

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

На правах рукопису

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

Дисертація на здобуття наукового ступеня
кандидата фізико-математичних наук

Науковий керівник

Лазур Володимир Юрійович,
доктор фізико-математичних наук,
професор

Ужгород – 2016

ЗМІСТ

ПЕРЕЛІК УМОВНИХ ПОЗНАЧЕНЬ	5
ВСТУП	6
РОЗДІЛ 1. ОГЛЯД ЛІТЕРАТУРИ ЗА ТЕМОЮ І ВИБІР НАПРЯМ- КІВ ДОСЛІДЖЕНЬ	13
1.1 Вступ до розділу 1	14
1.2 Загальна характеристика елементарних процесів в електрон- атомних зіткненнях	16
1.3 Розрахунки атомної структури	20
1.4 Методи розрахунку розсіювання електронів низьких енергій на атомах	25
1.5 Вибір атомних систем для дослідження електрон-атомних зітк- нень	32
1.6 Висновки до розділу 1	34
РОЗДІЛ 2. ЗАГАЛЬНА МЕТОДИКА Й ОСНОВНІ МЕТОДИ ДОС- ЛІДЖЕНЬ	35
2.1 Метод сильного зв'язку	35
2.1.1 Загальна характеристика методу.	35
2.1.2 Розрахунки розсіювання й атомної структури.	36
2.2 Метод R -матриці	40
2.2.1 Внутрішня область.	40
2.2.2 Зовнішня область.	44
2.2.3 Розрахунки зв'язаних станів.	47
2.2.4 Застосування псевдостанів.	49
2.2.5 Іонізація електронним ударом.	50
2.3 Сплайн-алгоритми розв'язування диференціальних та інтегро- диференціальних рівнянь	52

2.4	Багатоконфігураційний метод Хартрі-Фока з B -сплайнами. Врахування електронних кореляцій	57
2.4.1	Метод БКХФ з B -сплайнами.	57
2.4.2	Методика підбору ФКС-базисів.	65
2.5	Висновки до розділу 2	69
РОЗДІЛ 3. РОЗРАХУНКИ ДИФЕРЕНЦІАЛЬНИХ ТА ІНТЕГРАЛЬНИХ ПЕРЕРІЗІВ РОЗСІЯННЯ ЕЛЕКТРОНІВ НА АТОМІ МАГНІЮ		70
3.1	Стан дослідження перерізів розсіяння e —Mg	70
3.2	Методика розрахунку процесів розсіяння e —Mg	72
3.2.1	Розрахунки структури атома Mg.	72
3.2.2	Розрахунки зіткнення e —Mg.	75
3.3	Диференціальні та інтегральні перерізи розсіяння e —Mg	76
3.3.1	Пружне розсіяння.	76
3.3.2	Збудження стану $(3s3p) \ ^1P^o$	80
3.3.3	Збудження стану $(3s3p) \ ^3P^o$. Вплив кореляцій.	81
3.3.4	Збудження стану $(3s4p) \ ^1P^o$	88
3.3.5	Збудження стану $(3s3d) \ ^1D$	89
3.3.6	Збудження стану $(3s4s) \ ^1S$	91
3.3.7	Інтегровані по куту перерізи.	95
3.4	Обговорення ДП та ІП, отриманих у наближенні БСР37	98
3.5	Висновки до розділу 3	100
РОЗДІЛ 4. РОЗСІЯННЯ ЕЛЕКТРОНІВ НА АТОМІ СТРОНЦІЮ .		101
4.1	Стан досліджень процесів розсіяння e —Sr	101
4.2	Розрахунки структури атома Sr та розсіяння e —Sr	103
4.3	Результати розрахунків розсіяння e —Sr	104
4.4	Висновки до розділу 4	110
РОЗДІЛ 5. РОЗСІЯННЯ ЕЛЕКТРОНІВ НА АТОМІ КРЕМНІЮ .		111
5.1	Стан досліджень процесів розсіяння e —Si	111

5.2	Методика розрахунку розсіяння електронів на Si I	112
5.2.1	Розрахунки структури.	112
5.2.2	Поляризовані псевдостани.	115
5.2.3	Розрахунки розсіяння.	116
5.3	Результати розрахунку розсіяння e —Si	118
5.4	Обговорення результатів розрахунку атома Si. Вплив кореляції на величину атомних характеристик	123
5.5	Висновки до розділу 5	127
РОЗДІЛ 6. РОЗСІЯННЯ ЕЛЕКТРОНІВ НА АТОМІ ФТОРУ		128
6.1	Вступні зауваження	128
6.2	Методика розрахунку процесів розсіяння e —F	130
6.2.1	Розрахунки структури.	130
6.2.2	Розрахунки зіткнення.	133
6.3	Результати з розсіяння e —F	134
6.4	Роль кореляцій у розрахунках розсіяння e —F	145
6.5	Висновки до розділу 6	152
ВИСНОВКИ		153
СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ		155
Додаток А.		184

ПЕРЕЛІК УМОВНИХ ПОЗНАЧЕНЬ

ABC	– автовідривний стан
AIS	– автоіонізаційний стан (autoionizing state – AIS)
БК	– багатоконфігураційний (multiconfiguration – MC)
БКХФ	– багатоконфігураційний Хартрі-Фока метод (multiconfiguration Hartree-Fock method – MCHF)
БСР	– R -матриця з B -сплайнами (B -spline R -matrix – BSR)
ДБСР	– Діраківська R -матриця з B -сплайнами (Dirac B -spline R -matrix – DBSR)
ДП	– диференціальний переріз (differential cross section – DCS)
ДФ	– Дірака-Фока (Dirac-Fock – DF)
ЗК	– заморожений кор (frozen-cores – FCS)
ЗСЗ	– збіжний сильний зв'язок (convergent close-coupling – CCC)
ІП	– інтегральний/інтегрований переріз (integral/integrated cross section – ICS)
НЕН	– напівемпіричне наближення (semiempirical approach – SEA)
НІСТ	– Національний інститут стандартів і технологій, США (National Institute of Standards and Technology – NIST)
НК	– накладання (взаємодія) конфігурацій (configuration interaction – CI)
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)
СХ	– спотворені хвилі (distorted wave – DW)
ФКС	– функція конфігураційного стану (configuration State Function – CSF)
ХФ	– Хартрі-Фока (Hartree-Fock – HF)

ВСТУП

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 (АІС) системи „мішень + налітаючий електрон”, оже-розпад яких приво-

дить до складної резонансної структури перерізів розсіяння. Ключову роль в утворенні та розпаді АІС 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 ролі міжелектронної взаємодії у процесах електрон-атомного зіткнення були присвячені наші праці [1–7], які складають основу даної дисертації. Результати вказаних досліджень також доповідалися й обговорювалися на ряді міжнародних конференцій [8–20].

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 перерозподілом 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 багатеелектронних 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 розсіювання квадратично інтегровних 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 розсіювання 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 розсіювання 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 розсіювання, збудження та іонізації при зіткненнях повільних електронів зі складними атомами.

Предмет дослідження: перерізи розсіювання, 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 розсіювання 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 розсіювання в роботі були використані пакети комп’ютерних програм BSR [21] та MCHF [22].

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 розсіювання 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 значно 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 $2s^22p^5\ ^2P^o$ 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 $F^-(2p^43lnl')$ 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 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 [1,4,6],

$e\text{--Si}$ [2] та $e\text{--F}$ [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 [5] 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 імпакт-фактором і **4** статті у наукових фахових виданнях України, які входять до переліку ВАК/МОН України), та **13** тез доповідей на наукових конференціях.

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.

РОЗДІЛ 1

ОГЛЯД ЛІТЕРАТУРИ ЗА ТЕМОЮ І ВИБІР НАПРЯМКІВ ДОСЛІДЖЕНЬ

Теоретичне та експериментальне дослідження процесів низькоенергетичного зіткнення електронів з атомними системами, а також елементарних процесів з перерозподілом, що супроводжують такі зіткнення, представляє значний інтерес як для розвинення теорії електрон-атомного розсіювання, так і для прикладних застосувань. Це зумовлюється, насамперед, відносною простотою об'єктів дослідження, що в поєднанні з даними прецизійних вимірювань дозволяє використовувати їх для перевірки різноманітних методів квантової фізики, зокрема фізики будови атома та фізики електрон-атомних зіткнень. По-друге, для опису складових таких систем появляється можливість залучити концепції орієнтації і структурування в фізиці атома, пов'язані з формою і динамікою збудження атомних рівнів. Можна стверджувати, що у теорії атомних зіткнень елементарні процеси електрон-атомної взаємодії відіграють роль фундаментальних еталонних задач. По-третє, навіть при розсіюванні електронів на найпростіших атомах та іонах проявляються аналогії ефектів, характерних для більш складних атомних систем, що дозволяє використовувати їх для перевірки різних наближених методів у теорії важких багатоелектронних атомів. Нарешті не варто випускати з розгляду практичну значимість результатів теоретичних розрахунків. Мова йде про інтегральні і диференціальні перерізи елементарних процесів пружного розсіювання, збудження та іонізації, відповідні сили зіткнення та швидкості реакції, значення яких необхідні для всього комплексу питань, пов'язаних з моделюванням астрофізичної, атмосферної та лабораторної плазми.

1.1 Вступ до розділу 1

Стрімке зростання інтересу до дослідження процесів, які відбуваються при зіткненні електронів з атомами та іонами зумовлено, насамперед, тим, що вказані процеси забезпечують ідеальний засіб дослідження динаміки систем багатьох частинок на фундаментальному рівні [23, 24]. З іншого боку, детальне розуміння перебігу цих процесів потрібне у багатьох областях фізики плазми [25–27], включаючи керований термоядерний синтез [28], у фізиці атмосфери [29, 30] з надактуальною проблемою глобального потепління [31], при аналізі астрофізичних спостережень [32–34], при взаємодії надінтенсивних лазерів з атомами та іонами [35, 36], у процесах взаємодії електронів з поверхнею [37], при розділенні ізотопів [38, 39], а також в електричних розрядах у газах [40, 41], конструюванні безртутних світильників [42] і т.і.

В останні роки як на експерименті, так і в теорії електрон-атомних процесів отримано ряд важливих досягнень. Вони включають використання поляризованих пучків і мішеней [43, 44], розвинення техніки збігу [45], абсолютне вимірювання перерізів [46], отримання електронних пучків з дуже високою роздільною здатністю [47], застосування нових джерел світла [48, 49], розвиток лазерних променів фемтосекундної і аттосекундної тривалості [50]. Вказані експериментальні успіхи були підкріплені теоретичними, у першу чергу завдяки більшій доступності запаралелених комп'ютерів високої продуктивності [51] та розробці загальних комп'ютерних програм [52], що використовують надані обчислювальні сервіси. В результаті суттєво зросли можливості для визначення точних характеристик низькоенергетичних зіткнень електронів зі складними атомами та іонами [53], були розроблені методи отримання дуже точних перерізів збудження та іонізації при проміжних енергіях [54], а також були розвинуті непертурбативні підходи до вивчення процесів електронного та фотонного розсіяння на багатоелектронних мішенях [55].

Незважаючи на те, що ряд елементарних процесів електрон-атомної взає-

модії добре описуються в рамках різноманітних варіантів наближення сильного зв'язку [56], зокрема в такому його різновиді як метод R -матриці з B -сплайнами та неортогональними орбіталями [21], значна кількість станів атомних систем та низькоенергетичних процесів зіткнення навіть для найпростіших систем поки що недоступна точним і послідовним *ab initio* розрахункам. Основною проблемою залишається питання про роль кореляційної взаємодії між електронами у атомних системах, підданих зіткненню. Її дослідження, окрім того, що є принциповою задачею для фізики атома та фізики електрон-атомних зіткнень, також може пролити світло на фундаментальні проблеми нерелятивістської квантової теорії багаточастинкових систем.

Одним із важливих проявів кореляції є те, що її врахування (неврахування) на кожному кроці розрахунку атомної структури чи процесів зіткнення приводить до суттєвих поправок у числові значення атомних характеристик і, врешті-решт, до якісних змін у перебігу електрон-атомних взаємодій [57]. Отримання ж точних і систематичних числових даних з електрон-атомного розсіяння незмінно є суттєвою проблемою для практичних застосувань [24], зокрема для побудови різних плазмових пристроїв і установок на основі нейтральних і слабоіонізованих атомних систем [58]. Чи не найбільш ефективним способом зменшення неврахованої кореляції в електрон-атомній взаємодії є побудова багатоелектронних базисів з можливостями додаткової оптимізації отриманих базисних розкладів. Цим вимогам у значній мірі відповідає метод R -матриці з B -сплайнами та неортогональними орбіталями [55]. Тому подальше розвинення методу БСР, дослідження його *ab initio* застосування до розрахунку процесів зіткнень низькоенергетичних електронів з рядом атомів із різною структурою електронних оболонок (Mg, Sr, Si та F) та з якомога повним урахуванням міжелектронної кореляції є, без сумніву, важливою і актуальною задачею.

1.2 Загальна характеристика елементарних процесів в електрон-атомних зіткненнях

Теорії зіткнень електронів з атомними частинками присвячена значна кількість монографічної та журнальної літератури [23, 24, 59–72]. У не меншій кількості наукових джерел розкривається питання структурної будови атомних систем [52, 53, 57, 73–85]. При розгляді процесів зіткнення, в яких налітаюча частинка глибоко проникає у внутрішні області оболонок атома-мішені, точний розрахунок електронної структури останнього набуває вирішального значення. Утворення проміжних компаундних систем „електрон + атомна мішень”, що виникають у процесі зіткнення, тільки ускладнює початкову задачу розсіювання (див., напр., [86–88]). У цьому контексті важливим видається детальний аналіз елементарних процесів міжчастинкової взаємодії, що супроводжують акт зіткнення електрона з атомом, з урахуванням кореляції як між електронами в оболонках мішені, так і між зв’язаними та вільним електронами [89–94]. Практично це означає, що предметом розгляду повинна стати вся сукупність елементарних процесів взаємодії електронів з атомами при їх зіткненнях у низькотемпературній плазмі.

Ці процеси призводять до зміни конфігурації електронної оболонки мішені, а також траєкторії руху та енергії налітаючої частинки чи й до поглинення останньої мішенню. Кулонівський потенціал, в принципі, підтримує безліч доступних шляхів зіткнення, які перерахувати практично неможливо. Але всі ці процеси, навіть екзотичні, можна спостерігати в експериментах. Достатньо докладний аналіз процесів, що супроводжують акт зіткнення електронів з атомними системами, наведено в оглядах [26, 95]. Залежно від кінцевої ситуації, що спостерігається на експерименті після електрон-атомного зіткнення і після можливих релаксацій, елементарні процеси взаємодії електронів з атомами та іонами можна розділити на кілька груп. Отже, каналом розсіювання електронів на атомі чи іоні може стати 1) пружне відбиття, 2) рекомбінація

(для іона), 3) збудження мішені, 4) іонізація мішені з вибиванням зв'язаного електрона у неперервний спектр, 5) прилипання налітаючого електрона до атома-мішені з утворенням від'ємного іона. Кожний з перерахованих процесів може здійснюватися прямо, тобто шляхом безпосереднього переходу системи з початкового у кінцевий стан, або резонансним чином – шляхом утворення проміжної компаунд-системи „падаючий електрон + атом-мішень”, з різними ступенями можливого збудження квазістаціонарних станів новоутвореної системи та різними каналами релаксації [26].

Для прикладу, поряд з прямим пружним розсіянням може відбуватися непряме пружне розсіяння, що протікає через резонансне утворення і подальший розпад проміжного багаторазово збудженого стану, так званого резонансу (див. вище). Резонансне пружне розсіяння не може бути відокремлене від прямого процесу. Як наслідок, між амплітудами двох каналів пружного розсіяння може виникнути інтерференція. Резонанси відповідають за характерні особливості в енергетичній залежності електрон-атомних перерізів розсіяння.

Залежно від механізму релаксації, діелектронне або триелектронне захоплення може бути першим кроком також і в непружних процесах розсіяння електронів. Непружне розсіяння падаючого електрона змінює стан атомної мішені. В першу чергу, воно включає в себе втрату частини початкової кінетичної енергії вихідним електроном, внаслідок чого атомна система переходить у збуджений стан, запускаючи процес прямого $e + A \rightarrow [A]^* + e$ чи резонансного $e + A \rightarrow [A^-]** \rightarrow [A]^* + e$ збудження. Тут, як і в пружному розсіянні, перший крок останнього процесу може бути діелектронним або триелектронним захопленням, проте другий крок – може збудити автоіонізаційний стан атома. Резонансне збудження не завжди можна відрізнити від прямого процесу. Як наслідок, слід очікувати інтерференції між амплітудами двох каналів збудження. В результаті атом може перейти у стан з енергією збудження, яка перевищує поріг іонізації, необхідний для вибивання зовнішнього електрона. Такий стан буде автоіонізаційним і, отже, дуже збуджений

атом може розпадатися з випусканням електрона замість фотона. Кінцевим результатом цього процесу є іонізація початкового атома-мішені.

При енергії падаючої частинки, що перевищує іонізаційний поріг, поряд з пружним розсіянням та збудженням включається також канал іонізації: $e + A \rightarrow [A^+] + 2e$ (пряма іонізація) чи $e + A \rightarrow [A^-]** \rightarrow [A^+]* + 2e$ (резонансна іонізація, що включає різні варіанти автоіонізації). У більш загальному сенсі, непружні зіткнення електронів з атомними системами включають у себе також формування стабільної рекомбінованої атомної мішені. При цьому не виключається варіант, коли вільний на початку падаючий електрон у кінцевому підсумку стає зв'язаним, а нейтральна мішень перетворюється у від'ємний іон [96,97]. Як видно з вищесказаного, перерахувати всі класи проміжних суб-процесів, що можуть реалізуватися в результаті акту зіткнення „електрон + атомна мішень”, практично неможливо. Зокрема, не виключається зіткнення електрона з атомом, що уже знаходиться у збудженому стані. Тоді відкритим каналом зіткнення стає т.з. „надпружне” розсіяння: перехід збудженого атома в основний стан з вилученням надлишкової енергії атомної системи відлітаючим електроном [98–100].

Як зазначалося вище, загальна теорія зіткнення атомних частинок відображена в багатьох фундаментальних монографіях (див., напр., Голдбергер і Ватсон [23], Лендшел та ін. [24], Мотт і Мессі [61], Вайнштейн та ін. [62], Друкарєв [66], Лендшел і Салак [67], Бьорк і Беррінгтон [68], Лендшел та ін. [101] і т.д.). В останні роки до них додалися обширні огляди Бьорка [71], Чіна та ін [87], Мірошніченка [88], в яких викладено багато новітніх результатів з цікавої для нас області досліджень. Властивості спектрів нейтральних атомів і спектроскопія газорозрядної плазми розглянуті в праці Смирнова [25], а результати досліджень непружного розсіяння низькоенергетичних електронів на нейтральних системах та малозарядних іонах – у працях Гарджіоні і Гроссвендта [102] та Мюллера [26], де розглядаються процеси електронного збудження та іонізації цілих груп і класів атомних частинок. Результати з

особливостей структури від'ємних іонів та розсіяння електронів на них акумульовані в монографії Мессі [97] та в огляді Пегга [103]. Більш вузькопрофільні та наближені до нас у часі результати з розсіяння електронів низьких енергій на атомах та іонах можна отримати з оглядів Зацарінного і Бартшта [55], Фурси та Брея [104], і т.д.. Ряд цікавих особливостей фізики пружного і непружного розсіяння електронів на нейтральних атомах та малозарядних іонах відображені в оглядах [105, 106]. При розсіянні електронів на вказаних атомних системах утворення АІС зазвичай відбувається шляхом збудження одного зі зв'язаних електронів мішені і захоплення налітаючого електрона з неперервного спектру в стан дискретного спектру: Оже-розпад такого стану приводить до резонансного збудження атомної системи [87, 101]. Утворення АІС може відбуватися також шляхом збудження електрона з внутрішніх оболонок атома-мішені: Оже-розпад утвореного таким чином стану приводить до іонізації нейтрального атома чи малозарядного іона. Останній процес розпаду проміжного АІС з викиданням зв'язаного електрона у неперервний спектр прийнято також називати автоіонізацією.

При розгляді руху електронів у такій складній багаточастинковій системі, як атом, очевидно є необхідність урахування їх кореляцій, щоб уникнути зіткнень на своїх „орбітах” [90, 91]. Ще більш важливою стає кореляція при повільному зближенні електрона з атомом, коли електронна система мішені встигає „відреагувати на подразник” і перебудуватися в одну з (можливих) збуджених конфігурацій. Спостережувана при цьому залежність ефективного перерізу зіткнення атома-мішені з електронами від швидкості (енергії) налітаючих частинок взагалі є вражаючою. Все виглядає так ніби атомна система „відчуває” наближення частинки і, в залежності від енергії останньої, у десятки і сотні разів збільшує/зменшує свою ефективну площу [86, 101]. Атом-мішень вочевидь різко „розбухає” при фіксованих (резонансних) значеннях енергій частинки-снаряда і так же різко зменшує ефективний радіус зіткнення при проходженні вказаних енергій. Подібна узгодженість між пуль-

суючим зростанням/спаданням ефективної площі мішені і енергією частинки-снаряда є типовим резонансним процесом і вимагає тонкої кореляцій між рухом електронів атома і налітаючого електрона в області зіткнення. Теорія резонансних процесів, започаткована у фундаментальній роботі Фано [107], знайшла подальший розвиток у відомих працях [108, 109] і наразі є ще далекою від завершення. Відносно недавно появилися два ґрунтовні огляди Чін та ін. [87] і Мірошниченко [88], в яких детально викладені відповідно теорія резонансів Фешбаха та резонансів Фано. У цих оглядах детально висвітлено особливості вказаних резонансів з урахуванням різноманітних застосувань.

Ще раз підкреслимо, що елементарні процеси взаємодії атомних частинок, які проявляються при зіткненні електронів з атомами, являють не тільки фундаментальний інтерес, як еталонні задачі квантової теорії атома, але мають чітко визначену практичну спрямованість.

1.3 Розрахунки атомної структури

В даному розділі здійснено огляд основних концепцій, що стосуються теоретичних та експериментальних знань про атомні системи, насамперед щодо атомної структури і випромінювання. Зразу зауважимо, що надто спеціалізовані і „вузькопрофільні” теоретичні підходи, на зразок обчислювальних методів, необхідних для дуже високоточних розрахунків гелію (див. напр., [110–112]), не будуть предметом нашого розгляду. За браком місця поза оглядом також залишаються: досягнення нерелятивістської і релятивістської теорії електронів та атомів у зовнішніх електричних і магнітних полях [27, 113–117]; дослідження різних властивостей рідбергівських атомів у зовнішніх полях і при різноманітних зіткненнях [118–121], а також урахування когерентних взаємодій, що можуть бути використані для проведення квантових логічних операцій або для одержання багаточастинкових заплутаних станів у квантових обчисленнях [122]; будова атомних систем з порожніми внутрішніми

оболонками [35]; джерела надтонкої структури в атомних спектрах і способи розрахунку розщеплення енергії та ізотопних зсувів [123–125]; обговорення вимірювань і обчислення прецизійних сил осциляторів, які забезпечують строгу експериментальну перевірку фундаментальних розрахунків атомної структури [126]; опис характеристик моделі Томаса-Фермі [127] і її подальшого трансформування у загальну теорію функціоналу густини [128–131].

Натомість нами обговорена загальна концепція нерелятивістської теорії Хартрі-Фока та багатоконфігураційного Хартрі-Фока, поряд з методами конфігураційної взаємодії [57, 81, 82], а також відображено їх застосування до розрахунку різних атомних властивостей [82, 132]. Теорія побудови багателектронних базисів на основі функцій конфігураційних станів (ФКС-базисів) [57, 133] та B -сплайнів [21, 132], разом з розглядом видів електронної кореляції, які найбільш важливі при різних електронних конфігураціях всередині атомних систем, є одним з ключових аспектів даного дослідження. Не менш принциповим є розгляд процесу розсіяння електрона на N -електронному атомі у внутрішній R -матричній області як дискретного стану $(N + 1)$ -частинкової системи. Це дає можливість звести складні розрахунки процесу розсіяння до більш оптимізованих на даний час структурних розрахунків [21].

Знову ж таки, за браком місця в роботі лише побіжно описуються досягнення в області релятивістських методів розрахунку структури багателектронних атомів [52, 53, 55, 134]. Поза розглядом, на жаль, залишаються такі потенційно перспективні області та напрямки досліджень атомної структури як: потужна і універсальна техніка функцій Гріна – у застосуванні до обчислення вищих поправок до атомних рівнів енергії, а також амплітуд переходу для радіаційних переходів у атомах [135–138]; теорія атомної фотоіонізації та динаміки процесів фотон-атомних зіткнень [139–141]; процеси автоіонізації, де проміжна компаунд-система розглядаються як квазізв'язаний стан, вкладений у континуум розсіяння [142, 143]; діаграмний метод розрахунку струк-

тури атомів і характеристик різних атомних процесів [144, 145]. В останньому всі атомні характеристики і перерізи атомних процесів розраховуються методом ХФ в одноелектронному наближенні. Все, що є поза рамками ХФ, тобто спричинене залишковою взаємодією, трактується як кореляційні поправки, або кореляції. Тоді вони можуть бути розраховані з використанням багаточастинкової теорії збурень [146], наближення випадкових фаз [147] та наближення випадкових фаз з обміном чи його узагальненої версії [145].

У будь-якому наближенні теорії атома основу математичного апарату складають побудова хвильових функцій і вираження матричних елементів операторів фізичних величин. Найбільше визнання отримали: метод Хартрі-Фока [57, 81, 82], метод Томаса-Фермі [127], метод функціоналу густини [128], метод R -матриці [21, 71, 148] тощо. Метод самоузгодженого поля Хартрі-Фока розроблений на базі наближення, яке Хартрі [76] називав наближенням розділених функцій, маючи на увазі поділ одноелектронних хвильових функцій – спін-орбіталей. Для цього методу характерні наступні обмеження [80]: а) віднесення конфігурації, що складається з набору основних і орбітальних одноелектронних квантових чисел, до станів атома; б) опис всієї оболонки еквівалентних електронів однією і тією ж радіальною орбіталлю; в) незалежність хвильової функції всього атома від міжелектронних відстаней.

