАОМУ, 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. Vol. 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), травень 23–26, 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. Vol. 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 квітня, 2018, Дніпропетровськ: НЦАОМУ, 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 квітня, 2020, Дніпропетровськ: НЦАОМУ, Україна. Збірник тез. С. 34.

## **А.2. Відомості про апробацію результатів 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, May 6–11, 2007), Міжнародна конференція молодих учених та аспірантів **ІЕФ-2007**, **ІЕФ-2009**, **ІЕФ-2011**, **ІЕФ-2017** (Ужгород, Україна, 14–19 травня, 2007; 25–28 травня, 2009; 24–27 травня, 2011; 23–26 травня, 2017), **40-th EGAS** — Annual conference of the European group for atomic systems (Graz, Austria,

July 2–5, 2008), **4-th CEPAS** — Conference on elementary processes in atomic systems, (Cluj-Napoca, Romania, June 18–20, 2008), **X–XVI, XX, XXII** Міжнародна молодіжна науково-практична конференція «Людина і космос» (Дніпро, Україна, 9–11 квітня, 2008; 8–10 квітня, 2009; 7–9 квітня, 2010; 13–15 квітня, 2011; 11–13 квітня, 2012; 10–12 квітня, 2013; 10–12 квітня, 2014; 11–13 квітня, 2018; 15–17 квітня, 2020), **ICPEAC-XXIX, ICPEAC-XXX** — International Conference on Photonic, Electronic, and Atomic Collisions (Toledo, Spain, July 22–28, 2015; Cairns, Australia, July 26 – August 1, 2017), **18th STM** — Small Triangle Meeting, (Ptice, Slovakia, October 16–19, 2016).

Додаток Б  
Таблиці і графіки

Таблиця Б.1: Енергії збудження ( $E_{\text{збуд}}$ ) і зв'язку ( $E_{\text{зв}}$ ) (в еВ) для спектроскопічних станів мішені Са. Експериментальні значення взяті з бази даних НІСТ [106]. Наведені також різниці ( $\Delta E_{\text{зв}}$ ) між теоретичними та експериментальними енергіями зв'язку.

№ п/п	Конфігурація	Терм	НІСТ*[106]		БСР39 [1]	
			$E_{\text{збуд}}$	$E_{\text{зв}}$	$E_{\text{зв}}$	$\Delta E_{\text{зв}}$
1	$4s^2$	$^1S$	0.000	-6.113	-5.953	0.160
2	$4s4p$	$^3P^o$	1.892	-4.221	-4.116	0.105
3	$3d4s$	$^3D$	2.524	-3.589	-3.503	0.086
4	$3d4s$	$^1D$	2.709	-3.404	-3.328	0.076
5	$4s4p$	$^1P^o$	2.933	-3.181	-3.100	0.081
6	$4s5s$	$^3S$	3.910	-2.203	-2.154	0.049
7	$4s5s$	$^1S$	4.131	-1.982	-1.933	0.049
8	$3d4p$	$^3F^o$	4.442	-1.671	-1.684	-0.013
9	$3d4p$	$^1D^o$	4.443	-1.670	-1.681	-0.011
10	$4s5p$	$^3P^o$	4.534	-1.580	-1.565	0.015
11	$4s5p$	$^1P^o$	4.554	-1.559	-1.546	0.013
12	$4s4d$	$^1D$	4.624	-1.489	-1.476	0.013
13	$4s4d$	$^3D$	4.681	-1.432	-1.422	0.010
14	$3d4p$	$^3D^o$	4.740	-1.373	-1.401	-0.028
15	$4p^2$	$^3P$	4.774	-1.339	-1.275	0.064
16	$3d4p$	$^3P^o$	4.877	-1.236	-1.256	-0.020

\* Дані для триплетів усереднені по термах

## Продовження таблиці Б.1

№	Конфігурація	Терм	НІСТ*[106]		БСР39 [1]	
			$E_{\text{збуд}}$	$E_{\text{зв}}$	$E_{\text{зв}}$	$\Delta E_{\text{зв}}$
17	$3d4p$	$^1F^o$	5.026	-1.087	-1.131	-0.044
18	$4s6s$	$^3S$	5.028	-1.095	-1.077	0.018
19	$4s6s$	$^1S$	5.045	-1.068	-1.032	0.036
20	$4p^2$	$^1D$	5.049	-1.065	-1.022	0.043
21	$4s6p$	$^1P^o$	5.168	-0.946	-0.957	-0.011
22	$4p^2$	$^1S$	5.181	-0.932	-0.894	0.038
23	$4s4f$	$^3F^o$	5.229	-0.885	-0.882	0.003
24	$4s4f$	$^1F^o$	5.250	-0.863	-0.868	-0.005
25	$4s6p$	$^3P^o$	5.272	-0.841	-0.833	0.008
26	$4s5d$	$^3D$	5.300	-0.813	-0.812	0.001
27	$4s5d$	$^1D$	5.321	-0.792	-0.786	0.006
28	$3d^2$	$^3F$	5.393	-0.721	-0.684	0.037
29	$3d4p$	$^1P^o$	5.447	-0.666	-0.679	-0.013
30	$4s7s$	$^3S$	5.453	-0.660	-0.652	0.008
31	$4s7s$	$^1S$	5.490	-0.624	-0.615	0.009
32	$4s5f$	$^3F^o$	5.550	-0.563	-0.562	0.001
33	$4s5f$	$^1F^o$	5.555	-0.558	-0.558	0.000
34	$4s6d$	$^1D$	5.578	-0.535	-0.540	-0.005
35	$4s7p$	$^3P^o$	5.579	-0.539	-0.534	0.005
36	$4s6d$	$^3D$	5.586	-0.528	-0.531	-0.003
37	$4s7p$	$^1P^o$	5.632	-0.481	-0.484	-0.003
38	$4s8s$	$^3S$	5.671	-0.442	-0.435	0.007
39	$4s8s$	$^1S$	5.689	-0.424	-0.414	0.010

\* Дані для триплетів усереднені по термах

Таблиця Б.2: Сили осциляторів для атома Са

Початковий стан	Кінцевий стан	БСР39	БКХФ [107]	НІСТ [108]
$4s^2\ ^1S$	$4s4p\ ^1P^o$	1.78	1.76	1.75
	$4s5p\ ^1P^o$	0.0007	0.0059	0.0009
$4s4p\ ^3P^o$	$3d4s\ ^3D$	0.078	0.081	
	$4s5s\ ^3S$	0.158	0.161	0.162
$3d4s\ ^3D$	$3d4p\ ^3F^o$	0.369	0.355	0.361
	$4s5p\ ^3P^o$	0.055	0.037	0.045
$4s4p\ ^1P^o$	$4s5s\ ^1S$	0.127	0.119	
$3d4s\ ^1D$	$4s4p\ ^1P^o$	0.0011	0.0009	
	$3d4p\ ^1D^o$	0.375	0.299	0.274
	$4s5p\ ^1P^o$	0.063	0.044	0.060
$4s5s\ ^3S$	$4s5p\ ^3P^o$	1.21	1.30	
$4s5s\ ^1S$	$4s5p\ ^1P^o$	0.861	0.965	



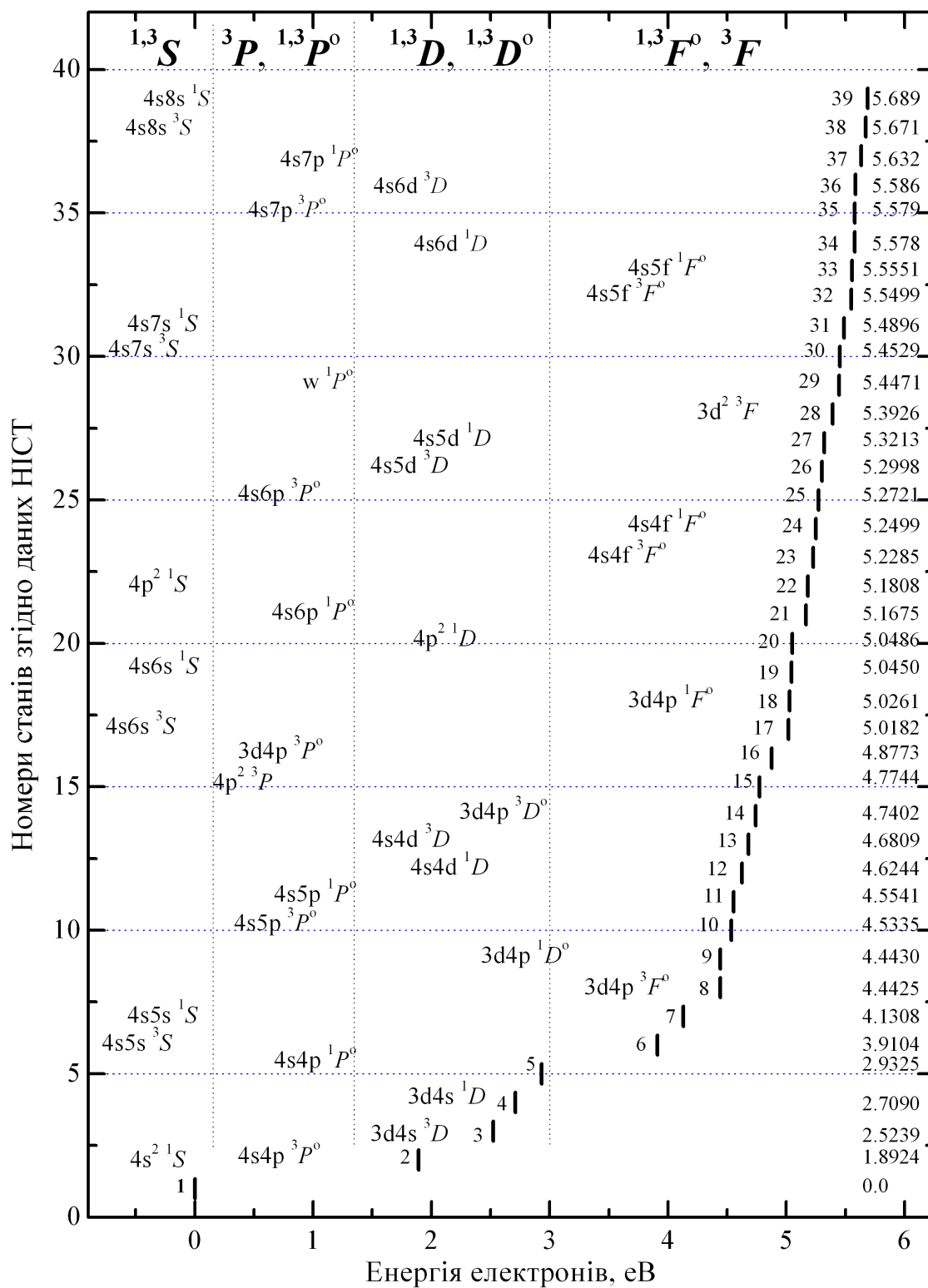


Рис. Б.1: Схема розміщення 39 нижчих енергетичних рівнів атома Ca. Справа наведені значення енергій збудження згідно даних НІСТ [106].

Таблиця Б.3: Експериментальні значення енергій збудження ( $E_{\text{збуд}}$ ) НІСТ [106] для спектроскопічних станів мішені Са (в еВ) та різниці ( $\Delta E_{\text{збуд}}$ ) між теоретичними та експериментальними даними. Теоретичні дані, отримані нами в підході БКХФ-БСР34, порівняні з результатами наближень БКХФ [107], РМ24 [119], РМПС22 [112], РМ6 [90], РМ5 [91] та РМ5 [102].

№	Стан	$E_{\text{збуд}}$	$\Delta E_{\text{збуд}}$ еВ					
			НІСТ*	БКХФ- БСР34	БКХФ [107]	РМ24** [119]	РМПС [112]	РМ6***[90]
1	$4s^2 \ ^1S$	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
2	$4s4p \ ^3P^o$	1.892	0.062	-0.00056	-0.144	-0.09	-0.088	
3	$3d4s \ ^3D$	2.524	0.013	0.00059	0.163	0.12	0.458	
4	$3d4s \ ^1D$	2.709	-0.040	0.00034	0.075	0.11	0.338	
5	$4s4p \ ^1P^o$	2.933	0.068	0.00037	0.047	0.05	0.145	
6	$4s5s \ ^3S$	3.910	0.023	0.00050	0.007	0.11	0.675	
7	$4s5s \ ^1S$	4.131	0.002	0.00053	0.051	0.12		
8	$3d4p \ ^3F^o$	4.443	-0.022	0.00147	-0.021	0.05	RM5 [91]	
9	$3d4p \ ^1D^o$	4.534	0.093	0.00023	-0.060	0.02	0.0	
10	$4s5p \ ^3P^o$	4.443	0.218	-8.53e-5	-0.032	0.02	0.138	
11	$4s5p \ ^1P^o$	4.554	0.112	0.00069	-0.039	0.04	0.521	
12	$4s4d \ ^1D$	4.624	0.074	0.00059	0.098	0.20	0.428	
13	$4s4d \ ^3D$	4.740	-0.041	0.00055	0.370	0.35	0.244	
14	$3d4p \ ^3D^o$	4.681	0.084	0.00082	0.034	0.13		
15	$4p^2 \ ^3P$	4.774	0.004	0.00135	-0.179	-0.11	RM5 [102]	
16	$3d4p \ ^3P^o$	4.877	0.031	0.00135	0.243	0.36	0.0	

\* Дані для триплетів усереднені по терму.

\*\* Ще три конфігураційні стани, розраховані в роботі [119], не були включені у даний розклад сильного зв'язку.

\*\*\* В колонці послідовно приведені значення енергій 5–6 нижніх рівнів, розраховані в працях [90,91, 102].

Продовження таблиці Б.3

№	Стан	$E_{\text{збуд}}$	$\Delta E_{\text{збуд}}$ eV					
			НІСТ*	БКХФ-	БКХФ	РМ24**	РМПС	РМ6***[90]
			[106]	БСР34	[107]	[119]	[112]	
17	$3d4p$	$^1F^o$	5.026	0.002	0.00064	0.862	0.97	−0.008
18	$4s6s$	$^3S$	5.018	0.043				0.008
19	$4s6s$	$^1S$	5.045	0.037				0.034
20	$4p^2$	$^1D$	5.049	0.063		0.243	0.28	−0.044
21	$4s6p$	$^1P^o$	5.168	0.075				
22	$4p^2$	$^1S$	5.181	0.099		0.109	0.21	
23	$4s4f$	$^3F^o$	5.250	0.047		−0.117	−0.03	
24	$4s4f$	$^1F^o$	5.228	0.069		0.019	0.01	
25	$4s6p$	$^3P^o$	5.272	0.044				
26	$4s5d$	$^3D$	5.300	0.061				
27	$4s5d$	$^1D$	5.321	0.068				
28	$3d^2$	$^3F$	5.393	0.056				
29	$3d4p$	$^1P^o$	5.453	0.001				
30	$4s7s$	$^3S$	5.490	−0.009				
31	$4s7s$	$^1S$	5.447	0.054		0.961	1.04	
32	$4s5f$	$^3F^o$	5.555	0.036				
33	$4s5f$	$^1F^o$	5.550	0.054				
34	$3d^2$	$^3P$	6.019	−0.003				

\* Дані для триплетів усереднені по терму.

\*\* Ще три конфігураційні стани, розраховані в роботі [119], не були включені у даний розклад сильного зв'язку.

\*\*\* В колонці послідовно приведені значення енергій 5–6 нижніх рівнів, розраховані в працях [90,91,102].

