

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ  
ДЕРЖАВНИЙ ВИЩИЙ НАВЧАЛЬНИЙ ЗАКЛАД  
„УЖГОРОДСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ”

**Нодь Єлизавета Андріївна**

УДК 539.186

**ВРАХУВАННЯ МІЖЕЛЕКТРОННОЇ КОРЕЛЯЦІЇ  
В РОЗСІЯННІ ЕЛЕКТРОНІВ НА СКЛАДНИХ АТОМАХ  
У РАМКАХ МЕТОДУ  $R$ -МАТРИЦІ З  $B$ -СПЛАЙНАМИ**

01.04.04 – фізична електроніка

**Автореферат**

дисертації на здобуття наукового ступеня  
кандидата фізико-математичних наук

Ужгород – 2016

Дисертацією є рукопис

Робота виконана на кафедрі теоретичної фізики фізичного факультету ДВНЗ „Ужгородський національний університет” Міністерства освіти і науки України

**Науковий керівник** – доктор фізико-математичних наук, професор  
**Лазур Володимир Юрійович,**  
ДВНЗ „Ужгородський національний університет”,  
завідувач кафедри теоретичної фізики

**Офіційні опоненти** – доктор фізико-математичних наук, старший науковий співробітник  
**Боровик Олександр Олександрович,**  
Інститут електронної фізики НАН України, старший науковий співробітник відділу електронних процесів

кандидат фізико-математичних наук, старший науковий співробітник  
**Бобков Валентин Васильович,**  
Харківський національний університет ім. В.Н. Каразіна, завідувач проблемної науково-дослідної лабораторії іонних процесів, доцент кафедри матеріалів реакторобудування

Захист відбудеться „ 20 ” травня 2016 р. о 10.00 годині на засіданні спеціалізованої вченої ради Д 61.051.01 при ДВНЗ „Ужгородський національний університет” Міністерства освіти і науки України за адресою: 88000, м. Ужгород, вул. Волошина, 54, ауд. 181.

З дисертацією можна ознайомитися в науковій бібліотеці ДВНЗ „Ужгородський національний університет” (м. Ужгород, вул. Університетська, 14).

Автореферат розісланий „ 19 ” квітня 2016 р.

Вчений секретар  
спеціалізованої вченої ради Д 61.051.01,  
доктор фіз.-мат. наук



Міца В.М.

## ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

**Актуальність теми.** Розвиток фізики електрон-атомних зіткнень в останні десятиріччя виявляє явну тенденцію до зростання ролі пучкових експериментів, в котрих вимірюються енергетичні та кутові залежності перерізів пружного і непружного розсіяння електронів на атомних системах. Це пов'язано, в першу чергу, з потребами таких швидко прогресуючих галузей фізики і техніки, як створення та експлуатація пристроїв для здійснення керованого термоядерного синтезу з магнітним утриманням плазми, розробка нових типів лазерів на електронних переходах атомів і молекул, розвитком плазмохімічних технологій, з потребами астрофізики та фізики верхніх шарів атмосфери. Необхідні у цих галузях відомості про атомні процеси не обмежуються даними про швидкості реакцій, але й включають більш детальні характеристики, такі як, наприклад, енергетичні та кутові розподіли продуктів реакцій. Більше того, необхідними виявляються дані про такі процеси, які неможливо чи надзвичайно важко здійснити в лабораторних експериментах. Все це висуває підвищені вимоги до надійності та точності теоретичних і модельних розрахунків. Багатостороння перевірка теоретичних уявлень про механізми перебігу електрон-атомних процесів виявилася не тільки актуальною, але й практично важливою задачею. Причому на перший план висувається вже не якісний, а кількісний опис цих процесів. Саме це, поряд із самою логікою розвитку фізики електрон-атомних зіткнень, викликало появу численних кореляційних та поляризаційних досліджень, які дозволяють провести найбільш радикальну та чутливу перевірку теорії.

Фізика непружного розсіяння електронів на складних атомах має ряд важливих особливостей. Крім прямого кулонівського збудження атомів, а також їх прямої іонізації, непружне розсіяння електронів характеризується можливістю утворення в процесі зіткнення так званих автоіонізаційних станів (AIC) системи „мішень + налітаючий електрон”, оже-розпад яких приводить до складної резонансної структури перерізів розсіяння. Ключову роль в утворенні та розпаді AIC відіграє міжелектронна взаємодія, яка зазвичай є причиною більшості непружних процесів зіткнення. Однак, незважаючи на очевидні перспективи використання резонансних явищ для спектроскопічних застосувань, все ще недостатньо вивчена роль міжелектронних кореляцій у процесах пружного розсіяння, збудження та іонізації атомів електронним ударом. Спеціального дослідження вимагають також вельми важливі питання про роль поляризаційних явищ та ефектів зв'язку дискретних станів з континуумом у процесах низькоенергетичного зіткнення електронів з атомами, що мають незаповнені оболонки  $2p$  чи  $3p$ . Таким дослідженням були присвячені наші праці [1-7], які складають основу даної дисертації.

**Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами.** Дослідження, результати яких включені в дисертаційну роботу, виконані згідно з такими науково-дослідними темами ДВНЗ „Ужгородський національний університет”: „Релятивістська версія асимптотичної теорії процесів з перероз-

поділом при повільних іон-іонних та іон-атомних зіткненнях” (2009-2011 рр., шифр ДБ-714, № ДР – 0109U000872), “Релятивістські та квантово-електродинамічні ефекти при взаємодії багатозарядних іонів з важкими атомами та з постійними електричним і магнітним полями” (2012-2014 рр., шифр ДБ-806, № ДР – 0112U001552), „Інтегральні рівняння Додда-Грейдера в теорії одно- та двоелектронних процесів з перерозподілом у високоенергетичних іон-атомних зіткненнях” (2015-2017 рр., шифр ДБ-847, № ДР – 0115U001099).

**Мета і завдання дослідження.** Метою дисертаційної роботи є дослідження властивостей електронної структури складних багатоелектронних атомів та елементарних (пружних і непружних) процесів їх взаємодії з повільними електронами. Вивчення принципів особливостей та основних механізмів таких процесів, дослідження впливу на їх характеристики різних фізичних факторів – багатоелектронних кореляцій, поляризаційних та обмінних ефектів, взаємодії дискретних рівнів з суцільним спектром тощо.

Для досягнення мети передбачено вирішення таких **завдань**:

- з використанням неортогональних орбіталей та  $B$ -сплайнів як базисних функцій розробити розширену версію методу  $R$ -матриці, яка б враховувала можливість віртуального захоплення електрона у незаповнені підоболонки мішені та дозволяла б розраховувати зіткнення повільних електронів з будь-яким складним атомом;
- включення в розклад хвильової функції задачі розсіяння квадратично інтегрованих кореляційних функцій для закритих каналів та скінченного числа псевдостанів, які враховують поляризованості нижніх станів мішені;
- використання  $B$ -сплайнів як базисних функцій для представлення радіальних частин одноелектронних хвильових функцій як зв'язаних орбіталей мішені, так і орбіталей розсіяного електрона;
- врахування міжелектронних кореляцій шляхом включення в базис функцій конфігураційних станів (ФКС) як однократно, так і двократно збуджених конфігурацій мішені;
- реалізація розширеної версії методу  $R$ -матриці з  $B$ -сплайнами (БСР) у вигляді відповідних пакетів прикладних програм для розрахунків атомної структури та основних характеристик процесів низькоенергетичного розсіяння електронів на складних атомах;
- розрахунок методом БСР та багатоконфігураційним методом Хартрі-Фока (БКХФ) сил осциляторів та низькоенергетичної частини спектру багатоелектронних атомів Mg, Sr, Si та F;
- розрахунок методом  $R$ -матриці з  $B$ -сплайнами інтегральних (ІП) та диференціальних (ДП) перерізів розсіяння електронів на атомах Mg, Sr, Si та F;
- дослідження резонансів у розсіянні повільних електронів на атомах стронцію Sr та фтору F, з'ясування механізмів їх формування, вивчення впливу на їх характеристики різних фізичних факторів – деталей структури повної хвильової функції зіткнення, електронних кореляцій, взаємодії АІС з суцільним спектром, у який вони занурені.

**Об'єкт дослідження:** процеси пружного розсіяння, збудження та іонізації при зіткненнях повільних електронів зі складними атомами.

**Предмет дослідження:** перерізи розсіяння, міжканальна взаємодія та ефекти електронних кореляцій у процесах зіткнення повільних електронів з багатоелектронними атомами.

**Методи дослідження.** В основі пропонованого методу розв'язування зв'язаних інтегро-диференціальних рівнянь задачі розсіяння лежить представлення радіальних орбіталей мішені та орбіталей розсіяного електрона у вигляді скінченного набору  $B$ -сплайнів. Такий підхід значно прискорює збіжність методу  $R$ -матриці і не вимагає надмірних комп'ютерних та часових ресурсів. Крім того, включення в  $R$ -матричний розклад хвильової функції зіткнення всіх можливих одно- та двократно збуджених конфігурацій мішені забезпечує найбільш повне врахування ефектів електронної кореляції. *Надійність та точність* методу БСР підтверджується добрим узгодженням результатів обчислень з великою сукупністю експериментальних даних. Для розрахунків атомної структури та характеристик розсіяння в роботі були використані пакети комп'ютерних програм BSR [1\*] та MCHF [2\*].