Відмова хоча б від одного зазначеного обмеження являє уточнення теорії. Якщо відмовлятися від обмежень у наведеній вище послідовності, отримаємо наступні уточнені методи теорії атома: а) метод накладання конфігурацій або багатоконфігураційне наближення [57]; у цьому випадку хвильова функція атома виражається лінійною комбінацією хвильових функцій, що відповідають різним термам, б) розширений метод розрахунку, де кількість радіальних орбіталей збільшується до числа електронів; в) метод неповного розділення змінних: у цьому випадку в хвильову функцію вводяться міжелектронні відстані в явному вигляді.

Найперше розглянемо одноелектронне наближення. Воно означає, що по-

ведінка одного електрона в полі інших електронів і ядра системи описується за допомогою атомних спін-орбіталей. У найпростішому випадку N -електронну хвильову функцію атома апроксимують простим детермінантом Слейтера [77], який складається із зайнятих електронами атомних спін-орбіталей. Це наближення приводить до методу Хартрі-Фока [57, 81]. Для розв'язання рівнянь Хартрі-Фока застосовують метод самоузгодженого поля [57]. У процесі розв'язання оптимізуються тільки орбіталі, зайняті електронами, а отже, енергії лише цих орбіталей знаходяться фізично обгрунтовано. Однак метод Хартрі-Фока дає і характеристики вільних орбіталей, – такі атомні спін-орбіталі називаються віртуальними.

Метод Хартрі-Фока має низку недоліків. Головний з них – неможливість врахування кулонівської кореляції, викликаной миттєвим взаємним відштовхуванням електронів незалежно від їх спіну. Це відбувається через використання наближення незалежних частинок. Також одnodетермінантна функція Хартрі-Фока внаслідок самоузгодження не має сингулярності, яка впливає з закону Кулона. Причина недоліків полягає в тому, що метод Хартрі-Фока використовує наближення незалежних частинок і одnodетермінантну хвильову функцію, а міжелектронна взаємодія враховується в ньому як сума взаємодій кожного електрона з середньою електронною густиною інших електронів. В дійсності, між усіма електронами існує миттєве кулонівське відштовхування, тобто їх рух корельовано. Щоб точно врахувати кореляцію електронів, необхідно явно ввести в хвильову функцію залежність енергії електронного відштовхування від відстані між електронами. Але оскільки зробити це в загальному випадку неможливо, розроблені наближені методи, що дозволяють врахувати електронну кореляцію і обчислити енергію атома більш точно. Найбільш поширеними є метод конфігураційної взаємодії та багатоконфігураційний метод самоузгодженого поля [57].

З аналізу літературних джерел ясно, що оптимальною ситуацією у такому випадку є включення в конфігураційні розклади не тільки конфігурації

основного стану атома-мішені, але й конфігурацій з одно- та двоелектронними збудженнями. Це дозволяє поліпшити власні стани мішені шляхом включення додаткових електрон-електронних кореляційних ефектів. Не менш важливим є такий підбір станів мішені, який гарантував би, що кореляційні ефекти, включені в стани мішені, є збалансовані з тими, які враховуються у хвильовій функції зіткнення, необхідній для отримання точних результатів з електрон-атомного розсіяння. Особливо важливим подібне узгодження кореляційних ефектів є для електронних зіткнень при проміжних енергіях, де включення конфігурацій з двома збудженими електронами у хвильову функцію зіткнення може призвести до появи нефізичних структур у перерізах розсіяння при цих енергіях.

Описана вище теорія, звичайно, може бути модифікована у різних напрямках. Однією з таких оптимізацій є розрахунок псевдостанів, які представляють вищі мультипольні поляризованості мішені, а також дипольні поляризованості збуджених станів мішені. Крім того, можуть бути обрані такі псевдостани, які дозволяють урахувати усередненим чином втрату потоку за рахунок незліченного числа високорозташованих рідбергівських і неперервних станів мішені і, тим самим, представити канал іонізації в електрон-атомних зіткненнях. Ми обговоримо побудову і застосування таких псевдостанів нижче, коли розглядатимемо електрон-атомні зіткнення при проміжних енергіях для випадку конкретних багатоелектронних атомних систем.

Іншим напрямком оптимізації є розрахунок хвильових функцій мішені не в результаті варіаційної самоузгодженої процедури, як це робиться в наближенні Хартрі-Фока, а шляхом розв'язання рівнянь сильного зв'язку у внутрішній R -матричній області – у рамках R -матричного наближення методу сильного зв'язку. Огляд джерел з цієї надзвичайно перспективної області структурних розрахунків атомних систем здійснено в праці [55]. Важливо також розуміти, що подібний поділ конфігураційного простору на під'області є доцільним навіть за наявності далекодійних кулонівських потенціалів,

оскільки обмін електронами і кореляційні ефекти обмежені в об'ємі, визначеному областю станів мішені і псевдостанів, включених у розрахунок, які експоненціально затухають на великих відстанях.

Вимоги до високої точності розрахунків атомних спектрів атомів і іонів з кожним роком тільки зростають. Тому кожна обчислювальна операція в структурних розрахунках атомних систем піддається прискіпливому аналізу. В результаті були розроблені поліпшені способи обробки кутових коефіцієнтів для великомасштабних обчислень, які вже працюють у нових версіях існуючих програм. Важливим кроком в обчислювальній атомній фізиці стало використання алгебраїчних базисних наборів. Великий внесок у цю справу зробили Зацарінний та Фрозе-Фішер [21, 132, 133], що дослідили можливості використання *B*-сплайнів для БКХФ- і БСР-розрахунків, і також розглянули їх застосування до розкладів хвильових функцій Дірака.

1.4 Методи розрахунку розсіювання електронів низьких енергій на атомах

У квантовій механіці розсіювання електрона на атомі описується рівнянням досить простого виду – рівнянням Шредінгера з потенціалом кулонівської взаємодії всіх електронів між собою і з ядром. Однак воно є диференціальним рівнянням в частинних похідних від багатьох змінних, і при практичному розв'язанні виникають значні математичні труднощі. Поки енергія падаючого електрона набагато перевищує енергію атомних електронів – проблеми немає: падаючий електрон пролітає повз атома настільки швидко, що не встигає значно змінити стан атомних електронів і, тим більше, відчувати зворотний вплив цих змін. Тоді взаємодію між падаючим електроном і атомом можна вважати слабкою і за допомогою теорії збурень отримати вирази для перерізів розсіювання електрона, збудження та іонізації атома. Цей прийом називається наближенням Борна (див. [149–151]). Зі зменшенням енергії точність

наближення Борна знижується. Великий практичний інтерес представляють розрахунки перерізів розсіювання при енергіях падаючого електрона порядку енергії зв'язку атомних електронів. Тут швидкість розсіюваного електрона не відрізняється істотно від швидкостей атомних електронів, і в загальному випадку його взаємодію з атомом не можна розглядати як збурення. Тому наближення Борна дає результати, правильні лише за порядком величини.

Для розрахунків у цьому інтервалі енергій розроблено і застосовується ряд методів: метод сильного зв'язку, метод спотворених хвиль, статичне наближення, метод поляризаційних орбіталей, варіаційні принципи Кона, Хюльтена, Рубінова та їх модифікації. Всі вони більш трудомісткі, ніж наближення Борна. Більшість розрахунків, представлених у науковій літературі, зроблено методом сильного зв'язку, а частина інших методів є його варіантами. Наприклад, статичне наближення означає, що в рівняннях методу сильного зв'язку зберігають лише одне рівняння, що відповідає розсіюванню на атомі в основному стані. Метод спотворених хвиль застосовується, якщо система рівнянь методу сильного зв'язку розпадається на дві (або більше) підсистеми, зв'язок яких між собою настільки слабкий, що його можна врахувати першим наближенням теорії збурень. Метод поляризаційних орбіталей, як за принципом, так і за результатами, близький до використання псевдостанів в узагальненнях методу сильного зв'язку. За допомогою вказаних методів впродовж кількох останніх десятиліть здійснено велику кількість найрізноманітніших розрахунків розсіювання електронів на всеможливих атомних системах і отримано більш-менш якісні набори різних атомних характеристик, насамперед, диференціальних та інтегральних перерізів розсіювання.

Проте, необхідними є і нові, послідовні і систематичні дані. Насправді, однією з основних проблем у дослідженнях переносу електронів у плазмі є велика невизначеність в основних даних, таких як диференціальні та інтегральні перерізи. При наявності дуже обмеженої кількості експериментальних даних з перерізів розсіювання для конкретних атомів і переходів, а то й

за повної їх відсутності, основний масив необхідних для практичних застосувань атомних даних повинні дати теоретичні розрахунки. Тому даний огляд наявних результатів з електрон-атомного розсіяння якраз і орієнтований на найбільш важливі принципи, підходи й методи отримання необхідних атомних даних та на критерії побудови систематичних і точних каталогів.

У багатьох оглядах [152–154] розглядалися в основному експериментальні методи або теоретичні моделі для конкретного типу процесу. Зокрема, Белл та ін. [152] та Марк та ін. [153] зосередилися на отриманні перерізів електронно-ударної іонізації. У той же час Геддл і Галладжер [154] розглянули найважливіші методи вимірювання характеристик збудження атомних систем електронним ударом і перевірили їх на несуперечливість.

Поряд з пошуком і систематизацією наявних даних з констант електрон-атомного зіткнення, не варто випускати з виду і ряд фундаментальних проблем, що стосуються всього комплексу питань розсіяння атомних частинок. Як зазначив Бедерсон [155, 156], зусилля експериментаторів повинні бути спрямовані на здійснення „ідеальних експериментів з розсіяння”, так щоб всі аспекти процесу розсіяння визначалися відразу. Крім того, теоретики повинні розвинути „повну теорію розсіяння”, яка здатна описувати не тільки „окремі прекрасні досліди з розсіяння для конкретного процесу розсіяння, але також і можливі процеси розсіяння для даної енергії падаючого снаряда”. Це означає, що „єдиний розрахунок повинен дати точні амплітуди розсіяння для пружних, непружних процесів, для збудження та іонізації” (Фурса та Брей, [54]).

Як зазначалося вище, пертурбативні підходи базуються на якомусь варіанті борнівських рядів з, як правило, тільки одним або двома оцінюваними членами ряду, у зв’язку з практичними обмеженнями. На відміну від цього, непертурбативний метод сильного зв’язку, в принципі, базується на повному розкладі хвильової функції розглядуваної системи. Цей метод зазвичай приводить до системи зв’язаних інтегро-диференціальних рівнянь, яка може бути розв’язана з використанням різних підходів. У останні роки для опису

різних мішеней [157, 158] з відносно простою валентною оболонкою успішно використовувалося наближення збіжного сильного зв'язку [54], сформульоване в термінах елементів матриці переходу (\mathbf{T}) в імпульсному просторі.

Забігаючи наперед зазначимо, що розвинутий цими авторами метод ЗСЗ є чи не найповнішим і найпослідовнішим втіленням згаданої вище концепції „повної теорії розсіяння”. Результати, отримувані в рамках цього методу, незмінно слугують в якості еталонних розрахунків (див., напр., [159, 160]), відмінно узгоджуючись з наявним експериментом. Проте розрахунки атомних процесів методом ЗСЗ не позбавлені й суттєвих недоліків. Насамперед, це велика затратність комп'ютерного часу, необхідного для здійснення обчислень, та принципові проблеми з розрахунком атомних систем з кількома відкритими електронними оболонками.

На цьому фоні, значні переваги у здійсненні систематичних розрахунків атомних констант отримує інша різновидність методу сильного зв'язку, а саме R -матричне наближення [148]. R -матрична техніка [64], як це показано в компіляційному томі Бьорка і Беррінгтона [68] і, нещодавно, у монографії Бьорка [71], використовується для розрахунку більш складних систем, а також для отримання результатів у великій кількості точок по енергії.

Однією з найбільш вдалих версій R -матричного наближення є вже згадуваний вище метод R -матриці з B -сплайнами (БСР) [21] зі всіма своїми модифікаціями (див. огляд [55]). Розклад N -електронної хвильової функції мішені та $(N+1)$ -електронної функції розсіяння за подвійним ФКС- та B -сплайновим базисом відкриває перед дослідником значні можливості щодо їх оптимізації. Розкриття механізмів подібної оптимізації з ціллю якнайповнішого врахування електронної кореляції якраз і складає основу як фундаментального, так і прикладного аспектів даного дисертаційного дослідження.

Варто відзначити, що обидва згадані прецизійні методи розрахунку (ЗСЗ і БСР) появились не на порожньому місці, а є узагальненням широкого масиву теоретичних наближень і підходів до опису електрон-атомної взаємодії, що

впродовж багатьох десятиліть розвивалися в рамках методу сильного зв'язку. Очевидно, що для розуміння новітніх досягнень і тенденцій розвитку у цій галузі бажано ґрунтовно освоїти напрацьовані за попередні десятиліття теоретичні надбання. Зокрема, обширна інформація з електрон-атомних і електрон-іонних теорій розсіювання та відповідних методик розрахунку, може бути отримана з таких відомих джерел як книги Бьорка [161], Шнайдера [162], або відносно недавньої статті Кальмана і Пальмері [163]. Як зазначалося вище, двома зазвичай використовуваними наближеннями атомного потенціалу є потенціали Томаса-Фермі і Хартрі-Фока (ХФ). Модель Томаса-Фермі базується на статистичних та напівкласичних міркуваннях і припускає, що N електронів атома утворюють газ Фермі в основному стані, замкнутий в області простору з центральним потенціалом $V(r)$. З іншого боку, метод Хартрі-Фока, або наближення самоузгодженого поля, є більш складним і припускає, що електрони рухаються в ефективному потенціалі, який бере до уваги притягання ядра і усереднений ефект відштовхувальної взаємодії від інших електронів (Бренсден і Йоахін [164]).

Метод сильного зв'язку (СЗ) є поширеним способом для апроксимації хвильової функції, шляхом розкладу її по членах, в яких беруться до уваги всі можливі канали взаємодії системи (для загального обговорення цього методу див., напр., Шнайдер [162]). Цей метод точно описує процес розсіювання, якщо він застосовується зі збереженням всіх членів розкладу. Але через величезну кількість рівнянь (яка, в принципі, має тенденцію прямувати до нескінченності), цей метод збігається дуже повільно.

Опис пружних зіткнень методом сильного зв'язку добре працює для падаючих частинок з енергіями вище 5 кеВ. Фактично ж, при проміжних енергіях (від 50 еВ до 5 кеВ) стають важливими ефекти другого порядку, такі як врахування обмінної взаємодії (коли налітаючий електрон міняється місцями з атомним електроном), поляризації атома-мішені, і втрати потоку при переході від пружного до непружних каналів. Вони враховуються шляхом визначе-

ння оптичного потенціалу у вигляді суми статично-обмінного потенціалу та інших членів, що описують вказані ефекти другого порядку.

Часто для практичних застосувань має значимість не тільки точність отримуваних у тому чи іншому наближенні результатів, але й можливість їх оперативного отримання. Тому для швидкого визначення перерізів збудження електронним ударом на основі наближення Борна і в цілях врахування електронного обміну з електронами мішені, або поляризації мішені були розроблені відповідні методи масштабування. Наприклад, метод масштабування, введений Кім [165] і застосовуваний до дипольно дозволених збуджень, вимагає знання обмеженої кількості атомних параметрів: енергії зв'язку збуджуваного електрона, енергію збудження, і точну силу осцилятора для переходу. Обширні огляди класичних і квазікласичних наближень для перерізів іонізації були представлені Радже [60], Кім і Радд [166] та Марк та ін. [153].

Як слідує з назви дисертаційної роботи, вона присвячена в основному розгляду наближення R -матриці з B -сплайнами (БСР) [21]. Він є одним з багатьох, які можуть бути, в принципі, використані для розв'язання рівнянь сильного зв'язку, і був успішно застосований до цілого ряду задач з розрахунку атомної структури та інтерпретації електронно-індукованих процесів (пружне розсіювання, збудження та релаксація, іонізація) [55]. Всі ці процеси можуть бути розраховані в рамках одного і того ж всеосяжного підходу, з відповідними уточненнями, здійснюваними за допомогою граничних умов для рівнянь сильного зв'язку та ступеня врахування різних фізичних явищ (електронних кореляцій, релятивістських ефектів, каналів зв'язку). В рамках методу наразі існує п'ять пакетів комп'ютерних програм (з різними проміжними модифікаціями) для здійснення розрахунків, а саме: нерелятивістська програма БСР + Брейт-Паулі [21]; програма структурних розрахунків [132]; B -сплайнова релятивістська версія на основі рівняння Дірака (ДБСР) [167]; кутові інтеграли в неортогональному базисі [168]; залежне від часу наближення БСР [169].

Резюме публікацій, пов'язаних з методом БСР, представлено в огляді [55]. Як зазначалося вище, цей метод особливо ефективний для випадку збільшення складності мішені, зокрема при розв'язанні задач електронного розсіяння на складних мішенях з відкритими оболонками. Двома найбільш важливими нововведеннями БСР-підходу, в порівнянні з іншими методами і супроводжуваними їх комп'ютерними кодами, є наступні: а) для представлення як зв'язаних, так і континуальних одноелектронних орбіталей можуть бути використані різні неортогональні набори орбіталей; б) R -матричні базисні функції визначаються набором B -сплайнів.

Використання неортогональних наборів зв'язаних орбіталей дозволяє отримати значно вищу точність в описі станів мішені, ніж зазвичай досягається при дотриманні вимог ортогональності. Оскільки орбіталі оптимізовані в розділених розрахунках для окремих термів, високий рівень точності може бути отриманий з компактними розкладами конфігураційної взаємодії (НК). Що стосується повної хвильової функції для задач зіткнення, то використання неортогональних орбіталей континууму запобігає необхідності введення в її розклад $(N+1)$ -електронних членів і, отже, зменшує проблеми з появою псевдорезонансної структури в перерізах розсіяння. Ключовим кроком у розробці наближення БСР, зв'язаним з використанням неортогональних орбіталей, стала поява роботи Зацарінного і Фрозе Фішер [168]. При цьому вибір B -сплайнів у якості базисних функцій, уведений у розрахунки атомної структури в 1980-х роках, є вигідним у зв'язку з їх чудовими властивостями для числових апроксимацій [170]. B -сплайни є дзвоноподібними кусково-поліноміальними функціями порядку k_s (степеня $k_s - 1$), які визначаються заданим набором точок на деякому скінченному радіальному інтервалі [171]. Має місце велика гнучкість у виборі радіальної сітки B -сплайнового базису, і машинна точність може бути досягнута з простими гаусовими квадратурами. Цим уникаються різницеві алгоритми і замість них використовуються добре зарекомендовані лінійно-алгебраїчні пакети.

Основна ідея R -матричної техніки полягає у розділенні конфігураційного простору на два діапазони. Перший з них є замкнутим „боксом”, радіус a якого вибирається з критерію можливості нехтування обмінними ефектами поза цією обмеженою областю. Розв’язки простішої системи зв’язаних диференціальних (а не інтегро-диференціальних) рівнянь для зовнішньої області ($r > a$) узгоджуються при $r = a$ з розв’язком у внутрішній області ($r < a$). Останній, у свою чергу, отримується за допомогою розкладу по базисних функціях, що дозволяє у повній мірі скористатися вельми складними, але, водночас, добре розвиненими методами розрахунку атомної структури.

Однією із основних компонент вищеназваних програм є варіативність у визначенні наборів одноелектронних орбіталей. Одна із підмножин набору використовується для побудови станів мішені в багатоконфігураційних розкладах, а інша – для представлення розсіяного електрона всередині боксу. Така структура спрощує розрахунки і дозволяє розробку ефективних комп’ютерних програм. Більш детально особливості методу БСР будуть розкриті нижче, в розділі 2.

1.5 Вибір атомних систем для дослідження електрон-атомних зіткнень

Прямі вимірювання перерізів збудження атомів та іонів – задача надзвичайно складна. Тому основну кількість необхідних для практичних застосувань атомних даних повинні надавати теоретичні розрахунки. Критерії вибору методів для теоретичного дослідження атомних об’єктів були обґрунтовані у попередніх підрозділах. Проте навіть найбільш прецизійні методи розрахунку повинні бути відтестовані на еталонних експериментальних вимірюваннях. Одним з „реперних” атомів, на яких відпрацьовуються нові методики експериментального і теоретичного дослідження електрон-атомного розсіяння є магній. Так, в останні 10-15 років появилось кілька експериментальних

робіт [172–177], в яких представлені результати вимірювань диференціальних перерізів розсіяння електронів на атомі магнію. Поряд з більш ранніми працями [178–180] вони дають хорошу можливість для перевірки різних теоретичних моделей розрахунку кутових залежностей ДП процесів зіткнення e –Mg. Разом з тим, для іншого елемента тієї ж II групи Періодичної системи, стронцію, єдині вимірювання повного інтегрального перерізу розсіяння e –Sr були виконані більше 40 років тому Романюк та ін. [181] в інтервалі енергій від 0.1 до 10 еВ. Ще раз наголосимо, що це єдині експериментальні дослідження енергетичної залежності і резонансної структури повного ІІ атома Sr. Природно, напрошується ідея застосувати відтестовану на атомі магнію методику розрахунку до більш складної атомної системи.

І зовсім осібно у ряду проведених більше ніж за півстоліття розрахунків атомних систем, стоять здійснені нами дослідження розсіяння електронів на атомах кремнію та фтору. До проведення нами БСР-обчислень характеристик процесів зіткнення e –Si, якихось систематичних даних щодо значень перерізів, швидкостей реакції чи сил зіткнення для розсіяння електронів атомами кремнію у літературі не було представлено. Для розсіяння e –F існує єдиний розрахунок у наближенні PM11 (Баліян і Батя [182]). Вибір вказаних атомів кремнію та фтору в якості об'єктів теоретичного дослідження якраз і був обґрунтований, головним чином, даною обставиною. З іншого боку, електронні конфігурації атомів II групи Mg та Sr із заповненими ns^2 -оболонками суттєво відрізняються від конфігурацій атома IV групи Si з основним конфігураційним станом $3p^2$ чи атома VII групи фтору F з конфігурацією основного стану $2p^5$. Все це дає змогу дослідити вплив електронної кореляції для різних електронних конфігурацій складних атомних систем різних груп Періодичної системи елементів. Природно, що за повної відсутності експериментальних даних, точність теоретичних розрахунків розсіяння електронів на атомах Si та F повинна була бути обґрунтована самою обчислювальною процедурою. Мова про все це йтиме нижче, у відповідних розділах даної дисертації.

1.6 Висновки до розділу 1

Проведений аналіз наявних експериментальних даних та результатів теоретичних досліджень інших авторів дозволяє зробити такі висновки:

1. У той час як у внутрішніх оболонках важких атомів вплив кулонівських і обмінних кореляцій між електронами в значній мірі послаблений сильним електричним полем ядра, у валентних оболонках досліджуваних атомів Mg, Sr, Si та F такого сильного джерела фонового поля нема. Це дозволяє використовувати у наших подальших дослідженнях наближення „замороженого остова”.

2. Одноелектронне наближення, яке використовувалося в більшості ранніх праць (див., напр., [81]) з розрахунку атомної структури, припускає можливість зображення хвильової функції системи електронів у вигляді добутку хвильових функцій окремих електронів, що означає нескорельований рух частинок у самоузгодженому полі. Якщо у внутрішніх оболонках атома застосування квантовомеханічних методів, базованих на одноелектронному наближенні та наближенні усередненого поля Хартрі-Фока з подальшим врахуванням міжелектронних кореляцій в якості поправок, виправдано, то у валентних оболонках складних атомів обмінно-кореляційні ефекти повинні закладатися в теорію як ведучий фактор і описуватися із перших принципів. Задовольнити цим вимогам на основі традиційних квантовомеханічних підходів [64] у термінах хвильових функцій Шредінгера навряд чи можливо, оскільки це спряжено з колосальними об'ємами обчислень. Принципово точний опис перестановочної симетрії та міжелектронних кореляцій припускає попередню симетризацію хвильових функцій та відмову від одноелектронного наближення і ортогональності радіальних орбіталей.

РОЗДІЛ 2

ЗАГАЛЬНА МЕТОДИКА Й ОСНОВНІ МЕТОДИ ДОСЛІДЖЕНЬ

У даному 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. Наближення R -матриці з B -сплайнами [21] є одним з небагатьох, що можуть бути використані для розв'язання рівнянь сильного зв'язку водночас у задачах розрахунку атомної структури та в задачах дослідження процесів електрон-атомних зіткнень. Найбільш важливими перевагами БСР-підходу над іншими методами і відповідними їм комп'ютерними кодами, є наступні: а) для представлення одноелектронних орбіталей як дискретного, так і неперервного спектрів можуть бути використані різні набори неортогональних орбіталей; б) R -матричні базисні функції визначаються набором B -сплайнів.

2.1 Метод сильного зв'язку

2.1.1 Загальна характеристика методу. *Метод сильного зв'язку каналів* [61,63,64,66,68,183–185] базується на тому, що з погляду функціонального аналізу хвильові функції системи кількох частинок можна розглядати як вектор нескінченновимірного простору, а рівняння Шредінгера – як векторне рівняння з нескінченним числом компонент; при цьому якщо знайти точний розв'язок згаданого рівняння неможливо, то можна поставити задачу про знаходження наближеного розв'язку.