Таблиця Б.4: Порівняння БКХФ-БСР34-значень сил осциляторів з іншими теоретичними (БКХФ [107], МП [130], БКХФ [131]) та експериментальними [129] (див. також [107]) даними для переходів між станами атома кальцію

Початков. стан	Кінцевий стан	Теорія						Експеримент	
		БКХФ-БСР34		БКХФ [107]		МП	БКХФ	Мітрой	Інші експер.
		( $gfi$ )	( $gfv$ )	( $gfi$ )	( $gfv$ )	[130]	[131]	[129]	(див. [107] <sup>*</sup> )
$4s^2\ ^1S$	$4s4p\ ^1P^o$	1.760	1.723	1.760	1.827	1.746	1.74	(1.71-1.81) $\pm$ 0.03	1.754(10) <sup>c</sup> , 1.79(3) <sup>d</sup>
	$4s5p\ ^1P^o$	0.0002	0.0003	0.0059	0.0051	0.0020	0.0011	0.00091 $\pm$ 0.0019	0.00091(19) <sup>g</sup>
	$4s6p\ ^1P^o$	0.060	0.051				0.027	0.041 $\pm$ 0.006	
	$3d4p\ ^1P^o$	0.098	0.084				0.055	0.066 $\pm$ 0.008	
$4s4p\ ^1P^o$	$4s5s\ ^1S$	0.366	0.327	0.356	0.369				
	$4s6s\ ^1S$	0.0002	0.0015				0.0105	0.0270 $\pm$ 0.0018	
	$4p2\ ^1S$	0.352	0.316				0.348	0.342 $\pm$ 0.012	
	$4s7s\ ^1S$	0.097	0.041				0.0408	0.0399 $\pm$ 0.0018	
	$4s4d\ ^1D$	0.485	0.403	0.640	0.762	0.619	0.744	0.618 $\pm$ 0.015	0.62(2) <sup>h</sup>
	$4p^2\ ^1D$	1.870	1.858				1.491	1.737 $\pm$ 0.039	
	$4s5d\ ^1D$	0.637	0.619				0.909	0.840 $\pm$ 0.018	

<sup>\*</sup> Посилання на джерела (a, b, c, d, e, f, g, h, i, j, k, l) з експериментальними силами осциляторів наведені згідно [107]

Продовження таблиці Б.4

Початков. стан	Кінцевий стан	Теорія				Експеримент		
		БКХФ-БСР34		БКХФ [107]		МП	БКХФ	Мітрой
		( $gfi$ )	( $gfv$ )	( $gfi$ )	( $gfv$ )	[130]	[131]	[129]
$3d4s\ ^1D$	$4s4p\ ^1P^o$	0.007	0.043	0.0045	0.0092	0.0073		
	$3d4p\ ^1D^o$	2.014	3.072	1.495	1.590	1.84		
	$4s5p\ ^1P^o$	0.295	0.280	0.219	0.270	0.293		
	$3d4p\ ^1F^o$	0.7736	0.6415	0.416	0.376	0.357		
$4s5s\ ^1S$	$4s5p\ ^1P^o$	1.199	0.847	0.965	1.467			
$3d4p\ ^1D^o$	$4s4d\ ^1D$	0.017	0.030	0.010	0.022			
$4s5p\ ^1P^o$	$4s4d\ ^1D$	0.134	0.058	0.309	0.496			
$4s4d\ ^1D$	$3d4p\ ^1F^o$	0.562	0.627	0.660	0.848	0.9733		
$4s4p\ ^3P^o$	$3d4s\ ^3D$	0.550	0.319	0.725				
	$4s5s\ ^3S$	1.373	1.333	1.451		1.374	1.44	1.08±0.18
	$4s4d\ ^3D$	3.600	3.577	3.722		3.411	3.393	3.96±0.63
	$4p^2\ ^3P$	4.156	4.218	4.727		4.527		
	$4s5d\ ^3D$	0.914	0.878				1.008	1.08±0.27
								0.0046(12) <sup>i</sup> , 0.0051 <sup>j</sup>
								1.37(4) <sup>k</sup>
								0.299(7) <sup>k</sup>
								0.499(24) <sup>l</sup>
								0.65(24) <sup>l</sup>
								1.46(22) <sup>b</sup>
								3.86(53) <sup>b</sup>
								5(1) <sup>c</sup>

\* Посилання на джерела (a, b, c, d, e, f, g, h, i, j, k, l) з експериментальними силами осциляторів наведені згідно [107]

Продовження таблиці Б.4

Початков. стан	Кінцевий стан	Теорія				Експеримент		
		БКХФ-БСР34		БКХФ [107]		МП	БКХФ	Мітрой
		( $gfi$ )	( $gfv$ )	( $gfi$ )	( $gfv$ )	[130]	[131]	Інші експер. (див. [107] <sup>*</sup> )
$3d4s\ ^3D$	$3d4p\ ^3F^o$	6.135	5.261	5.322		5.066		$5.42(13)^d$
	$4s5p\ ^3P^o$	0.727	0.483	0.556		0.7031		$0.67(2)^d$
	$3d4p\ ^3D^o$	5.201	7.550	5.040		4.98		$5.47(14)^d$
	$3d4p\ ^3P^o$	3.163	2.096	3.171		2.848		$3.11(8)^d$
$4s5s\ ^3S$	$4s5p\ ^3P^o$	4.250	3.935	3.891				
	$3d4p\ ^3P^o$	0.508	0.554	0.117				
$3d4p\ ^3F^o$	$4s4d\ ^3D$	0.016	0.576	0.025				
$4s5p\ ^3P^o$	$4s4d\ ^3D$	2.532	3.528	2.410				

\* Посилання на джерела (a, b, c, d, e, f, g, h, i, j, k, l) з експериментальними силами осциляторів наведені згідно [107]

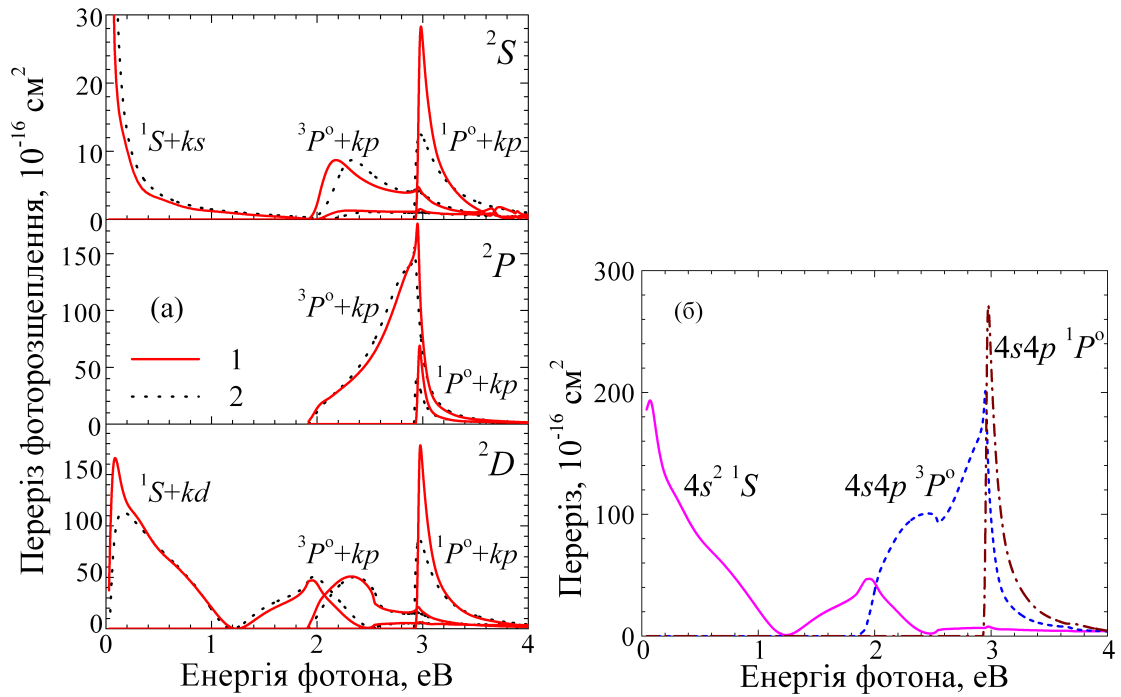


Рис. Б.2: Перерізи фоторозщеплення  $\text{Ca}^-$ : (а) парціально-хвильові вклади у фоторозщеплення  $\text{Ca}^-$ : 1 — БСР39; 2 — RM5, Юань [102]; (б) БСР39-перерізи, що приводять до різних кінцевих станів атома Ca.

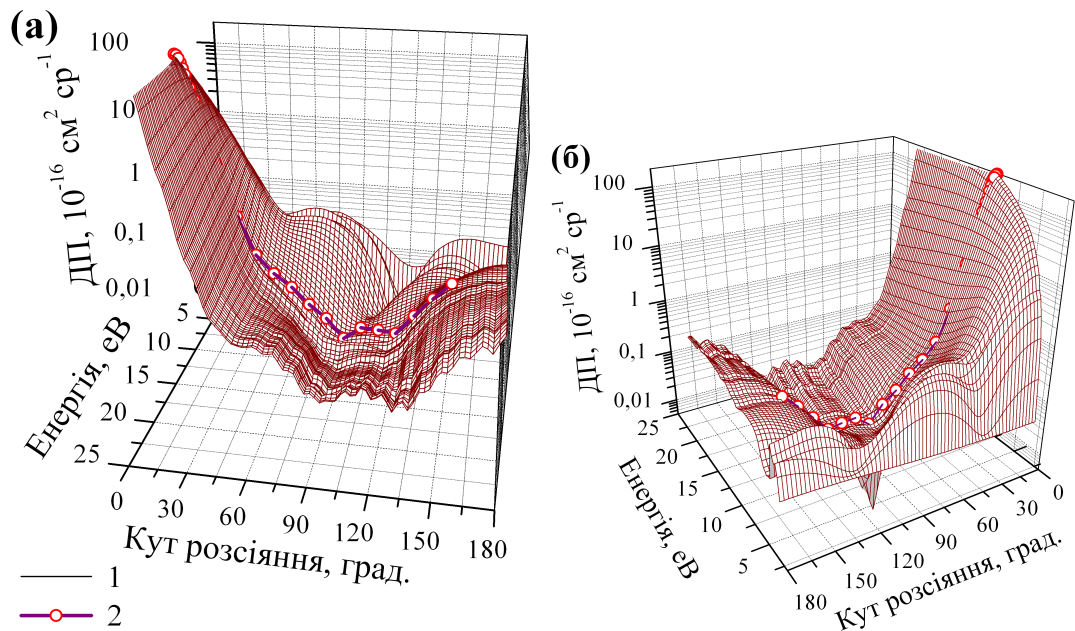


Рис. Б.3: 3D-поверхня ДП переходу  $4s^2 1S - 4s4p 1P^0$  в атомі Ca.

1 — 3D-поверхня ДП, БСР39; 2 — експеримент, Мілісавлевич та ін. [122].

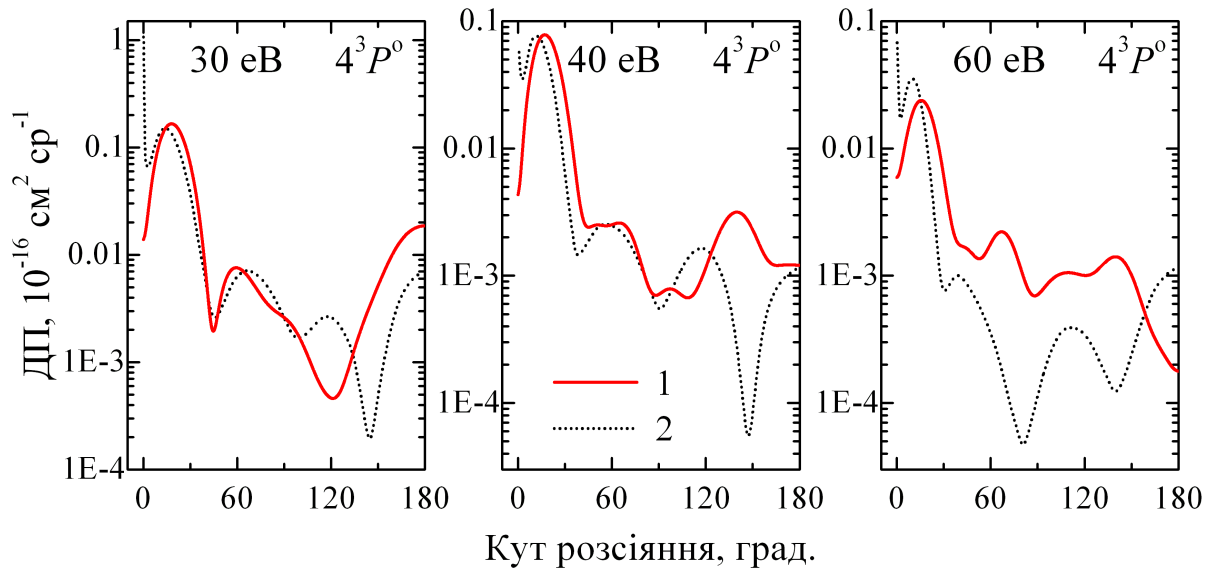


Рис. Б.4: ДП збудження стану  $4^3P^o$  атома Са електронним ударом при енергіях 30, 40 та 60 еВ: 1 – дані БСР39 [2]; 2 – РСХ, Срівастава та ін. [113].

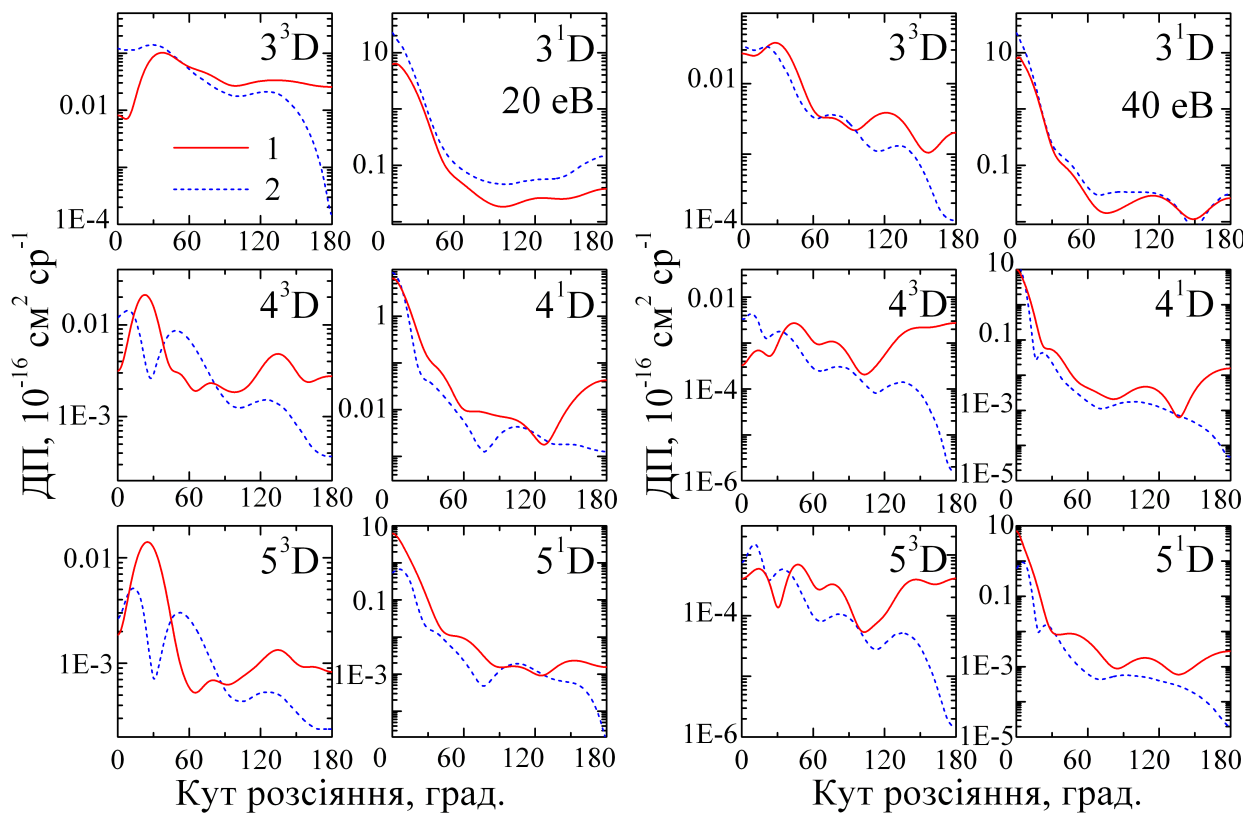


Рис. Б.5: ДП збудження станів  $n^1,3D$  ( $n = 3, 4, 5$ ) атома Са електронним ударом при енергіях 20 і 40 еВ: 1 – дані БСР39 [2]; 2 – РСХ, Муктават та ін. [114].