**Наукова новизна одержаних результатів.** В дисертаційній роботі вперше:

- Реалізована в дисертації БСР-версія методу  $R$ -матриці з  $B$ -сплайнами вигідно відрізняється від відомих на даний час методів теорії розсіяння принаймні двома інноваціями: а) використанням неортогональних орбіталей для представлення радіальних частин одноелектронних хвильових функцій як зв'язаних атомних станів, так і станів розсіяного електрона; б) більш вдалим  $R$ -матричним базисом, заданим повним скінченим набором  $B$ -сплайнів з компактними носіями у внутрішній області.
- Вперше отримано кутові залежності ДП процесів пружного розсіяння та електронного збудження п'яти нижніх станів  $3s3p\ ^{1,3}P^o$ ,  $3s4p\ ^1P^o$ ,  $3s3d\ ^1D$  та  $3s4s\ ^1S$  атома Mg при різних значеннях енергії зіткнення. Виявлено сильну чутливість перерізів до електронних кореляцій та ефектів зв'язку каналів, включаючи зв'язок з іонізаційним континуумом. Показано, що електронні кореляції впливають як на абсолютну величину перерізів, так і на вигляд їх залежності від кута розсіяння.
- Вперше встановлені детальні енергетичні залежності ІП пружного розсіяння та збудження найважливіших переходів із основного  $3s^23p^2\ ^3P$  і метастабільних  $3s^23p^2\ ^1D$  та  $3s^23p^2\ ^1S$  станів атома Si. Показано, що включення в розклад сильного зв'язку спеціальних додаткових псевдостанів, які повністю враховують дипольну поляризованість основного та кількох нижніх збуджених станів мішені, може приводити до суттєвої зміни (на десятки відсотків) ІП збудження високорозташованих станів атома Si.
- Вперше отримано енергетичні залежності ІП збудження 15 спектроскопічних станів атома фтору, розташованих вище рівня  $2p^4(^3P)4s\ ^4P$ . Показано, що поправки на взаємодію дискретних станів з континуумом мішені є зна-

чно суттєвішими для дипольних та обмінних переходів з основного стану, ніж для переходів зі збуджених станів. Встановлено, що перерізи переходів між збудженими станами атома F на два-три порядки величини перевищують перерізи переходів з основного стану.

- Вперше розраховано повний переріз іонізації атома фтору з основного стану  $2s^2 2p^5 {}^2P^o$  електронним ударом. Показано, що домінуючий внесок у повний переріз іонізації дають канали утворення іона  $F^+$  у станах  $2p^4 {}^3P$  та  $2p^4 {}^1D$ , тоді як внесок іонного стану  $2p^4 {}^1S$  не перевищує 5-7 %.
- Виявлено багату резонансну структуру в енергетичних залежностях ІП розсіяння електронів на атомі фтору, яка зумовлена утворенням та розпадом у процесі зіткнення  $e$ -F автовідривних станів (АВС) від'ємного іона фтору  $F^- (2p^4 3lnl')$  з  $n = 3, 4$  та  $l, l' = 0, 1, 2$ . Встановлено, що властивості цих АВС у значній мірі визначаються кореляціями у русі збуджених електронів, поляризацією мішені F та зв'язком дискретних станів з континуумом. Визначено параметри (положення і ширини) 24 резонансів фешбахівського типу та проведено їх спектроскопічну класифікацію.

### **Практичне значення одержаних результатів**

Розраховані в дисертаційній роботі характеристики розсіяння електронів на атомах Mg, Sr, Si та F складають основу необхідних атомних даних для проблем керованого термоядерного синтезу, лазерної спектроскопії, астрофізики, теорії електрон-атомних зіткнень тощо.

Застосування розвинених у роботі теоретичних підходів до конкретних атомних систем дозволило з'ясувати ряд експериментально виявлених закономірностей в енергетичних і кутових залежностях диференціальних та інтегральних перерізів розсіяння електронів на атомах магнію, стронцію та фтору. Результати, представлені в дисертації, багатократно використовувалися іншими авторами як для порівняння з експериментальними даними, так і при теоретичних дослідженнях. Реалізована в дисертації версія БСР-версія методу  $R$ -матриці може бути використана для систематичних розрахунків процесів розсіяння електронів на інших складних атомах.

**Особистий внесок здобувача.** Дисертаційна робота підсумовує наукові дослідження автора, виконані нею як самостійно, так і у творчій співпраці з науковим керівником В.Ю. Лазуром, а також зі співавторами [К. Бартшат і О. Зацарінний (Де-Мойн, США) та В. Гедеон, С. Гедеон (Ужгород, Україна)]. Дисертантка приймала участь у постановці задач, розробці методів дослідження, інтерпретації одержаних результатів, формулюванні основних положень та висновків. Їй належить реалізація сплайн-алгоритмів розв'язування систем зв'язаних диференціальних та інтегро-диференціальних рівнянь для задачі розсіяння та задачі на зв'язані стани. Вона безпосередньо здійснювала основну частину комп'ютерних БКХФ- і БСР-розрахунків властивостей електронної структури атомів Mg, Si та F та процесів розсіяння  $e$ -Mg [1, 4-5],  $e$ -Si [2] та  $e$ -F [3, 7] з їх участю. Їй належить також отримання обширного масиву атомних констант та характеристик розсіяння електронів

на атомах Mg, Si та F, їх обробка, теоретичний аналіз результатів розрахунку, підготовка матеріалів досліджень до друку. Всі результати з дослідження атома Sr [6] отримані автором особисто.

**Апробація результатів дисертації.** Результати досліджень, що викладені у дисертації, доповідалися й обговорювалися на таких конференціях: XXVI ICPEAC – International Conference on Photonic, Electronic and Atomic Collisions (Western Michigan University, Kalamazoo, Michigan, USA, 22–28 July 2009); XII, XIII, XIV, XV, XVI, XVII Міжнародній молодіжній науково-практичній конференції “Людина і космос” (Дніпропетровськ: НЦАОМУ, Україна, 7-9 квітня 2010; 13-15 квітня 2011, 11-13 квітня 2012, 10-12 квітня 2013, 9-11 квітня 2014, 8-10 квітня 2015); Міжнародній конференції молодих учених і аспірантів „ІЕФ-2011”, „ІЕФ-2013”, „ІЕФ-2015” (Ужгород, Україна, 24-27 травня 2011, 20-23 травня 2013, 18-22 травня 2015); Міжнародній конференції студентів і молодих науковців з теоретичної та експериментальної фізики „Еврика-2012” (Львів, Україна, 19-22 квітня 2012); 43-th DAMOP – Annual Meeting of the APS Division of Atomic, Molecular and Optical Physics (Orange County, California, USA, June 4-8 2012).

**Публікації.** За результатами дослідження опубліковано **20** наукових праць, у тому числі **7** у фахових періодичних виданнях (з них **3** статті в іноземних журналах з імпаکت-фактором і **4** статті у наукових фахових виданнях України, які входять до переліку ВАК/МОН України), та **13** тез доповідей на наукових конференціях. Список публікацій наведено в кінці автореферату.

**Структура роботи.** Дисертація складається зі вступу, шести розділів, висновків, списку літератури із 267 найменувань та додатку. Робота викладена на 203 сторінках, з яких 154 сторінки становлять основний текст дисертації, вона містить 11 таблиць та 27 рисунків.

## ОСНОВНИЙ ЗМІСТ РОБОТИ

У **вступі** всебічно обґрунтовано актуальність теми дисертаційної роботи, сформульовано мету і завдання для її досягнення, розкрито предмет та об'єкт дослідження, відзначено наукову новизну та практичне значення одержаних результатів, особистий внесок здобувача, а також подано інформацію щодо апробації одержаних результатів, публікацій, структури й обсягу роботи.

У **першому розділі** дисертації зроблено огляд літератури, присвяченої теоретичним та експериментальним дослідженням процесів зіткнення електронів з атомами та іонами. Існуючі на даний час методи, такі як сильного зв'язку (СЗ) каналів, діагоналізаційний, *R*-матриці та інші, забезпечують адекватний опис процесів розсіювання повільних електронів на простих атомах. Однак, незважаючи на досягнуті успіхи, все ще недостатньо вивчена роль електронних кореляцій у процесах пружного розсіювання, збудження та іонізації атомів електронним ударом. Залишаються відкритими також актуальні питання про вплив поляризаційних явищ та ефектів міжканальної взаємодії на динаміку розсіювання електронів на складних атомах, що мають незаповнені електронні оболонки. Відзначено також, що у міру ускладнення еле-

ктронних оболонок в атомі результати розрахунків характеристик розсіяння все більше відхиляються від експериментальних даних.