Наприклад, якщо замінити вихідне рівняння Шредінгера його проекцією на деякий скінченновимірний підпростір, то наближену хвильову функцію в цьому скінченновимірному просторі можна розглядати як деяке наближення до точної хвильової функції, а оператор проектування вибирати таким

чином, щоб найбільш повно врахувати найважливіші особливості досліджуваних процесів. Зокрема, можна включити в розгляд найбільш істотні відкриті канали, а також частину закритих. Представляючи далі наближену хвильову функцію у вигляді лінійної комбінації відомих базисних функцій, для коефіцієнтів цього розкладу отримуємо систему звичайних диференціальних рівнянь, яка може бути розв'язана чисельно. Основною перевагою цього методу є те, що фізичному процесу відповідає наочна картина, що дозволяє прослідкувати за деталями механізму реакції. Даний метод дозволяє описати в рамках єдиного формалізму як прямі реакції, так і реакції, що відбуваються з утворенням проміжного комплексу. Однак, незважаючи на згадані вище привабливі сторони методу, значні труднощі викликає коректне врахування неперервного спектру в розкладі повної хвильової функції. Тому не існує однозначного способу побудови хвильової функції, що описує перехід з одного каналу в інший. У результаті цього виникають труднощі при описанні непружних процесів зіткнення, що супроводжуються утворенням квазістаціонарних станів проміжних компаунд-систем. У цьому випадку модифікація методу сильного зв'язку полягає в тому, що повна хвильова функція зображається у вигляді скінченного ряду, складеного з псевдостанів та власних станів атома-мішені [2, 3].

2.1.2 Розрахунки розсіяння й атомної структури. Задача низькоенергетичного розсіяння електрона на N -електронному атомі зводиться до розв'язування рівняння Шредінгера

$$(H_{N+1} - E)\Psi_{\alpha}^{\Gamma}(X, x_{N+1}) = 0 \quad (2.1)$$

з відповідними граничними умовами. Тут E – повна енергія $(N+1)$ -електронної системи „атом + налітаючий електрон”. В атомних одиницях гамільтоніан

цієї системи має вигляд (у стандартних позначеннях)

$$H_{N+1} = \sum_{i=1}^{N+1} \left(-\frac{1}{2} \nabla_i^2 - \frac{Z}{r_i} \right) + \sum_{i>j=1}^{N+1} \frac{1}{r_{ij}}, \quad (2.2)$$

де Z – заряд ядра. Гамільтоніан (2.2) діагональний по відношенню до повного орбітального моменту L , повного спіну S , їх проекцій M_L , M_S на задану вісь та парності π . 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 σ_i координат i -го електрона. Індекс α характеризує початкові умови і зазвичай позначає вхідний канал розсіювання. Без урахування іонізації розклад повної хвильової функції зіткнення $\Psi_\alpha^\Gamma(X, x_{N+1})$ можна записати у вигляді

$$\Psi_\alpha^\Gamma(X, x_{N+1}) = A \sum_{i=1}^N \bar{\Phi}_i^\Gamma(X; \hat{r}_{N+1}, \sigma_{N+1}) \frac{F_{i\alpha}^\Gamma(r_{N+1})}{r_{N+1}} + \sum_{j=1}^m c_j \chi_j^\Gamma(X, x_{N+1}). \quad (2.3)$$

Хвильова функція каналу $\bar{\Phi}_i^\Gamma$ утворюється шляхом векторного зв'язку хвильової функції N -електронної мішені $\Phi_i(X) = \Phi_i(x_1, \dots, x_N)$ 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 (2.3) 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 випадку складних атомів хвильові функції $\Phi_i(X)$ будуються у вигляді скінченного багатоконфігураційного розкладу

$$\Phi_i(x_1, \dots, x_N) = \sum_j c_{ij} \varphi_j(x_1, \dots, x_N), \quad (2.4)$$

де φ_j – заданий набір антисиметризованих одноконфігураційних функцій. Коефіцієнти c_{ij} у розкладі (2.4) можна отримати при діагоналізації N -електрон-

ного гамільтоніана мішені:

$$\langle \Phi_i | H_N | \Phi_j \rangle = E_i(Z, N) \delta_{ij}. \quad (2.5)$$

Зазвичай у першу суму в правій частині розкладу (2.3) 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 може бути зроблений 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 (2.3).

Базисні функції φ_j та χ_j у розкладах (2.3), (2.4) будуються із одноелектронних атомних орбіталей φ_{α_i} , які у наближенні центрального поля можна подати у вигляді

$$\varphi_{\alpha_i}(x) = \frac{1}{r} P_{n_i l_i}(r) Y_{l_i m_i}(\hat{r}) \chi(m_S | \sigma), \quad x \equiv (\vec{r}, \sigma), \quad (2.6)$$

де α_i – скорочене позначення набору квантових чисел n_i, l_i, m_i та m_S . У стандартному підході Бьорка [64, 71] 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

$$\int_0^\infty P_{n_j l_j}(r) F_{i\alpha}^\Gamma(r) dr = 0 \quad \text{при } l_j = l_i. \quad (2.7)$$

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 (2.7) фактично означає, що налітаючий електрон не може бути віртуально захоплений в одну із незаповнених підболонок, врахованих у розкладі (2.4) станів мішені. Зазначимо також, що в рамках стандартного підходу [64, 71] можли-

вість такого захоплення забезпечується шляхом включення у другу суму розкладу (2.3) спеціальних додаткових кореляційних функцій χ_j^Γ , що приводить до значного збільшення числа інтегро-диференціальних рівнянь, які підлягають розв'язанню. Однак основна трудність такого підходу полягає у тому, що включення у вихідний розклад додаткових кореляційних функцій χ_j^Γ приводить до значного збільшення числа рівнянь для невідомих функцій $F_{i\alpha}^\Gamma$ та до появи нефізичної псевдорезонансної структури у перерізах розсіювання. У наших працях [1–3] показано, що цих утруднень можна позбутися, якщо відмовитися від вимоги ортогональності (2.7) функцій $F_{i\alpha}^\Gamma$ до орбіталей мішені $P_{n_j l_j}$, що дозволяє природним чином (через першу суму у розкладі (2.3)) урахувати можливість віртуального захоплення електрона у незаповнені підболомки мішені. Звідси випливає, що в пропонованій версії методу сильного зв'язку більш суттєву роль відіграє перша сума в (2.3), оскільки тепер вона повинна включати хвильові функції незайнятих станів, у які міг би бути захоплений налітаючий електрон.

Підставляючи розклад (2.3) у рівняння Шредінгера (2.1), домножуючи його почергово на функції $\bar{\Phi}_i^\Gamma$ і χ_j^Γ , одержимо після інтегрування за всіма змінними, крім r_{N+1} , систему зв'язаних інтегро-диференціальних рівнянь для радіальних функцій $F_i \equiv F_{i\alpha}^\Gamma$ та коефіцієнтів c_j . Вилучивши з цієї системи коефіцієнти c_j , дістанемо систему інтегро-диференціальних рівнянь

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l_i(l_i + 1)}{r^2} + \frac{2Z}{r} + k_i^2 \right) F_i(r) = 2 \sum_j \left(V_{ij} + W_{ij} + X_{ij} \right) F_j(r), \quad (2.8)$$

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 розсіювання електронів на складних атомах явний вигляд цих потенціалів генерується автоматично програмою BSR [21] у залежності від типу вхідних даних.

Перспективний підхід до прямого розв'язання рівнянь сильного зв'язку (2.8) був запропонований Фішер та Ідріс [186]. Він ґрунтується на використанні B -сплайнового базису і вирізняється своєю простотою, яка є ключем

до його успішної обчислювальної імплементації. Метод передбачає визначення розв'язку з скінченною границею без накладання граничних умов. Це не є обмеженням загальності за умови досягнення асимптотичної області, де шукані розв'язки можуть бути зшиті з лінійною комбінацією істинних асимптотичних розв'язків. Ядро алгоритму включає оцінку матричних елементів гамільтоніана H_{ij} та матриці перекриття S_{ij} на B -сплайновому базисі:

$$H_{ij} = \langle \Psi_i, H \Psi_j \rangle, \quad S_{ij} = \langle \Psi_i, \Psi_j \rangle, \quad (2.9)$$

і знаходження власних векторів з умови мінімуму модуля власних значень неермітової, залежної від енергії матриці

$$A(E) = H - ES \quad (2.10)$$

для кожного заданого значення енергії E .

2.2 Метод R -матриці

2.2.1 Внутрішня область. У цьому підрозділі розглянемо розв'язання системи рівнянь (2.8) за допомогою методу R -матриці з B -сплайнами. 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 $(N+1)$ -електронної 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 $r \geq a$. Як і в стандартному методі R -матриці [64, 71], повну хвильову функцію $(N+1)$ -електронної системи у внутрішній області представимо при заданій енергії E у вигляді розкладу

$$\Psi_E^\Gamma = \sum_k A_{EK}^\Gamma \Psi_k^\Gamma \quad (2.11)$$

за незалежним від енергії дискретним базисним набором Ψ_k^Γ , який для кожної комбінації $LS\pi$ зображається у вигляді

$$\Psi_k^\Gamma(X, x_{N+1}) = A \sum_{i,j} \bar{\Phi}_i^\Gamma(X; \hat{r}_{N+1}, \sigma_{N+1}) \frac{u_j(r_{N+1})}{r_{N+1}} c_{ijk}^\Gamma + \sum_i \chi_i^\Gamma(X, x_{N+1}) d_{ik}^\Gamma, \quad (2.12)$$

де $\bar{\Phi}_i^\Gamma$ та χ_i^Γ визначаються так само, як і в формулі (2.3). Функції $F_{i\alpha}^\Gamma$, що описують радіальний рух розсіяного електрона в i -му каналі, ми представили в (2.12) 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 (2.2) 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:

$$L_{N+1} = \sum_{i=1}^{N+1} \frac{1}{2} \delta(r_i - a) \left(\frac{d}{dr_i} - \frac{b-1}{r_i} \right). \quad (2.13)$$

Перепишемо тепер рівняння Шредінгера (2.1) у вигляді

$$(H_{N+1} + L_{N+1} - E)\Psi = L_{N+1}\Psi, \quad (2.14)$$

де оператор $(H_{N+1} + L_{N+1})$ є ермітовим у внутрішній області. Формальний розв'язок рівняння (2.14) можна подати у вигляді

$$\Psi = (H_{N+1} + L_{N+1} - E)^{-1} L_{N+1} \Psi. \quad (2.15)$$

Рівняння (2.15) записане в операторній формі. Для явного запису цього рівняння слід розкласти функцію Гріна $(H_{N+1} + L_{N+1} - E)^{-1}$ у внутрішній області за дискретним базисом Ψ_k^Γ . Коефіцієнти c_{ijk}^Γ і d_{ik}^Γ розкладу (2.12) обчислюються при діагоналізації оператора $(H_{N+1} + L_{N+1})$, що дає

$$\langle \Psi_k^\Gamma | H_{N+1} + L_{N+1} | \Psi_{k'}^\Gamma \rangle_{\text{int}} = E_k^\Gamma \langle \Psi_k^\Gamma | \Psi_{k'}^\Gamma \rangle_{\text{int}}. \quad (2.16)$$

Тут інтегрування за радіальними змінними проводиться по внутрішній області, а власні значення E_k^Γ дійсні. Рівняння (2.15) при цьому набуває вигляду

$$|\Psi\rangle = 1/2 \sum_{kj} |\Psi_k^\Gamma\rangle \langle \Psi_k^\Gamma | \bar{\Phi}_j^\Gamma \rangle (E_k - E)^{-1} \left(\frac{d}{dr_{N+1}} - \frac{b_j}{r_{N+1}} \right) \langle \bar{\Phi}_j^\Gamma | \Psi \rangle. \quad (2.17)$$

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

$$F_i^\Gamma(a) = \sum_{j=1}^n R_{ij}^\Gamma(E) \left(a \frac{dF_j^\Gamma}{dr_{N+1}} - b_j F_j^\Gamma \right)_{r_{N+1}=a}, \quad (2.18)$$

де ми ввели R -матрицю з елементами

$$R_{ij}^\Gamma(E) = \frac{1}{2a} \sum_k \frac{w_{ik}^\Gamma(a) w_{jk}^\Gamma(a)}{E_k^\Gamma - E}, \quad (2.19)$$

приведені радіальні функції F_i^Γ та поверхневі амплітуди w_{ik}^Γ :

$$F_i^\Gamma(r_{N+1}) = r_{N+1} \langle \bar{\Phi}_i^\Gamma | \Psi_k^\Gamma \rangle', \quad w_{ik}^\Gamma = a \langle \bar{\Phi}_i^\Gamma | \Psi_k^\Gamma \rangle'_{r_{N+1}=a}. \quad (2.20)$$

Рівняння (2.18) і (2.19) описують розсіяння електронів на атомах або іонах у внутрішній області. Разом з виразом для коефіцієнтів

$$\begin{aligned} A_{Ek}^\Gamma &= \frac{1}{2a} (E_k - E)^{-1} \sum_i w_{ik}(a) \left(a \frac{dF_i^\Gamma}{dr} - b F_i^\Gamma \right)_{r=a} = \\ &= \frac{1}{2a} (E_k - E)^{-1} \mathbf{w}^T \mathbf{R}^{-1} \mathbf{F}^\Gamma, \end{aligned} \quad (2.21)$$

вони визначають хвильову функцію Ψ_E^Γ у внутрішній області для будь-якого значення повної енергії системи E . Діагоналізуючи матрицю $\langle \Psi_k^\Gamma | H_{N+1} + L_{N+1} | \Psi_{k'}^\Gamma \rangle_{\text{int}}$ у виразі (2.16) для кожного набору квантових чисел Γ , можна визначити енергетичний спектр E_k^Γ і коефіцієнти c_{ijk}^Γ , d_{ik}^Γ у розкладі (2.12), тобто хвильові функції Ψ_k^Γ для відповідних базисних станів. Однак це треба зробити лише один раз, щоб визначити R -матрицю у всьому діапазоні енергій. Справа в тому, що залежність R -матриці від E , як видно з (2.19), міститься лише в знаменнику, тому знайти її для різних E можна тривіально, якщо відомі поверхневі амплітуди $w_{ik}^\Gamma(a)$.

Як і у випадку методу СЗ, точність методу R -матриці в значній мірі залежить від числа членів, залишених у розкладах (2.11) і (2.19). У стандартному підході [64, 71] швидка збіжність розкладу (2.19) досягається за допомогою запропонованих Баттлом поправок, які вносяться у діагональні R -матричні елементи (2.19). Цей підхід має той суттєвий недолік, що в ньому всі базисні функції u_j мають одну й ту ж саму (зазвичай нульову) логарифмічну похідну на межі ($r = a$) внутрішньої області. Це зумовлює розрив у нахилі результуючих орбіталей суцільного спектра F_i^Γ , в тому числі й тих, що включають поправки Баттла. Ця хиба стандартного методу [64, 71] усувається в дисертаційній роботі шляхом більш вдалого добору базисних функцій u_j .

Практичне застосування методу R -матриці передбачає використання певної базисної системи одноелектронних функцій u_j , кожна з яких описує радіальний рух розсіяного електрона з додатною енергією у деякому потенціальному полі V , що моделює поле мішені. При побудові функцій u_j зазвичай вимагають [64, 71], щоб вони були ортогональними (на відріжку $[0, a]$) до радіальних орбіталей і псевдоорбіталей мішені $P_{n_i l_i}$, що володіють тією ж симетрією. З цією вимогою пов'язані утруднення в стандартній R -матричній теорії [64, 71] при урахуванні можливості віртуального захоплення електрона у незаповнені підоболонки мішені. Як і у випадку методу СЗ, включення у розклад (2.12) спеціальних додаткових кореляційних функцій χ_i^Γ дозволяє частково врахувати ефекти, пов'язані з вимогою ортогональності функцій u_j атомним орбіталям $P_{n_i l_i}$. Однак у випадку складних атомів, коли для акуратного представлення хвильової функції мішені слід використовувати багатоконфігураційні розклади (2.4), така процедура приводить до надто великого числа додаткових кореляційних функцій, які необхідно уводити в СЗ-розклад (2.11), (2.12) для компенсації вимог ортогональності. Проте головна трудність даного методу зумовлена тією ж причиною, що і в розглянутому вище методі СЗ – появою нефізичної псевдорезонансної структури в перерізах розсіяння. У цій ситуації одна з можливостей усунути отримання не-

фізичних результатів – використання неортогональних (до орбіталей $P_{n_i l_i}$) базисних функцій u_j . При сучасній складній ситуації в теорії резонансного розсіювання електронів на складних атомах було б необачно нехтувати такою можливістю.

Найважливішою особливістю реалізованої у дисертації БСР-версії R -матричного методу є використання B -сплайнів як базисних функцій u_j в R -матричному представленні (2.12) для внутрішньої області. 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 базисні сплайни – фінитні функції, які відмінні від нуля лише на своїх інтервалах-носіях. Завдяки властивостям фінитності та повноти скінченної системи базисних сплайнів потреба включення поправок Баттла в R -матричні елементи (2.19) автоматично відпадає. Інші важливі властивості базисних сплайнів і сплайн-алгоритми розв'язування систем диференціальних та інтегродиференціальних рівнянь ретельно висвітлені у підрозділі 2.3 дисертації.

2.2.2 Зовнішня область. Наступним кроком нашого розгляду є розв'язання задачі розсіювання у зовнішній області та зшивки розв'язків на межі $r = a$ з метою визначення K - та S -матриць і фазових зсувів. Оскільки радіус $r = a$ внутрішньої області вибирається таким чином, щоб обмінні і кореляційні ефекти були нехтуюче малими при $r > a$, ми можемо представити повну хвильову функцію зіткнення у зовнішній області у формі розкладу

$$\Psi^\Gamma(x_1, \dots, x_{N+1}) = \sum_j \bar{\Phi}_i^\Gamma(x_1, \dots, x_N; \hat{\mathbf{r}}_{N+1}, \sigma_{N+1}) \frac{1}{r_{N+1}} F_i^\Gamma(r_{N+1}); \quad r_{N+1} > a. \quad (2.22)$$

Тут каналні функції $\bar{\Phi}_i^\Gamma$ визначаються так само, як і в формулі (2.3), а $F_i^\Gamma(r)$ – аналітичні продовження у зовнішню область $r > a$ приведених раді-

альних хвильових функцій (2.20). Ці радіальні функції є розв'язками системи зв'язаних диференціальних рівнянь

$$\begin{aligned} \left(\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l_i(l_i + 1)}{r^2} + \frac{2(Z - N)}{r} + k_i^2 \right) F_i^\Gamma(r) = \\ = 2 \sum_{j=1}^n \sum_{\lambda=1}^{\Lambda} \frac{a_{ij}^{\lambda, \Gamma}}{r^{\lambda+1}} F_j^\Gamma(r), \quad i = 1, n \quad (r \geq a). \end{aligned} \quad (2.23)$$

Тут n – число каналних функцій, збережених у розкладах (2.3) і (2.22), а l_i та $k_i^2/2$ – кутовий момент та енергія налітаючого електрона в i -му каналі. Взаємодія між каналами в рівнянні (2.23) визначається далекодієним потенціалом з коефіцієнтами

$$\begin{aligned} a_{ij}^{\lambda, \Gamma} = \langle \bar{\Phi}_i^\Gamma(x_1, \dots, x_N; \hat{\mathbf{r}}_{N+1}, \sigma_{N+1}) | \times \\ \times \sum_k^N r_j^\lambda P_\lambda(\cos \theta_{kN+1}) | \bar{\Phi}_j^\Gamma(x_1, \dots, x_N; \hat{\mathbf{r}}_{N+1}, \sigma_{N+1}) \rangle, \end{aligned} \quad (2.24)$$

де $\cos \theta_{kN+1} = \hat{\mathbf{r}}_k \cdot \hat{\mathbf{r}}_{N+1}$, а $P_\lambda(x)$ – поліном Лежандра. Інтегрування у формулі (2.24) проводиться за всіма просторовими і спіновими електронними координатами, крім радіальної координати розсіяного електрона. У практичних розрахунках коефіцієнти $a_{ij}^{\lambda, \Gamma}$ далекодієних потенціалів визначаються через коефіцієнти відповідних слетерівських інтегралів R_k [21], які описують пряму міжканальну взаємодію у внутрішній області ($r < a$).

Розглянемо постановку граничних умов, яким задовольняють радіальні функції $F_i(r)$. Для цього необхідно відновити у цих функціях другий нижній індекс α , який визначає канал падаючої хвилі. Розглянемо випадок, коли всі n каналів, включених у розклади (2.3) і (2.22), відкриті, тобто мають значення $k_i^2 > 0$. У залежності від постановки граничних умов існує ряд представлень для розв'язків рівняння (2.1), які відповідають їхнім різним лінійним комбінаціям. Зокрема, S -матриця розсіяння визначається наступними граничними умовами:

$$F_{i\alpha}(r) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} k_i^{-1/2} [\exp(-i\xi_i) \delta_{i\alpha} - \exp(i\xi_i) S_{i\alpha}], \quad (2.25)$$

де

$$\xi_i(r) = k_i r - l_i \pi / 2 + \eta_i \ln(2k_i r) + \arg \Gamma(l_i + 1 - i\eta_i) \quad (2.26)$$

– асимптотична фаза регулярної кулонівської функції з $\eta_i = -(Z - N)/k_i$.

В числових методах зручніше використовувати не комплексні, а дійсні хвильові функції. Це досягається побудовою на основі розв'язків (2.25) таких лінійних комбінацій, які задовольняють дійсним граничним умовам

$$F_{i\alpha}(r) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} k_i^{-1/2} [\sin(\xi_i) \delta_{i\alpha} + \cos(\xi_i) K_{i\alpha}], \quad (2.27)$$

або

$$F_{i\alpha}(r) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} k_i^{-1/2} [\sin(\xi_i + \tau_i) \delta_{i\alpha} + \cos(\xi_i + \tau_i) \rho_{i\alpha}], \quad (2.28)$$

де τ_i – довільна фаза.

Порівнюючи (2.25) і (2.27), отримуємо, що матриці $S_{i\alpha}$ та $K_{i\alpha}$ розмірності $n \times n$ пов'язані матричним співвідношенням

$$\mathbf{S} = \mathbf{1} + \mathbf{T} = \frac{\mathbf{1} + i\mathbf{K}}{\mathbf{1} - i\mathbf{K}}. \quad (2.29)$$

Ці матриці використовуються в подальшому для розрахунку перерізів розсіяння та всіх інших спостережуваних величин.

Із збереження потоку ймовірності та інваріантності по відношенню до інверсії часу легко показати, що S -матриця унітарна й симетрична, а отже, K -матриця дійсна й симетрична. Симетричні K -матриці для кожної комбінації $LS\pi$ містять повну інформацію про процеси зіткнення у просторі базисних функцій Φ_i та χ_i , і саме ці величини ми будемо обчислювати, щоб потім з них отримувати перерізи.

Зрозуміло, що асимптотичні форми (2.25) і (2.27) не єдино можливі. Справді, замінюючи у формулі (2.27) $\xi_i(r)$ на $\xi_i(r) + \tau_i$, де τ_i – деяка стала величина (див. Сараф і др. [187]), можна ввести нову, залежну від τ_i , K -матрицю, яку надалі будемо позначати через $\rho_{i\alpha}(\tau_i)$. У випадку, коли значення енергії у

вхідному каналі такі, що K -матриця близька до полюсу при $\tau_i = 0$, використання матриці $\rho_{i\alpha}(\tau_i)$ дозволяє уникнути сингулярності. Це зручно у більшості числових методів, які використовуються для обчислення K -матриць. Зрозуміло, що, знаючи ρ -матрицю при $\tau_i = 0$: $\rho_{i\alpha}(\tau_i = 0) = K_{i\alpha}$, у принципі можна обчислювати її значення і при ненульових τ_i , комбінуючи розв'язки, визначені граничними умовами (2.27) та (2.28).

2.2.3 Розрахунки зв'язаних станів. Розклад сильного зв'язку (2.3) може дуже точно представляти стани, у яких N електронів є зв'язаними в атомній системі, а один, $(N + 1)$ -й, електрон знаходиться на нескінченності. Вказані стани $(N + 1)$ -електронної системи представляють значний інтерес для теорії електрон-атомних зіткнень. Цей розклад також дуже підходить для представлення станів з одним високоезбудженим електроном та іншими N тісніше зв'язаними електронами. При розрахунку зв'язаних станів атомних систем у наближенні сильного зв'язку, воно називається наближенням замороженого кора (ЗК), а Φ_i^c називаються радше функціями „кора”, ніж функціями „мішені”.

Наша імплементація методу сплайнів відрізняються від попередньої [170] завдяки використанню неортогональних орбіталей як для побудови хвильових функцій мішені (кора), так і для представлення станів зовнішнього електрона. Це забезпечує велику гнучкість як у виборі хвильових функцій кора, що можуть бути оптимізовані для кожного атомного стану окремо, так і для включення у розклад (2.3) різних кореляційних поправок. Так, наприклад, кор-корова кореляція може бути врахована за допомогою використання обширних багатоконфігураційних станів мішені. Кор-валентну кореляцію можна враховувати шляхом включення в розклад сильного зв'язку або ж великого набору збуджених станів мішені, або ж додаткових $(N + 1)$ -електронних станів, спеціально згенерованих для цієї мети. Збіжність розкладу сильного зв'язку може виявитися при цьому дуже повільною і, отже, перше наближен-

ня може стати вельми часозатратним. У той же час, наші дослідження показують, що цей метод забезпечує найбільш точний опис кор-поляризаційного потенціалу, а згадані додаткові $(N + 1)$ -електронні члени в (2.3) доцільно використовувати тільки для врахування короткодійної кореляції.

Метод ЗК має кілька важливих переваг. Він може бути легко поширений на високозбуджені стани. Багатоканальна форма (2.3) дозволяє враховувати явно як взаємодію різних рідбергівських серій між собою, так і їх взаємодію зі збуреннями, що можуть бути представлені у другій частині розкладу (2.3). Енергії і хвильові функції можуть бути ефективно обчислені з високою точністю, порівнянню з отримуваною в рамках найкращих альтернативних методів. Зазначимо також, що один і той же розклад (2.3) може бути використаний як для задач розсіювання, так і для ЗК-розрахунків зв'язаних станів. Ця обставина є вельми важливою для коректної постановки задачі про іонізацію атома електронним ударом (див. [188]). Крім того, порівняння розрахованих енергій зв'язаних станів з експериментальними енергіями може слугувати для перевірки необхідної точності розрахунків процесів зіткнення.