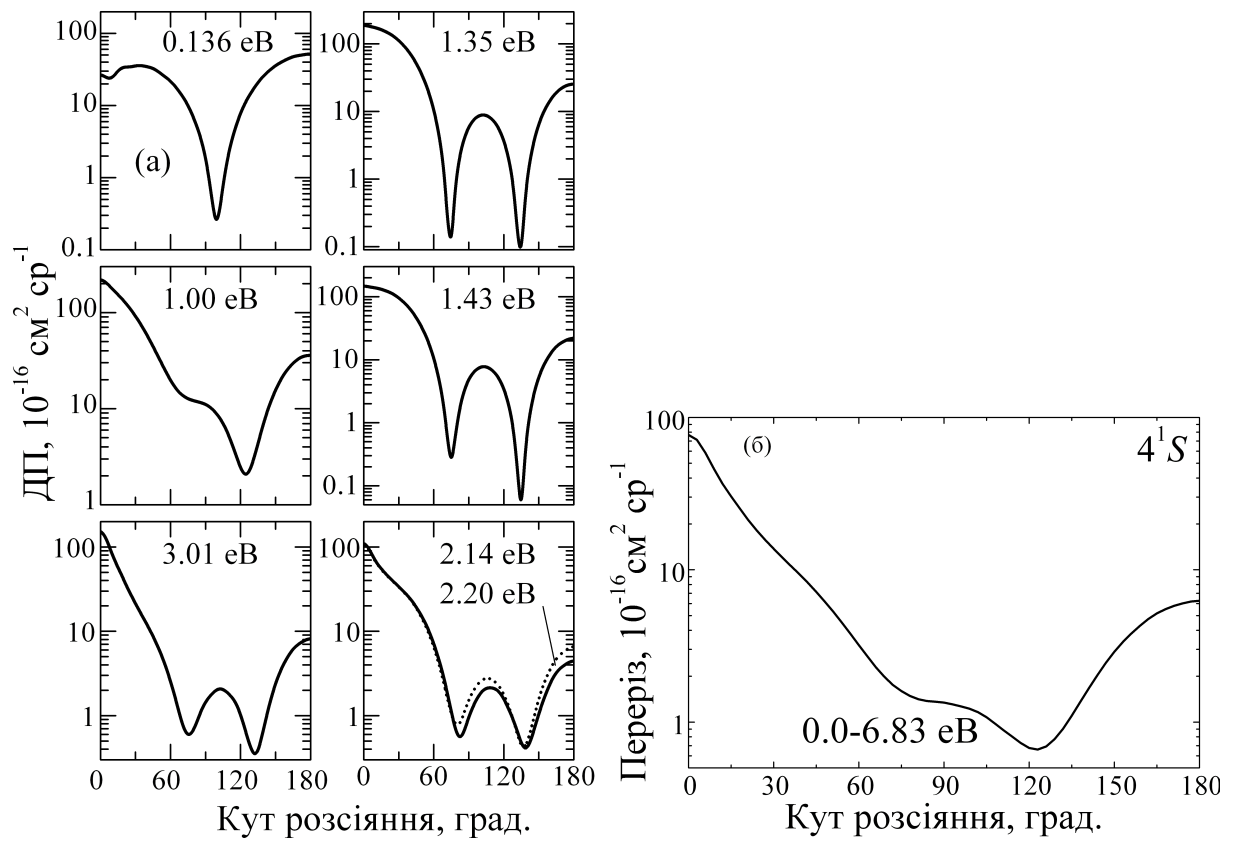


Рис. Б.6: Диференціальні перерізи пружного розсіяння  $e^+Ca$ :

- (а) Кутові залежності ДП при фіксованих значеннях енергії до  $\sim 3$  eV.  
 (б) Залежність інтегрованих по енергії (в межах від 0.002 до 6.83 eV) ДП пружного розсіяння від кутів розсіяння.

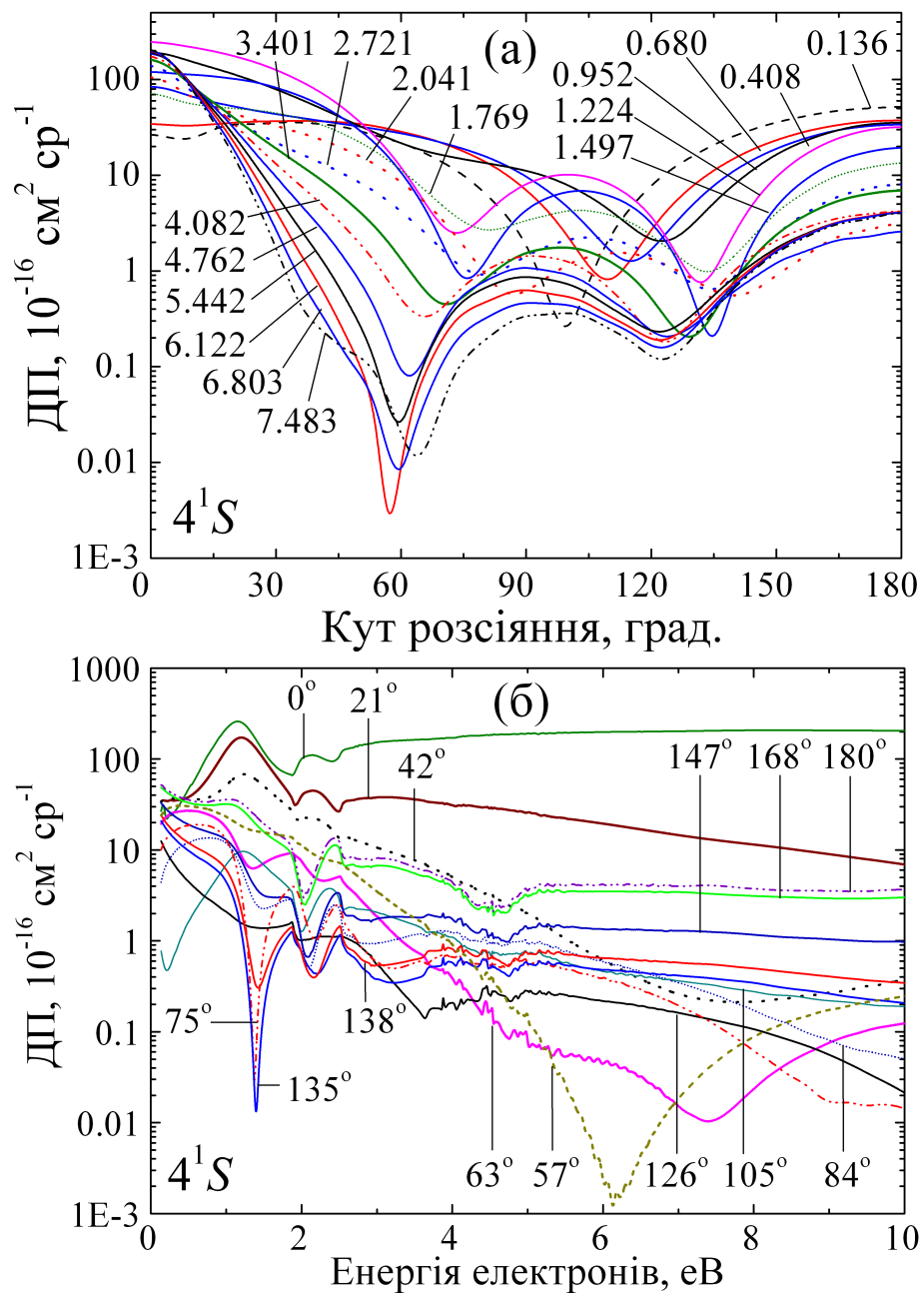


Рис. Б.7: Кутові (а) та енергетичні (б) БСР39-залежності ДП пружного розсіяння електронів на Са для фіксованих значень енергій (в eV) та кутів (у градусах), відповідно.

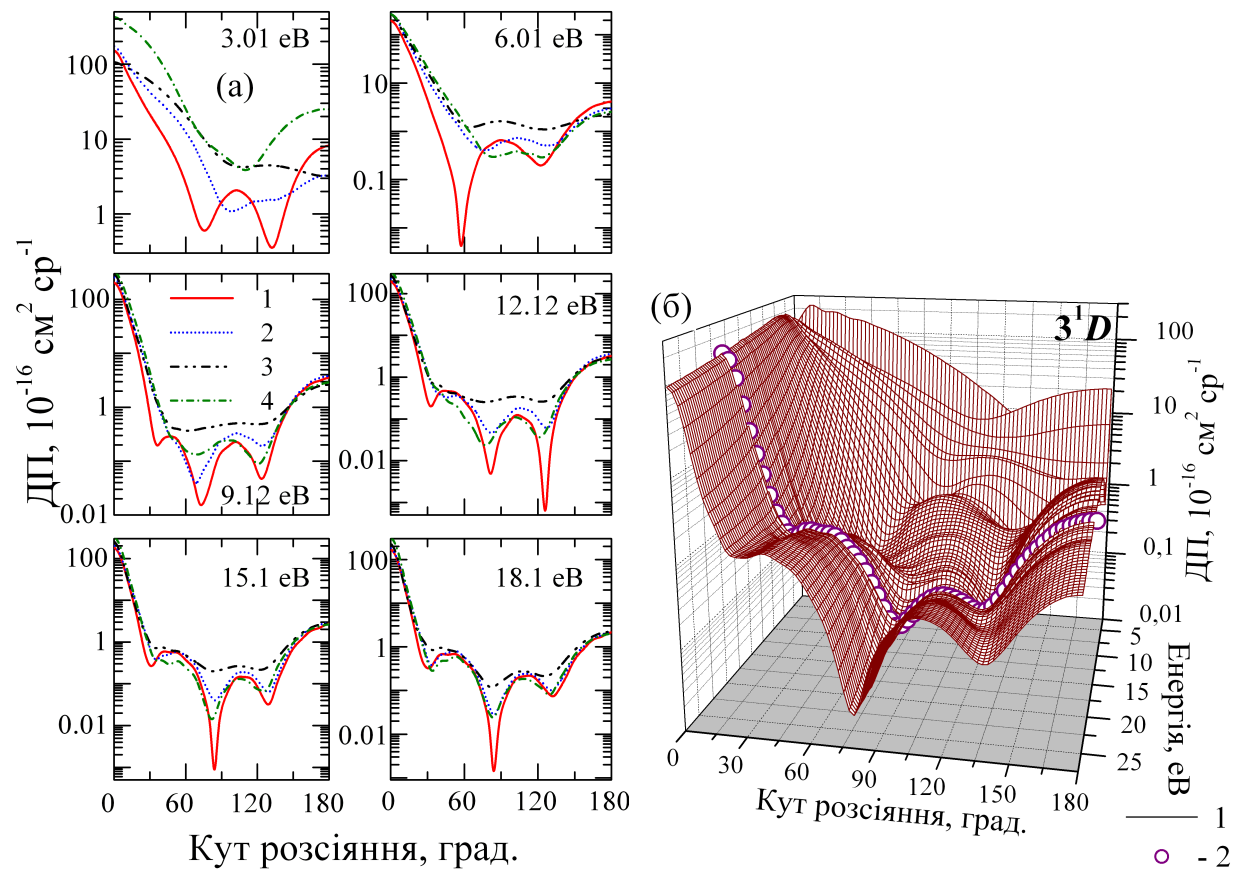


Рис. Б.8: ДП пружного розсіяння електронів на атомі Са (наближення БСР39) у різних початкових станах  $4^1S$ ,  $4^3P^0$ ,  $3^3D$  і  $4^1P^0$ :

(а) кутові залежності ДП пружного розсіяння  $e+\text{Ca}$ : 1 — початковий стан  $4^1S$ ; 2 —  $4^3P^0$ ; 3 —  $3^3D$ ; 4 —  $4^1P^0$ ;

(б) 3D-поверхня ДП пружного розсіяння електронів на атомі Са в початковому стані  $3^3D$ ; 1 — кутова залежність ДП при  $E = 18.1 \text{ eV}$ ; 2 — 3D-поверхня ДП.

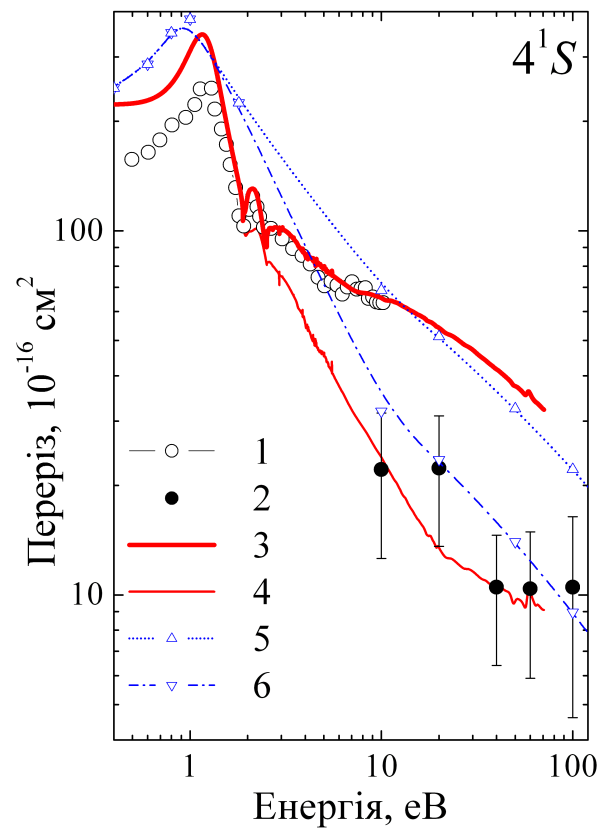


Рис. Б.9: Енергетичні залежності пружного та повного ІП розсіяння  $e+\text{Ca}$ :

1 — калібрований згідно [1] експеримент [82];

2 — експеримент [146];

3, 4 — повний та пружний БСР39-перерізи;

5, 6 — повний та пружний ОП-перерізи [86].