З проведеного огляду стану досліджень електрон-атомних зіткнень стає зрозуміло, що прийшов час для розробки нових та вдосконалення існуючих методів аналізу та розрахунку розсіяння електронів на складних атомах, які за своєю точністю задовольняють вимогам сучасного експерименту і більш повно, ніж, скажімо, метод сильного зв'язку чи  $R$ -матриці, враховують деталі структури електронних оболонок атома. В цьому ж розділі обґрунтовано вибір атомних систем Mg, Sr, Si та F як об'єктів дослідження властивостей багатоелектронних атомів та процесів їх взаємодії з повільними електронами.

**В другому розділі** дисертаційної роботи з використанням неортогональних орбіталей та  $B$ -сплайнів як базисних функцій проведено узагальнення методів СЗ каналів та  $R$ -матриці на випадок взаємодії повільних електронів з будь-яким складним атомом. У підрозділі 2.1 задача низькоенергетичного розсіяння електрона на  $N$ -електронному атомі зводиться до розв'язування рівняння Шредінгера

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

з відповідними граничними умовами. Тут  $E$  і  $H_{N+1}$  – повна енергія та гамільтоніан  $(N+1)$ -електронної системи «атом + налітаючий електрон»,  $Z$  – заряд ядра. Гамільтоніан  $H_{N+1}$  (1) діагональний по відношенню до повного орбітального моменту  $L$ , повного спіну  $S$ , їх проекцій  $M_L, M_S$  на задану вісь та парності  $\pi$ . Функція  $\Psi_{\alpha}^{\Gamma}(X, x_{N+1})$ , яку зазвичай називають хвильовою функцією зіткнення, представляє собою повністю антисиметризовану хвильову функцію  $(N+1)$ -електронної системи,  $X \equiv (x_1, \dots, x_N)$ ,  $\Gamma \equiv (\gamma L S M_L M_S \pi)$ , а  $x_i \equiv (\vec{r}_i, \sigma_i)$  позначає сукупність просторової  $\vec{r}_i$  та спінової  $\sigma_i$  координат  $i$ -го електрона. Індекс  $\alpha$  характеризує початкові умови і зазвичай позначає вхідний канал розсіяння. Без урахування іонізації розклад повної хвильової функції зіткнення  $\Psi_{\alpha}^{\Gamma}(X, x_{N+1})$  можна записати у вигляді

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

Хвильова функція каналу  $\bar{\Phi}_i^{\Gamma}$  утворюється шляхом векторного зв'язку хвильової функції  $N$ -електронної мішені  $\Phi_i(X) \equiv \Phi_i(x_1, \dots, x_N)$  з кутовою  $Y_{l_T m_T}(\hat{r}_{N+1})$  та спіною  $\chi_{m_S}^{1/2}(\sigma_{N+1})$  частинами хвильової функції  $(N+1)$ -го електрона. У формулі (2)  $A$  – оператор антисиметризації,  $\chi_j^{\Gamma}(X, x_{N+1})$  – набір квадратично інтегровних антисиметричних кореляційних функцій, які разом з  $\Phi_i(X)$  вважаються відомими. Задача полягає в знаходженні радіальних функцій розсіяного електрона  $F_{i\alpha}^{\Gamma}(r_{N+1})$  та коефіцієнтів розкладу  $c_j$ . У випад-

ку складних атомів хвильові функції  $\Phi_i(X)$  будуються у вигляді багатоконфігураційного розкладу

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

де  $\varphi_j$  – заданий набір антисиметризованих одноконфігураційних функцій. Коефіцієнти  $c_{ij}$  у розкладі (3) можна отримати при діагоналізації  $N$ -електронного гамільтоніана мішені:

$$\langle \Phi_i | H_N | \Phi_j \rangle = E_i(Z, N) \delta_{ij}. \quad (4)$$

Зазвичай у першу суму в правій частині розкладу (2) включають лише ті стани мішені, які при заданій енергії  $E = E_i + k_i^2/2$  відповідають так званим *відкритим* каналам. У першу суму можна також включити деякі псевдостани, які наближено представляють стани суцільного спектру. Вибір псевдостанів здійснюється на підставі точного врахування поляризованості основного та кількох збуджених станів мішені. Крім використання псевдостанів, внесок *закритих* каналів можна частково врахувати за допомогою скінченного числа кореляційних функцій  $\chi_j^\Gamma(X, x_{N+1})$ , включених у другу суму розкладу (2).

Базисні функції  $\varphi_j$  та  $\chi_j$  у розкладах (2), (3) будуються із одноелектронних атомних орбіталей  $\varphi_{\alpha_i}$ , які у наближенні центрального поля мають вигляд

$$\varphi_{\alpha_i}(x) = 1/r \cdot P_{n_i l_i}(r) Y_{l_i m_i}(\hat{r}) \chi(m_S | \sigma), \quad x \equiv (\vec{r}, \sigma), \quad (5)$$

де  $\alpha_i$  – скорочене позначення набору квантових чисел  $n_i, l_i, m_i$  та  $m_S$ . У стандартному підході Бьорка [3\*] для зручності обчислень радіальні хвильові функції розсіяного електрона  $F_{i\alpha}^\Gamma$  вибираються ортогональними усім атомним орбіталям мішені  $P_{n_j l_j}$  тієї ж симетрії, тобто

$$\int_0^\infty P_{n_j l_j}(r) F_{i\alpha}^\Gamma(r) dr = 0 \quad \text{при } l_j = l_i. \quad (6)$$

Очевидно, що ця умова є чисто математичною, а не фізичною вимогою і не впливає із загальних квантовомеханічних принципів, оскільки радіальні орбіталі  $P_{n_j l_j}$  та  $F_{i\alpha}^\Gamma$  є власними функціями різних гамільтоніанів. Умова (6) фактично означає, що налітаючий електрон не може бути віртуально захоплений в одну із незаповнених підоболонки, врахованих у розкладі (3) станів мішені. Зазначимо також, що в рамках стандартного підходу [3\*] можливість такого захоплення забезпечується шляхом включення у другу суму розкладу (2) спеціальних додаткових кореляційних функцій  $\chi_j^\Gamma$ , що приводить до появи нефізичної псевдорезонансної структури у перерізах розсіяння та до значного збільшення числа інтегро-диференціальних рівнянь, які підлягають розв'язанню. У наших працях [1-3] показано, що цих утруднень можна позбутися, якщо відмовитися від вимоги ортогональності (6) функцій  $F_{i\alpha}^\Gamma$  до

орбіталей мішені  $P_{n_j l_j}$ , що дозволяє природним чином урахувати можливість віртуального захоплення електрона у незаповнені підоболонки мішені.

Підставляючи розклад (2) у рівняння (1), домножуючи його почергово на функції  $\bar{\Phi}_i^\Gamma$  і  $\chi_j^\Gamma$ , одержимо після інтегрування за всіма змінними, крім  $r_{N+1}$ , систему інтегро-диференціальних рівнянь для функцій  $F_i \equiv F_{i\alpha}^\Gamma$ :

$$\left( \frac{d^2}{dr^2} - \frac{l_i(l_i+1)}{r^2} + \frac{2Z}{r} + k_i^2 \right) F_i(r) = 2 \sum_j (V_{ij} + W_{ij} + X_{ij}) F_j(r), \quad (7)$$

де  $k_i^2 = 2[E - E_i(Z, N)]$ , а  $V_{ij}$ ,  $W_{ij}$ ,  $X_{ij}$  – локальний прямий, нелокальний обмінний та нелокальний кореляційний потенціали відповідно. Для розсіяння електронів на складних атомах явний вигляд цих потенціалів генерується автоматично програмою BSR [1\*] у залежності від типу вхідних даних.

У підрозділі 2.2 до розв'язання системи рівнянь СЗ (7) застосовується розвинений у наших працях [1-3] варіант методу  $R$ -матриці, який ґрунтується на використанні неортогональних орбіталей та  $B$ -сплайнів як базисних функцій. Даний метод дозволяє описати в рамках єдиного формалізму різні типи реакцій, такі, як пружне розсіяння, збудження та іонізація атома електронним ударом. Головна ідея  $R$ -матричного методу полягає в розбитті конфігураційного простору системи „атом + електрон” на дві області: внутрішню  $r < a$  і зовнішню  $r > a$ . Радіус внутрішньої області  $r = a$  вибирається таким чином, щоб обмінні та кореляційні ефекти були достатньо малими при  $r \geq a$ . Повну хвильову функцію  $(N+1)$ -електронної системи у внутрішній області можна подати при заданій енергії  $E$  у вигляді розкладу

$$\Psi_E^\Gamma = \sum_k A_{Ek}^\Gamma \Psi_k^\Gamma \quad (8)$$

за незалежним від енергії дискретним базисним набором  $\Psi_k^\Gamma$ :