Перейдемо до розгляду ЗК-методу у поєднанні з B -сплайновими розкладами. Вибір B -сплайнів у якості базисних функцій має ряд переваг. Повнота B -сплайнового базису гарантує, що, в принципі, можуть вивчатися повні серії Рідберга. Кількість фізичних станів, отримуваних в одній діагоналізації визначається радіусом боксу a , який у B -сплайновому представленні може легко змінюватися. Тому для зв'язаних станів найбільш придатною є експоненціальна сітка вузлів, яка дозволяє використовувати великий радіус з відносно невеликою кількістю B -сплайнів.

За допомогою B -сплайнового ЗК-методу можуть бути отримані числові результати високої точності для рідбергівських серій. У цьому випадку хвильові функції зовнішніх електронів безпосередньо розкладаються за B -сплайнами в деякій скінченній області $r \leq a$, з достатньо великим значенням a . Шляхом видалення з розкладу першого і останнього сплайнів, тобто

єдиних сплайнів з відмінними від нуля значеннями на границі, накладаються відповідні граничні умови. Де-факто видаляється також передостанній сплайн, щоб отримати нульову похідну на границі для всіх зв'язаних розв'язків.

Хвильові функції в обговорюваному методі отримуються *для всіх радіусів і для всіх розглянутих рідбергівських станів*. Тут немає необхідності отримувати асимптотичний розв'язок і приводити його до вигляду, що відповідав би розв'язку у внутрішній області, як у розглянутому вище R -матричному методі. Це значно спрощує розрахунки і відповідні комп'ютерні коди.

2.2.4 Застосування псевдостанів. Під псевдоорбіталями будемо розуміти орбіталі, порядок генерування яких має певні відмінності від стандартної хартрі-фоківської процедури розрахунку фізичних орбіталей (див. нижче). Стани мішені, побудовані хоча би з однією із таких псевдоорбіталей у домінуючій конфігурації, прийнято називати псевдостанами. Псевдоорбіталі можуть бути використані для відтворення як залежності від терму фізичних орбіталей, так і зв'язку з іонізаційним континуумом. Розглянемо, наприклад, орбіталі $1s, 2s, 2p, 3s$ для атома фтору у трьох станах: $1s^2 2s^2 2p^5 {}^2P^o$, $2p^4 ({}^3P) 3s {}^4P$ та $2p^4 ({}^3P) 3s {}^2P$. Орбіталі $1s, 2s$ будемо вважати замороженими, а $2p, 3s$ – розмороженими. Тоді незалежні хартрі-фоківські розрахунки приводять до різних $2p$ і $3s$ -одноелектронних орбіталей для різних станів. Однак, якщо обчислювальний процес обмежений одним набором одноелектронних орбіталей, то точність *одночасного* опису всіх цих станів може бути покращена шляхом уведення, наприклад, псевдоорбіталі $\bar{7}s$. Ця орбіталь оптимізується на основі критеріїв, деталі яких залежать від вибраного набору $2p$ і $3s$ -орбіталей і статистичних ваг, приписуваних різним станам. В результаті $\bar{7}s$ орбіталь може мати набагато менший радіус, ніж фізична $7s$ орбіталь і, отже, її називають псевдоорбіталлю. За її допомогою можуть бути побудовані додаткові стани, такі як $2p^4 ({}^3P) \bar{7}s {}^{4,2}P$. Ці псевдостани мають нефізичні

пороги, внаслідок чого повинні оброблятися з обережністю. Для досягнення необхідної точності можуть стати необхідними і багато інших таких псевдоорбіталей. В іншому підході потрібна точність досягається шляхом індивідуальної оптимізації орбіталей для кожного цікавого для нас стану.

Частина цих псевдостанів, які розміщені вище порогу іонізації, може бути використана для імітації іонізаційного континууму. Такий підхід дістав серйозне підтвердження у методі збіжного сильного зв'язку [189–191]. Для генерування одноелектронних псевдоорбіталей може використовуватися базис Лагера, функції Штурма чи безпосередньо R -матричні базисні функції [190, 192, 193]. Частина станів з енергією нижчою від порогу іонізації апроксимує ефекти високорозташованих рідбергівських станів. Стани з енергією вище порогу моделюють іонізаційний континуум (неперервний спектр). Основна ідея завжди однакова: гамільтоніан мішені діагоналізується в базисі скінченного діапазону, будь то бокс з жорсткою стінкою, подібно до R -матричного радіусу, або з м'якою стінкою, як у базисах Лагера чи Штурма.

2.2.5 Іонізація електронним ударом. Іонізацію атома електронним ударом схематично записуються як

$$e_0(\mathbf{k}_0\mu_0) + A(L_0S_0) \rightarrow e_1(\mathbf{k}_1\mu_1) + e_2(\mathbf{k}_2\mu_2) + A^+(L_fS_f), \quad (2.30)$$

де \mathbf{k}_i та μ_i ($i = 0, 1, 2$) – лінійні імпульсні та спінові компоненти налітаючого, розсіяного і вибитого електронів, відповідно. L_0, S_0 і L_f, S_f – орбітальні і спінові моменти початкового $(N + 1)$ -електронного атома і, відповідно, залишкового N -електронного іона.

Для повного опису цього процесу нам потрібні амплітуди іонізації

$$f(L_0M_0S_0M_{S_0}, \mathbf{k}_0\mu_0 \rightarrow L_fM_fS_fM_{S_f}, \mathbf{k}_1\mu_1, \mathbf{k}_2\mu_2), \quad (2.31)$$

де введено магнітні квантові числа атомного (M_0) та іонного (M_f) орбітальних кутових моментів, а також відповідні компоненти спіна M_{S_0} і M_{S_f} .

У наближені БСР розрахунки іонізації здійснюється наступним чином. Для даної енергії налітаючого електрона визначаються амплітуди розсіяння для збудження всіх енергетично дозволених атомних псевдостанів $\Phi^p(nln'l', LS)$ у вигляді

$$\begin{aligned}
 f^p(L_0 M_0 S_0 M_{S_0}, \mathbf{k}_0 \mu_0 \rightarrow L M S M_S, \mathbf{k}_1 \mu_1) = \\
 = \sqrt{\frac{\pi}{k_0 k_1}} \sum_{l_0, l_1, L_T, S_T, \Pi_T, M_{L_T}, M_{S_T}} i^{(l_0 - l_1)} \sqrt{(2l_0 + 1)} \\
 \times (L_0 M_0, l_0 0 | L_T M_{L_T}) (L M, l_1 m_1 | L_T M_{L_T}) \\
 \times (S_0 M_{S_0}, \frac{1}{2} \mu_0 | S_T M_{S_T}) (S M_S, \frac{1}{2} \mu_1 | S_T M_{S_T}) \\
 \times T_{l_0 l_1}^{L_T S_T \Pi_T}(\alpha_0 L_0 S_0 \rightarrow \alpha L S) Y_{l_1 m_1}(\theta_1, \varphi_1),
 \end{aligned} \tag{2.32}$$

де $T_{l_0 l_1}^{L_T S_T \Pi_T}(\alpha_0 L_0 S_0 \rightarrow \alpha_1 L_1 S_1)$ є елементом T -матриці для даного повного орбітального моменту L_T , повного спіну S_T і парності Π_T для $(N + 2)$ -електронної системи. Вибір z осі вздовж напрямку падаючого пучка спрощує формулу, бо $m_0 = 0$.

Тоді отримуємо амплітуду іонізації (2.31) за допомогою виразу

$$\begin{aligned}
 f(L_0 M_0 S_0 M_{S_0}, \mathbf{k}_0 \mu_0 \rightarrow L_f M_f S_f M_{S_f}, \mathbf{k}_1 \mu_1, \mathbf{k}_2 \mu_2) \\
 = \sum_p \langle \Psi_{L_f M_f S_f M_{S_f}}^{\mathbf{k}_2 \mu_2(-)} | \Phi^p(nln'l', LS) \rangle \\
 \times f^p(L_0 M_0 S_0 M_{S_0}, \mathbf{k}_0 \mu_0 \rightarrow L M S M_S, \mathbf{k}_1 \mu_1).
 \end{aligned} \tag{2.33}$$

Це вимагає визначення коефіцієнтів перекриття $\langle \Psi_{LS}^{f, \mathbf{k}_2(-)} | \Phi^p(nln'l', LS) \rangle$ між істинно континуальними станами і відповідними псевдостанами. Стани континууму $\Psi_{L M S M_S}^{L_f M_f S_f M_{S_f}, \mathbf{k}_2(-)}$ отримуються з використанням R -матричного методу з тим же розкладом сильного зв'язку, що використовується і для псевдостанів. В обчислювальному плані єдиною відмінністю є використання R -матричних граничних умов шляхом додавання відповідного оператора Блоха. Як розв'язок з псевдостанами, так і континуальний розв'язок у B -сплайновому базисі можуть розглядатися як вектори b_p та b_c , довжина яких залежить від числа відкритих каналів.

Обчислювальною перевагою даного підходу є те, що необхідні множники перекриття отримуються простим способом, як $\langle \mathbf{b}_p | \mathbf{S} | \mathbf{b}_c \rangle$, використовуючи вже розраховані матриці перекриття. Звернемо увагу, що одноелектронний псевдостан і континуальні орбіталі є неортогональними. Техніка неортогональних орбіталей приймає цю неортогональність до уваги у повному обсязі. Для того, щоб отримати необхідні розв'язки з граничними умовами вхідної хвилі, R -матричні розв'язки перенормовуються шляхом множення на матрицю $[1 + i\mathbf{K}]^{-1}$.

2.3 Сплайн-алгоритми розв'язування диференціальних та інтегро-диференціальних рівнянь

Одним з ключових моментів пропонованої версії R -матричного методу є вибір B -сплайнів як базисних функцій для представлення радіальних частин як зв'язаних орбіталей мішені, так і орбіталей розсіяного електрона. У порівнянні з класичним апаратом наближення многочленами сплайни володіють принаймні двома основними перевагами: сплайни мають кращі апроксимаційні властивості, а алгоритми, ґрунтовані на сплайн-апроксимації, відрізняються простотою, гнучкістю та зручністю реалізації на комп'ютерах. Використовуючи їх, вдається оптимальним чином поєднати задовільний порядок апроксимації шуканих розв'язків з мінімальною кількістю числових операцій.

Основні означення. Нехай на відрізку $a \leq r \leq b$ задана деяка нерівномірна сітка вузлів: $\omega_t : a = t_0 < t_1 < \dots < t_n = b$. Одновимірна сітка, всі кроки якої $h_i = t_{i+1} - t_i$, $i = 0, 1, \dots, n-1$ однакові, називається рівномірною, або регулярною. Уведемо також розширену сітку

$$\Omega_t : t_{-k} < t_{-k+1} < \dots < t_0 < \dots < t_n < t_{n+1} < \dots < t_{n+k}$$

з додатковими вузлами t_i і номерами $i < 0$ та $i > n$. Якщо за додаткові вузли добирати $t = a$ та $t = b$, то кінцеві точки відрізка $[a, b]$ стають вузлами кратності k . B -сплайни порядку k на цій сітці вузлів визначаються за допомогою

рекурентних співвідношень

$$B_i^1 = \begin{cases} 1, & r \in [t_i, t_{i+1}], \\ 0, & r \notin [t_i, t_{i+1}] \end{cases} \quad (2.34a)$$

та

$$B_i^k(r) = \frac{r - t_i}{t_{i+k-1} - t_i} B_i^{k-1}(r) - \frac{t_{i+k} - r}{t_{i+k} - t_{i+1}} B_{i+1}^{k-1}(r). \quad (2.34б)$$

Оскільки k та t_i зазвичай фіксовані, ми будемо позначати B -сплайни одним індексом, B_i . Базисний сплайн B_i , який „починається” в i -вому вузлі сітки, визначений на інтервалі $[t_i, t_{i+k}]$, що містить $k+1$ послідовних вузлів. Значення сплайнів B_i та їх похідних у вузлах сітки називають вузловими значеннями.

Наведемо деякі основні властивості базисних сплайнів:

- Базисні сплайни B_i – фінитні функції з компактними носіями, які відмінні від нуля тільки на своїх інтервалах-носіях $[t_i, t_{i+k}]$, $i = 0, 1, \dots, n-1$. Тут і далі діапазон зміни індексу i вибраний так, щоб охопити усі B -сплайни, в яких хоча б один ненульовий підінтервал належить відрізка $[a, b]$.
- Кожний сплайн B_i та всі його похідні дорівнюють нулю зовні інтервалу-носія $[t_i, t_{i+k}]$: $B_i(r) = 0$ при $r \leq t_i$ або $r \geq t_{i+k}$.
- На кожному підінтервалі $[t_i, t_{i+k}]$ точно k базисних сплайнів не дорівнюють нулю: $B_j(r) \neq 0$ при $j = i - k + 1, \dots, i$. Тобто, при $|i - j| \geq k$ всі добутки $B_i(r) \cdot B_j(r) = 0$.
- У розклад довільної функції $f(r) = \sum_{j=1}^n c_j B_j(r) = \sum_{j=i-k+1}^i c_j B_j(r)$ для $r \in [t_i, t_{i+1}]$ внесок дають тільки k членів. Отже, B -сплайнове представлення для різних операторів буде мати стрічкову структуру, що спрощує в значній мірі розв’язування відповідних матричних рівнянь.
- Система усіх базисних сплайнів $B_i(r)$, $j = 1, 2, \dots, n+k$ володіє властивістю $\sum_{i=1} B_i(r) = 1$, $r \in [a, b]$, тобто утворює повний базис на скінченному інтервалі $[a, b]$, покритому нерегулярною сіткою вузлів ω_t . Оскільки B -сплайни невід’ємні з мінімальним носієм, коефіцієнти розкладу c_j довільної функції

$f(r)$ близькі до значень функції у вузлах. Сформульовані властивості повноти, локальності та стійкості базисних сплайнів мають велике значення для практичних застосувань.

- B -сплайни задовольняють рекурентним співвідношенням (2.34б). Разом з означенням B -сплайна порядку $k = 1$, це забезпечує простий алгоритм для їх практичного обчислення. Похідна B -сплайна порядку k може також бути представлена як лінійна комбінація B -сплайнів порядку $(k - 1)$:

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

- У лівому кінці інтервалу $[a, b]$ не дорівнює нулю лише перший B_1 -сплайн, тоді як усі інші B_i -сплайни мають $(r - a)^{i-1}$ -залежність. Подібна поведінка має місце і в правій кінцевій точці b . Це суттєво спрощує постановку граничних умов у кінцевих точках a і b . Наприклад, умову $f(a) = 0$ можна задовольнити вилученням першого B_1 -сплайна із системи базисних сплайнів $\{B_i\}$.

- З мінімальною кратністю вузлів B_i^k -сплайн-функції належать класу функцій C^{k-2} , тобто вони є неперервними функціями разом зі своїми похідними аж до $k-2$ порядку включно. У кожному підінтервалі $[t_i, t_{i+1}]$ B -сплайни можуть бути представлені поліномами порядку k (максимального степеня $k - 1$). Це дозволяє використовувати пакети символічних обчислень для аналітичних маніпуляцій з B -сплайновими функціями.

У квантовомеханічних застосуваннях найчастіше доводиться мати справу з матричними елементами, тобто визначеними інтегралами, що включають B -сплайни та їхні похідні. Для їх обчислення з машинною точністю можна використовувати метод квадратур Гаусса-Лежандра відповідного порядку на кожному підінтервалі $[t_i, t_{i+1}]$. Нагадаємо, що числове інтегрування методом Гаусса-Лежандра порядку n (n точок) є точним для поліноміального підінтегрального виразу порядку $2n$. Це означає, що n точок квадратури Гаусса-Лежандра дозволяють точно проінтегрувати добуток $B_i \cdot B_j$ і забезпечують

надійний результат навіть для не поліноміального підінтегрального виразу.

Перейдемо тепер до основного завдання цього підрозділу – до розв’язування радіального рівняння Шредінгера. Для демонстрації можливостей сплайн-алгоритмів розв’язування такого рівняння, розглянемо одновимірне рівняння

$$\left[-\frac{d^2}{2dr^2} + \frac{l(l+1)}{2r^2} + V(r) \right] u_{nl}(r) = E_{nl} u_{nl}(r). \quad (2.36)$$

Розв’язок цього рівняння задовольняє при $r = 0$ та $r = \infty$ певним умовам, які прийнято називати фізичними граничними умовами. Числове розв’язання рівняння (2.36) можливе лише при скінченних значеннях радіуса $r = \infty$. Тому далі і рівняння (2.36), і граничні умови розглядаються на скінченному інтервалі $[0, r_{max}]$. Представимо розв’язок рівняння (2.36) на $[0, r_{max}]$ у вигляді лінійної комбінації базисних сплайнів $B_i(r)$, $i = 1, 2, \dots, n_s$:

$$u_{nl}(r) = \sum_{i=1}^{n_s} c_i^{nl} B_i(r). \quad (2.37)$$

Тут ми вважаємо, що сітка, яка визначає сплайн-апроксимацію розв’язку (2.36), має на інтервалі $[0, r_{max}]$ n_s вузлів. Якщо при генеруванні B -сплайнового базису використовується сітка з кратними вузлами у кінцевих точках інтервалу $[0, r_{max}]$, то нульові граничні умови можна, наприклад, задовольнити видаленням першого і останнього B -сплайнів із базисного набору $\{B_i(r), i = 1, 2, \dots, n_s\}$. Позначимо через $\vec{c} = \{c_i^{nl}\}$ вектор-стовпець, складений із невідомих коефіцієнтів c_i^{nl} сплайн-апроксимації (2.37) шуканого розв’язку $u_{nl}(r)$. Рівняння (2.36) після переходу до B -сплайнового представлення (підстановки (2.37) в (2.36) і проєкціювання на $B_j(r)$) можна записати у матричному вигляді:

$$\vec{H} \cdot \vec{c} = E \vec{S} \cdot \vec{c}. \quad (2.38)$$

Тут E – шукане власне значення, а

$$H_{ij} = -\frac{1}{2} \langle B_i | \frac{d^2}{dr^2} | B_j \rangle + \frac{l(l+1)}{2} \langle B_i | \frac{1}{r^2} | B_j \rangle + \langle B_i | V | B_j \rangle, \quad (2.39)$$

$$S_{ij} = \langle B_i | B_j \rangle. \quad (2.40)$$

Зазначимо, що матриця перекриття \vec{S} не є діагональною (чи одиничною) внаслідок того, що B -сплайни не утворюють ортогональний набір базисних функцій. Радіальна частина (вираз у квадратних дужках в (2.36)) оператора Гамільтона реалізується у B -сплайновому представленні як дійсна квадратна матриця рангу n_s з елементами H_{ij} (2.39). Система (2.38) називається дискретним аналогом узагальненої задачі на власні функції та власні значення. З усіх дискретних аналогів оптимальним є той, у якого число вузлів сітки, шуканих коефіцієнтів ненульових елементів та розмірність матриць \vec{H} і \vec{S} мінімальні.

Як уже зазначалося вище, всі матричні елементи в системі (2.38) можна обчислити з машинною точністю методом числового інтегрування Гаусса-Лежандра на кожному підінтервалі. Інші ключові властивості системи (2.38), що пов'язані з використанням B -сплайнового базису, випливають з того факту, що B -сплайни B_i порядку k відмінні від нуля тільки на своїх інтервалах-носіях $[t_i, t_{i+1}]$, що включають k послідовних підінтервалів. Оскільки при $|i - j| \geq 2k - 1$ всі матричні елементи H_{ij} та S_{ij} дорівнюють нулю, то відповідні їм матриці \vec{H} та \vec{S} – блочно-діагональні, тобто стрічкові з шириною стрічки $2k - 1$. Це суттєво спрощує розв'язання узагальненої задачі (2.38) на власні значення енергії.

Коротко обговоримо деякі питання, які виникають при розв'язуванні інтегро-диференціальних рівнянь (2.8) задачі розсіяння. У B -сплайновому представленні ці рівняння після їх дискретизації у внутрішній R -матричній області $r < a$ зводяться до системи алгебраїчних рівнянь зі стрічковими блочно-діагональними матрицями. Саме розрідженість матриць алгебраїчної задачі у поєднанні зі зручною постановкою граничних умов у термінах базисних сплайнів забезпечує ефективність практичного застосування сплайн-алгоритмів до розв'язання задачі розсіяння.

2.4 Багатоконфігураційний метод Хартрі-Фока з B -сплайнами. Врахування електронних кореляцій

2.4.1 Метод БКХФ з B -сплайнами. У наближенні Хартрі-Фока припускається, що кожен електрон рухається незалежно в деякому середньому самоузгодженому полі. Насправді ж електрони взаємодіють один з одним і безпосередньо, що відображається на їх хвильовій функції, а отже, і на хвильовій функції атома. Зміна електронних хвильових функцій унаслідок відхилення руху електронів від незалежного прийнято називати кореляційними поправками.

Кореляційні ефекти в атомах відіграють важливу роль. Урахування електронної кореляції приводить до значного покращення узгодження з експериментом при обчисленні рівнів енергії, ймовірностей переходів та інших атомних характеристик. Крім того, деякі ефекти, такі, наприклад, як двоелектронні переходи, взагалі не можуть бути описані у рамках наближення Хартрі-Фока.

У звичайному одноконфігураційному підході вважається, що усі електрони в оболонці l^N описуються однією й тією ж радіальною орбіталлю $P_{nl}(r)$. У так званому розширеному методі Хартрі-Фока [89, 194, 195] кожен електрон в оболонці еквівалентних електронів l^N описується окремою (тобто відмінною від інших) хвильовою функцією. Оскільки така процедура стосується тільки радіальних функцій, весь розвинутий математичний апарат незвідних тензорних операторів та генеалогічних коефіцієнтів застосовний і у цьому випадку. Розроблені порівняно прості методи отримання виразів для матричних елементів операторів електростатичної взаємодії дозволяють застосовувати цей метод і до атомів та іонів, що мають незаповнені p -, d - і навіть f -оболонки. Проте він дозволяє враховувати лише так звані радіальні кореляції, оскільки уточненню підлягають тільки радіальні орбіталі. Відмова від одноконфігураційного наближення – один з основних способів урахування кореляційних

ефектів.

Метод, в якому кореляційні поправки враховуються шляхом додавання до вихідної хартрі-фоківської функції інших функцій, що відповідають збудженим станам, отримав назву метода змішування конфігурацій. Хвильова функція атома представляється при цьому у вигляді

$$\Psi(q) = \sum_{j=1}^{j_{\max}} C_j \Phi_j(q), \quad (2.41)$$

де $q = \{q_1, q_2, \dots, q_N\}$, Φ_j – слетерівські детермінанти, які відповідають різним (основній і поправковим) електронним конфігураціям N -електронного атома. Через q_i позначена сукупність радіус-вектора \vec{r}_i та спінової змінної σ_i i -го електрона. Коефіцієнти розкладу C_j визначаються з варіаційного принципу з додатковими умовами ортогональності у випадку збуджених станів. Одноелектронні функції, з яких будуються детермінанти Φ_j вважаються відомими (наприклад, із розв'язків рівнянь Хартрі-Фока). Хоча метод накладання конфігурацій є у принципі точним, однак на практиці його основним недоліком є слабка збіжність. Крім того, заздалегідь невідомо, які саме конфігурації, крім основної, слід врахувати у розкладі (2.41).

Останнім часом при розрахунках властивостей атомної структури та характеристик розсіяння з успіхом застосовується багатоконфігураційний метод Хартрі-Фока (БКХФ-метод). Цей метод є на сьогодні найбільш послідовним з точки зору коректності врахування обмінних та кореляційних ефектів. У БКХФ-методі хвильова функція $\Psi(q)$ N -електронного атома із зарядом ядра Z записується у вигляді лінійної комбінації (2.41) скінченного числа багатоелектронних функцій конфігураційних станів із заданими повним орбітальним L_j і повним спіновим S_j моментами. Кожний базисний ФКС-стан $\Phi_j(q)$ відповідає певній електронній конфігурації $K_j \equiv [(n_1 l_1)^{w_1} \dots (n_\nu l_\nu)^{w_\nu}]_j$ з числом оболонок ν та числом електронів w_i на i -ій оболонці, $\sum_{i=1}^{\nu} w_i = N$, і

зображається у вигляді лінійної комбінації слетерівських детермінантів

$$\Phi_j(q) = \sum_{k=1}^{K_j} A_k^j |\det \alpha_1^{k,j} \dots \alpha_N^{k,j}\rangle. \quad (2.42)$$

Для детермінанта Слетера тут використано позначення

$$|\det \alpha_1 \dots \alpha_N\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\tau} \varepsilon_{\tau} \prod_{i=1}^N \varphi_{\alpha_{\tau i}}(q_i). \quad (2.43)$$

Підсумовування в (2.43) ведеться за всіма можливими перестановками τ , а ε_{τ} дорівнює $+1$ для парної перестановки координат електронів $i - 1$ для не-парної. Одноелектронні атомні орбіталі $\varphi_{\alpha}(q)$ визначаються виразом (2.6), а квантовомеханічний індекс α у позначеннях Дірака записується у вигляді $|\alpha\rangle = |nlmm_s\rangle$, де n, l та m – відповідно головне, азимутальне та магнітне квантові числа, а m_s – проекція спіна.

Успіх будь-якого практичного розрахунку атомних констант сильно залежить від вибору радіальних орбіталей $P_{nl}(r)$ та конфігурацій, включених у розклад (2.41). Тому перший і неминучий етап реалізації БКХФ-методу – побудова багатеелектронного ФКС-базису Φ_j (2.42). У свою чергу, задача побудови ФКС-базису складається із задачі вибору електронних конфігурацій і для кожної конфігурації – задачі про додавання орбітальних і спінових моментів, яка, зазвичай, розв'язується за допомогою техніки генеалогічних коефіцієнтів, розробленої Рака [196]. Що стосується першої задачі – підбору конфігурацій, то спочатку визначають оптимальний вигляд незбудженого слетерівського детермінанту Φ_1 , що відповідає основній конфігурації (з $j = 1$). Потім генерують детермінанти, що відповідають збудженим станам Φ_j (з $j \neq 1$), і використовують їх для розрахунку матричних елементів $H_{ij} = \int \Phi_i^* H_N \Phi_j dq$, де H_N – повний гамільтоніан N -електронного атома. Після цього за допомогою самоузгодженої ітераційної БКХФ-процедури [57, 132] визначають невідомі коефіцієнти C_j у розкладі (2.41).