Таблиця Б.5: Параметри особливих точок на поверхні ДП пружного розсі-  
яння  $e+\text{Ca}$

№, $\pi/\pi$	$E_{\min}$ , eВ	$\theta_{\min}$ , °	$\approx \sigma_{\max}$ , Мб	$\sigma_{\min}$ , Мб
1	0.1361	99.47	—	—
2	1.3473	73.89	16	4.80e-3
3	1.4185	134.53	3	1.50e-3
4	2.1310	82.42	3	5.30e-1
5	2.2022	136.89	1	4.10e-1
6	6.1208	57.79	0.25	3.59e-5
7	11.6069	125.40	0.1	6.75e-7
8	16.4517	83.84	0.01	5.33e-5

Таблиця Б.6: Найбільш чіткі резонанси в ІП зіткнення  $e+\text{Ca}$  в області енер-  
гій до 4.3 eВ

Енергія, eВ	Ширина, meВ	Зсув фази, $\pi$	Класифікація	
			Поч. стан	Кін. стан
1.193	700	0.83	$4s^2 3d \ ^2D$	$4s^2 \ ^1S$
2.121	59	0.83	$4s 4p [^3P] 3d \ ^4F^o$	$4s 4p \ ^3P^o$
2.251	140	0.84	$4s 3d [^3D] 5p \ ^2D^o$	$4s 3d \ ^3D$
2.523	13	0.85	$4s 4p [^3P] 3d \ ^4D^o$	$4s 4p \ ^3P^o$
3.659	101	0.72	$4s 3d [^1D] 4d \ ^2S$	$4s 3d \ ^1D$
3.826	16	0.9	$4s 5s [^3S] 5p \ ^4P^o$	$4s 5s \ ^3S$
3.875	3	0.98	$4s 5s^2 \ ^2S$	$4s 5s \ ^3S$
3.877	7	0.96	$4s 5s [^3S] 5p \ ^2P^o$	$4s 5s \ ^3S$
3.917	4	0.77	$4s 5s [^3S] 4d \ ^2D$	$4s 5s \ ^3S$
4.099	3	0.86	$4s 5s [^1S] 6s \ ^2S$	$4s 5s \ ^1S$
4.143	11	0.67	$4s 5s [^1S] 4d \ ^2D$	$4s 5s \ ^1S$

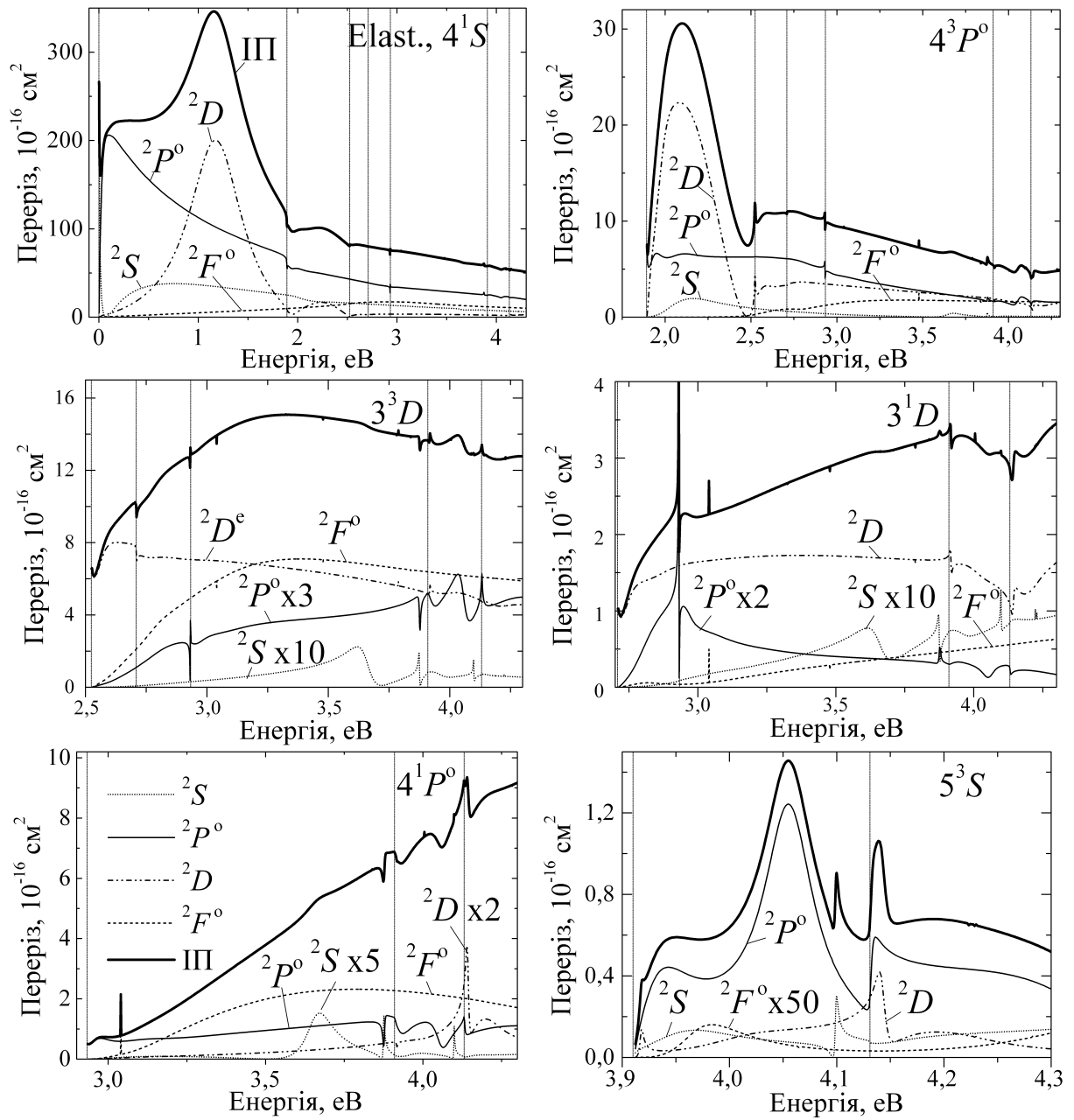


Рис. Б.10: Інтегральні перерізи пружного розсіяння  $e+\text{Ca}$  і збудження станів  $4^3P^0$ ,  $3^3D$ ,  $3^1D$ ,  $4^1P^0$  та  $5^3S$  атома  $\text{Ca}$  (—). Для кожного ІП показано розклад по парціальних хвилях  $^2S$ ,  $^2P^0$ ,  $^2D$  та  $^2F^0$ . Вертикальні тонкі лінії вказують на пороги збудження станів атома  $\text{Ca}$ .

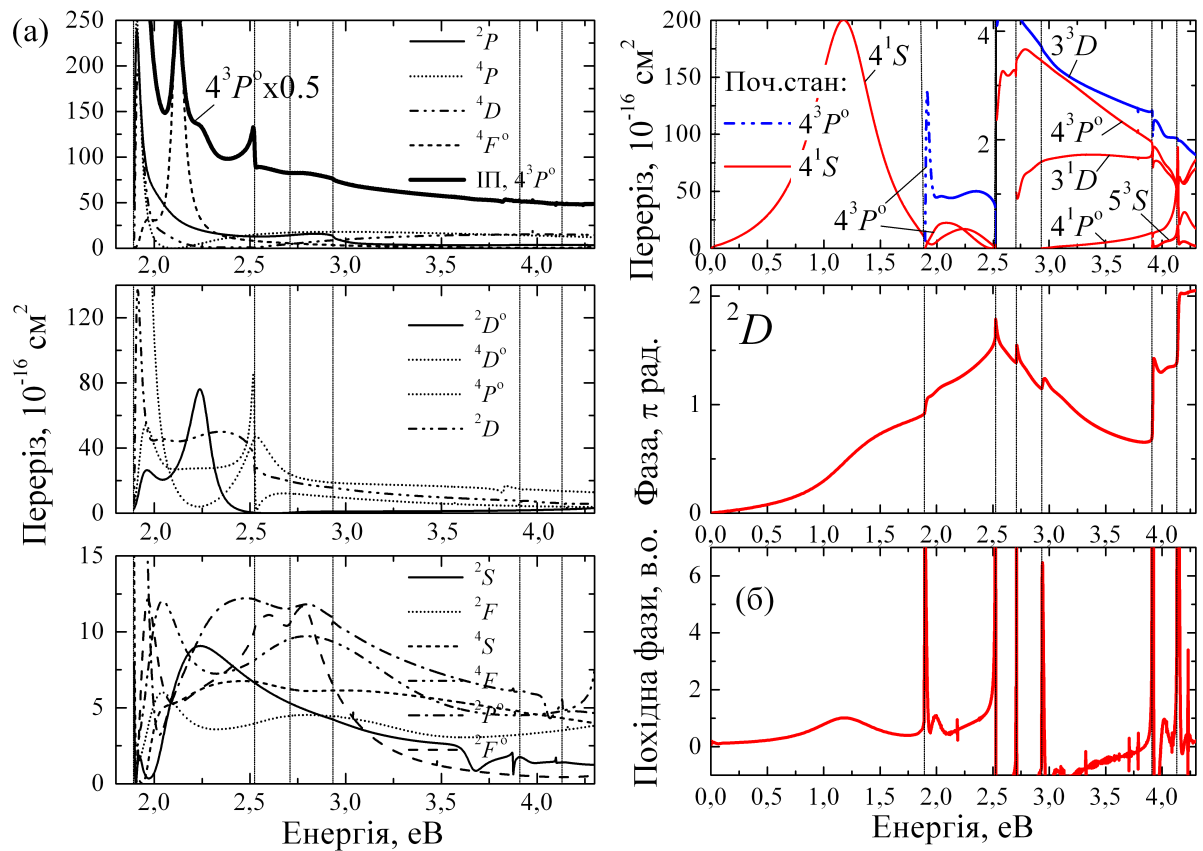


Рис. Б.11: Парціально-хвильовий аналіз ІП розсіяння  $e+\text{Ca}$  в області енергій до 4.3 eV:

(а) Інтегральний переріз пружного розсіяння електронів на атомі кальцію у метастабільному стані  $4^3P^o$  та його розклад по парціальних хвилях. Вертикальні тонкі лінії вказують на пороги збудження станів атома Ca.

(б) Парціально-фазовий аналіз резонансних особливостей ІП для  $^2D$ -хвилі: Верхнє вікно: парціальні  $^2D$ -перерізи пружного розсіяння та збудження при розсіянні електронів на Ca в основному стані  $4^1S$  (суцільна лінія) та метастабільному стані  $4^3P^o$  (штрих-пунктирна лінія);

Середнє вікно: парціальні  $^2D$ -фазові суми, в одиницях  $\pi$  радіан;

Нижнє вікно: похідні від парціальних  $^2D$ -фазових сум.

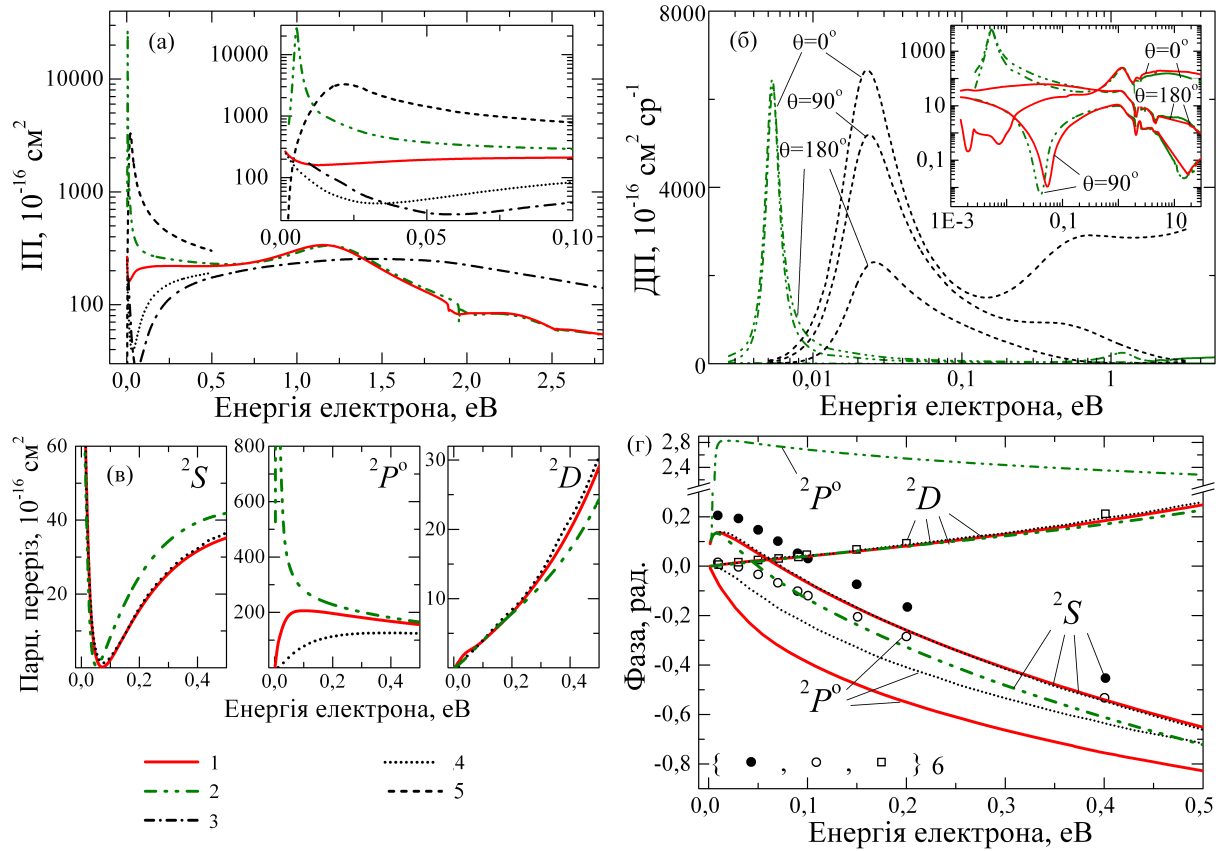


Рис. Б.12: Перерізи та фазові суми для розсіювання  $e^+Ca$  в ультрахолодній області енергій:

- (а) Ш: 1, 2 — дані БСР39 і БКХФ-БСР34; 3 — ДФ, Yuan [111]; 4 — РМПС, Bartschat and Sadeghpour [89]; 5 — метод полюсів Редже — Felfi et al. [109];
- (б) ДП при кутах розсіювання  $0^\circ$ ,  $90^\circ$  та  $180^\circ$ , позначення як у вікні (а): значення ДП показані в лінійній та логарифмічній шкалах;
- (в) парціальні  $^2S$ ,  $^2P^0$  та  $^2D$ -перерізи, позначення як у вікні (а);
- (г) фази розсіювання для  $^2S$ ,  $^2P^0$  та  $^2D$ -хвиль: 1–5 — позначення як у вікні (а); 6 — SEP, Yuan and Zhang [89].