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

де  $\bar{\Phi}_i^\Gamma$  та  $\chi_i^\Gamma$  визначаються так само, як і в формулі (2). Функції  $F_{i\alpha}^\Gamma$ , що описують радіальний рух розсіяного електрона в  $i$ -му каналі, ми представили у вигляді лінійної комбінації скінченного числа базисних функцій  $u_j$ , які задовольняють граничним умовам:  $u_j = 0$ ,  $(a/u_j) du_j/dr|_{r=a} = b$ , де  $b$  – довільна дійсна стала. Для таких базисних функцій гамільтоніан (1) у внутрішній області не є ермітовим внаслідок ненульових (при  $r = a$ ) поверхневих членів, що виникають із оператора кінетичної енергії. Однак ці члени можна вилучити за допомогою оператора Блоха  $L_{N+1}$  [3\*]. Формальний розв'язок рівняння Шредінгера (1) набуває при цьому вигляду

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{2} \sum_{kj} \left| \Psi_k^\Gamma \right\rangle \left\langle \Psi_k^\Gamma \right| \bar{\Phi}_j^\Gamma \rangle (E_k - E)^{-1} (d/dr_{N+1} - b_j/r_{N+1}) \left\langle \bar{\Phi}_j^\Gamma \right| \Psi \rangle. \quad (10)$$

Проекціюючи це рівняння на функції каналів  $\bar{\Phi}_i^\Gamma$  і виконуючи обчислення на межі внутрішньої області, дістанемо

$$F_i^\Gamma(a) = \sum_{j=1}^n R_{ij}^\Gamma(E) \left( a dF_j^\Gamma / dr_{N+1} - b_j F_j^\Gamma \right)_{r_{N+1}=a}, \quad (11)$$

де ми ввели  $R$ -матрицю з елементами

$$R_{ij}^\Gamma(E) = \frac{1}{2a} \sum_k w_{ik}^\Gamma(a) w_{jk}^\Gamma(a) / (E_k^\Gamma - E), \quad (12)$$

приведені радіальні функції  $F_i^\Gamma$  і поверхневі амплітуди  $w_{ik}^\Gamma$ . Діагоналізуючи матрицю  $\langle \Psi_k^\Gamma | H_{N+1} + L_{N+1} | \Psi_{k'}^\Gamma \rangle_{\text{int}}$  для кожного набору квантових чисел  $\Gamma$ , можна визначити енергії  $E_k^\Gamma$  і коефіцієнти  $c_{ijk}^\Gamma$ ,  $d_{ik}^\Gamma$  у розкладі (9), тобто хвильові функції  $\Psi_k^\Gamma$  для відповідних базисних станів. Однак це треба зробити лише один раз, щоб визначити  $R$ -матрицю у всьому діапазоні енергій зіткнення.

Включення у вихідний розклад (9) додаткових кореляційних функцій  $\chi_i^\Gamma$  дозволяє частково врахувати ефекти, пов'язані з умовами ортогональності (6) функцій  $F_{i\alpha}^\Gamma$  та обмеженням першої суми в (9) скінченним числом доданків. Однак це веде у більшості випадків до появи псевдорезонансної структури в перерізах розсіяння та до надмірно великого числа додаткових інтегро-диференціальних рівнянь, які необхідно залишити в (9) для реалістичних розрахунків складних атомів та процесів їх взаємодії з електронами.

Вільною від цих утруднень є реалізована в наших працях [1-3] БСР-версія  $R$ -матричного методу, яка ґрунтується на використанні неортогональних орбіталей для представлення одноелектронних хвильових функцій як дискретного, так і суцільного спектрів. Ще одним ключовим аспектом пропонуваної БСР-версії методу  $R$ -матриці є вибір  $B$ -сплайнів як базисних функцій  $u_j(r)$  в  $R$ -матричному зображенні (9) для внутрішньої області. Такий вибір  $u_j(r)$  забезпечує швидку збіжність  $R$ -матричного розкладу без введення в діагональні  $R$ -матричні елементи (12) т. з. поправок Баттла. Базисні сплайни володіють властивостями, немовби спеціально створеними для  $R$ -матричної теорії. Вони формують повний базис на скінченному  $R$ -матричному інтервалі  $[0, a]$ , зручні при знаходженні як зв'язаних орбіталей мішені, так і орбіталей розсіяного електрона. Зручність забезпечується насамперед тим, що  $B$ -сплайни – фінітні функції, які відмінні від нуля лише на своїх інтервалах-носіях.

У пункті 2.2.2 основну увагу зосереджено на розв'язанні рівнянь СЗ (9) у зовнішній області  $r > a$  та на зшиванні розв'язків на межі  $r = a$ , що дозволяє визначити  $K$ - та  $S$ -матриці й фазові зсуви. Оскільки у зовнішній області усі обмінні та кореляційні потенціали практично дорівнюють нулю, для радіальних функцій  $F_i(r)$  у цій області отримуємо доволі просту систему зв'язаних інтегро-диференціальних рівнянь, які з достатньою точністю розв'язуються чисельно за допомогою сучасних комп'ютерів з одержанням однозначних результатів. Отримані таким чином розв'язки зшиваються при  $r = a$  з розв'язками у внутрішній області  $r < a$ . Після цього легко визначити  $K$ -матрицю із асимптотичного співвідношення

$$F_{i\alpha} \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} k_i^{-1/2} (\sin \theta_i \delta_{i\alpha} + \cos \theta_i K_{i\alpha}), \quad (13)$$

де другий індекс  $\alpha$  вказує номер каналу падаючої хвилі. Матрицю розсіяння  $S_{i\alpha}$  і матрицю переходу  $T_{i\alpha}$  з розмірностями  $n \times n$  можна визначити за допомогою відомих матричних співвідношень  $\mathbf{S} = \mathbf{1} + \mathbf{T} = (\mathbf{1} + i\mathbf{K})/(\mathbf{1} - i\mathbf{K})$ . Ці матриці в подальшому використовуються для розрахунку перерізів розсіяння та всіх інших спостережуваних величин.

В підрозділі 2.3 ґрунтовно описані найбільш важливі з обчислювальної точки зору властивості  $B$ -сплайнів зі скінченними носіями. Детально розглянуто сплайн-алгоритми розв'язування диференціальних та інтегро-диференціальних рівнянь задачі розсіяння і задачі на зв'язані стани. Продемонстровано, що ці алгоритми мають дві принципові переваги над алгоритмами, що ґрунтуються на скінченно-різницеvій апроксимації. По-перше, для числових розрахунків особливо важливі локальні властивості сплайн-алгоритмів, які забезпечуються фінітними властивостями базисних сплайнів з компактними носіями. По-друге, завдяки властивостям фінітності та повноти скінченної системи  $B$ -сплайнів інтегро-диференціальні рівняння після їх дискретизації у внутрішній  $R$ -матричній області  $r < a$  зводяться до системи матрично-векторних алгебраїчних рівнянь скінченного рангу з розрідженими, а саме стрічковими матрицями, що суттєво спрощує чисельний аналіз таких систем.

У підрозділі 2.4 описано загальний підхід до проблеми урахування кореляції електронів – метод БКХФ, в основі якого лежить представлення радіальних орбіталей  $P_{nl}(r)$  у вигляді скінченного розкладу за повним базисним набором  $B$ -сплайнів  $\{B_i\}_{i=1}^{n_s}$ . Багатоконфігураційний характер розкладу (3) повної хвильової функції  $N$ -електронної системи дає змогу врахувати значну частину кореляційних ефектів. Квантовомеханічний розрахунок у рамках БКХФ-методу складається з двох етапів: побудови багатоелектронного ФКС-базису та розв'язування багатоконфігураційних рівнянь Хартрі-Фока, з яких визначаються радіальні хвильові функції  $P_{nl}(r)$ , що входять до складу слетерівських детермінантів. Успіх будь-якого практичного розрахунку атомних характеристик сильно залежить від вибору радіальних орбіталей  $P_{nl}(r)$  та конфігурацій, включених у розклад хвильової функції мішені за ФКС-базисом. На відміну від стандартного підходу [3\*], у пропонованій версії БКХФ-методу в якості одноелектронних функцій використовуються залежні від терму неортогональні зв'язані орбіталі, які оптимізуються в незалежних розрахунках для індивідуальних термів. Використання таких орбіталей має вирішальне значення для детального опису складної резонансної структури в перерізах розсіяння електронів на багатоелектронних атомах.

У третьому розділі на основі розширеної БСР-версії методу  $R$ -матриці здійснено розрахунки диференціальних та інтегральних перерізів розсіяння повільних електронів на атомі Mg з акуратним урахуванням ефектів електронних кореляцій. Розрахунки охоплюють пружне розсіяння і збудження п'яти нижніх станів  $3s3p \ ^{1,3}P^o$ ,  $3s3d \ ^1D$ ,  $3s4s \ ^1S$  та  $3s4p \ ^1P^o$ . Результати розра-

хунків виявилися вельми чутливими до ефектів електронних кореляцій як у  $N$ -електронній мішені Mg, так і в  $(N+1)$ -електронній системі розсіяння  $e$ -Mg. Представлені результати розрахунків кутових залежностей ДП та ІП перерізів пружного і непружного розсіяння  $e$ -Mg при енергіях налітаючого електрона 10, 15, 20, 40, 60, 80 та 100 еВ. Використання залежних від терма неортогональних наборів орбіталей  $P_{n,l_j}$  та  $F_{i\alpha}^\Gamma$  дозволило здійснити більш точний опис як станів розсіяння, так і станів атома-мішені Mg. Врахування валентної і кор-валентної кореляцій здійснювалося шляхом включення в багатоконфігураційні розклади хвильових функцій мішені електронних конфігурацій зі збудженим кором. Результати розрахунку ДП та ІП для пружного розсіяння (рис. 1) знаходяться в доброму узгодженні з наявними експериментальними даними [4\*] при 10, 15, 20, 40, 60, 80 та 100 еВ.