Для найбільш повного урахування електронних кореляцій у БКХФ-розклад (2.41) необхідно включати слетерівські детермінанти усіх можливих еле-

ктронних конфігурацій системи: від однократно до N -кратно збуджених. Такий підхід є найбільш прямим втіленням ідеї про багатодетермінантне представлення хвильової функції атомної системи. Однак у цьому випадку БКХФ-метод оперує з астрономічною кількістю детермінантів, що вимагає непомірних комп'ютерних ресурсів і практично застосовний хіба що до малоелектронних атомних систем. Так, наприклад, для конфігурації $n_1s^1n_2p^2n_3d^3n_4f^4$ сума (2.42) складається з 90328 детермінантів для $M_{L_j} = 0$, $M_{S_j} = 0$ та $\pi_j = 0$. Як уже зазначалося, найбільшу частину енергії кореляції електронів складають парні кореляції. Тому в практичних розрахунках, як правило, використовують спрощений варіант БКХФ-методу, який у багатодетермінантних розкладах одночасно враховує лише одно- та двократно збуджені електронні конфігурації. Такий підхід, як показують конкретні розрахунки [195], дає змогу врахувати значну частину (до 95%) кореляційних ефектів.

На наступному етапі реалізації БКХФ-методу доводиться розв'язувати систему інтегро-диференціальних рівнянь Хартрі-Фока для радіальних частин P_{nl} одноелектронних хвильових функцій φ_α , що входять до складу слетерівських детермінантів. Досягнута при цьому точність обумовлює точність усіх подальших обчислень. Застосування техніки скінченно-різницевої схем не може гарантувати у загальному випадку збіжності розв'язку на окремому кроці ітераційного БКХФ-процесу, а в окремих випадках приводить до появи нестійкості при чисельному інтегруванні рівнянь. Навіть при найпростішій дискретизації, що полягає в апроксимації інтегралів квадратурними сумами Гауса, система інтегро-диференціальних рівнянь Хартрі-Фока зводиться до системи алгебраїчних рівнянь з нерозрідженими матрицями великої розмірності. Досягнення задовільної точності при чисельному обертанні таких матриць – вельми складна проблема [57, 132].

У дисертаційній роботі для розв'язання багатоконфігураційних рівнянь Хартрі-Фока використовується оригінальний і перспективний метод B -сплайнів [21], в основі якого лежить концепція „стиснутого атома”, тобто система

граничних умов у задачі на зв'язані стани припускає обертання в нуль хвильової функції електрона на відстанях порядку кількох десятків розмірів атома a_0 . Тому далі система інтегро-диференціальних рівнянь Хартрі-Фока та граничні умови розглядаються в деякій обмеженій області $r \leq na_0$ конфігураційного простору. При цьому радіальні хвильові функції $P_{nl}(r)$ представляються у вигляді скінченного розкладу

$$P_{nl}(r) = \sum_{i=1}^{n_S} c_i^{nl} B_i(r) \quad (2.44)$$

за повним неортогональним базисним набором B -сплайнів $\{B_i\}_{i=1}^{n_S}$. Після підстановки (2.44) в інтегро-диференціальне рівняння Хартрі-Фока та проєкціювання на B -сплайновий базис B_i воно зводиться до скінченної системи нелінійних алгебраїчних рівнянь для невідомих коефіцієнтів c_i^{nl} :

$$\mathbf{F}\mathbf{c}_n = \varepsilon_n \mathbf{S}\mathbf{c}_n. \quad (2.45)$$

Тут \mathbf{F} та \mathbf{S} – квадратні матриці порядку $n_S \times n_S$ на базисних сплайнах B_i , \mathbf{F} – матриця оператора Фока \hat{F} [57], \mathbf{S} – матриця інтегралів перекриття $\langle B_i | B_j \rangle$, а \mathbf{c}_n – матриця-стовпець шуканих коефіцієнтів c_i^{nl} . Матриця \mathbf{F} залежить квадратично від коефіцієнтів c_i^{nl} , так що (2.45) представляє собою систему алгебраїчних рівнянь третього степеня за невідомими коефіцієнтами. Цю систему рівнянь можна чисельно розв'язувати методом ітерації (послідовних наближень) до повної самоузгодженості [133]. Оскільки коефіцієнти $c_i^{n'l'}$ розкладу кожної орбіталі $P_{n'l'}(n'l' \neq nl)$ у свою чергу визначаються системою нелінійних рівнянь типу (2.45), то ми маємо в дійсності сукупність зв'язаних систем матрично-векторних рівнянь скінченного рангу, розв'язок яких дає нам набір шуканих радіальних функцій $P_{nl}(r)$ з різними nl , які відповідають певній електронній конфігурації K_j із заданими повним орбітальним L_j та повним спіновим S_j моментами.

Описаний вище алгоритм дискретизації системи інтегро-диференціальних рівнянь Хартрі-Фока у B -сплайновому базисі має дві принципові перева-

ги 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 цим властивостям система інтегро-диференціальних рівнянь Хартрі-Фока зводиться до системи матрично-векторних алгебраїчних рівнянь скінченного рангу зі стрічковою матрицею. Саме розрідженість матриці алгебраїчної задачі у поєднанні зі зручною постановкою граничних умов у B -сплайновому базисі обумовлює ефективність чисельних методів розв'язування рівнянь типу (2.45). У працях О. Зацарінного та Ш. Фрозе Фішер [21, 132, 133, 197] розроблено універсальний метод розв'язування матрично-векторних рівнянь (2.45) для складних атомів у B -сплайновому базисі з довільним числом орбіталей.

У літературі розглядалися й інші можливості вибору базисних функцій для розв'язування багатоконфігураційних рівнянь Хартрі-Фока. Так, наприклад, у праці [198] використовувалося аналітичне представлення радіальних $P_{nl}(r)$ у вигляді скінченного розкладу за ортонормованим базисом із многочленів Чебишева-Лагерра. Суттєвим недоліком при використанні цих базисних функцій є те, що не вдається у простому замкненому вигляді обчислити радіальні інтеграли прямої і обмінної взаємодії між оболонками. До недоліків цього методу слід віднести і той факт, що у випадку складних конфігурацій виникає необхідність працювати з нерозрідженими матрицями великої розмірності. Одним із ключових моментів нашого підходу до розв'язування багатоконфігураційних рівнянь Хартрі-Фока є більш вдалий вибір системи базисних функцій $\{B_i\}_{i=1}^{n_s}$, які володіють чудовими апроксимаційними властивостями. Накопичується все більше вказівок (див., наприклад, огляд [55]) на те, що B -сплайновий базис краще підходить навіть у тому випадку, коли розглядаються високозбуджені рідбергівські стани атомів. Завдяки повноті системи базисних сплайнів $\{B_i\}_{i=1}^{n_s}$ компактні сплайн-представлення (2.44) радіальних функцій $P_{nl}(r)$ є зручним засобом дослідження цілих рідбергів-

ських серій. Очевидно, що для таких серій при реалізації запропонованої в праці [198] чисельної схеми БКХФ-методу доводиться оперувати з надмірно великою кількістю лінійно незалежних аналітичних базисних функцій, що суттєво утруднює обчислення з прийнятною точністю.

Одним з критеріїв ефективності методу B -сплайнів є число базисних функцій $B_i(r)$, необхідних для представлення (2.44) орбіталей $P_{nl}(r)$ на скінченному радіальному інтервалі $0 \leq r \leq a$. Досвід показує, що прийнятну точність остаточного розв'язку можна досягнути відносно невеликим числом базисних сплайнів $B_i(r)$, якщо використовувати експоненціальну сітку вузлів. Так, наприклад, для рідбергівських станів нейтральних атомів з $n = 10$ сума (2.44) буде включати всього 45 B -сплайнів B_i , які утворюють на доволі широкому R -матричному відрізку $0 \leq r \leq 300$ а. о. повну систему базисних функцій.

Зупинимося коротко на проблемі ортогональності одноелектронних хвильових функцій:

$$\int \varphi_{\alpha_i}^*(x) \varphi_{\alpha_j}(x) dx = \delta_{\alpha_i, \alpha_j}. \quad (2.46)$$

Тут квантовий індекс α_i , як і α_j , є набором квантовомеханічних величин, а символ Кронекера в правій частині рівності (2.45) є добутком символів Кронекера. Для збуджених станів атома, які володіють іншою симетрією у порівнянні з основним станом, умова (2.46) не є обмеженням загальності. Дійсно, у цьому випадку хвильова функція збудженого стану атома автоматично ортогональна до хвильової функції основного стану, і умова (2.46) не може порушити цю ортогональність. У випадку ж збуджених станів, що мають ту ж симетрію, що й основний стан, це уже не так. Класичним прикладом тут є збуджений синглетний стан гелію в конфігурації $K' = 1s2s$. Координатна хвильова функція атома у цій конфігурації має вигляд

$$\Psi'(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = N' \{ \varphi'_{1s}(\vec{r}_1) \varphi_{2s}(\vec{r}_2) + \varphi_{2s}(\vec{r}_1) \varphi'_{1s}(\vec{r}_2) \}, \quad (2.47)$$

де N' – нормувальний множник. Запишемо тепер координатну хвильову функ-

цію основного (також синглетного) стану в конфігурації $K' = 1s^2$:

$$\Psi'(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = N\varphi_{1s}(\vec{r}_1)\varphi_{1s}(\vec{r}_2). \quad (2.48)$$

Одноелектронні хвильові функції $\varphi'_{1s}(\vec{r}_1)$ і $\varphi_{1s}(\vec{r}_1)$ різні, оскільки визначаються з різних систем рівнянь Хартрі-Фока. Тому умова ортогональності повних хвильових функцій Ψ' та Ψ набуває вигляду

$$2NN'\langle\varphi'_{1s}|\varphi_{1s}\rangle\langle\varphi_{2s}|\varphi_{1s}\rangle = 0. \quad (2.49)$$

Остання умова, взагалі кажучи, несумісна з умовою (2.46), котра у даному випадку виглядає як $\langle\varphi_{2s}|\varphi'_{1s}\rangle = 0$. У цій і в подібних ситуаціях слід використовувати рівняння Хартрі-Фока з неортогональними радіальними хвильовими функціями [55].

Викладена вище методика побудови ФКС-базису передбачає незалежне знаходження хвильових функцій окремих конфігураційних станів із заданими повним орбітальним L_j та повним спіновим S_j моментами. Водночас слід зазначити, що вимога ортогональності радіальних орбіталей окремих оболонок у наших розрахунках не є обов'язковою; описаний вище сплайн-алгоритм розв'язування систем інтегро-диференціальних рівнянь Хартрі-Фока застосовний і у випадку неортогональних радіальних орбіталей. Побудовані таким чином радіальні функції $P_{nl}(r)$ однієї й тієї ж оболонки nl будуть різними для різних конфігураційних станів із заданими моментами, і при обчисленні характеристик електронних переходів слід враховувати додаткові інтеграли перекриття.

Використання залежних від терму неортогональних зв'язаних орбіталей дає змогу коректно описувати багатоелектронні ФКС-стани Φ_j . Знайдені в результаті таких обчислень функції конфігураційних станів Φ_j можна використовувати для високоточних розрахунків сил осциляторів, ймовірностей переходів, перерізів і швидкостей різних процесів. Оскільки атомні орбіталі оптимізуються в незалежних розрахунках для індивідуальних термів, відкри-

вається можливість вельми точного розрахунку енергетичних характеристик, використовуючи компактні конфігураційні розклади.

Урахування залежності радіальних орбіталей $P_{nl}(r)$ від терму має ключове значення для коректного кількісного опису електронних переходів між конфігураціями, в яких спостерігається так званий колапс орбіти електрона – різка зміна радіуса квантової орбіти електрона при зміні його стану. Указане явище пояснюється тим, що ефективний потенціал взаємодії налітаючого електрона з деякими атомами має вигляд достатньо глибокої ями з додатним потенціальним бар’єром. При енергії налітаючого електрона, що приблизно дорівнює енергії квазістаціонарного рівня в ямі, відбувається стрибкоподібне зміщення максимуму радіальної хвильової функції електрона у середину атома – електрон колапсує. Це явище обумовлює появу резонансів форми в перерізах розсіювання електронів на атомах. Практичні розрахунки свідчать (див., наприклад, [55]) про сильну чутливість характеристик подібних ефектів навіть до незначних уточнень радіальних хвильових функцій, зокрема, залежності від терму, ефектів неортогональності і т.п..

2.4.2 Методика підбору ФКС-базисів. Отже, під ефектами електронної кореляції зазвичай розуміють поправки до моделей незалежних електронів (орбітальних теорій). Оскільки не існує способу „вмикати” або „вимикати” взаємодії між електронами в атомі, то ефекти електронної кореляції не можуть бути спостережені експериментально: кореляційна енергія являє собою суто теоретичне поняття. Тому різні дослідники можуть розуміти під „кореляційною енергією” об’єктивно зовсім відмінні сутності.

У даній роботі ми будемо дотримуватися трактування цього поняття, даного у праці Браге та Фрозе Фішер [91], де кореляція була визначена як різниця між точними значеннями певних атомних характеристик для окремого нерелятивістського гамільтоніана і хартрі-фоківськими (одноконфігураційними) результатами для того ж оператора Гамільтона. Фізичною інтерпрета-

цією сказаного є динамічна поведінка електронів, які в одноконфігураційній моделі переміщуються незалежно один від одного в усередненому центральному полі. Кореляція відображає той факт, що вони фактично уникають один одного на своїх „орбітах”.

Отже, величина ефекту електронної кореляції визначається як різниця істинного значення деякої спостережуваної величини (наприклад енергії), і значення цієї величини, обчисленого за методом Хартрі-Фока з використанням електронних орбіталей. Таке визначення, як говорилося вище, до певної міри неоднозначне, оскільки розрахунки за методом Хартрі-Фока в різних базисах і при немінучих різноманітних наближеннях дають результати, що значно різняться між собою. Проте при проведенні обчислень поняття про кореляційні ефекти має достатньо визначений операційний сенс, причому ці ефекти піддаються природному якісному тлумаченню.

Метою квантовомеханічних розрахунків є адекватний опис реальних атомних систем: точне теоретичне обчислення будови атомів, їх фізичних властивостей, кількісне передбачення результатів проходження фізичних процесів. Метод Хартрі-Фока, що використовує одноелектронне наближення, вирішує частину цих завдань. Зокрема, для переважної більшості легких атомів теорія добре відтворює їх структуру, зокрема розміщення енергетичних рівнів, дипольний момент і деякі інші властивості. Ряд завдань принципово не може бути вирішеним за допомогою вказаного методу. Зокрема, великі проблеми виникають при розрахунках повної енергії квантової системи.

Головною проблемою наразі є фактичний вибір ФКС для включення в розклад (2.41). При цьому вимагається прийняття двох різних рішень. Насамперед, якусь частину атома потрібно визначити, як зовнішню. Відповідно, інші атомні оболонки будуть вважатися замороженим кором, який зберігається спільним для всіх ФКС. Наприклад, для основного терму фтору, $1s^2 2s^2 2p^5 \ ^2P^o$, хорошою апроксимацією для врахування потрібних властивостей є збереження оболонки $1s^2$ спільною для всіх ФКС і варіювання параме-

трів орбіталей тільки семи зовнішніх електронів. Зроблений вибір визначає, таким чином, спектр ураховуваних кореляцій. У наведеному прикладі включеною є кореляція між зовнішніми електронами, і не враховується жодна кореляція у межах $1s$ -оболонки та між нею і верхніми електронами.

Друге рішення стосується того, як створити розклад для зовнішньої частини атома. Традиційно мають місце дві різні філософії. Першою є наближення управління конфігураціями. Слідуючи йому, ми вибираємо (на підставі досвіду, інтуїції або якихось тестів) ФКС-функції, які об'єднуються у певний набір. При цьому можуть бути використані певні „натяки” і правила, – такі як поняття комплексу [89] або близької виродженості. Деколи вибір ФКС може бути особливо прив'язаний до властивості, яка представляє інтерес. У нашому прикладі для фтору, можливий вибір мав би починатися згідно з

$$\begin{aligned} \Psi(2s^2 2p^5 \ ^2P^o) = c_1 \Phi(2s^2 2p^5 \ ^2P^o) + c_2 \Phi(2s^2 2p^4 ({}^3P) 3p \ ^2P^o) + \\ + c_3 \Phi(2s^2 2p^4 ({}^1D) 3p \ ^2P^o) + c_4 \Phi(2s^2 2p^4 ({}^1S) 3p \ ^2P^o) + \dots \end{aligned} \quad (2.50)$$

Головною проблемою цього способу вибору ФКС є те, що він базується на досвіді і навичках здійснення наукових обчислень. Тому різні люди можуть отримувати відмінні один від одного результати, використовуючи якесь наближення того самого методу.

З описаними методами різко контрастують методи приведених орбіталей. Вони є надзвичайно систематичними і тому можуть точно відтворюватися. В цьому випадку, в основному, знову виділяють два різні підходи. Перший з них, – так званий метод активного набору, – є частинним випадком другого. Згідно з ним генеруються всі можливі ФКС із визначеного активного набору орбіталей з даними L , S та парністю π . Шляхом суттєвого збільшення активного набору отримується систематичне наближення. Наприклад, якщо для основного стану фтору використовуємо в якості активного набору множину

орбіталей $\{2s, 2p, 3s, 3p, 3d\}$, отримуємо всі ФКС із наступною структурою:

$$2s^2 2p^5, 2s^2 2p^4 3p, 2s^2 2p^3 3s^2, 2s^2 2p^3 3s 3d, 2s^2 2p^3 3p^2, 2s^2 2p^3 3d^2, 2s^2 2p^2 3s^2 3p, \\ 2s^2 2p^2 3s 3p 3d, 2s^2 2p^2 3p^3, \dots, 3p^5 3d^2, 3p^3 3d^4, 3p 3d^6,$$

всього 96 конфігурацій, що включають всі можливі зв'язки для кінцевого терму $^2P^o$, які будуть задаватися в цілому 1510-ма ФКС.

Другий тип розрахунків з приведеними орбіталями базується на ідеї заміни орбіталей з реферованого набору ФКС віртуальним набором орбіталей. Це найкраще проілюструвати на прикладі. Так, якщо для основного стану фтору вибрати тільки одно і двократні заміни орбіталей з реферованого набору, який існує для головної ФКС, $2s^2 2p^5 \ ^2P^o$, то до віртуального набору орбіталей $\{2s, 2p, 3s, 3p, 3d\}$ включаються тільки ФКС з наступною структурою:

$$2s^2 2p^5, 2s^2 2p^4 3p, 2s^2 2p^3 3s^2, 2s^2 2p^3 3s 3d, 2s^2 2p^3 3p^2, 2s^2 2p^3 3d^2, 2s 2p^5 3s, \\ 2s 2p^5 3d, 2s 2p^4 3s 3p, \dots, 2p^3 3p^4, 2p^3 3p^2 3d^2, 2p^3 3d^4.$$

При включенні всіх наявних зв'язків для кінцевого терму $^2P^o$, це приведе до 31 конфігурації з 344 можливими ФКС, тобто до суттєвого скорочення конфігураційного розкладу.

Ілюстрація використання різних способів розрахунку ФКС та різних критеріїв точності отримання результатів буде наведена нижче при розрахунку конкретних атомів (Розділ 3-6).

2.5 Висновки до розділу 2

1. Реалізований варіант R -матричного методу вигідно відрізняється від усіх інших відомих на даний час методів теорії розсіювання повільних електронів на складних атомах принаймні двома інноваціями: а) використанням неортогональних орбіталей для представлення радіальних частин одноелектронних хвильових функцій як дискретного, так і неперервного спектрів; б) більш ефективним і зручним R -матричним базисом u_j , заданим повним скінченним набором B -сплайнів з компактними носіями у внутрішній області.

2. Пропонована версія методу R -матриці з B -сплайнами та неортогональними орбіталями є вельми загальною: у неї нема жорстких обмежень на число відкритих чи закритих каналів і на величину взаємодії автоіонізаційних станів з суцільним спектром. Суттєвою перевагою підходу БСР є зменшення числа додаткових кореляційних функцій та псевдоорбіталей, які включаються у розклад повної хвильової функції системи для компенсації обмежень ортогональності орбіталей неперервного спектру всім зв'язаним орбіталям.

3. Використання неортогональних орбіталей та B -сплайнів як базисних функцій дозволяє у значній мірі позбутися багатьох недоліків стандартного методу R -матриці: а) необхідності внесення у діагональні R -матричні елементи поправки Баттла для досягнення швидкої збіжності; б) появи нефізичних псевдорезонансів у перерізах розсіювання, пов'язаних з порогами псевдостанів; в) необхідності включення в розклад повної хвильової функції зіткнення спеціальних додаткових кореляційних функцій, які враховують можливість віртуального захоплення електрона у незаповнені підоболонки мішені.

4. Система усіх B -сплайнів B_i^k ($i = 1, 2, \dots, n+k$) порядку k утворює повний базис на скінченному R -матричному інтервалі $[0, a]$, покритому нерегулярною сіткою з n вузлів. Завдяки повноті та фінитності B -сплайнів інтегродиференціальні рівняння задачі розсіювання зводяться до системи алгебраїчних рівнянь зі стрічковою матрицею, що спрощує числовий аналіз такої системи.

РОЗДІЛ 3

РОЗРАХУНКИ ДИФЕРЕНЦІАЛЬНИХ ТА ІНТЕГРАЛЬНИХ ПЕРЕРІЗІВ РОЗСІЯННЯ ЕЛЕКТРОНІВ НА АТОМІ МАГНІЮ

3.1 Стан дослідження перерізів розсіяння e –Mg

В останній час було опубліковано ряд нових результатів експериментальних вимірювань диференціальних перерізів розсіяння електронів на атомі Mg [172–174, 176–178, 199]. Поряд з більш ранніми роботами [179, 180, 200] вони забезпечують чудову можливість для перевірки дієвості різних сучасних теоретичних методів, які використовуються для розрахунку процесів електрон-атомного зіткнення. Наприклад, Бравн та ін. [172, 173] представили відносні ДП для пружного розсіяння і збудження станів $(3s3p)^1P^o$ та $(3s3p)^3P^o$ при 20 та 40 еВ. Експериментальні дані були порівняні з передбаченнями, отриманими за допомогою методу збіжного сильного зв'язку та методу R -матриці з псевдостаними. Хороше узгодження між експериментом і теорією для кутової залежності ДП, отриманої у цих працях, надає деякої упевненості щодо процедури приведення експериментальних даних до абсолютної шкали шляхом їх нормування на теорію. Вказані розрахунки, поряд з дослідженнями [200] індукованого електронами резонансного переходу $(3s^2)^1S - (3s3p)^1P^o$, до нашого дослідження [1] були єдиними обширними розрахунками зіткнення e –Mg, здійсненими методом сильного зв'язку.

Поряд з тим, більшість наявних вимірювань порівнювалися або з результатами розрахунків у першому порядку теорії збурень [201, 202], або з ранніми моделями методу СЗ [203, 204]. Невеликі СЗ-розклади, що використовувалися в названих роботах, навряд чи спроможні забезпечити надійні результати, за винятком дуже низьких, або достатньо високих енергій, тобто для випадків, коли домінуючий зв'язок виникає тільки між кількома каналами, або ж зв'язок каналів у цілому малий. Дійсно, серйозні розбіжності між експериментом і теорією, наприклад, для збудження вищерозміщених станів, таких

як $(3s4s)^1S$ та $(3s4p)^1P^o$ при 10 і 15 еВ [176], вимагають більш досконалих і детальних теоретичних досліджень розсіяння електронів на Mg.

Більшість попередніх розрахунків не були систематичними і стосувалися окремих вибраних переходів і кількох енергій. Метою ж даної роботи було отримання всеосяжного набору результатів, що покривають по суті всі останні експериментальні дані. Це систематичне порівняння наявних експериментальних і теоретичних результатів дозволяє оцінити точність існуючих даних і знайти можливі джерела розходжень між експериментом і теорією. Дані розрахунки проводилися з використанням розширеної версії *R*-матричного методу з *B*-сплайнами [21], – в якій для представлення функцій континууму в розкладі сильного зв'язку хвильової функції розсіяння використовується *B*-сплайновий базис. Більш ранні застосування цього методу до квазі-двоелектронних атомів, таких як Ca [205] і Zn [206], показали значно краще узгодження між експериментом і теорією порівняно з попередніми наявними розрахунками низькоенергетичного розсіяння. Використання наборів неортогональних орбіталей як для побудови хвильових функцій мішені, так і для представлення функцій розсіяння дозволило отримувати в нашому дослідженні [1] більш точні описи структури мішені, ніж ті, що використовувалися в попередніх розрахунках зіткнення. Зокрема, дані хвильові функції мішені містили як валентну, так і кор-валентну кореляції *ab initio*, шляхом включення багатоконфігураційних розкладів з відкритим кором.

Даний розділ організовано наступним чином. Після схематичного опису структури мішені, розкриваються найбільш важливі аспекти розрахунку зіткнення. Потім слідує представлення диференціальних по куту перерізів пружного розсіяння і збудження станів $(3s3p)^{1,3}P^o$, $(3s3d)^1D$, $(3s4s)^1S$ і $(3s4p)^1P^o$ атома Mg. Представлені і обговорені також інтегровані по куту перерізи для цих станів. Отримані в нашому дослідженні результати порівняні з доступними експериментальними даними і передбаченнями інших теоретичних моделей. Розділ завершується обговоренням наявних відмінностей і

оглядом можливих покращень у майбутніх теоретичних дослідженнях.