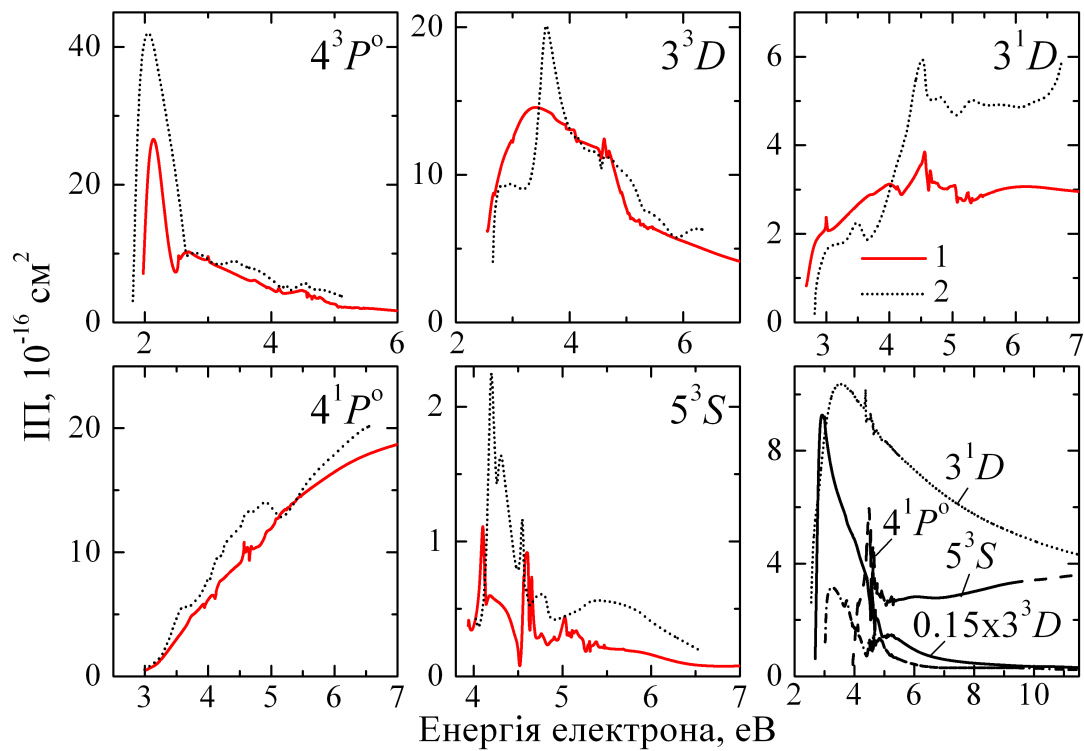


Рис. Б.13: ІП збудження станів  $4^3P^o$ ,  $3^3D$ ,  $3^1D$ ,  $4^1P^o$  та  $5^3S$  атома Ca електронним ударом:

1 — наші дані БСР39; 2 — РМ22, Самсон і Беррінгтон [112] для ІП збудження з основного стану  $4^1S$ ;

у нижньому правому вікні — дані БСР39 для ІП збудження станів  $3^3D$ ,  $3^1D$ ,  $4^1P^o$  та  $5^3S$  із метастабільного стану  $4^3P^o$ .

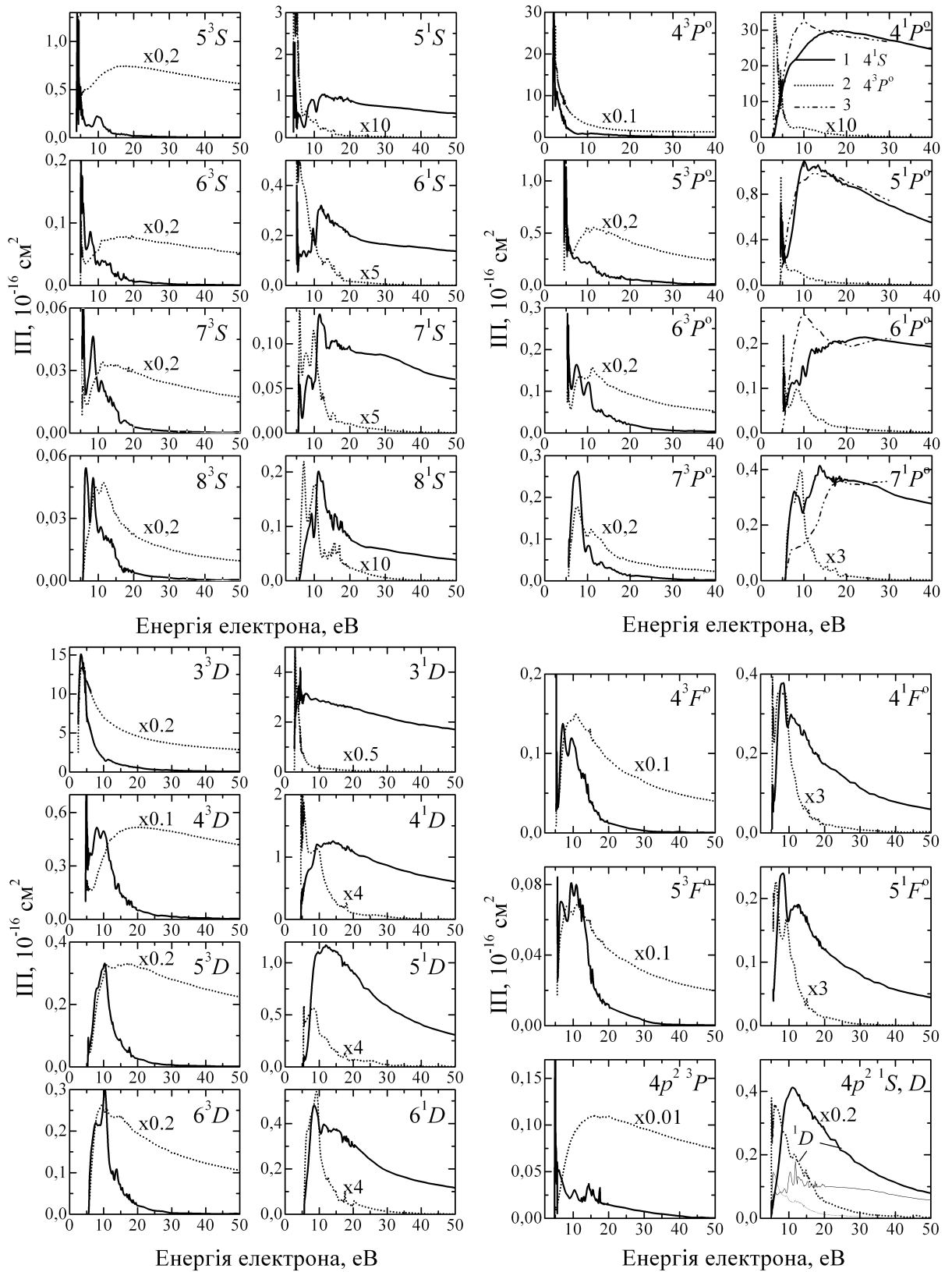


Рис. Б.14: ІП збудження станів серій  $ns\ ^3S$  ( $n = 5, 6, 7, 8$ ), серій  $np\ ^3P^o$  ( $n = 4, 5, 6, 7$ ),  $nd\ ^3D$  ( $n = 3, 4, 5, 6$ ),  $nf\ ^3F^o$  ( $n = 4, 5$ ), а також станів  $4p^2\ (^3P^o, ^1S, ^1D)$ :

1, 2 — БСР39-збудження з рівнів  $4\ ^1S$  і  $4\ ^3P^o$ ; 3 — експ. Гарга та ін. [144].

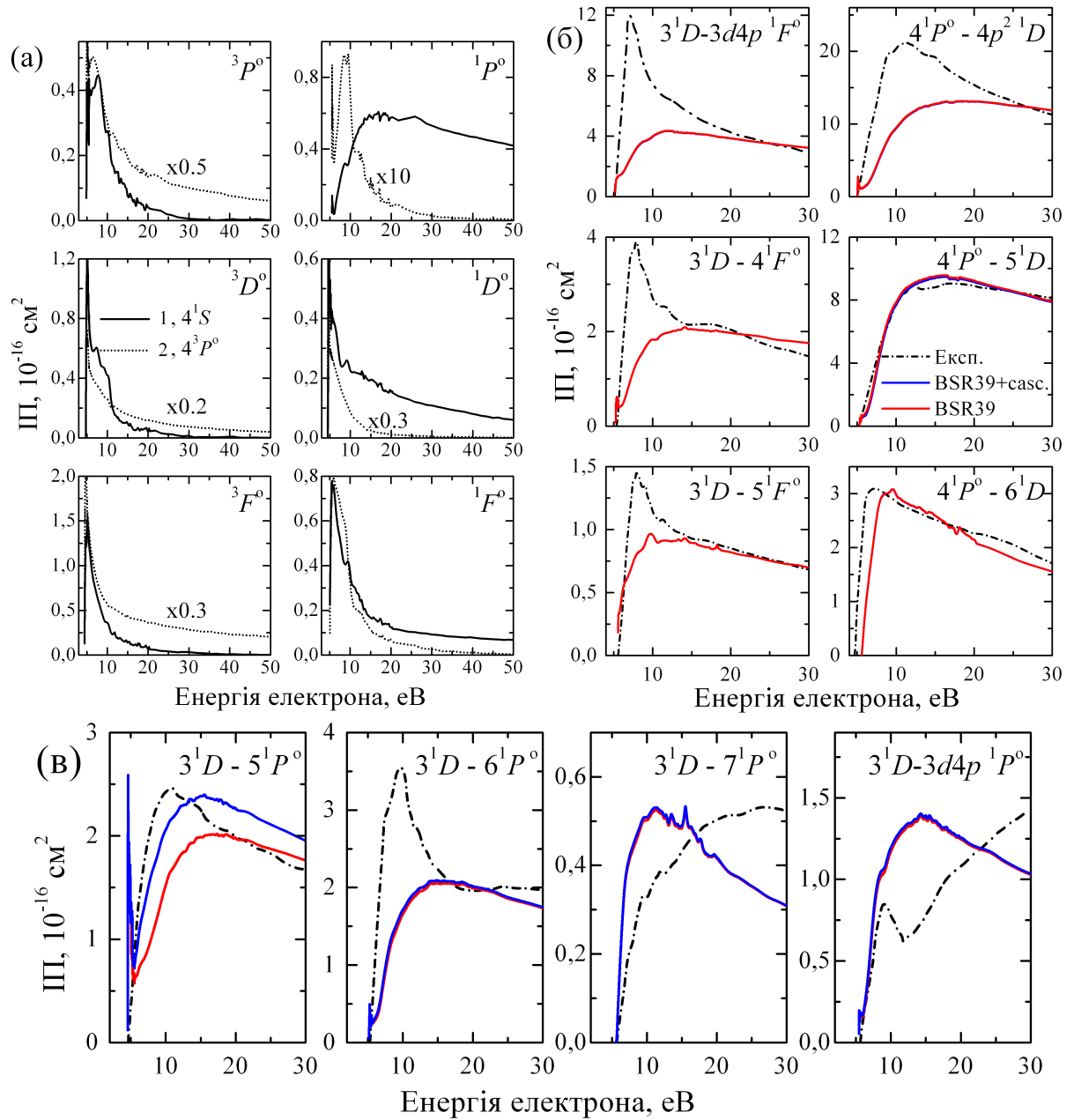


Рис. Б.15: Інтегральні перерізи різних переходів для розсіяння  $e+\text{Ca}$ :

(а) — ІП збудження станів серії  $3d4p\ ^{3,1}L$  ( $L = 1, 2, 3$ ): 1, 2 — БСР39-збудження з рівнів  $4^1S$  і  $4^3P^o$ ;

(б), (в) — порівняння даних БСР39 з експериментом Гарга и др. [144] для різних серій переходів в атомі Са: 1 — БСР39; 2 — БСР39+каскади; 3 — експ. Гарга та ін. [144].

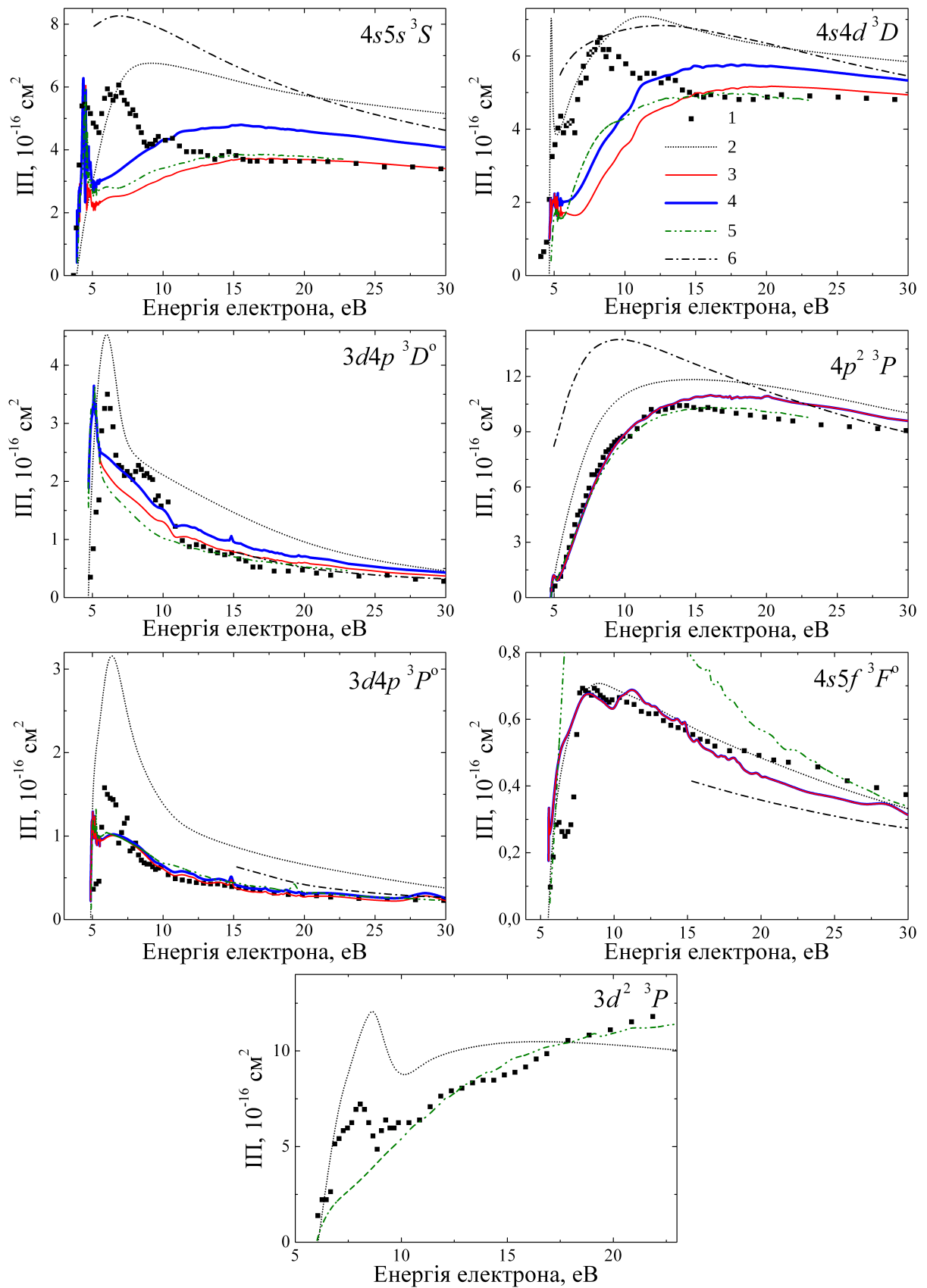


Рис. Б.16: ІП збудження електронами атома Са в стані  $4s4p\ ^3P^\circ$ :

1 — експ. Шафраньош та ін. [128]; 2 — 6СС, Шафраньош та ін. [128]; 3, 4, 5 — дані БСР39, БСР39+каскади, БКХФ-БСР34; 6 — РСХ, Шарма та ін. [148].