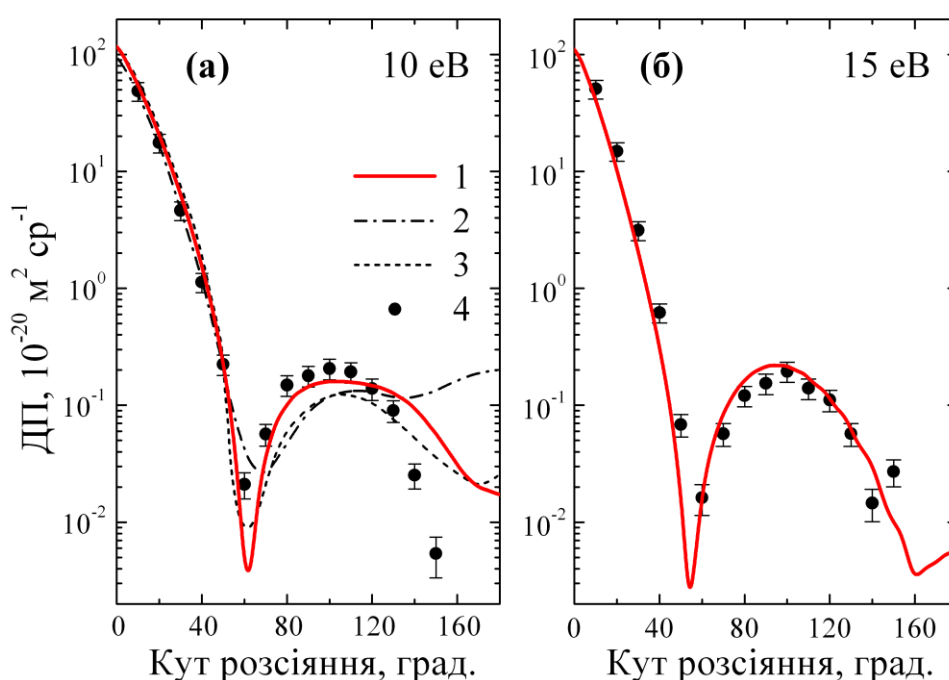


Рис. 1. Диференціальні перерізи пружного розсіяння  $e$ -Mg при енергіях зіткнення 10 і 15 еВ: 1 – даний БСР37-розрахунок [1]; 2 – C35 [4\*]; 3 – метод оптично зв'язаних каналів [5\*]; 4 – експеримент [6\*].

У випадку електронного збудження оптично дозволеного переходу  $3s^2\ ^1S^o \rightarrow 3s3p\ ^1P^o$  розраховані нами кутові залежності ДП добре узгоджуються з результатами недавніх вимірювань при енергіях 10, 15, 20 та 40 еВ. Отримані ДП характеризуються значною кутовою асиметрією з переважним розсіянням в область малих кутів. Для збудження спін-забороненого переходу  $3s^2\ ^1S^o \rightarrow 3s3p\ ^3P^o$  і експериментальні, і теоретичні дані є дещо суперечливими. Це частково може бути пов'язано з тим, що для цього переходу перерізи є відносно малими і тому вони вельми чутливі як до незначних уточнень хвильових функцій мішені, так і до ефектів зв'язку каналів, включаючи зв'язок з іонізаційним континуумом. Добре узгодження результатів БСР37-розрахунків перерізів електронного збудження ще трьох станів  $3s4s\ ^1S$ ,

$3s3d\ ^1D$  та  $3s4p\ ^1P^o$  атома Mg з експериментальними даними дає додаткове представлення про точність наближення БСР.

**Четвертий розділ** дисертації присвячено дослідженню процесів розсіювання повільних електронів на атомах стронцію. Методом БКХФ із залежними від терму неортогональними орбіталями  $P_{nl}(r)$  здійснено чисельні розрахунки енергій збудження для 31 нижніх станів атома Sr. Алгоритм розв'язання багатоконфігураційних рівнянь Хартрі-Фока ґрунтується на представленні радіальних функцій у внутрішній області  $P_{nl}(r)$   $r \leq 80 a_0$  (де  $a_0$  – борівський радіус) у вигляді розкладу за повною скінченною системою базисних сплайнів  $B_i$  з експоненціальною сіткою вузлів. Добре узгодження експериментальних значень енергій збудження з розрахованими нами вказує на значну роль електронних кореляцій, які враховувалися шляхом включення в БКХФ-розклад базисних ФКС-функцій, що відповідають одно- та двократно збудженим електронним конфігураціям. У підрозділі 4.3 з допомогою розширеної БСР-версії методу  $R$ -матриці проведено розрахунки енергетичних і кутових залежностей ДП та ІП перерізів пружного і непружного розсіювання електронів на атомі Sr в області енергій до 10 еВ. Детальне порівняння спостережуваних енергетичних залежностей ІП розсіювання  $e$ -Sr із передбаченнями моделі БСР31 підтвердило висновок Юаня (див. [5]) про необхідність калібрування згаданих експериментальних перерізів шляхом їх зсуву (вверх) по енергії на 0.98 еВ. Результати розрахунку енергетичних залежностей пружного і повного ІП розсіювання  $e$ -Sr указують на існування двох максимумів при енергіях 1.04 еВ та 1.86 еВ. Перший з них відповідає потужному резонансу форми  $5s^24d[{}^2D]$  у  ${}^2D^e$ -хвилі, а другий – неповністю проявлено-му (через відкриття нових каналів розсіювання) резонансу  $5s5p[{}^1D]\ ^2D^e$ .

**В п'ятому розділі** наведено результати дослідження процесів пружного розсіювання та збудження нейтрального атома кремнію електронним ударом у діапазоні енергій зіткнення від порогу і до 100 еВ. Відомості про перерізи таких процесів на даний час практично відсутні. Викладений у другому розділі дисертації формалізм методу БКХФ та БСР дає змогу визначити характеристики (сили осциляторів, ймовірності переходів, енергії рівнів) багатоелектронної системи Si, а також характеристики елементарних процесів взаємодії атома Si з повільними електронами. Для акуратного представлення хвильових функцій атома-мішені Si використовувався метод БКХФ з неортогональними орбіталями, які оптимізуються в незалежних розрахунках для кожного окремого терма. Результати розрахунків енергій збудження для 34 нижніх станів атома Si добре узгоджуються з експериментальними даними.

Розклад сильного зв'язку для хвильової функції зіткнення (9) включав 34 зв'язані стани атома кремнію, що походять від базисних конфігурацій  $[\text{Ne}]\ 3s^23p^2$ ,  $3s3p^3$ ,  $3s^23p4s$ ,  $3s^23p5s$ ,  $3s^23p4p$ ,  $3s^23p5p$ ,  $3s^23p3d$  та  $3s^23p4d$ , а також сім псевдостанів для повного врахування дипольної поляризованості основного та трьох нижчих збуджених станів атома кремнію. Вибір таких базисів дозволив доволі детально і точно описати найважливіші переходи із

основного  $3s^2 3p^2 \ ^3P$  і двох метастабільних  $3s^2 3p^2 \ ^1D$  та  $3s^2 3p^2 \ ^1S$  станів атома Si. Як ілюстрацію на рис. 2 наведено результати розрахунків енергетичних залежностей ІІ деяких найважливіших переходів з основного стану  $3s^2 3p^2 \ ^3P$  атома Si із використанням двох різних наближень БСР41 та БСР34. Криві для різних моделей розсіювання дуже близькі одна до одної й істотні відмінності виникають лише для деяких переходів у високорозташовані стани атома Si. Ці відмінності вказують на слабку збіжність розкладу сильного зв'язку, оскільки для переходів у високорозташовані стани суттєвим стає ефект збудження континууму мішені, тобто іонізація. Показано також, що врахування поляризаційних та обмінно-кореляційних ефектів може приводити до суттєвої зміни (аж до фактора 2) обчислених перерізів збудження атома Si електронним ударом.