3.2 Методика розрахунку процесів розсіяння e –Mg

3.2.1 Розрахунки структури атома Mg. Магній з його конфігурацією основного стану $[1s^2 2s^2 2p^6] (3s^2) ^1S$ і одноразово збудженими станами $[1s^2 2s^2 2p^6] (3snl)^{3,1}L$ багато в чому подібний до гелію, тобто може при певних умовах розглядатися в рамках моделі двох електронів понад іонізованим Ne-подібним $[1s^2 2s^2 2p^6]$ -кором. Для спрощення позначень, замкнуті оболонки нижче будуть опускатися. Для основного стану і для низькорозміщених збуджених станів Mg є важливими як валентна, так і кор-валентна кореляції. Широко використовуваний метод включення кор-валентної кореляції базується на застосуванні напівемпіричного кор-поляризаційного потенціалу. Хоча такий потенціал суттєво спрощує розрахунки і може забезпечити точні енергії збудження та сили осциляторів, завжди залишається під питанням, наскільки точно модельний потенціал може відтворювати *всю* кор-валентну кореляцію, включаючи недипольні вклади. Через це у даному наближенні кор-валентна кореляція включалася *ab initio*, шляхом додавання конфігурацій мішені зі збудженим кором. Проте прямі багатоконфігураційні хартрі-фоківські розрахунки у цьому випадку зазвичай ведуть до надто великих розкладів, які навряд чи можуть бути використані в подальших розрахунках розсіяння. З цієї причини, для генерування станів мішені використовувався обмежений у боксі метод сильного зв'язку з B -сплайнами [207].

Зокрема, обчислення станів мішені включало наступні кроки. Процедура розпочиналася з генерування орбіталей кора у хартрі-фоківському розрахунку для іона Mg^{2+} і, таким чином, з обчислень із замороженим кором отримувалися валентні орбіталі $3s, 3p, 3d$, та $4s$ для Mg^+ . Далі, кор-валентна кореляція моделювалася шляхом додавання конфігурацій $2p^5 \bar{n}l\bar{n}'l'$ через роз-

клад

$$\phi(2p^6 nl) = a_{nl} \phi_{HF}(2p^6 nl) + \sum_{\bar{n}l\bar{n}'l'} b_{\bar{n}l\bar{n}'l'} \chi(2p^5 \bar{n}l\bar{n}'l'), \quad (3.1)$$

де риска означає радше кореляційну, ніж фізичну орбіталь. Іншими словами, хартрі-фоківські хвильові функції $\phi_{HF}(2p^6 nl)$ були покращені кореляційними функціями χ з $2p$ -збудженого кора. Ці розрахунки були здійснені програмою MCHF, Фрозе Фішер [22]. Оскільки середній радіус для $\bar{n}l$ -орбіталей лежить між середнім радіусом кора і валентних орбіталей, цей метод дозволяє включити кор-валентну кореляцію з відносно малою кількістю конфігурацій (від 10 до 20 у даному випадку). Зазначимо, що кореляційні орбіталі $\bar{n}l$ були оптимізовані для кожного стану окремо. Кор-валентно корельовані стани Mg^+ далі були використані в якості станів мішені у розрахунках (методом сильного зв'язку з B -сплайнами) зв'язаних станів, – для генерування низько розміщених станів атома Mg. Відповідний багатоканальний розклад мав структуру

$$\begin{aligned} \Phi(2p^6 3snl, LS) = & \mathcal{A} \sum_{nl} \phi(2p^6 3s) P(nl)^{LS} + \mathcal{A} \sum_{nl} \phi(2p^6 3p) P(nl)^{LS} + \\ & + \mathcal{A} \sum_{nl} \phi(2p^6 3d) P(nl)^{LS} + \mathcal{A} \sum_{nl} \phi(2p^6 4s) P(nl)^{LS}, \end{aligned} \quad (3.2)$$

де \mathcal{A} позначає оператор антисиметризації. Для стислості позначень будемо вважати, що коефіцієнти розкладу включені в невідомі функції $P(nl)$ для зовнішнього валентного електрона. Ці функції були розкладені у B -сплайновому базисі і відповідні рівняння були розв'язані виходячи з умови, що хвильові функції перетворюються в нуль на границі. Ця схема дає набір ортогональних одноелектронних орбіталей для кожного зв'язаного стану, але орбіталі з різних наборів більше не є ортогональними одні до одних. На практиці ця процедура часто згадується як використання „неортогональних орбіталей”, і саме в цьому трактуванні буде використовуватися нижче. Нарешті, один і той же багатоканальний розклад (3.1) використовувався як для станів $3snl$, так і для всіх станів nl^2 з еквівалентними електронами. Кількість фізичних станів,

які можна генерувати в цьому методі, залежить від розміру a R -матричного боксу. Вибираючи $a = 80a_0$ (де $a_0 = 0.529 \times 10^{-10}$ м позначає борівський радіус), отримуємо хороший опис всіх низькорозміщених станів Mg аж до $(3s8s) \ ^1S$.

В дані розрахунки були включені 110 B -сплайнів порядку 8. Оскільки згадані вище розрахунки зв'язаних станів методом сильного зв'язку з B -сплайнами генерують різні неортогональні ряди орбіталей для кожного стану атома, їх подальше використання, звичайно, є досить ускладненим. З іншого боку, отримані конфігураційні розклади станів атома-мішені містять тільки від 20 до 50 конфігурацій для кожного стану i , отже, можуть бути використані у розрахунках зіткнення з досить скромними обчислювальними ресурсами.

Стани мішені, включені у дані розрахунки розсіювання, наведені в Таблиці А.1, де для кожного з них розраховані енергії зв'язку порівнюються з експериментальними значеннями [208]. Загальне узгодження між експериментом і теорією є дуже хорошим, з відхиленнями в значеннях енергій у цілому меншими за 0.06 еВ, за винятком найнижчого стану $(3s^2) \ ^1S$ та стану $(3p^2) \ ^1S$. Тут кореляційні поправки, як очікується, будуть найважливішими. Стан $(3p^2) \ ^1S$ був включений для повноти СЗ-розкладу, оскільки конфігурація $3p^2$ дає сильний внесок у розклад основного стану. Точність даних енергій зв'язку близька до точності, досягнутої в обширних БКХФ-обчисленнях [209], і даний опис структури є істотно кращим у порівнянні з тими, що використовувалися в попередніх розрахунках розсіювання.

Інша оцінка якості опису мішені може бути здійснена шляхом порівняння результатів для сил осциляторів різних переходів з експериментальними даними та іншими теоретичними передбаченнями. Таке порівняння наших даних зі значеннями, рекомендованими в останній критичній компіляції НІСТ [210], наведене в таблиці А.2, і у більшості випадків спостерігається їх дуже близьке узгодження. Має місце незначна (біля 3%), але помітна розбіжність для резонансного переходу $(3s^2) \ ^1S \rightarrow (3s3p) \ ^1P^o$. Хоча значення

НІСТ базуються на експериментальних даних, всі останні розширені розрахунки пропонують менші значення. Наприклад, дуже обширні і по суті збіжні БКХФ-розрахунки [209] дають $f = 1.717$, яке є дуже близьким до нашого значення. Зазначимо, що точні сили осциляторів є дуже важливими для отримання достовірних абсолютних значень як перерізів, так і швидкостей для дипольно-дозволених переходів при високих енергіях падаючого електрона. Для низькоенергетичного розсіяння точність сил осциляторів також важлива, оскільки визначає вірно, чи ні була визначена поляризація мішені налітаючим електроном.

3.2.2 Розрахунки зіткнення e –Mg. Для розрахунків розсіяння використовувалася розроблена незадовго до їх виконання програма R -матриці з B -сплайнами BSR [21]. Деталі щодо використання цього наближення, зокрема в застосуванні до електрон-атомних зіткнень з аналогічними квазі-двоелектронними мішенями, можна встановити з двох попередніх досліджень процесів зіткнення e –Ca [205] та e –Zn [206]. Як згадувалося вище, відмітною особливістю методу є використання B -сплайнів у якості універсального базису для представлення орбіталей розсіяння у внутрішній області, $r \leq a$. Отже, R -матричний розклад у цій області має вигляд

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

де $\bar{\Phi}_i^\Gamma$ – каналні функції, у той час як сплайни представляють орбіталі континууму. Головна перевага B -сплайнів полягає у тому, що вони утворюють ефективно повний базис, і тому ніяка корекція Баттла щодо R -матриці у даному випадку не потрібна. Амплітуди хвильових функцій на границі, які потрібні для оцінки R -матриці, задаються коефіцієнтом при останньому сплайні, який є єдиним сплайном з відмінним від нуля значенням на границі. Інша важлива особливість даної програми стосується вимоги ортогональності для одноелектронних радіальних функцій, про що вже йшлося вище. Тут не накладає-

тяться жодних умов ортогональності на одноелектронні радіальні функції, що використовуються для представлення різних станів мішені, а орбіталі континууму не повинні бути ортогональні до будь-яких зв'язаних орбіталей. Використання неортогональних орбіталей дозволяє уникати введення додаткових $(N + 1)$ -електронних термів у R -матричному розкладі. Останні можуть призводити до обширних багатоконфігураційних розкладів, особливо коли для поліпшення станів мішені використовуються кореляційні псевдо-орбіталі.

Кількість B -сплайнів і R -матричний радіус у розрахунках розсіяння були взяті такими ж, як і при розрахунках зв'язаних станів мішені. Чисельно розраховувалися парціально-хвильові вклади аж до $L = 50$, при необхідності доповнені подальшою оцінкою „хвостів”, основою на екстраполяції геометричних рядів. Розрахунки перерізів були здійснені тим самим чином, як і в стандартних R -матричних розрахунках.

3.3 Диференціальні та інтегральні перерізи розсіяння e –Mg

3.3.1 Пружне розсіяння. На рисунках 3.1 та 3.2 показані диференціальні по кутах перерізи для пружного розсіяння електронів на Mg у його основному стані $(3s^2) ^1S$ і здійснене порівняння різних теоретичних передбачень з останніми експериментальними даними, отриманими в працях Бравн та ін. [172,173] і Предоевич та ін. [175]. Окрім даних розрахунків у наближенні БСР з 37 врахованими станами (БСР37), для порівняння були вибрані більш ранні розрахунки в рамках сильного зв'язку 5 станів (С35) [203] та 6 станів у наближенні оптичних зв'язаних каналів (ОЗК6) [204], обширні розрахунки у наближенні збіжного сильного зв'язку 109 станів (ЗСЗ109) [200] та методі R -матриці з псевдостанами з урахуванням 54 станів (РМПС54) [172,173].

При енергії налітаючого електрона 10 еВ, всі теоретичні передбачення знаходяться у хорошому узгодженні з експериментальними перерізами аж до кутів розсіяння 130° , з даними результатами найкраще узгодження спо-

стерігається при середніх кутах між 70° та 130° . Проте дві експериментальні точки при 140° та 150° лежать суттєво нижче всіх теоретичних результатів. Зауважимо, що Предоєвич та ін. [175] для трактування своїх результатів при великих кутах використовували напівемпіричні розрахунки у наближенні оптичного потенціалу Харе та ін. [211] (не показані на рисунку). Ці розрахунки у наближенні оптичного потенціалу дають при малих кутах суттєво більші перерізи, ніж експеримент, але після нормування експериментальних ДП при 100° до цієї теорії, вона дає хороше узгодження з експериментом при великих кутах. Проте, таке трактування експериментальних даних слід приймати з обережністю у світлі наявних розбіжностей при малих кутах.

При енергії 15 еВ, розраховані в наближенні БСР37 ДП знаходяться у хорошому узгодженні з експериментом [175] при всіх кутах, за винятком точки при 150° . Наразі невідомі які-небудь теоретичні, або експериментальні дані з ДП при цій енергії, щоб використати їх для порівняння. Для енергії 40 еВ відзначимо повне узгодження між двома останніми наборами експериментальних даних і результатами наближень ЗСЗ109 та БСР37. Тому вважатимемо, що ДП для цієї енергії установлені дуже добре.

ДП при 20 еВ є одними з тих, що найчастіше зустрічаються у літературі. Абсолютні експериментальні дані Предоєвич та ін. [175] добре узгоджуються з отриманими Бравн та ін. [172] відносними ДП, які були нормовані на ЗСЗ-розрахунок, щоб досягти їх максимального візуального узгодження. Всі теоретичні результати є у хорошому узгодженні з експериментом і одні з одними при всіх кутах, за винятком двох мінімумів, що спостерігаються в околі 50° та 130° , відповідно: обчислення передбачають набагато глибші мінімуми. У той час як розбіжності у першій особливості, можливо, є результатом обмеженої експериментальної роздільної здатності, другий мінімум, передбачений цілим рядом теорій, є, як зазначили Бравн та ін. [172], недостатньо вузьким, щоб бути поясненим подібним чином. Крім того, має місце явна відмінність між експериментом (в околі 130°) та теорією (в околі 140°) щодо положення цього

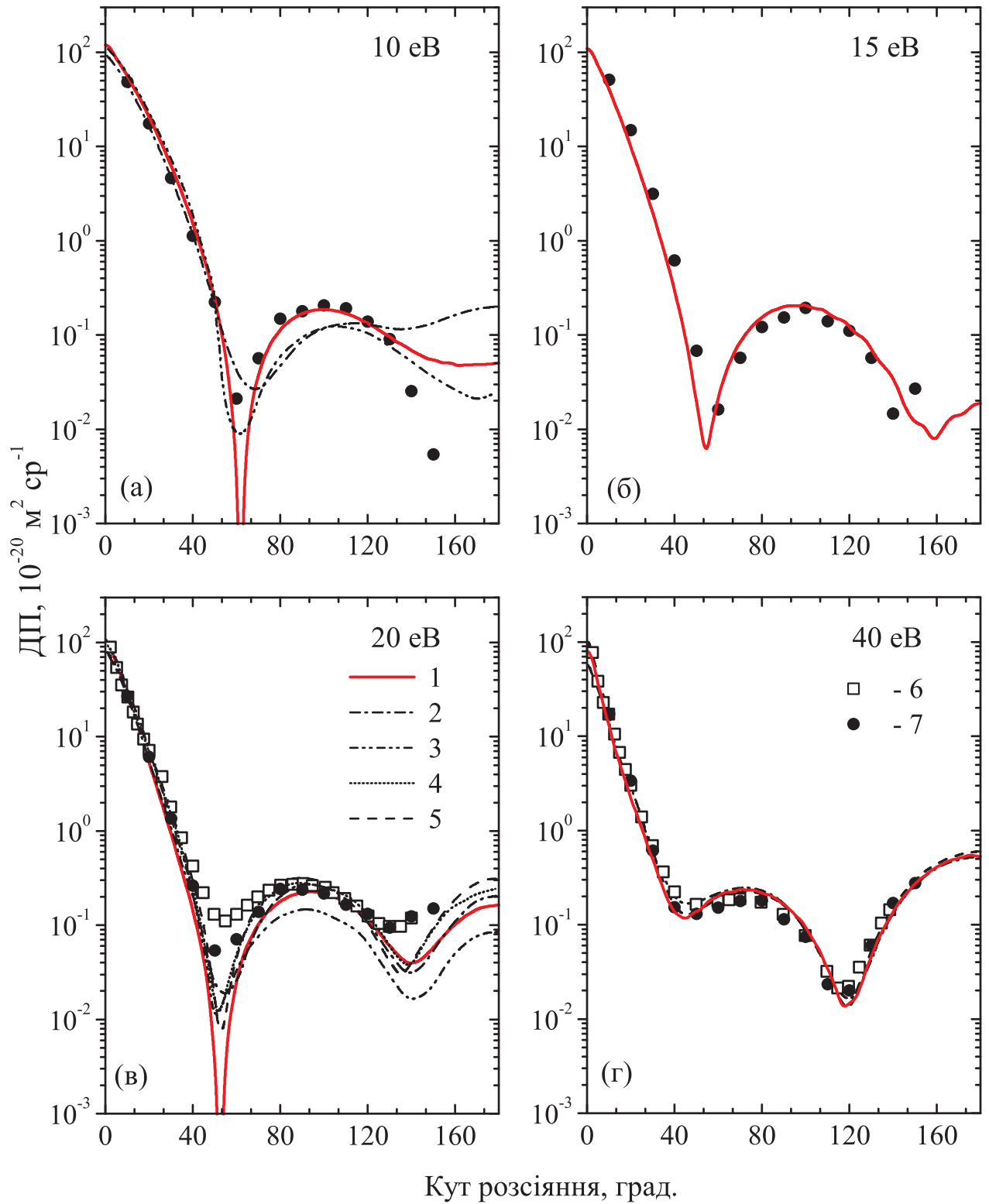


Рис. 3.1. Диференціальні перерізи пружного розсіяння e —Mg при енергіях зіткнення 10, 15, 20 та 40 еВ. Теорія: 1 – наші дані БСР37 [1]; 2 – С35 [203]; 3 – ОЗК6 [204]; 4 – РМПС54 [172, 173]; 5 – ЗС3109 [200]. Експеримент: 6 – Бравн та ін. [172]; 7 – Предосєвич та ін. [175].

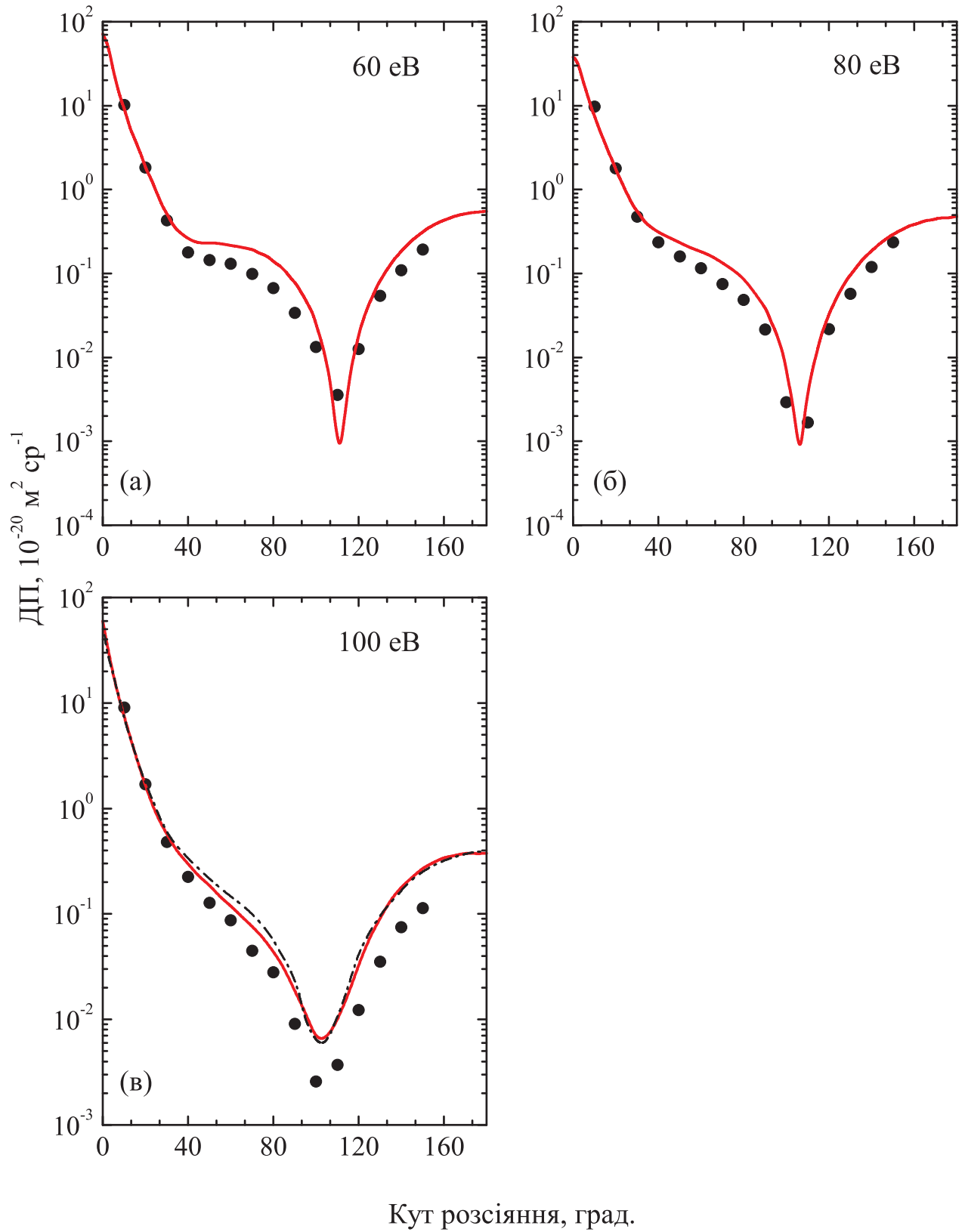


Рис. 3.2. Диференціальні перерізи пружного розсіяння $e\text{--Mg}$ при енергіях зіткнення 60, 80 і 100 еВ. Позначення як на рисунку 3.1.

мінімуму.

Диференціальні перерізи при енергіях 60, 80 та 100 еВ показані на рис. 3.2. Має місце хороше узгодження між експериментальними даними Предоевич та ін. [175] і даним розрахунком для 60 та 80 еВ, які є єдиними результатами, доступними для порівняння при цих двох енергіях.

На експериментальних кривих ДП спостерігається плато і один мінімум біля $\theta = 110^\circ$, положення якого точно відтворюється даною моделлю. Має місце також розумне узгодження з експериментом при 100 еВ, хоча розраховані в БСР37 ДП лежать систематично вище експериментальних даних для $\theta > 100^\circ$. Як можна було передбачити, завдяки ефекту зменшення зв'язку каналів при такій високій енергії, дані результати дуже добре узгоджуються з такими ж даними з СЗ5-розрахунків Мітрой та Маккарті [203] для всіх кутів.

3.3.2 Збудження стану $(3s3p) {}^1P^o$. Найближче до нас у часі експериментальне вивчення ДП для $(3s3p) {}^1P^o$ -збудження було представлено Філіпович та ін. [174]. Ці дані, разом з абсолютними вимірюваннями Бранджер та ін. [179] і відносними даними Бравн та ін. [172, 173] порівнюються з результатами обчислень БСР37 на рис. 3.3. Крім того, показані розрахунки на основі наближень релятивістських спотворених хвиль (РСХ) [174], СЗ5 [203], РМПС та ЗСЗ [172, 173, 200]. Для спрощення аналізу, кілька ранніх експериментальних і теоретичних результатів (обговорених, наприклад, в [200]) не показані на цьому рисунку.

Як і очікувалося, найбільший розкид у теоретичних результатах спостерігається при енергії 10 еВ. Отримані в наближенні БСР37 ДП найбільш близько узгоджуються з ЗСЗ-результатами, і знаходяться також у хорошому узгодженні з експериментальними даними аж до кутів розсіювання 90° . З іншого боку, біля 100° дана БСР37-модель передбачає локальний мінімум, який не спостерігається на експерименті. Дещо дивно, що найближче узгодження

з експериментом у цьому діапазоні кутів забезпечує СЗ5-розрахунок, у той час як наближення РСХ суттєво переоцінює перерізи. При енергії 15 еВ для порівняння є у наявності тільки один розрахунок (РСХ). Тут БСР37 результати знаходяться у прийнятному узгодженні з експериментом [174], тоді як модель РСХ знову переоцінює перерізи при великих кутах.

При енергії 20 еВ, всі СЗ-розрахунки добре узгоджуються один з одним і вказують на існування двох мінімумів біля 70° і 150° , відповідно. Проте логарифмічний масштаб і дуже швидке спадання ДП зі збільшенням кута розсіювання від напрямку розсіювання вперед дещо вводять в оману.

Як буде показано нижче, мають місце суттєві відмінності в інтегральних по куту перерізах, отриманих для різних СЗ-розрахунків, іноді до 25%. При великих кутах розсіювання результати наближення РСХ знову помітно вищі за ті, що отримані в СЗ-теоріях. Для кутів більших 90° розраховані в БСР37 ДП краще узгоджуються з абсолютними вимірюваннями Бранджер та ін. [179], ніж з такими ж Філіпович та ін. [174].

Для енергії 40 еВ, виміряні ДП ясно вказують на два мінімуми поблизу 60° та 120° . Їхні положення дуже добре передбачаються всіма теоріями. Проте, відмінності між абсолютними значеннями, отриманими в різних СЗ-розрахунках є гідними уваги. Наші розрахунки є в кращому узгодженні з останніми даними Філіпович та ін. [174], ніж із більш ранніми вимірюваннями. Філіпович та ін. [174] також представили дані з ДП при 60, 80 та 100 еВ, які є у близькому узгодженні з РСХ-розрахунками. Для стислості, тут не наводиться порівняння даних БСР37 з цими результатами. Зазначимо, однак, що результати БСР37 є в дуже близькому узгодженні з такими ж, отриманими у моделі РСХ. Це спостереження не є неочікуваним, оскільки знову виражає зменшення впливу зв'язку каналів зі збільшенням енергії зіткнення.