Таблиця Б.7: Розсіяння  $e+\text{Ca}$ : ефективні сили зіткнень збудження з основного стану (для вибраних температур)

К.стан	Температура, $\times 10^3$ К						
	25	50	75	100	250	500	1000
1	4.811	5.165	5.367	5.576	6.585	7.046	6.991
2	6.026-1	4.510-1	3.799-1	3.359-1	2.142-1	1.375-1	8.036-2
3	9.163-1	7.773-1	6.745-1	5.992-1	3.731-1	2.350-1	1.360-1
4	3.301-1	4.680-1	5.866-1	6.906-1	1.039	1.161	1.137
5	1.676	3.477	5.153	6.666	1.1981	1.4591	1.4791
6	4.110-2	3.485-2	3.085-2	2.773-2	1.785-2	1.165-2	6.967-3
7	1.104-1	1.533-1	1.985-1	2.381-1	3.600-1	3.852-1	3.636-1
8	1.273-1	1.075-1	9.344-2	8.309-2	5.146-2	3.206-2	1.838-2
9	5.119-2	5.429-2	5.738-2	5.988-2	6.328-2	5.358-2	3.856-2
10	5.961-2	5.109-2	4.593-2	4.199-2	2.819-2	1.826-2	1.069-2
11	8.736-2	1.543-1	2.047-1	2.430-1	3.529-1	4.108-1	4.315-1
12	1.207-1	1.989-1	2.582-1	3.045-1	4.501-1	5.423-1	5.875-1
13	6.691-2	7.108-2	6.750-2	6.246-2	4.071-2	2.574-2	1.491-2
14	9.683-2	8.383-2	7.263-2	6.394-2	3.739-2	2.227-2	1.236-2
15	7.568-3	7.154-3	7.235-3	7.330-3	6.690-3	4.974-3	3.128-3
16	5.683-2	5.441-2	4.914-2	4.428-2	2.735-2	1.678-2	9.508-3
17	8.754-2	8.332-2	7.953-2	7.701-2	7.314-2	7.513-2	7.693-2
18	1.375-2	1.161-2	1.016-2	9.066-3	5.674-3	3.595-3	2.096-3
19	2.690-2	4.201-2	5.407-2	6.359-2	9.668-2	1.197-1	1.340-1
20	1.689-1	2.960-1	3.703-1	4.154-1	4.803-1	4.622-1	4.193-1
21	1.878-2	3.171-2	4.440-2	5.618-2	1.097-1	1.577-1	1.943-1
22	1.404-2	2.134-2	2.697-2	3.147-2	4.565-2	5.306-2	5.622-2
23	1.572-2	1.733-2	1.665-2	1.549-2	1.007-2	6.234-3	3.538-3

Продовження таблиці Б.7

К.стан	Температура, $\times 10^3$ К						
	25	50	75	100	250	500	1000
24	4.086-2	5.494-2	6.187-2	6.582-2	7.111-2	7.000-2	6.658-2
25	2.203-2	2.064-2	1.895-2	1.744-2	1.171-2	7.523-3	4.372-3
26	2.901-2	3.513-2	3.411-2	3.170-2	2.031-2	1.251-2	7.088-3
27	1.002-1	1.809-1	2.301-1	2.617-1	3.231-1	3.332-1	3.241-1
28	4.658-2	4.742-2	4.378-2	3.992-2	2.520-2	1.558-2	8.863-3
29	4.204-2	8.450-2	1.213-1	1.526-1	2.731-1	3.659-1	4.306-1
30	5.727-3	5.385-3	4.887-3	4.428-3	2.809-3	1.772-3	1.027-3
31	9.659-3	1.680-2	2.244-2	2.696-2	4.251-2	5.248-2	5.818-2
32	1.120-2	1.232-2	1.186-2	1.105-2	7.137-3	4.369-3	2.452-3
33	3.001-2	3.858-2	4.309-2	4.580-2	5.024-2	5.057-2	4.919-2
34	5.377-2	7.709-2	9.065-2	9.948-2	1.189-1	1.262-1	1.277-1
35	2.775-2	2.403-2	2.070-2	1.820-2	1.083-2	6.591-3	3.723-3
36	3.078-2	3.310-2	3.095-2	2.826-2	1.758-2	1.076-2	6.089-3
37	4.508-2	6.936-2	8.961-2	1.066-1	1.702-1	2.173-1	2.487-1
38	6.209-3	6.028-3	5.537-3	5.054-3	3.258-3	2.067-3	1.201-3
39	1.393-2	2.315-2	2.818-2	3.129-2	3.799-2	4.027-2	4.035-2

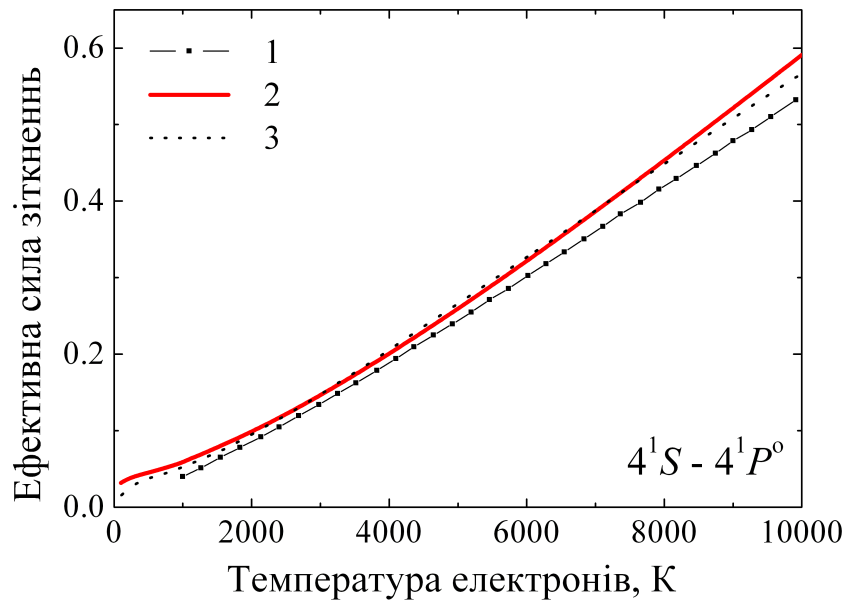


Рис. Б.17: Ефективні сили зіткнень для резонансного переходу  $4s^2\ ^1S - 4s4p\ ^1P^0$  в атомі Ca:

1 — експ. Кренделл та ін. [145]; 2 — наші дані БСР39; 3 — РМ22, Самсон і Беррінгтон [112].

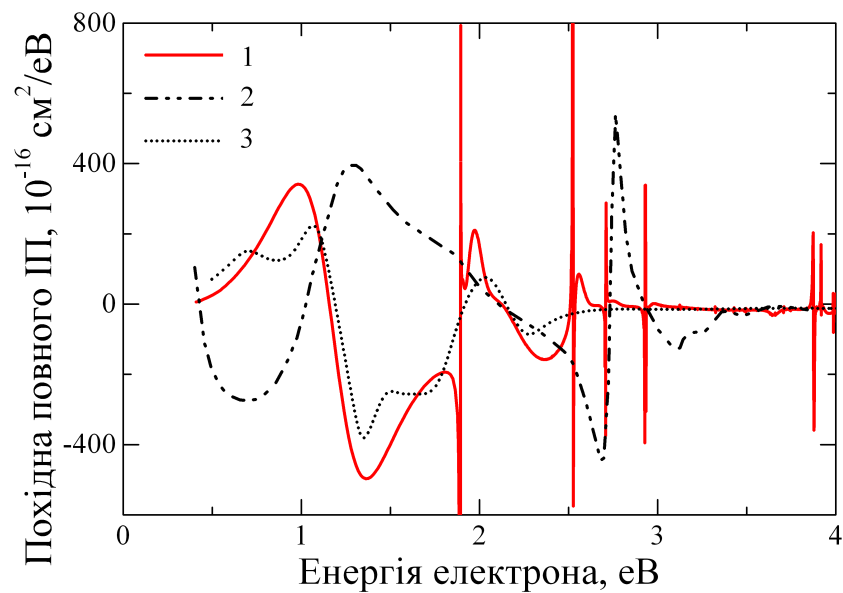


Рис. Б.18: Похідні повних перерізів розсіяння електрона на атомі кальцію.

1 — дані БСР39; 2 — експеримент Джонстон та. ін. [84]; 3 — калібровані дані Романюк та. ін. [82] (похідні розраховані нами)

Таблиця Б.8: Енергії зв'язку (в еВ) для спектроскопічних станів мішені атома Al, включених у наш СЗ розклад

Конфіг.	Терм	НІСТ [165]	БСР [3]	Різниця
$3s^23p$	$^2P^o$	-5.976	-5.946	0.030
$3s^24s$	$^2S$	-2.843	-2.808	0.035
$3s3p^2$	$^4P$	-2.378	-2.384	-0.006
$3s^23d$	$^2D$	-1.964	-1.950	0.014
$3s^24p$	$^2P^o$	-1.899	-1.890	0.009
$3s^25s$	$^2S$	-1.313	-1.302	0.011
$3s^24d$	$^2D$	-1.159	-1.158	0.001
$3s^25p$	$^2P^o$	-0.992	-0.988	0.004
$3s^24f$	$^2F^o$	-0.863	-0.863	0.000
$3s^26s$	$^2S$	-0.761	-0.751	0.010
$3s^25d$	$^2D$	-0.749	-0.747	0.002
$3s^26p$	$^2P^o$	-0.613	-0.590	0.023
$3s3p^2$	$^2S$	0.431	0.423	-0.008
$3s3p^2$	$^2P$	1.044	1.086	0.042



Таблиця Б.9: Порівняння сил осциляторів для Al

Перехід	$f_L$	різниця а, %	[165]	різниця б, %
$3p - 4s$	1.16e-1	2.8	1.16e-1	0.0
$3p - 3d$	1.74e-1	1.6	1.70e-1	2.3
$3p - 5s$	1.44e-2	3.8	1.50e-2	4.1
$3p - 4d$	4.62e-2	1.4	4.90e-2	5.9
$3p - 6s$	5.14e-3	4.1	4.85e-3	5.8
$3p - 5d$	1.26e-1	1.7	1.28e-1	1.6
$4s - 4p$	1.22	1.2	1.24	1.6
$4s - 5p$	1.95e-2	4.1	2.03e-2	4.0
$4s - 6p$	3.34e-3	7.2	3.19e-3	4.6
$3d - 4p$	2.37e-2	4.8	2.27e-2	4.3
$3d - 5p$	1.05e-3	4.4	9.94e-4	5.5
$3d - 4f$	4.01e-1	0.1	3.70e-1	8.0
$4p - 5s$	2.56e-1	1.1	2.01e-1	24.1
$4p - 4d$	7.80e-1	1.6	8.28e-1	6.0
$4p - 6s$	2.40e-2	1.7	2.36e-2	1.7
$4p - 5d$	4.60e-3	7.3	4.78e-3	3.8
$5s - 5p$	1.71	0.6	1.74	1.7
$5s - 6p$	4.91e-2	1.9	4.65e-2	5.4
$4d - 5p$	2.09e-1	3.0	1.94e-1	7.4
$4d - 4f$	7.93e-1	0.1	7.90e-1	0.4
$4d - 6p$	4.77e-3	7.8	5.35e-3	11.5
$5p - 6s$	4.01e-1	0.6	3.94e-1	1.8
$5p - 5d$	1.21	1.4	1.25	3.3
$4f - 5d$	1.60e-1	0.4	1.63e-1	1.9
$6s - 6p$	2.24	0.4	2.18	2.7
$5d - 6p$	3.85e-1	1.8	3.53e-1	8.7

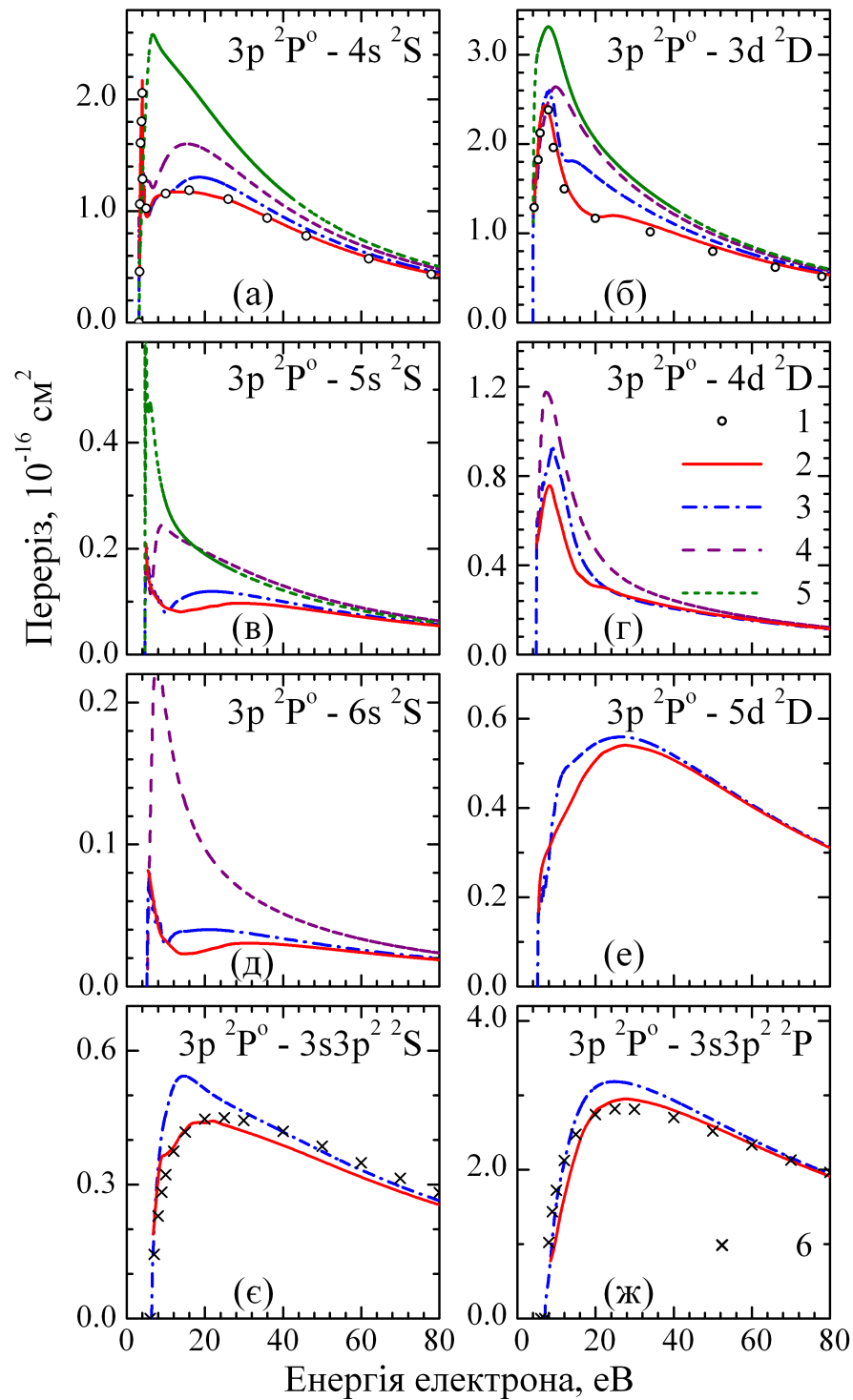


Рис. Б.19: Залежність ІП від енергії зіткнення для обраних дипольно-дозволених переходів в атомі Al:

1–5 — результати даних розрахунків [3] у наближеннях БСР587, БСР81, БСР32, БСР10 та БСР2 відповідно; 6 —  $f$ -масштабоване борнівське наближення плоских хвиль для збудження станів  $3s3p^2\ ^2S$ ,  $^2P$  Кім і Стоун [156].