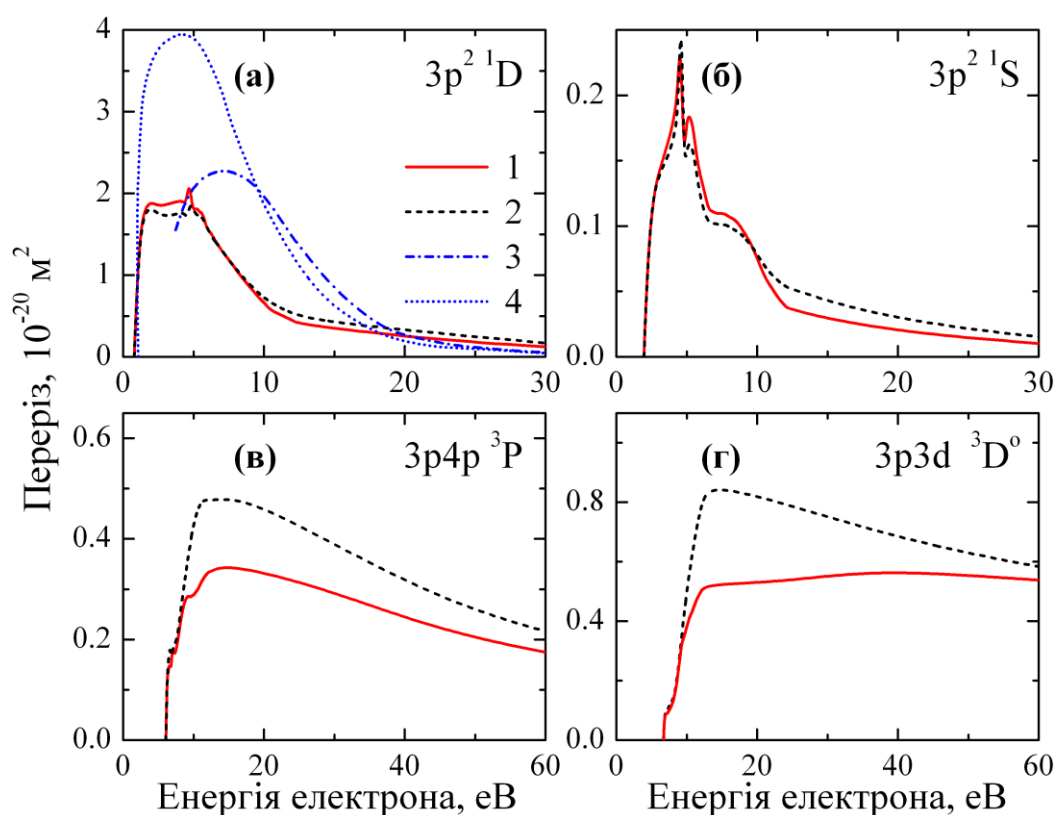


Рис. 2. Інтегральні перерізи деяких переходів з основного стану  $3s^2 3p^2 \ ^3P$  атома Si: 1, 2 – розрахунки в наближеннях БСР41 та БСР34 з урахуванням і без урахування поляризаційних псевдостанів, відповідно [3]; 3, 4 – розрахунки інших авторів методом спотворених хвиль для переходу  $^3P \rightarrow ^1D$ .

**Шостий розділ** присвячено дослідженню процесів розсіювання електронів на атомі фтору в діапазоні енергій зіткнення від порогу до 100 еВ. Для точного визначення хвильових функцій мішені використовувався БКХФ-метод з  $B$ -сплайнами та залежними від терму неортогональними орбіталями. Чутливість результатів до зв'язку дискретних станів з континуумом перевірялася шляхом порівняння даних, отриманих у різних наближеннях, що відрізняються числом і вибором базисних функцій у  $R$ -матричному

розкладі (9). Так, максимальна розмірність базису у наближенні БСР39 складає 39 станів, а у обширному розрахунку БСР690 – 39 фізичних станів та понад 650 континуальних псевдостанів.

$R$ -матричні розрахунки розсіяння  $e$ -F проводилися за допомогою розпаралеленої версії BSR-коду [1\*], в якій для представлення орбіталей неперервного спектру  $F_{i\alpha}^\Gamma$  у внутрішній області  $r \leq 30 a_0$  використовувався базис з 58  $B$ -сплайнів порядку 8. Інша характерна особливість БСР-розрахунків – використання неортогональних орбіталей як для побудови хвильових функцій мішені (3), так і для представлення функцій зіткнення (9).

Розраховані енергетичні залежності перерізів пружного розсіяння та збудження вирізняються багатою резонансною структурою. У дуже вузьких ділянках енергій налітаючого електрона величини перерізів мають різкі скачки, зумовлені утворенням та розпадом автоіонізуючих станів (АВС) від'ємного іона фтору  $F^- (2p^4 3lnl')$  з  $n = 3, 4$  та  $l, l' = 0, 1, 2$ . Встановлено, що властивості цих АВС у значній мірі визначаються кореляціями у русі збуджених електронів, поляризацією мішені F та зв'язком дискретних станів з континуумом. Визначено параметри (положення і ширини) 24 резонансів фешбахівського типу у розсіянні  $e$ -F та проведено їх спектроскопічну класифікацію.

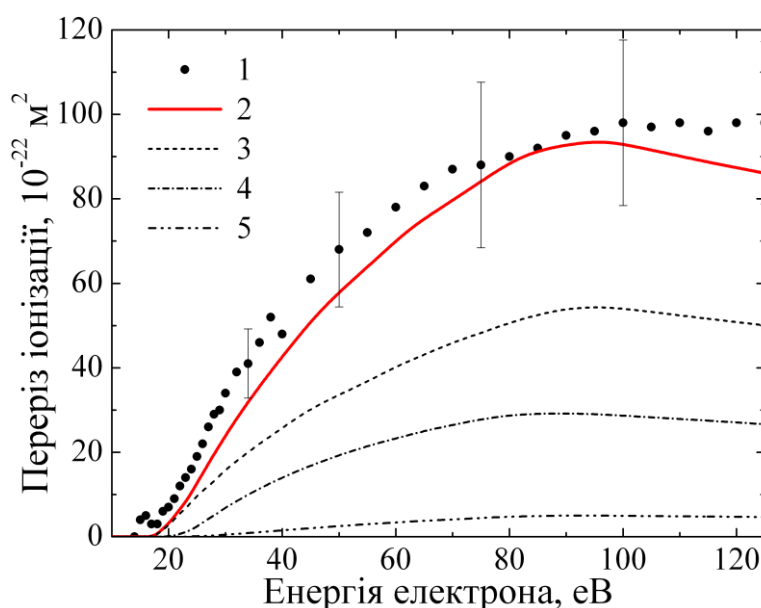


Рис. 3. Переріз іонізації електронами атома F в основному стані  $(2s^2 2p^5) ^2P^o$ : 1 – експеримент [7\*]; 2 – даний БСР690-розрахунок; 3, 4, 5 – БСР690, парціальні перерізи утворення станів  $2p^4 ^3P$ ,  $^1D$  та  $^1S$  іона  $F^+$ .

Основним результатом підрозділу 6.3 дисертації є отримання обширного масиву даних з характеристик розсіяння електронів на атомі фтору, в тому числі енергетичних залежностей ІІ пружного розсіяння, передачі імпульсу, збудження та іонізації з основного стану. Перерізи збудження отримані для всіх можливих переходів між 26 нижчими станами F. Значні відмінності між результатами моделей БСР39 та БСР690 (аж до фактора 2-3 у деяких діапа-

зонах енергій) вказують на повільну збіжність розкладу сильного зв'язку в задачі розсіювання  $e-F$ . Виявлено сильний вплив ефектів зв'язку дискретних станів з континуумом мішені на перерізи збудження при проміжних енергіях зіткнення. Наявність такого зв'язку вказує на те, що незаповнена  $2p$ -підоболонка атома F суттєво впливає на всі величини, що характеризують процеси непружного розсіювання електронів атомами фтору. У даному дослідженні (підрозділ 6.3) вперше розраховані перерізи іонізації атома F електронним ударом. Результати БСР690-розрахунку (рис. 3) добре узгоджуються з наявним експериментом [7\*].

У Додатку А наведено результати наших розрахунків енергетичних спектрів, сил осциляторів та параметрів резонансів у розсіянні електронів на атомах Mg, Sr, Si та F, проведено їх порівняння з наявними експериментальними даними та теоретичними передбаченнями інших авторів.

## ОСНОВНІ РЕЗУЛЬТАТИ ТА ВИСНОВКИ

1. З використанням залежних від терму неортогональних орбіталей та  $B$ -сплайнів як базисних функцій розроблено розширену БСР-версію методу  $R$ -матриці, яка дозволяє найбільш повно враховувати обмінні та кореляційні ефекти в розрахунках властивостей електронної структури складних багатоелектронних атомів та процесів їх взаємодії з повільними електронами.

2. За допомогою методів БСР та БКХФ із залежними від терму неортогональними орбіталями проведено систематичні розрахунки енергій рівнів та сил осциляторів великої сукупності одно- та двоелектронних переходів у спектрах атомів Mg, Si та F. Порівняння результатів розрахунків з експериментальними даними показує, що вказані методи дозволяють отримати правильну кількісну картину розподілу сил осциляторів для складних багатоелектронних атомів.