3.3.3 Збудження стану $(3s3p) \ ^3P^o$. Вплив кореляцій. Розрахунки ДП збудження $(3s^2) \ ^1S \rightarrow (3s3p) \ ^3P^o$ у рамках даного дослідження були

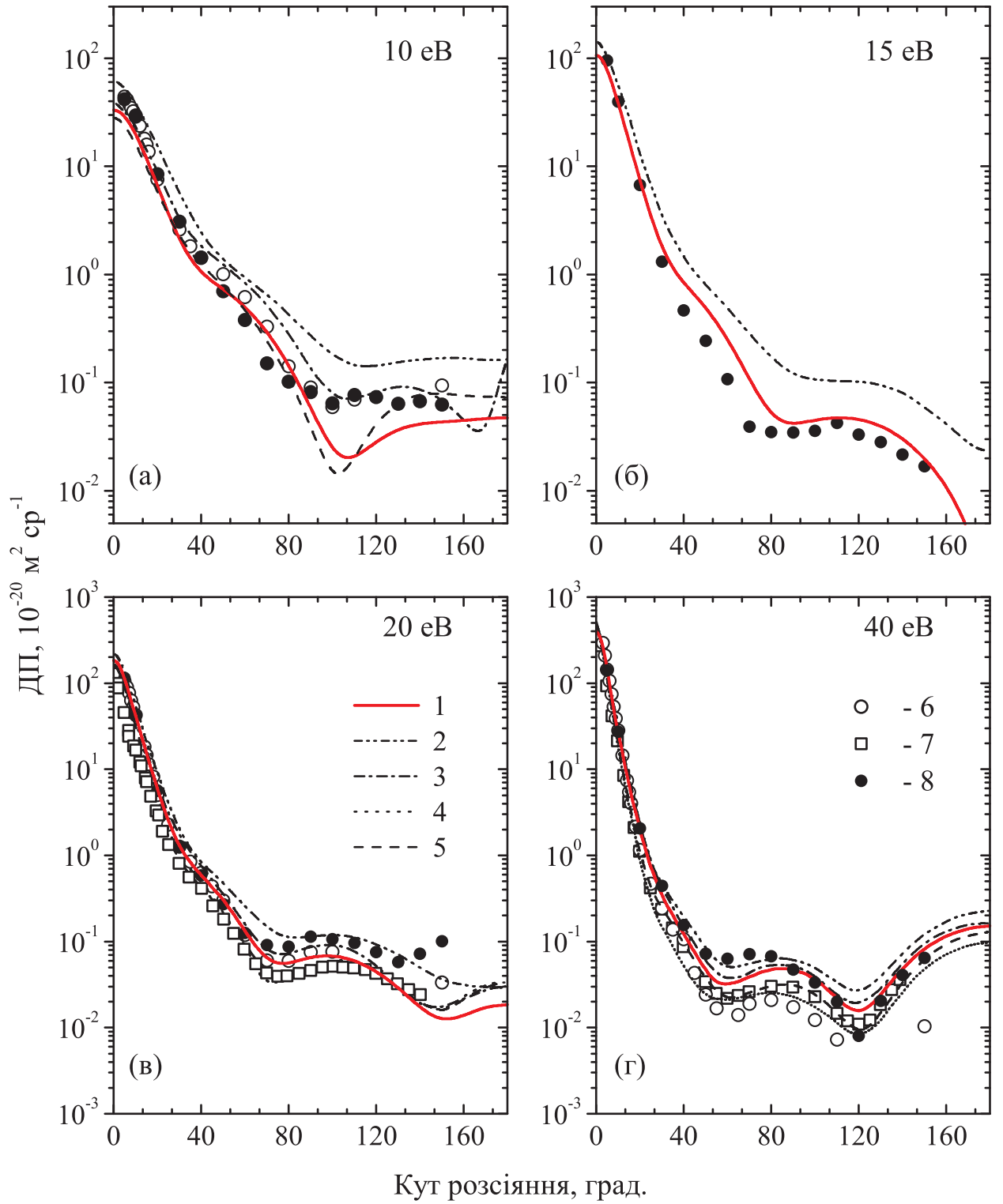


Рис. 3.3. Диференціальні перерізи збудження електронним ударом стану $(3s3p) \ ^1P^o$ атома Mg при енергіях зіткнення 10, 15, 20 та 40 eV. Теорія: 1 – наші дані БСР37 [1]; 2 – РСХ [174]; 3 – С35 [203]; 4 – РМПС54 [172, 173]; 5 – ЗС3109 [200]. Експеримент: 6 – Бранджер та ін. [179]; 7 – Бравн та ін. [172, 173]; 8 – Філіпович та ін. [174].

здійснені у три етапи. Спочатку в статтях [4] та [1] були представлені, відповідно, результати наближень БСР29 та БСР37 для ДП збудження метастабільного стану 3^3P^o при енергіях 20 та 40 еВ. Розрахунки БСР29 та БСР37 в обох випадках були порівняні з наявним на той час експериментом та іншими теоретичними даними. Проте за відсутності експериментальних даних в абсолютній шкалі одиниць при інших енергіях, ці результати носили дещо академічний характер. Ситуація змінилася з появою новітніх абсолютних вимірювань ДП збудження стану 3^3P^o атома Mg при енергіях: 10, 15, 20, 40 та 60 еВ [177]. Виникла можливість прямого порівняння теорії та експерименту з метою перевірки точності розрахунку/вимірювання та внесення відповідних коректив у теоретичні моделі і обставини експерименту. Тому в статті [6] були представлені результати БСР37-розрахунку відповідних ДП збудження метастабільного стану 3^3P^o атома Mg. Дані наближення БСР37 були порівняні, насамперед, з новітніми експериментальними ДП [177], а також з більш ранніми результатами відносних вимірювань [173, 180] і наявними теоретичними обчисленнями. Нижче послідовно представлено порівняння диференціальних БСР37-перерізів для енергій 20 і 40 еВ [1] та 10, 15, 20, 40 і 60 еВ [6] з наявними на час виходу статей [1] і [6] експериментальними та теоретичними даними. Результати наближення БСР29 [4], значення яких є дуже близькими до значень БСР37, на рисунках не наведені, хоча вони й слугують хорошим підтвердженням збіжності даного розкладу сильного зв'язку.

Диференціальні перерізи збудження стану $(3s3p) \ ^3P^o$, обговорені у праці [1], наведені на рис. 3.4. Результати для цього стану демонструють відмінну від попередніх переходів кутову залежність ДП, і є приблизно на три порядки величини меншими у порівнянні з такими ж для пружного розсіяння і для оптично дозволеного переходу $(3s^2)^1S \rightarrow (3s3p)^1P^o$, розглянутими вище. ДП для стану $(3s3p) \ ^3P^o$ має максимальне значення біля 30° , на противагу до швидкого спадання від напрямку розсіяння вперед для ДП пружного розсіяння та збудження стану $(3s3p) \ ^1P^o$. У кутових залежностях ДП $3P^o$ збуд-

ження також є два чіткі локальні мінімуми при великих кутах розсіювання. Всі ЗСЗ-розрахунки, показані тут, передбачають дуже подібну кутову залежність ДП, але мають місце суттєві відмінності в абсолютних значеннях.

При енергії 20 еВ наші ДП (наближення БСР37) тісно узгоджуються з абсолютними вимірюваннями Хоуджтон та ін. [180], і також точно відтворюють співвідношення між двома максимумами при 30° та 120° , відповідно. Експериментальні ДП Бравн та ін. [173] проявляють у загальному таку ж форму, але вони були нормовані з метою надання їм найкращої візуальної відповідності зі спільними ЗСЗ та РМПС-результатами. Для цього стану був паралельно здійснений обширний ЗСЗ-розрахунок, що включав 210 станів (ЗСЗ210). Значне зменшення (аж до множника 3) значень теоретичних ДП при 20 еВ, отриманих у наближенні ЗСЗ210 було віднесено на рахунок сильного впливу каналів континууму, не включених у більш ранні обчислення. Оскільки дані БСР37-розрахунки не враховують зв'язку з континуумом мішені, наразі є неможливим оцінити його вплив. Однак, зниження аж до фактору 3 є, звичайно, великим. Варто також відзначати, що хороше узгодження результатів БСР37 з абсолютними даними Хоуджтон та ін. [180] і більш ранніми абсолютними вимірюваннями Вільямс та Траймар [178] (не вказані на рисунку) свідчить на користь пропонування дещо більших значень ДП при 20 еВ, ніж передбачені РМПС54 та ЗСЗ210.

При енергії 40 еВ узгодження даних БСР37 з результатами ЗСЗ210 є набагато кращим, можливо знову через зменшення важливості зв'язку каналів при цій вищій енергії. За винятком глибин обох мінімумів, дані БСР37-результати знаходяться у задовільному узгодженні з відносними вимірюваннями Бравн та ін. [172]. Тим не менше, той факт, що ЗСЗ210-результати відрізняються від даних БСР37, але знаходяться в чудовому узгодженні з експериментом, за винятком глибини другого мінімуму, свідчить, що зв'язком каналів з іонізаційним континуумом для цього оптично забороненого переходу не можна нехтувати, особливо в діапазонах кутів, де ДП є дуже малими.

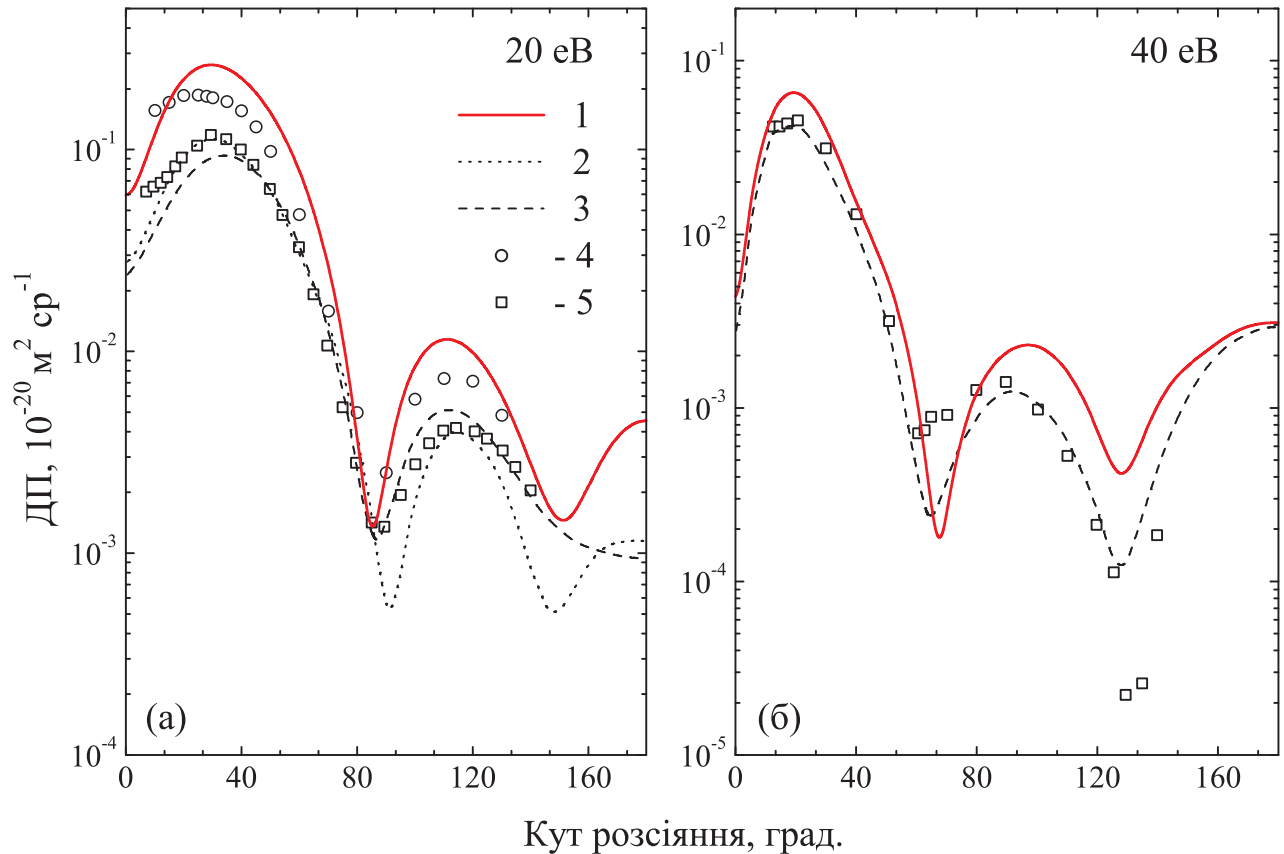


Рис. 3.4. Диференціальні перерізи збудження електронним ударом стану $(3s3p) \ ^3P^o$ атома Mg при енергіях зіткнення 20 та 40 еВ. Теорія: 1 – наші дані БСР37 [1]; 2 – РМПС54 [172,173]; 3 – ЗСЗ210 [173]. Експеримент: 4 – Хоуджтон та ін. [180]; 5 – Бравн та ін. [172,173].

Розглянемо тепер результати, представлені у праці [6]. На рис. 3.5-3.6 відтворені кутові залежності ДП збудження електронним ударом стану 3^3P^o атома Mg при енергіях 10 і 15 еВ, та 20, 40 і 60 еВ, відповідно. Поряд з абсолютними експериментальними ДП [177] і даними БСР37-перерізами на рис. 3.5а, 3.6а та 3.6б представлені також дані інших експериментальних вимірювань і теоретичних розрахунків. Для енергій 15 та 60 еВ (рис. 3.5б та 3.6в, відповідно) обчислення БСР37 є наразі єдиними.

При енергії 10 еВ (рис. 3.5а) результати всіх експериментальних і теоретичних досліджень кутових залежностей ДП достатньо помітно відрізняються від даних аналогічних вимірювань чи розрахунків інших авторів. Нав-

паки, при енергії збудження 40 еВ дані, отримані у наближеннях БСР37 та ЗСЗ [173], більш-менш корелюють між собою і з даними експериментів Пре-
доевич та ін. [177] і Бравн та ін. [173], – звичайно, з урахуванням зроблених
вище зауважень.

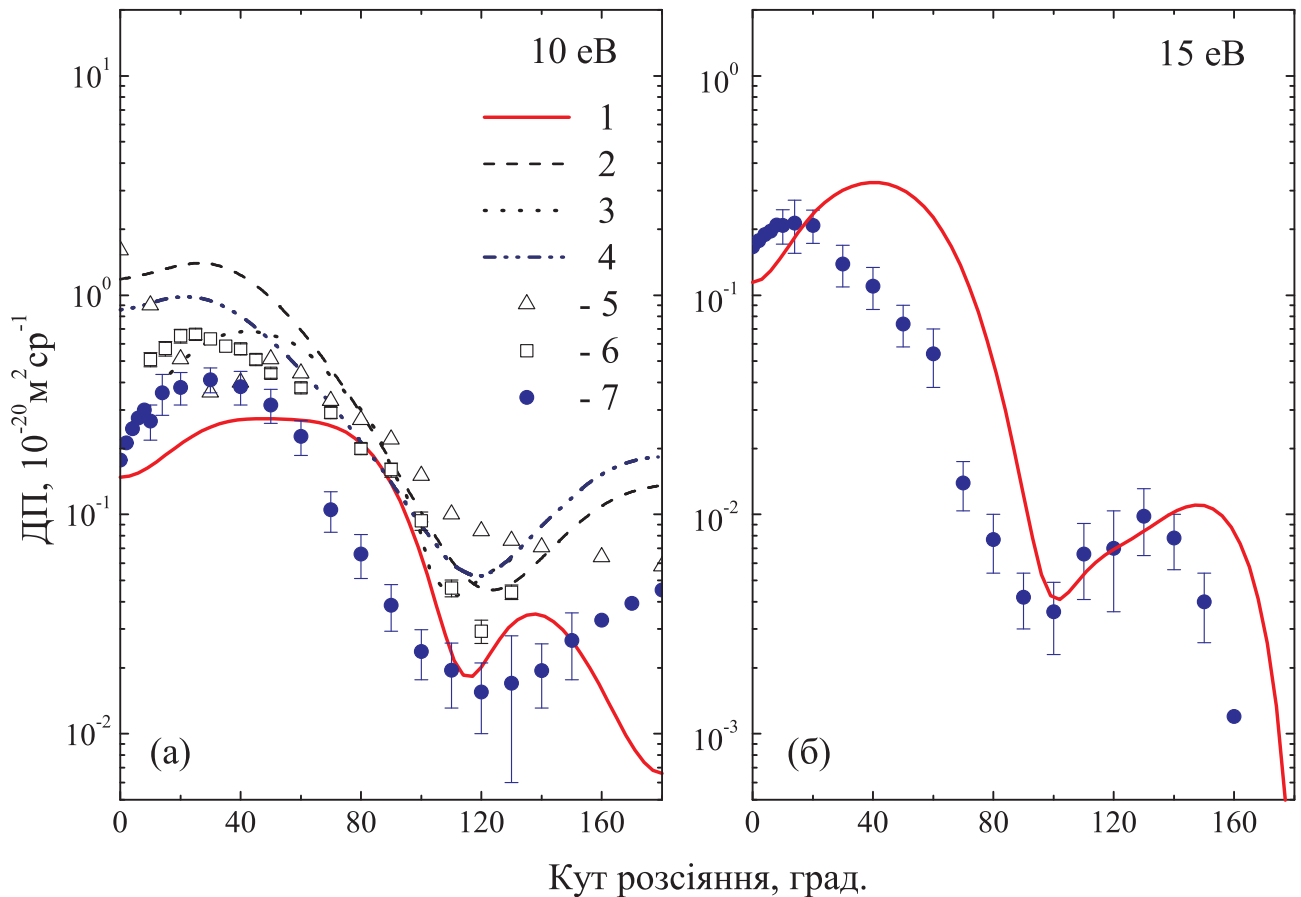


Рис. 3.5. Диференціальні перерізи збудження електронним ударом стану $(3s3p) \ ^3P^o$ атома Mg при енергіях 10 і 15 еВ, відповідно. Теорія: 1 – наші дані БСР37 [1, 6]; 2 – багаточастинкова теорія першого порядку (Менес та ін. [212]); 3 – ОЗК (Маккарті та ін. [204]); 4 – РСХ (Кавр та ін. [213]). Експеримент: 5 – Вільямс і Траймар [178]; 6 – Хоуджтон та ін. [180]; 7 – Предоевич та ін. [177].

Щодо результатів новітнього експерименту [177] варто зауважити, що при всій точності представлених результатів екстраполяція виміряних даних в області малих (менше 10°) і великих (більше 150°) кутів носить достатньо

довільний характер і не є самоочевидною. Це, зокрема, видно із порівняння у вказаних областях даних різних досліджень для ДП при 10 еВ, рис. 3.5а.

Щодо наших результатів при енергії збудження при 60 еВ, рис. 3.6в, відзначимо явно недостатню кількість врахованих парціальних хвиль. Очевидно, їх число ($L=60$) є неповним для даного випадку, про що свідчить характерна хвилястість у графічному представленні кутових залежностей ДП. На жаль, на час здійснення обчислень у нас не було можливості довести кількість розрахованих парціальних хвиль хоча б до $L=200$.

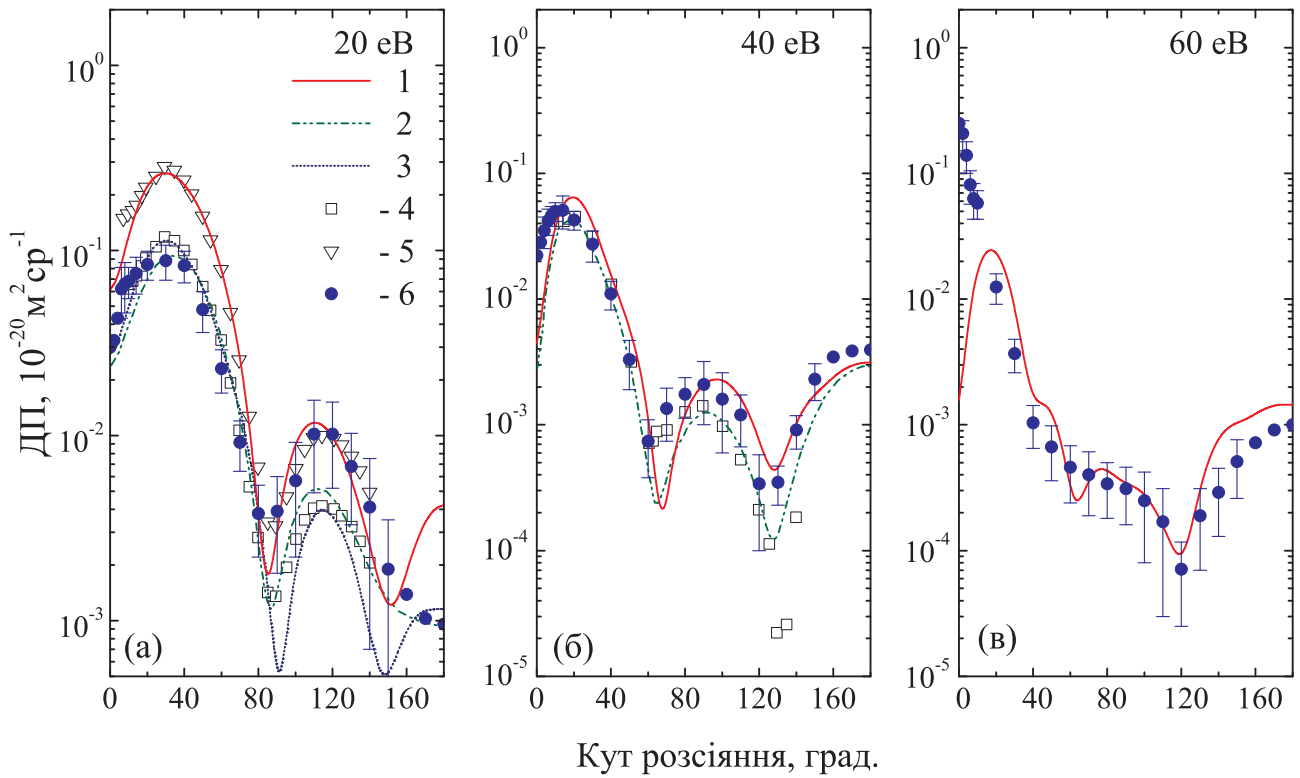


Рис. 3.6. Диференціальні перерізи збудження електронним ударом стану $(3s3p) \ ^3P^o$ атома Mg при енергіях 20, 40 та 60 еВ, відповідно. Теорія: 1 – наші дані БСР37 [1, 6]; 2 – ЗСЗ [173]; 3 – РМПС [173]. Експеримент: 4 – Бравн та ін. [172, 173]; 5 – Бравн та ін. [173] (дані нормовані нами фактором 2.4); 6 – Предоєвич та ін. [177].

Для енергії 20 еВ БСР37-результати чудово корелюють з перенормованими множником 2.4 відносними даними експерименту [173]. Ці дані у свій

час були нормовані на результати ЗСЗ-розрахунків, виконаних у тій же роботі [173]. Щодо новітніх абсолютних експериментальних даних [177], то БСР37-перерізи відмінно узгоджуються, у рамках експериментальних похибок, з виміряними перерізами при кутах розсіювання в діапазоні $\sim 70 - 150^\circ$, проте проявляють помітну розбіжність з ними при кутах $\sim 10 - 70^\circ$. Зауважимо, що перерізи, розраховані у методі ЗСЗ [173], проявляють протилежну тенденцію.

Достатньо посереднє узгодження експерименту [177] з результатами всіх без винятку теоретичних розрахунків, а також з іншими експериментальними даними при енергії 10 еВ, рис. 3.5а, свідчить про необхідність більш точного врахування кореляційних ефектів, роль яких є визначальною в теоретичних розрахунках розсіювання електронів на атомах при низьких енергіях.

3.3.4 Збудження стану $(3s4p) {}^1P^o$. На рис. 3.7 показані диференціальні перерізи збудження стану $(3s4p) {}^1P^o$. При енергії 10 еВ для порівняння існує тільки один набір вимірювань [176] і один давній розрахунок [203] у наближенні СЗ5. Зазначимо, що останні РСХ-розрахунки [202] були проблемними для таких малих енергій і тому автори представили результати тільки для вищих енергій. Як видно з рисунка, експериментальні дані суттєво відрізняються від значень ДП, передбачуваних у рамках моделі СЗ5 при кутах розсіювання за межами 60° , у той час як наші БСР37-результати демонструють майже повне узгодження з експериментом. Причиною подібного є повільна збіжність СЗ-розкладу для цього стану. Тестові розрахунки, здійснені нами у наближенні сильного зв'язку 9 станів, які включають всі стани мішені аж до $(3s4p) {}^1P^o$, дають значення ДП дуже близькі до СЗ5-моделі Мітрося та Маккарті [203].

Для енергії зіткнення 20 еВ у літературі наявні два набори вимірювань [176, 178], і вони дуже добре узгоджуються одні з одними у всьому діапазоні кутів. Всі розрахунки також добре узгоджуються між собою і з експериментальними даними, хоча мають місце деякі відмінності для кутів розсіювання,

менших за 10° (відмітимо, що все це – у логарифмічній шкалі) і більших за 130° . Поблизу напрямку розсіяння вперед, експериментальні дані лежать вище СЗ5-результатів, у той час як РСХ та дані БСР37-розрахунки дуже добре узгоджуються одні з одними та з експериментом. Значення ДП при малих кутах є дуже важливими для отримання коректних інтегральних (по куту) перерізів. Обидва СЗ-розрахунки передбачають локальні мінімуми при 80° та 150° , у той час як РСХ-модель видає тільки один неглибокий мінімум поблизу 90° . Мінімум при 80° , отриманий у даному розрахунку, знаходиться в чудовому узгодженні з вимірюваннями. З іншого боку, другий мінімум, передбачений при 150° , не є чітко підтвердженим експериментальними даними, хоча розмір похибок вказує на збільшення невизначеності. У цьому діапазоні кутів найближче узгодження з експериментом дають якраз РСХ-розрахунки.

При енергії 40 еВ два набори вимірювань дуже добре узгоджуються для кутів розсіяння, менших за 60° . Всі розрахунки дають подібну одна до одної кутову залежність і добре узгоджуються з недавніми вимірюваннями Предоєвич та ін. [176] у всьому діапазоні кутів. Зокрема, і експеримент і теорія вказують на два мінімуми поблизу кутів розсіяння 60° та 120° . Дані розрахунки дають глибший другий мінімум, що є у хорошому узгодженні з вимірюваннями Предоєвич та ін. [176]. Нарешті, при 60 еВ, форма як експериментальної, так і теоретичної кривих ДП є подібною у тому, що обидві криві вказують на швидке спадання від розсіяння вперед до кута 60° і глибокий мінімум в області біля 115° . Однак, результати вимірювання лежать значно нижче розрахункових – для всіх кутів розсіяння, більших за $\sim 10^\circ$.