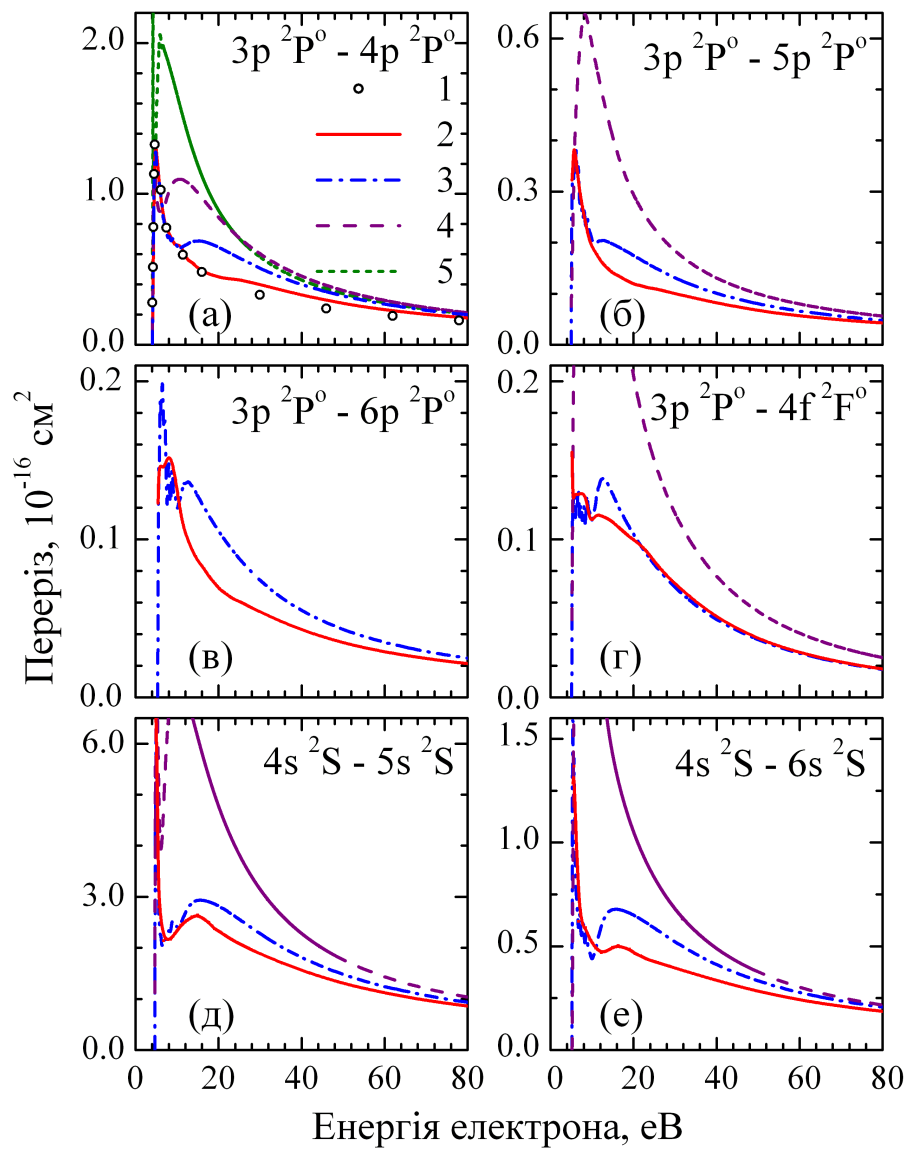


Рис. Б.20: Залежність ІП від енергії зіткнення для найважливіших неди-  
польних переходів в атомі Al:

1–5 — результати даних розрахунків [3] у наближеннях БСР587, БСР81,  
БСР32, БСР10 та БСР2 відповідно.

Дані БСР-результати, отримані в різних наближеннях, ілюструють збі-  
жність СЗ-розкладу.

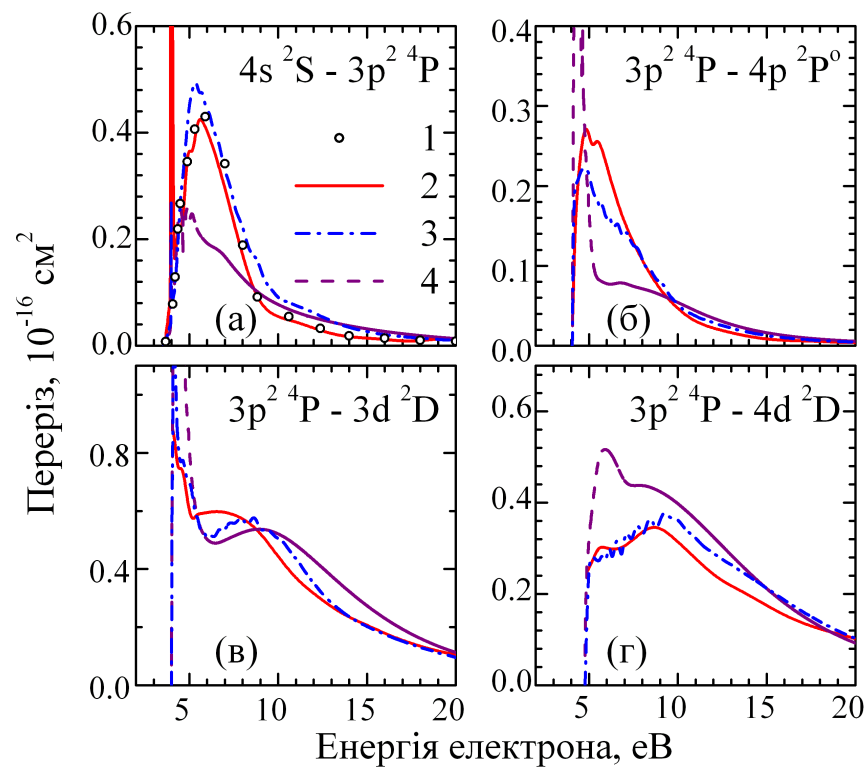


Рис. Б.21: Залежність ІП від енергії зіткнення для найважливіших обмінних переходів в атомі Al:

1–4 — результати даних розрахунків [3] у наближеннях БСР587, БСР81, БСР32 та БСР10 відповідно.

Дані БСР-результати, отримані в різних наближеннях, ілюструють збіжність СЗ-розкладу.

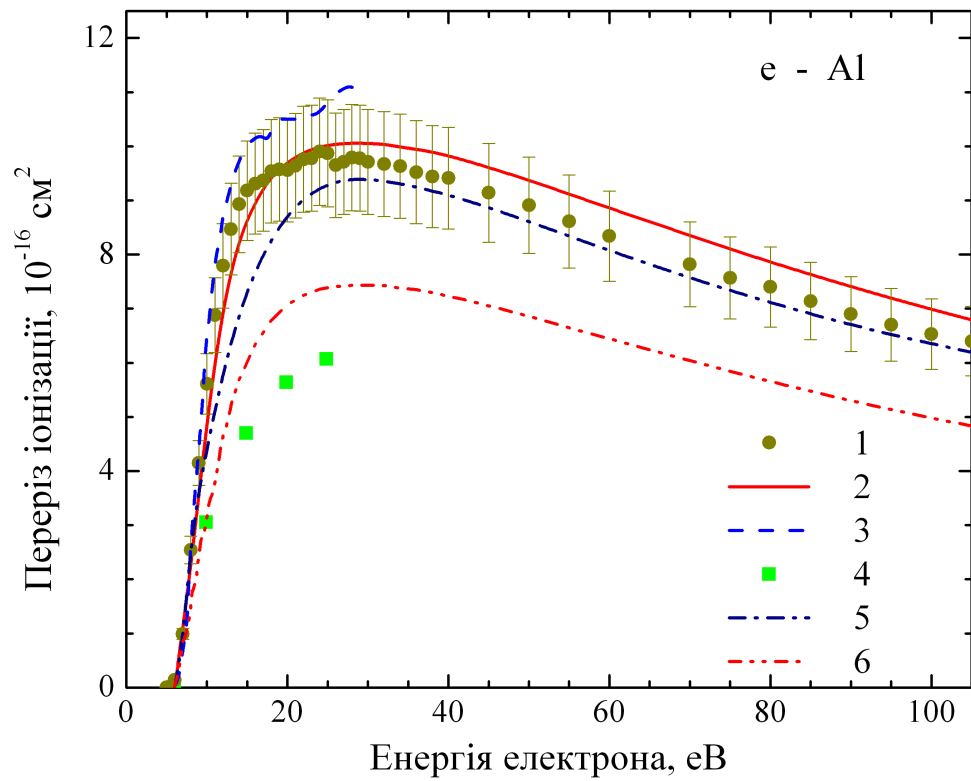


Рис. Б.22: Переріз іонізації електронним ударом атома Al з основного стану  $3s^2 3p^2 P^o$ :

1 — експериментальні дані Фройнд та ін. [154]; 2 — БСР587, даний розрахунок [3]; 3, 4 — РМПС та ЗЧСЗ відповідно [157]; 5 — БЗБ, Кім і Стоун [156]; 6 — БСР587 [3], переріз прямої іонізації.

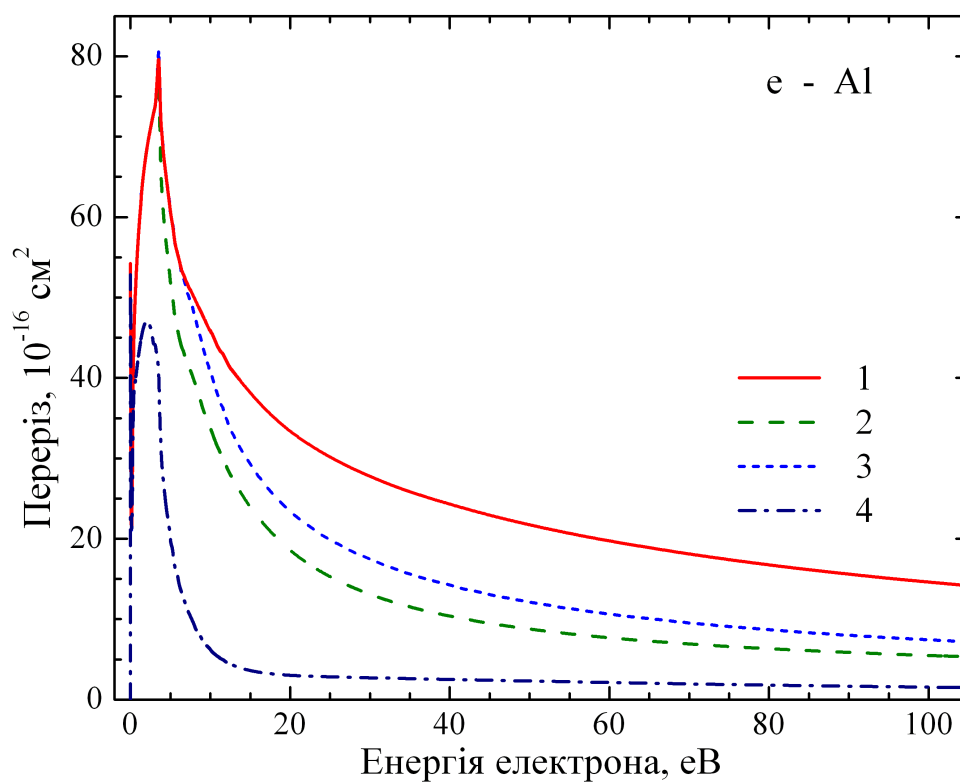


Рис. Б.23: Сумарний повний переріз зіткнень електронів з атомами Al в їх основному стані  $3s^2 3p \ ^2P^o$  (згідно наших БСР587-розрахунків [3]):

1 — сумарний повний переріз; 2 — переріз пружного розсіяння; 3 — переріз пружного розсіяння плюс збудження; 4 — переріз передачі імпульсу.

Таблиця Б.10: Енергії зв'язку (в еВ) для станів мішені Al, включених у даний СЗ-розклад, порівняні з даними НІСТ [165]. Також наведені порогові енергії фотонів для фоторозщеплення рівнів  $\text{Al}^-$  ( $^3P$ ) і ( $^1D$ ), відповідно

Конфіг.	Терм	НІСТ [165]	БСР [4]	Різниця	$^3P$	$^1D$
$3s^23p$	$^2P^o$	-5.976	-5.946	0.030	0.437	0.097
$3s^24s$	$^2S$	-2.843	-2.808	0.035	3.570	3.230
$3s3p^2$	$^4P$	-2.378	-2.384	-0.006	4.035	3.695
$3s^23d$	$^2D$	-1.964	-1.950	0.014	4.449	4.109
$3s^24p$	$^2P^o$	-1.899	-1.890	0.009	4.514	4.174
$3s^25s$	$^2S$	-1.313	-1.302	0.011	5.101	4.761
$3s^24d$	$^2D$	-1.159	-1.158	0.001	5.255	4.915
$3s^25p$	$^2P^o$	-0.992	-0.988	0.004	5.421	5.081
$3s^24f$	$^2F^o$	-0.863	-0.863	0.000	5.551	5.211
$3s^26s$	$^2S$	-0.761	-0.751	0.010	5.653	5.313
$3s3p^2$	$^2S$	0.431	0.423	-0.008	6.844	6.504
$3s3p^2$	$^2P$	1.044	1.086	0.042	7.457	7.117

Таблиця Б.11: Параметри ідентифікованих резонансів для  $\text{Al}^-$  (в еВ)

Стан	Зсув фази		Часова затримка	
	Енергія	Ширина	Енергія	Ширина
$3s^24s4p\ ^3P^o$	3.565	0.007	3.564	0.007
$3s3p^3\ ^3D^o$	3.870	0.360	3.891	0.391
$3s^24p5s\ ^1D^o$	4.141	0.019	4.141	0.017
$(3s3p^3)\ ^3P^o$	4.200	0.850	4.208	0.860
$(3s^23d4p)\ ^3P^o$	4.431	0.005	4.430	0.005
$3s3p^3\ ^1D^o$	5.744	1.160	5.714	1.020
$3s3p^3\ ^1P^o$	6.076	0.860	6.090	0.821
$3s3p^3\ ^3S^o$	7.211	1.170	7.211	1.172

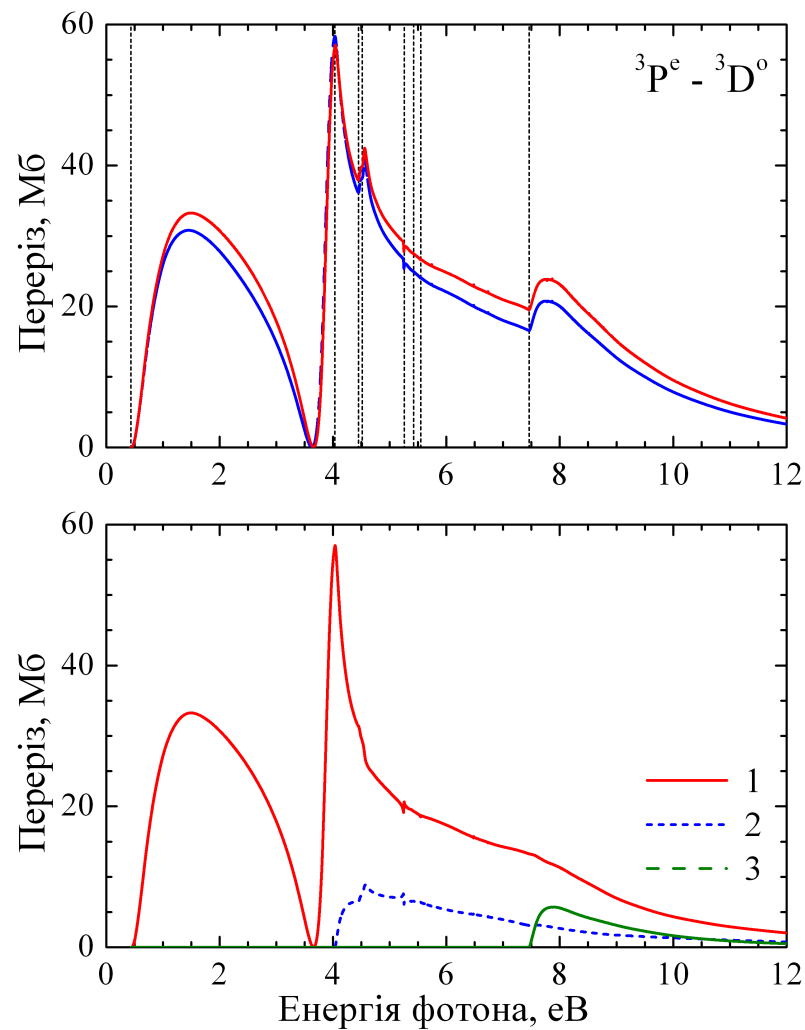


Рис. Б.24: Парціальні перерізи для переходу  ${}^3P^e - {}^3D^o$  та відповідних домінуючих каналів.