3. Проведено розрахунки диференціальних та інтегральних перерізів низькоенергетичного розсіювання електронів на атомі Mg, які охоплюють пружне розсіювання та збудження п'яти нижніх станів  $3s3p\ ^1\ ^3P^o$ ,  $3s3d\ ^1D$ ,  $3s4s\ ^1S$  та  $3s4p\ ^1P^o$ . Виявлено сильну чутливість перерізів до ефектів електронної кореляції як у  $N$ -електронній мішені Mg, так і в  $(N + 1)$ -електронній системі розсіювання  $e-Mg$ . Показано, що урахування валентних і кор-валентних електронних кореляцій шляхом змішування конфігурації основного стану атома Mg з електронними конфігураціями зі збудженим кором значно поліпшує узгодження обчислених ДП та ІП з експериментом.

4. Комбінованим методом БКХФ-БСР31 розраховано перерізи розсіювання  $e-Sr$  в діапазоні енергій зіткнення до 10 еВ. Виявлено потужний резонанс форми  $5s^24d\ ^2D$  в околі 1.04 еВ, який повністю визначає форму перерізів пружного розсіювання в області максимуму  $0.50 \div 1.86$  еВ.

5. Вперше теоретично досліджено процеси пружного розсіювання та збудження нейтрального атома кремнію електронним ударом у діапазоні енергій зіткнення від порогу реакції до 100 еВ. Обчислено енергетичні залежності

ті ІІ пружного розсіювання та збудження найважливіших переходів із основного  $3s^2 3p^2 \ ^3P$  і двох метастабільних  $3s^2 3p^2 \ ^1D$  та  $3s^2 3p^2 \ ^1S$  станів Si. Виявлено, що електронне збудження всіх досліджених переходів у припороговій області енергій має резонансний характер, пов'язаний з утворенням та розпадом квазістаціонарних станів від'ємного іона Si<sup>-</sup>. Показано також, що урахування поляризаційних та обмінно-кореляційних ефектів може приводити до суттєвої зміни обчислених ІІ збудження Si.

6. Проведено систематичне дослідження процесів розсіювання електронів на атомі фтору в діапазоні енергій зіткнення від порогу реакції до 100 еВ. У рамках двох моделей БСР39 та БСР690 методу *R*-матриці отримано великий масив даних з пружного розсіювання, передачі імпульсу, збудження та іонізації атома F з основного стану. Виявлено сильний вплив ефектів зв'язку дискретних станів з континуумом на перерізи збудження та іонізації атома F при проміжних енергіях зіткнення. Продемонстрована ефективність використання неортогональних орбіталей неперервного спектру для опису віртуального захоплення налітаючого електрона у квазістаціонарні (автовідривні) стани від'ємного іона F<sup>-</sup>.

### СПИСОК ЦИТОВАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

- 1\*. Zatsarinny O. BSR: *B*-spline atomic *R*-matrix codes / O. Zatsarinny // Comput. Phys. Commun. – 2006. – Vol. 174, No. 4. – P. 273–356.
- 2\*. Froese Fischer C. The MCHF atomic-structure package / C. Froese Fischer // Comput. Phys. Commun. – 1991. – Vol. 64, No. 3. – P. 369–398.
- 3\*. Burke P.G. The *R*-Matrix Theory of Atomic Processes / P.G. Burke, W.D. Robb // Adv. At. Mol. Opt. Phys. – 1976. – V. 11. – P. 143–214.
- 4\*. Mitroy J. Differential cross sections and Stokes parameters for electron-magnesium scattering / J. Mitroy, I. E. McCarthy // J. Phys. B. – 1989. – Vol. 22, No. 4. – P. 641–654.
- 5\*. McCarthy I. E. Coupled-channels optical calculation of electron-magnesium scattering / I. E. McCarthy, K. Ratnavelu, Y. Zhou // J. Phys. B. – 1989. – Vol. 22, No. 16. – P. 2597–2603.
- 6\*. Elastic electron scattering by a magnesium atom / B. Predojević, V. Pejčev, D. M. Filipović *et al.* // J. Phys. B. – 2007. – Vol. 40, No. 10. – P. 1853–1861.
- 7\*. Hayes T. R. Absolute electron-impact-ionization cross-section measurements of the halogen atoms / T. R. Hayes, R. C. Wetzel, R. S. Freund // Phys. Rev. A. – 1987. – Vol. 35, Iss. 2. – P. 578–584.

### СПИСОК ОПУБЛІКОВАНИХ ПРАЦЬ ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ

#### *Статті в іноземних наукових журналах з імпаکت-фактором*

1. Cross sections for electron scattering from magnesium / O. Zatsarinny, K. Bartschat, S. Gedeon, V. Gedeon, V. Lazur, **E. Nagy** // Phys. Rev. A. – 2009. – Vol. 79, Iss. 5. – P. 052709 (10).
2. Electron scattering from silicon / V. Gedeon, S. Gedeon, V. Lazur, **E. Nagy**, O. Zatsarinny, K. Bartschat // Phys. Rev. A. – 2012. – Vol. 85, Iss. 2. – P. 022711 (7).

3. *B-spline R-matrix-with-pseudostates calculations for electron-impact excitation and ionization of fluorine* / V. Gedeon, S. Gedeon, V. Lazur, **E. Nagy**, O. Zatsarinny, K. Bartschat // *Phys. Rev. A*. – 2014. – Vol. 89, Iss. 5. – P. 052713 (9).

**Статті у наукових фахових виданнях України**

4. Диференціальні перерізи розсіювання електронів на атомі магнію / В. Гедеон, С. Гедеон, О. Зацарінний, В. Лазур, **Є. Нодь** // *Наук. вісник УжНУ. Серія "Фізика"*. – 2008. – Вип. 23. – С. 23–35.
5. **Нодь Є. А.** Перерізи розсіювання електронів на атомі Sr / **Є. А. Нодь** // *Наук. вісник УжНУ. Серія "Фізика"*. – 2009. – Вип. 25. – С. 148–153.
6. **Нодь Є. А.** Збудження електронним ударом  $3s3p\ ^3P^o$ -стану магнію з основного стану / **Є. А. Нодь**, В. Ф. Гедеон, В. Ю. Лазур // *Наук. вісник УжНУ. Серія "Фізика"*. – 2011. – Вип. 29. – С. 195–200.
7. **Нодь Є. А.** Роль кореляцій у розрахунках розсіювання електронів на атомі фтору / **Є. А. Нодь**, В. Ю. Лазур // *Наук. вісник УжНУ. Серія "Фізика"*. – 2015. – Вип. 37. – С. 136–145.

**Тези доповідей на міжнародних наукових конференціях**

1. Cross sections for electron scattering from magnesium / O. Zatsarinny, K. Bartschat, S. Gedeon, V. Gedeon, V. Lazur, **E. Nagy** // XXVI International Conference on the Physics of Electronic and Atomic Collision (ICPEAC). Kalamazoo, Michigan, USA, 22-28 July, 2009. – *J. Phys.: Conf. Ser.* – 2009. – Vol. 194, Iss. 4. – P. 042029 (1).
2. **Нодь Е. А.** Перерізи розсіювання електронів на атомі Sr / **Е. А. Нодь**, В. Ф. Гедеон, В. Ю. Лазур // 3б. тез. XII Міжнародна молодіжна науково-практична конференція „Людина і космос”. Дніпропетровськ: НЦАОМУ, Україна, 7-9 квітня, 2010 р. – Дніпропетровськ. – 2010. – С. 58.
3. **Нодь Є. А.** Розрахунки розсіювання електронів на атомах лужноземельних елементів / **Є. А. Нодь**, В. Ю. Лазур, В. Ф. Гедеон // 3б. тез. XIII Міжнародна молодіжна науково-практична конференція „Людина і космос”. Дніпропетровськ: НЦАОМУ, Україна, 13-15 квітня, 2011 р. – Дніпропетровськ. – 2011. – С. 82.
4. **Нодь Є. А.** Розрахунки розсіювання електронів на атомах Mg та Sr / **Є. А. Нодь**, В. Ф. Гедеон, В. Ю. Лазур // 3б. тез. Міжнародна конференція молодих учених і аспірантів „ІЕФ-2011”. Ужгород, Україна, 24-27 травня, 2011 р. – Ужгород. – 2011. – С. 190.
5. **Нодь Є. А.** Збудження  $3s3p\ ^3P^o$ -стану атома магнію електронним ударом / **Є. А. Нодь**, В. Ф. Гедеон, В. Ю. Лазур // 3б. тез. XIV Міжнародна молодіжна науково-практична конференція „Людина і космос”. Дніпропетровськ: НЦАОМУ, Україна, 11-13 квітня, 2012 р. – Дніпропетровськ. – 2012. – С. 56.
6. **Нодь Є.** Розсіювання електронів на атомі Si / **Є. Нодь**, С. Гедеон, В. Лазур // 3б. тез. Міжнародна конференція студентів і молодих науковців з теоретичної та експериментальної фізики „ЕВРИКА-2012”. Львів, Україна, 19-22 квітня, 2012 р. – Львів. – 2012. – С. А19.