Верхня панель: парціальний переріз для переходу  ${}^3P^e - {}^3D^o$ : 1 — переріз у формі довжини електричного дипольного оператора; 2 — переріз у формі швидкості; вертикальні лінії — пороги енергій мішені.

Нижня панель: головні вклади (у формі довжини) окремих каналів розсіювання для  ${}^3D^o$ -парціального перерізу: 1 —  $3s^23p({}^2P^o)kd$ ; 2 —  $3s3p^2({}^4P)kp$ ; 3 —  $3s3p^2({}^2P)kp$ .



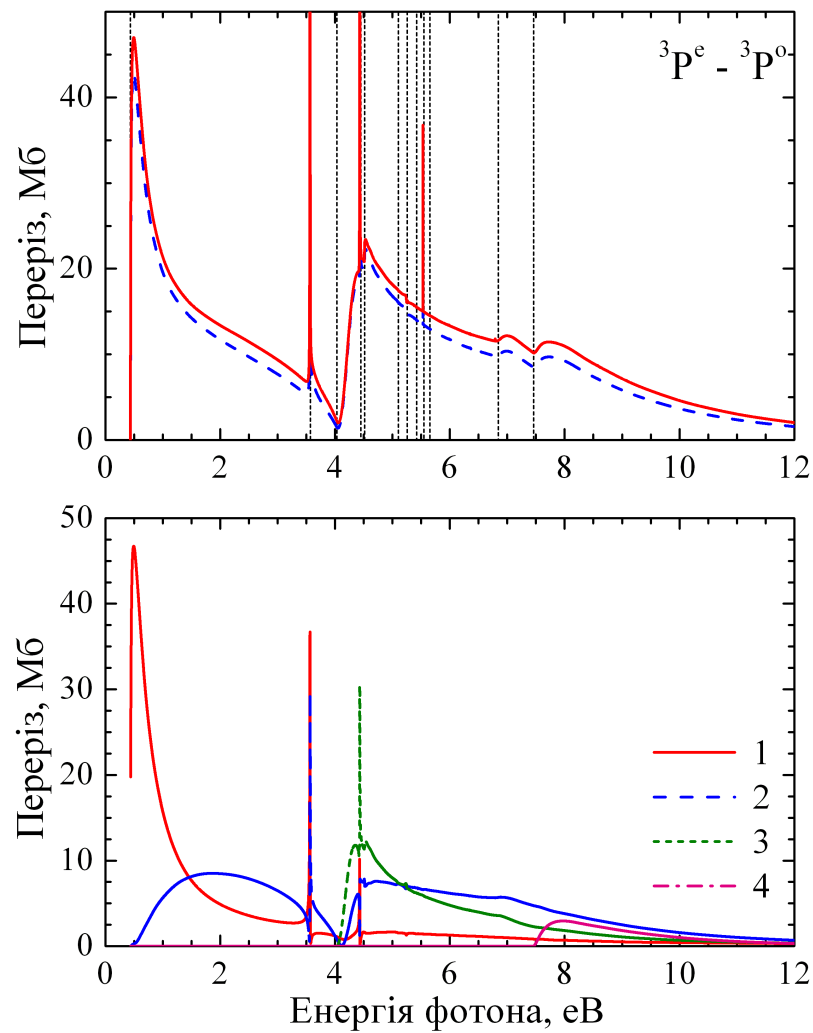


Рис. Б.25: Парціальні перерізи для переходу  ${}^3P^e - {}^3P^o$  та відповідних домінантних каналів.

Верхня панель: позначення як на рис. Б.24, але для переходу  ${}^3P^e - {}^3P^o$ .

Нижня панель: позначення як на рис. Б.24, але для  ${}^3D^o$ -парціального перерізу: 1 —  $3s^23p({}^2P^o)ks$ ; 2 —  $3s3p^2({}^2P^o)kd$ ; 3 —  $3s3p^2({}^4P)kp$ ; 4 —  $3s3p^2({}^2P)kp$ .

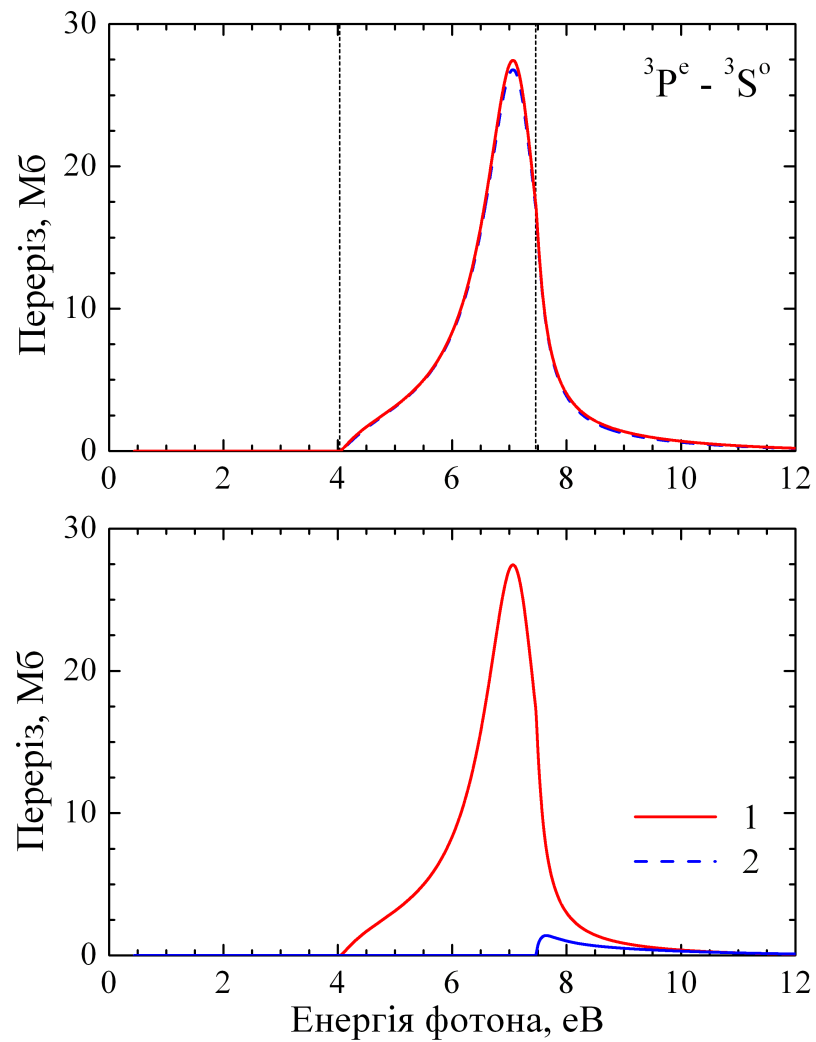


Рис. Б.26: Парціальні перерізи для переходу  ${}^3P^e - {}^3S^o$  та відповідних домінантних каналів.

Верхня панель: позначення як на рис. Б.24, але для переходу  ${}^3P^e - {}^3S^o$ .

Нижня панель: позначення як на рис. Б.24, але для  ${}^3S^o$ -парціального перерізу: 1 —  $3s3p^2 ({}^4P)kp$ ; 2 —  $3s3p^2 ({}^2P)kp$ .

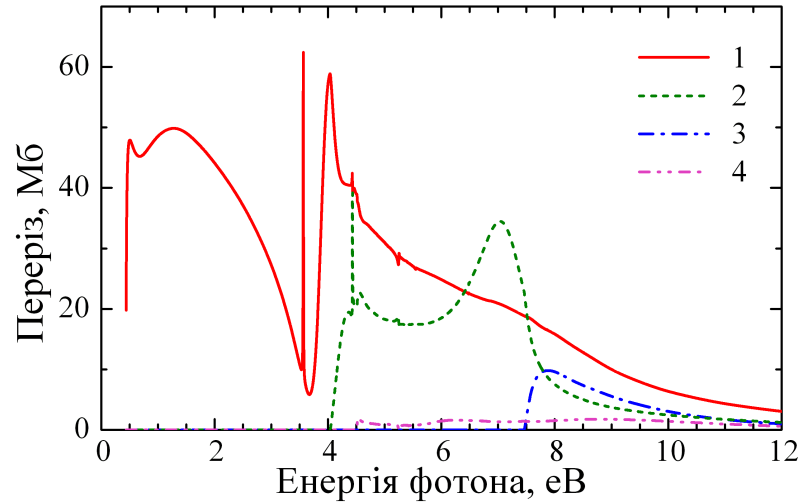


Рис. Б.27: Домінуючі перерізи фоторозщеплення для кінцевих атомних станів Al:

1 —  $3s^23p(^2P^o)$ ; 2 —  $3s3p^2(^4P)$ ; 3 —  $3s3p^2(^2P)$ ; 4 —  $3s^24p(^2P^o)$ .

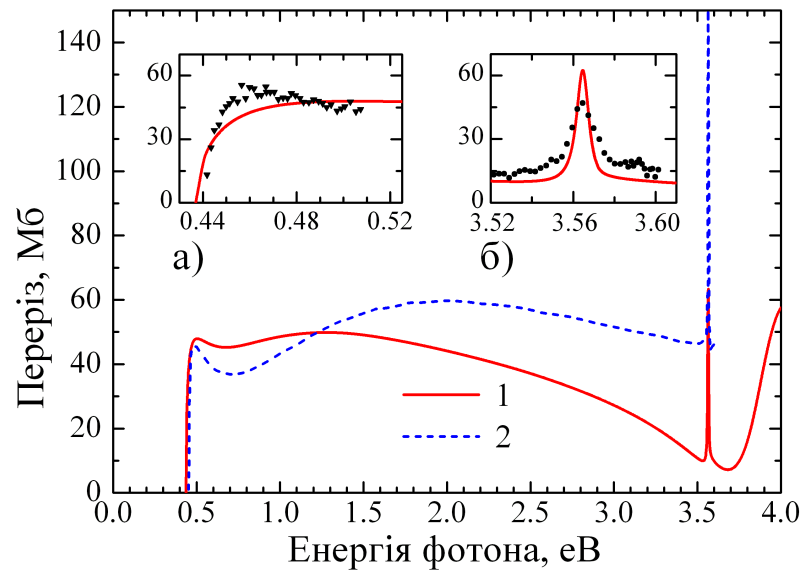


Рис. Б.28: Порівняння перерізів фоторозщеплення  $\text{Al}^- (3s^23p^2) ^3P$  при низьких енергіях з наявними теоретичними і експериментальними даними:

1 — даний БСР-переріз; 2 —  $R$ -матричні власноканальні розрахунки Девіс та ін. [180]; а) відносні вимірювання Calabrese та ін. [176]; б) відносні вимірювання Девіс та ін. [180]. Відносні експериментальні дані були нормовані до теоретичних передбачень БСР шляхом візуальної підгонки.

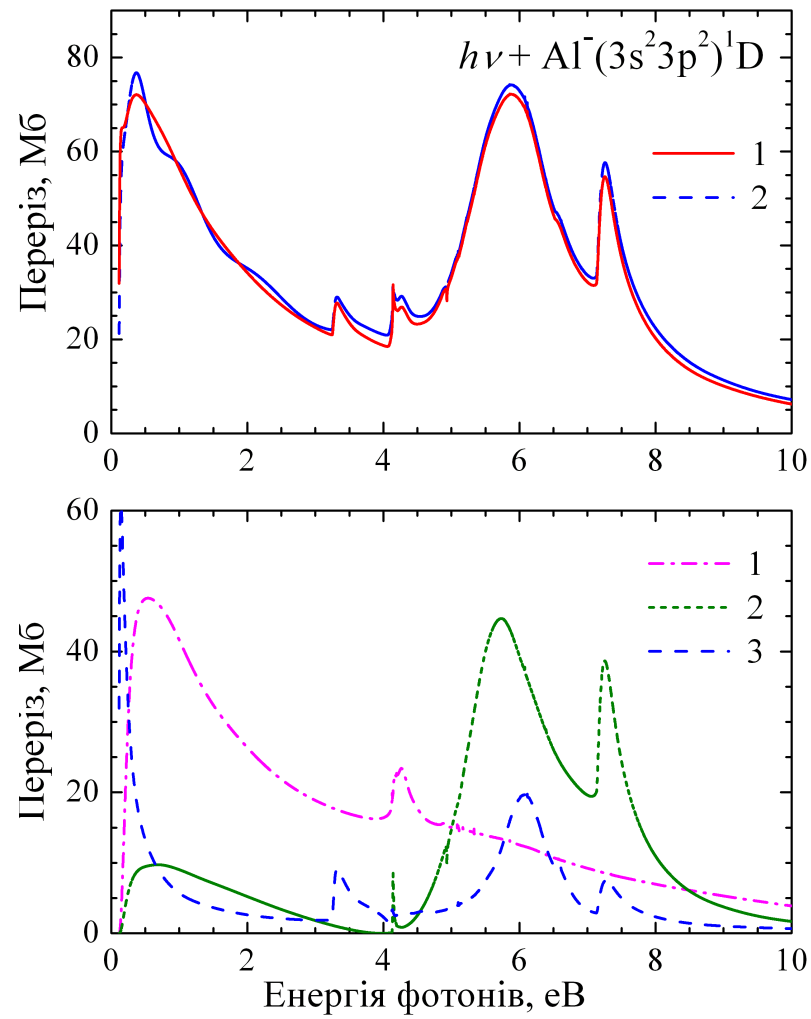


Рис. Б.29: Повний та парціальні перерізи фоторозщеплення  $\text{Al}^- (3s^2 3p^2) {}^1D$ .  
 Верхня панель: 1 — повний переріз у формі довжини електричного дипольного оператора; 2 — повний переріз у формі швидкості;  
 Нижня панель: найбільш важливі парціальні перерізи фоторозщеплення (у формі довжини): 1 —  ${}^1F^0$ ; 2 —  ${}^1D^0$ ; 3 —  ${}^1P^0$ .