7. Electron scattering from silicon / O. Zatsarinny, K. Bartschat, V. Gedeon, S. Gedeon, V. Lazur, **E. Nagy** // 43-rd Annual Meeting of the APS Division of Atomic, Molecular and Optical Physics „DAMOP12”. Orange County, California, 4-8 June, 2012. – Bul. Amer. Phys. Soc. – 2012. – Vol. 57, No. 5. – P. D1.00050.
8. **Нодь Є. А.** Врахування кореляцій у розрахунках розсіювання електронів на атомі кремнію / **Є. А. Нодь**, В. Ф. Гедеон, В. Ю. Лазур // Зб. тез. XV Міжнародна молодіжна науково-практична конференція „Людина і космос”. Дніпропетровськ: НЦАОМУ, Україна, 10-12 квітня, 2013 р. – Дніпропетровськ. – 2013. – С. 62.
9. **Нодь Є. А.** Розрахунки розсіювання електронів на атомі Si / **Є. А. Нодь**, В. Ф. Гедеон, В. Ю. Лазур // Зб. тез. Міжнародна конференція молодих учених і аспірантів „ІЕФ-2013”. Ужгород, Україна, 20-23 травня, 2013 р. – Ужгород. – 2013. – С. 211.
10. Врахування міжелектронної кореляції у розрахунках характеристик атома фтору / **Є. А. Нодь**, В. Ю. Лазур, С. В. Гедеон, В. Ф. Гедеон // Зб. тез. XVI Міжнародна молодіжна науково-практична конференція „Людина і космос”. Дніпропетровськ: НЦАОМУ, Україна, 10-12 квітня, 2014 р. – Дніпропетровськ. – 2014. – С. 61.
11. Комплексні розрахунки розсіювання електронів на атомі фтору / С. В. Гедеон, В. Ю. Лазур, **Є. А. Нодь**, В. Ф. Гедеон // Зб. тез. XVI Міжнародна молодіжна науково-практична конференція „Людина і космос”. Дніпропетровськ: НЦАОМУ, Україна, 10-12 квітня, 2014 р. – Дніпропетровськ. – 2014. – С. 48.
12. **Нодь Є. А.** Резонансна структура перерізів розсіювання електронів на атомі фтору / **Є. А. Нодь**, В. Ю. Лазур, В. Ф. Гедеон // Зб. тез. XVII Міжнародна молодіжна науково-практична конференція „Людина і космос”. Дніпропетровськ: НЦАОМУ, Україна, 8-10 квітня, 2015 р. – Дніпропетровськ. – 2015. – С. 45.
13. **Нодь Є. А.** Розрахунок перерізів розсіювання електронів на атомі фтору / **Є. А. Нодь**, В. Ф. Гедеон, В. Ю. Лазур // Зб. тез. Міжнародна конференція молодих учених і аспірантів „ІЕФ-2015”. Ужгород, Україна, 18-22 травня, 2015 р. – Ужгород. – 2015. – С. 70.

### АНОТАЦІЯ

**Нодь Є. А.** Врахування міжелектронної кореляції в розсіянні електронів на складних атомах у рамках методу *R*-матриці з *B*-сплайнами. – Рукопис.

Дисертація на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.04 – фізична електроніка. – ДВНЗ „Ужгородський національний університет” Міністерства освіти і науки України, Ужгород, 2016.

З використанням залежних від терму неортогональних орбіталей та *B*-сплайнів як базисних функцій запропоновано і реалізовано розширену вер-

сію БСР методу  $R$ -матриці, яка забезпечує ефективне урахування електронної кореляції. Проведено систематичні розрахунки енергетичних і кутових залежностей інтегральних (ІП) та диференціальних (ДП) перерізів пружного розсіяння, збудження та іонізації атомів магнію, стронцію, кремнію та фтору електронним ударом. Результати розрахунку демонструють добре узгодження з великою сукупністю експериментальних даних у широкому діапазоні енергій зіткнення. Досліджено роль ефектів зв'язку дискретних станів з континуумом в процесах збудження та іонізації атомів електронним ударом і показана необхідність їх урахування в розрахунках характеристик розсіяння  $e$ -Si та  $e$ -F. Виявлено сильну чутливість перерізів розсіяння до ефектів електронної кореляції як у  $N$ -електронній атома-мішені, так і в  $(N + 1)$ -електронній системі зіткнення. Показано, що урахування валентних і корвалентних електронних кореляцій шляхом змішування конфігурації основного стану атома-мішені з додатковими конфігураціями зі збудженим кором значно поліпшує узгодження обчислених ДП та ІП з експериментом. Виявлено 24 резонанси фешбахівського типу в розсіянні електронів на атомі F, визначено параметри (положення і ширини) цих резонансів та проведено їх спектроскопічну класифікацію.

Ключові слова: електрон, атом, кореляційна взаємодія, збудження, іонізація, метод  $R$ -матриці з  $B$ -сплайнами, багатоелектронні базиси.

### АННОТАЦИЯ

**Нодь Е. А. Учет межэлектронной корреляции в рассеянии электронов на сложных атомах в рамках метода  $R$ -матрицы с  $B$ -сплайнами. – Рукопись.**

Диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.04 – физическая электроника. – ГВУЗ „Ужгородский национальный университет” Министерства образования и науки Украины, Ужгород, 2016.

С использованием зависящих от терма неортогональных орбиталей и  $B$ -сплайнов в качестве базисных функций предложено и реализовано расширенную версию БСР метода  $R$ -матрицы, которая обеспечивает эффективный учет электронной корреляции. Проведены систематические расчеты энергетических и угловых зависимостей интегральных (ИС) и дифференциальных (ДС) сечений упругого рассеяния, возбуждения и ионизации атомов магния, стронция, кремния и фтора электронным ударом. Результаты расчета демонстрируют хорошее согласие с большой совокупностью экспериментальных данных в широком диапазоне энергий столкновения. Исследована роль эффектов связи дискретных состояний с континуумом в процессах возбуждения и ионизации атомов электронным ударом и показана необходимость их учета в расчетах характеристик рассеяния  $e$ -Si и  $e$ -F. Виявлено сильную чувствительность сечений рассеяния к эффектам электронной корреляции как в  $N$ -электронном атоме-мишени, так и в  $(N + 1)$ -электронной системе столкновения. Показано, что учет валентных и корвалентных электронных

корреляций путем смешивания конфигурации основного состояния атома-мишени с дополнительными конфигурациями с возбужденным кором значительно улучшает согласие вычисленных ИС и ДС с экспериментом. Выявлено 24 резонанса фешбаховского типа в рассеянии электронов на атоме F, определены параметры (положение и ширины) этих резонансов и проведена их спектроскопическая классификация.

Ключевые слова: электрон, атом, корреляционное взаимодействие, возбуждение, ионизация, метод *R*-матрицы с *B*-сплайнами, многоэлектронные базисы.

## SUMMARY

**Nagy E. A. Inclusion of electron correlation in the electron scattering on complex atoms within the *B*-spline *R*-matrix method framework.** – Manuscript.

Thesis in pursuit to acquire the scientific degree of Candidate of Physical and Mathematical Sciences, speciality 01.04.04 – Physical Electronics. – State Higher Educational Establishment „Uzhhorod National University”, Ministry of Education and Science of Ukraine, Uzhhorod, 2016.

With the use of term-dependent non-orthogonal orbitals and *B*-splines as basis functions, an extended version of the BSR *R*-matrix method, which provides an effective treatment of electron correlation, has been proposed and implemented. Systematic calculations of the energy and angular dependences of the integral (ICS) and differential (DCS) cross sections have been carried out for the elastic scattering, excitation and ionization of atoms of magnesium, strontium, silicon and fluorine by electron impact. The results show good agreement with a large amount of experimental data in the wide range of collision energies. The effect of coupling between the discrete states and the continuum have been scrutinized for the excitation and ionization of atoms by electron impact and the necessity of taking them into account in calculations of the scattering characteristics in the *e*–Si and *e*–F problems has been demonstrated. Strong sensitivity of the scattering cross sections to the electron correlation both in the *N*-electron atomic target and in the (*N* + 1)-electron collision system has been revealed. It is shown that inclusion of the valence and core-valence electron correlation through the mixing of the ground state configuration of the target atom with additional configurations with the excited core significantly improves the agreement between the calculated ICS and DCS and the experimental data. Overall, 24 Feshbach-type resonances have been revealed in the scattering of electrons by F atom, with their parameters (position and width) have been determined and their spectroscopic classification has been established.

Keywords: electron, atom, correlation interaction, excitation, ionization, method *R*-matrix with *B*-splines, multielectron bases.

Формат 60x84/16. Папір офс. Гарнітура Times New Roman.  
Друк офс. Ум. друк. арк. 1,16. Обл.-вид. арк. 0,89.  
Тираж 100 шт. Замовлення № 70.

Видавництво «Бреза».  
м. Ужгород, вул. Університетська, 21/220. Тел./факс: (0312) 64-37-22  
Свідоцтво суб'єкта видавничої справи ДК № 4815 від 15.06.2011р.  
Друк: ФОП Сабов А.М., тел.: 050-43-22-437