3.3.5 Збудження стану $(3s3d) {}^1D$. Диференціальні по кутах перерізи збудження стану $(3s3d) {}^1D$, представлені на рис. 3.8. При 10 еВ дані розрахунки дають розумне узгодження з вимірюваннями Предоєвич та ін. [176] для більшості кутів, за винятком області від 50° до 70° . І експеримент, і теорія вказують на наявність тут плато, але БСР37-результати розміщені значно

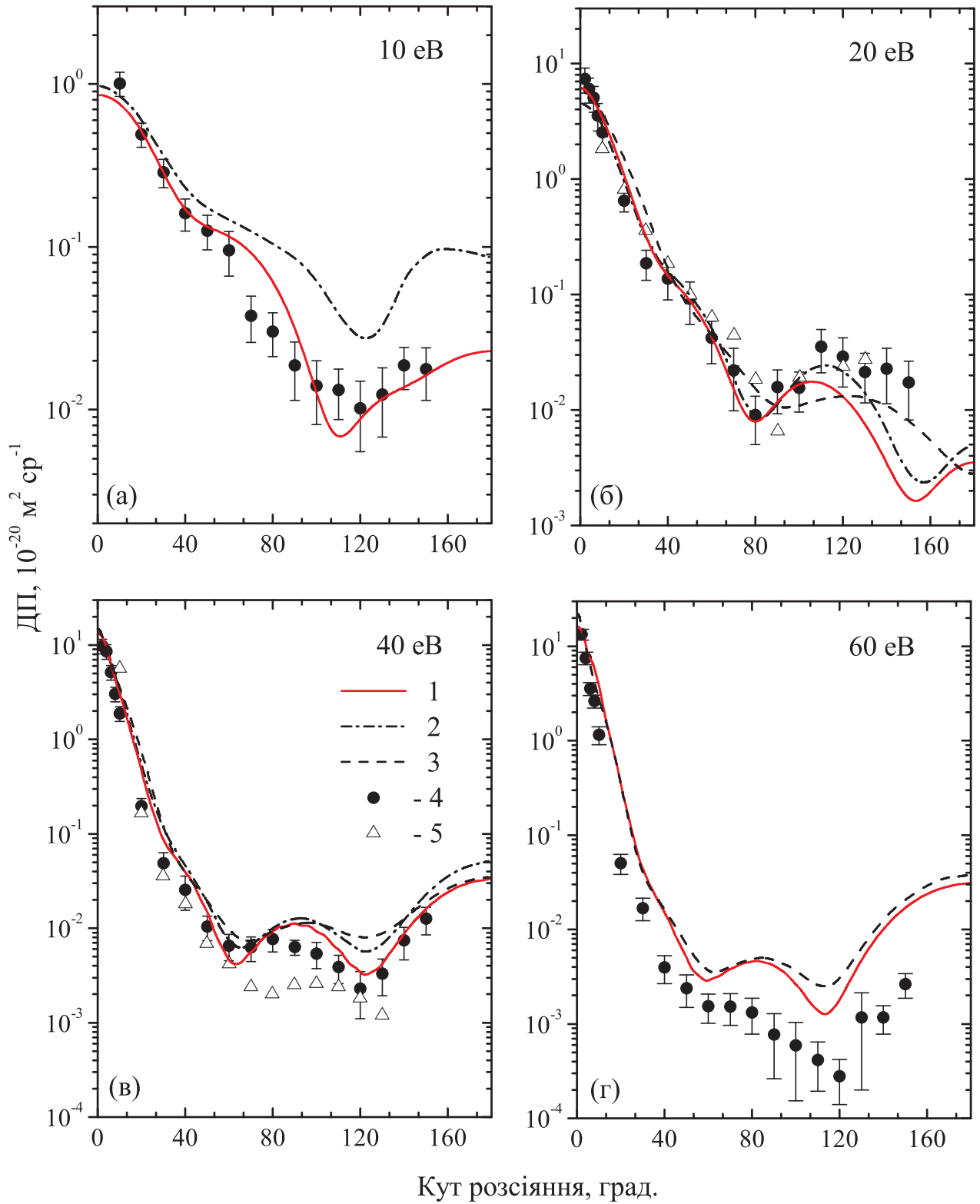


Рис. 3.7. Диференціальні перерізи збудження електронним ударом стану $(3s4p) \ ^1P^o$ атома Mg при енергіях зіткнення 10, 20, 40 та 60 еВ. Теорія:

1 – наші дані БСР37 [1]; 2 – СЗ5 [203]; 3 – РСХ [202]. Експеримент:

4 – Предоєвич та ін. [176]; 5 – Вільямс і Траймар [178].

нижче експериментальних даних. Два набори вимірюваних даних добре узгоджуються між собою для кутів більших за 50° . З іншого боку, при менших кутах дані Вільямс та Траймар [178] є систематично нижчі, ніж такі ж дані Предоєвич та ін. [176]. Теорія ясно віддає перевагу останнім вимірюванням. Обидва розрахунки в наближенні сильного зв'язку передбачають аналогічну кутову залежність, але дані БСР37-результати є суттєво нижчими для кутів, більших за 40° . Існують також значні відмінності в піку при розсіянні вперед нижче 10° .

Для енергії 20 еВ узгодження між С35 та БСР37 є значно кращим. Обидва вимірювання також передбачають подібні результати і дуже добре узгоджуються з передбаченнями БСР37 між 15° та 110° . При менших кутах експериментальні дані мають дуже великий пік при розсіянні вперед і значно перевищують всі теоретичні передбачення. При кутах, більших за 110° , експериментальні дані також є більшими за такі ж дані, розраховані в будь-якій із представлених моделей.

Найближче узгодження між експериментом [176] і теорією встановлено для 40 еВ. Обидві моделі сильного зв'язку дають дуже подібні результати, в той час як перерізи РСХ є систематично нижчими майже для всіх кутів. Знову обчислення БСР37, так само як і С35, підтверджують недавні результати [176] при великих кутах, де вони суттєво більші за ДП з попередніх вимірювань [178]. Нарешті, при енергії 60 еВ маємо для порівняння тільки вимірювання Предоєвич та ін. [176] і дані розрахунки. В загальному, узгодження нагадує ситуацію зі збудженням стану $(3s4p) {}^1P^o$: форми експериментальних і теоретичних ДП є подібними, але виміряні дані лежать нижче від розрахованих для кутів розсіяння більших за 10° .

3.3.6 Збудження стану $(3s4s) {}^1S$. Збудження стану $(3s4s) {}^1S$ є найбільш корельованим процесом з усіх, розглянутих дотепер. Як і очікувалося, воно проявляє значну залежність від зв'язку каналів і повинно сильно зале-

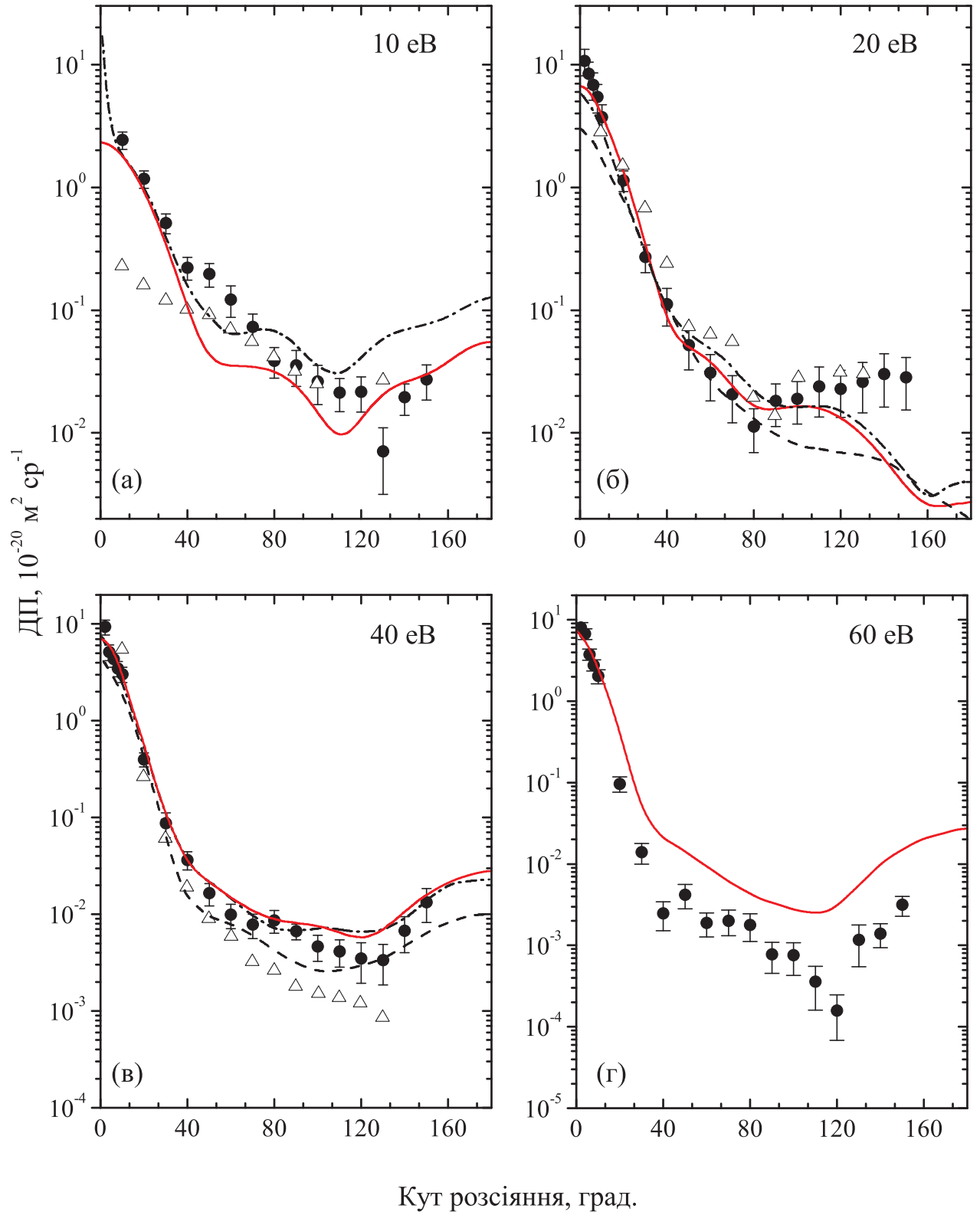


Рис. 3.8. Диференціальні перерізи збудження електронним ударом стану $(3s3d)\ ^1D$ атома Mg при енергіях зіткнення 10, 20, 40 та 60 eV. Позначення як на рисунку 3.7.

жати від деталей апроксимації. Результати для ДП збудження стану $(3s4s) {}^1S$ показані на рис. 3.9. При енергії 10 еВ експериментальні ДП проявляють ускладнену структуру, яка, в кращому випадку, тільки якісно узгоджується з теоретичними передбаченнями. Дані БСР37-результати є значно нижчі, ніж отримані у С35-моделі Мітрой та Маккарті [203]. У намаганні знайти хоч якийсь індикатор для прояснення цих невідповідностей, методом БСР були також порашовані ДП з урахуванням 9 та 17 станів у розкладі сильного зв'язку – наближення БСР9 та БСР17, відповідно, – кутові залежності для яких виведені на графік, поряд зі значеннями БСР37, рис. 3.9а.

Відмітимо, що результати БСР9 найбільш близькі до моделі С35, і зменшення значень теоретичних ДП відбувається систематично – зі збільшенням розміру розкладу сильного зв'язку. Навіть найбільш повна з розглянутих моделей, БСР37, є, можливо, не повністю збіжною із даним числом зв'язаних станів, але це є межа того, чим можна управляти з даним пакетом комп'ютерних програм і наразі доступними обчислювальними ресурсами. Тим не менше, на рисунку спостерігається задовільне узгодження між експериментом і БСР37-результатами для широкої області кутів, за винятком ДП при кутах нижче 10° та в околі 80° . Не можна також не відзначити значну величину експериментальних похибок. Така велика неоднозначність не дозволяє зробити якісь остаточні висновки. Очевидно, потрібні більш точні вимірювання, поряд з обширними теоретичними дослідженнями.

Для енергії зіткнення 20 еВ, узгодження теорії з експериментом є значно кращим. Розрахунки в рамках сильного зв'язку точно відтворюють пік при малих кутах і локальний мінімум в околі 70° , у той час як модель РСХ передбачає перший мінімум в околі 45° . Всі розрахунки також дають глибокий мінімум біля 135° , у той час як експеримент [176] вказує на більш мілкий мінімум в околі 125° . При енергії 40 еВ узгодження при малих і великих кутах є навіть кращим за узгодження при проміжних значеннях кутів, з глибоким мінімумом, установленим на експерименті в околі 120° , який відтворюється

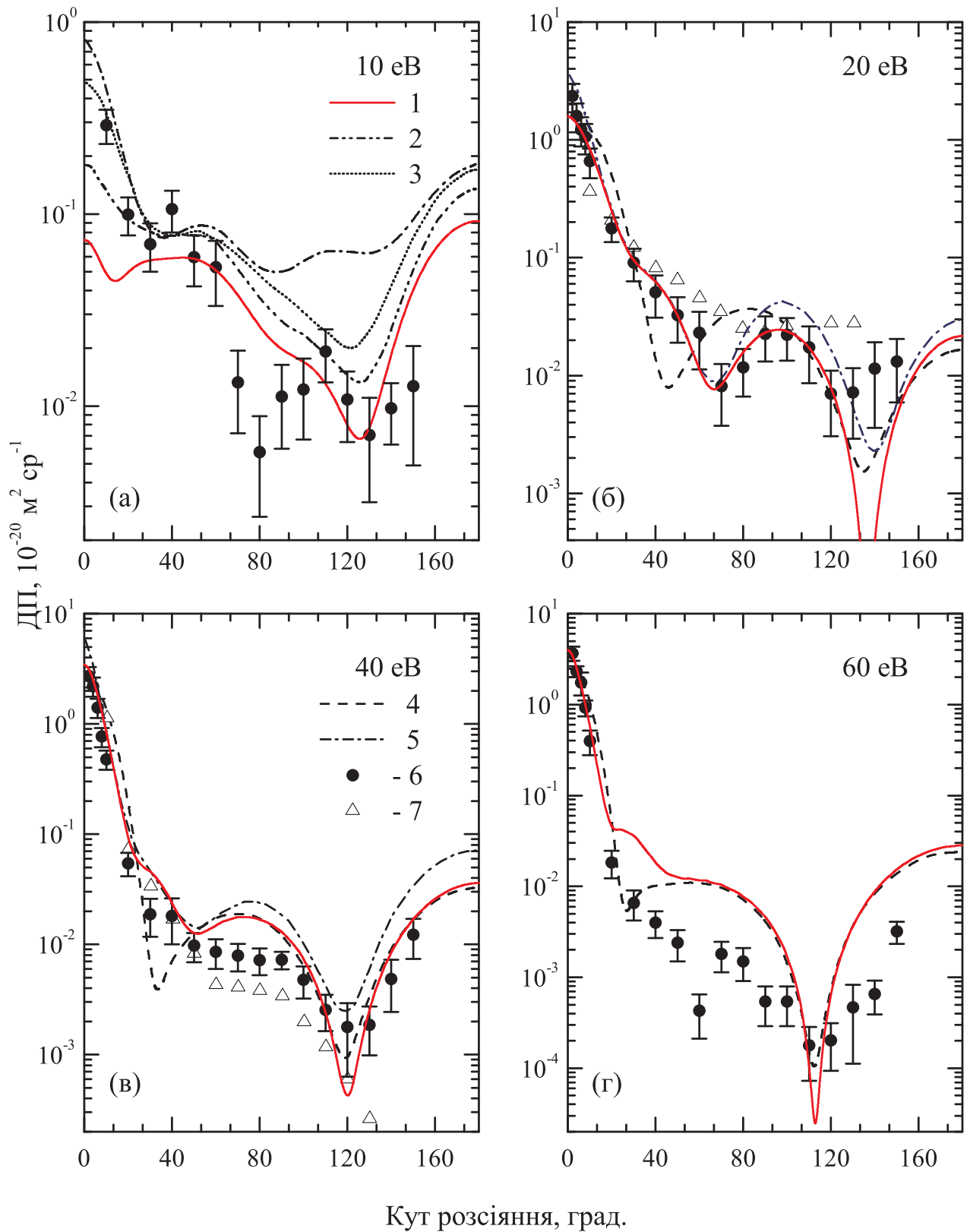


Рис. 3.9. Диференціальні перерізи збудження електронним ударом стану $(3s4s) \ ^1S$ атома Mg при енергіях зіткнення 10, 20, 40 та 60 eV. Теорія: 1, 2, 3 – наші дані БСР37, БСР17 та БСР9 [1], відповідно; 4 – РСХ [202]; 5 – С35 [203]. Експеримент: 6 – Предосєвич та ін. [176]; 7 – Вільямс і Траймар [178].

всіма теоріями. Проте, має місце і гідна уваги розбіжність при проміжних кутах розсіювання між 50° та 100° , де всі обчислення вказують на локальний максимум. Зокрема, для 20 еВ, але в деякій мірі також і для 40 еВ, узгодження між двома показаними експериментальними рядами даних є недостатнім, як по формі, так і за величиною. В загальному, розрахунки підтверджують останніші з вимірювань, здійснені Предоевич та ін. [176]. Нарешті, було встановлено хороше узгодження даних БСР37-обчислень з попередніми РСХ-розрахунками Шарма та ін. [202]. Проте, теоретичні значення ДП значно перевищують експериментальні при кутах, більших, ніж 20° . Глибокий мінімум передбачений в околі 110° також і експериментально, але не є таким гострим, як теоретична функція кута розсіювання.

3.3.7 Інтегровані по куту перерізи. На рис. 3.10 проведено порівняння інтегрованих по куту перерізів ІП для переходів, детально розглянутих вище при вивченні кутових залежностей ДП. Як видно з рисунка, має місце чудове узгодження між теорією і експериментом для пружного розсіювання в повному інтервалі енергій від 10 до 100 еВ, що вказує на швидку збіжність теоретичних моделей для цього випадку. Наш висновок, проте, не стосується малих енергій поблизу 1 еВ, де експериментально [214] був помічений сильний *p*-хвильовий шейп-резонанс. Нагадаємо також про дуже повільну збіжність розкладу сильного зв'язку, встановлену в попередньому дослідженні [215] для низькоенергетичного пружного розсіювання електронів на атомах магнію. Крім цього відзначимо, що на рис. 3.10 теоретичні криві різних наближень для пружного розсіювання нерозрізнявані в межах товщини лінії.

З іншого боку, ситуація навколо збудження стану $(3s3p) \ ^3P^o$ є взагалі незадовільною. Дані розрахунки узгоджуються з наявними експериментальними даними при 20 еВ, але БСР37 результати є суттєво нижчими при 10 еВ і вищими при 40 еВ. Обширний розрахунок у наближенні 210 станів ЗСЗ передбачає суттєво нижчі перерізи при 20 еВ та 40 еВ, що, можливо викликано

ефектом сильного зв'язку каналів з іонізаційним континуумом.

Найбільш часто досліджуваним переходом є збудження $(3s^2)^1S \rightarrow (3s3p)^1P^o$. За винятком випадку 10 еВ, дані БСР-результати узгоджуються в межах вказаних похибок з наявними експериментальними даними при всіх енергіях. Інтегровані БСР37-перерізи також добре узгоджуються з такими ж, отриманими із СЗ5-розрахунків, і відповідають результатам РСХ при вищих енергіях. Не є неочікуваним, що РСХ-модель значно переоцінює експериментальні перерізи при нижчих енергіях зіткнення. Найбільш вражаючою особливістю є, мабуть, набагато менші перерізи при низьких енергіях, отримані у ЗСЗ-розрахунку [200]. Він є найбільш обширним розрахунком і можна очікувати отримання найточніших теоретичних даних при проміжних енергіях, кратних кільком порогам іонізації. Зазначимо, що ЗСЗ-перерізи знаходяться в дуже хорошому узгодженні з оптичними вимірюваннями Ліп і Галладжер [216], які включають і каскадні вклади. Філіпович та ін. [174] також порівнювали свої результати з оптичними вимірюваннями, і хороше узгодження було інтерпретовано як додаткове підтвердження своїх даних. Проте, оптичні перерізи включають значні вклади від каскадів (близько 10% при низьких енергіях), і таким чином це порівняння є сумнівним. У світлі великих відмінностей між БСР37 і ЗСЗ109-результатами, вбачається необхідним додаткове вивчення низькоенергетичного діапазону, перед тим як інтегральний переріз $(3s3p)^1P^o$ міг би вважатися остаточно встановленим.

Для вище розміщених станів $(3s4s)^1S$, $(3s3d)^1D$ і $(3s4p)^1P^o$ узгодження з експериментальними даними проявляє подібну для всіх трьох випадків модель поведінки. Спостерігається хороше узгодження при низьких енергіях, але БСР37-розрахунки значно переоцінюють виміряні перерізи при 40 та 60 еВ. Цікаво, що, СЗ5-модель також переоцінює перерізи збудження стану $(3s4s)^1S$, – у той же час її результати лежать нижче більшості експериментальних даних для стану $(3s3d)^1D$ і дуже добре узгоджуються з даними БСР-результатами (за винятком точки при 10 еВ) для стану $(3s4p)^1P^o$. Останні

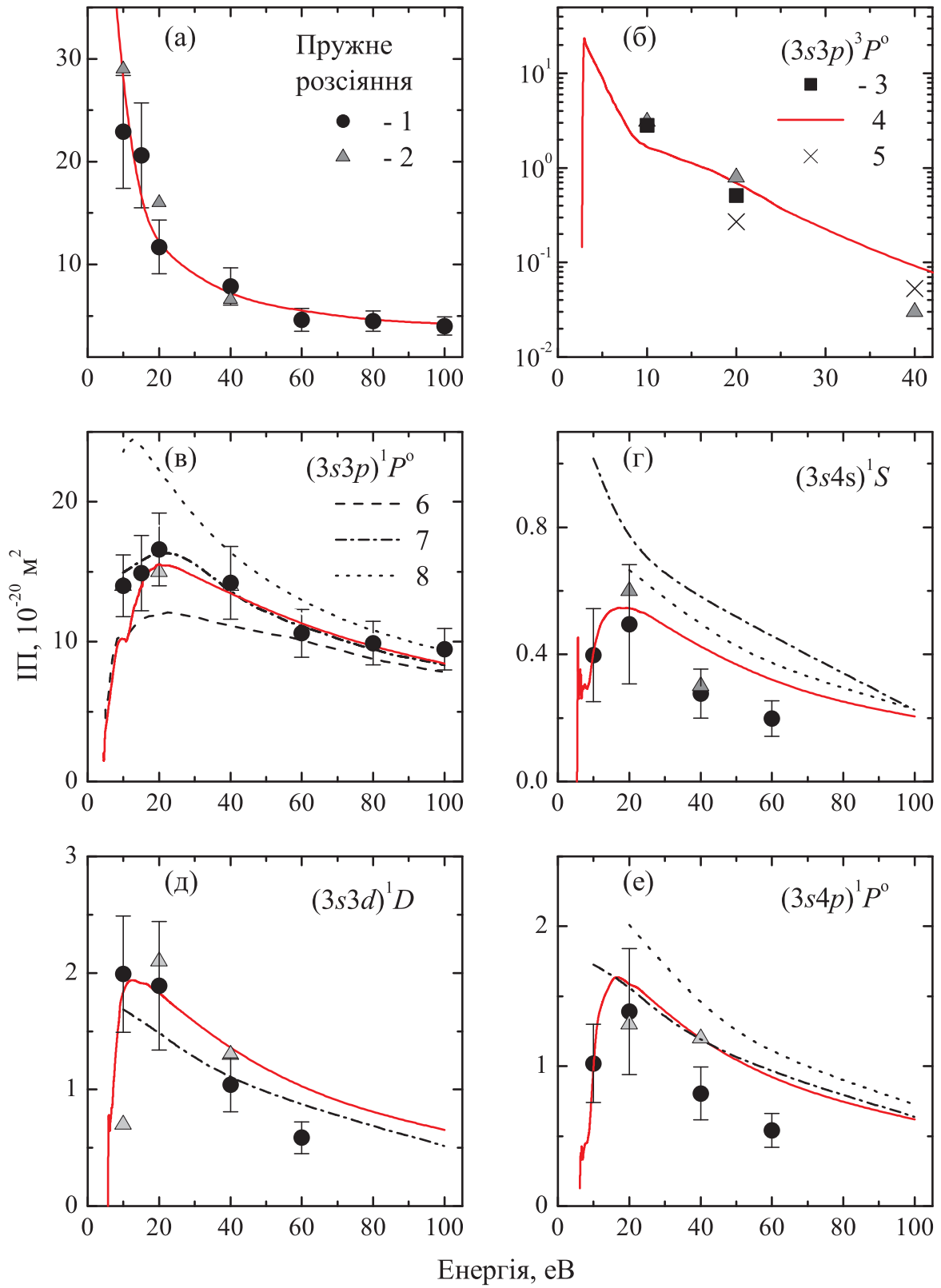


Рис. 3.10. Інтегровані по куту перерізи розсіяння електронів на атомі Mg в основному стані $(3s^2)^1S$. Експеримент: 1 – Предоевич та ін. [175,176]; 2 – Вільямс і Траймар [178]; 3 – Хоуджтон та ін. [180]. Теорія: 4 – наші дані БСР37 [1]; 5 – ЗСЗ210 [172,173]; 6 – ЗСЗ109 [200]; 7 – СЗ5 [203]; 8 – РСХ [202].

РСХ-результати для станів $(3s4s) {}^1S$ і $(3s4p) {}^1P^o$ помітно перевищують дані БСР-перерізи. В загальному, наявні теоретичні результати узгоджуються з даним розрахунком при більш високих енергіях.

3.4 Обговорення ДП та ІП, отриманих у наближенні БСР37

Вище були представлені теоретичні результати для диференціальних по куту і інтегрованих по куту перерізів для пружного і непружного розсіяння електронів на атомах Mg. На відміну від більшості попередніх публікацій з даного питання, чисельні експериментальні дані були порівняні з результатами, отриманими з використанням однієї з найскладніших теоретичних моделей. Таке систематичне порівняння експериментальних і теоретичних даних дозволило оцінити точність наявних результатів і, при наявності розбіжностей, запропонувати напрямки подальших досліджень.

Обчислення проводилися за допомогою розширеної версії методу R -матриці (сильний зв'язок) [21], у якій для представлення континуальних функцій падаючої частинки використовується B -сплайновий базис. Використання неортогональних наборів орбіталей як для побудови хвильових функцій мішені, так і для представлення функцій розсіяння, дозволило генерувати більш точний опис станів мішені, ніж ті, що зазвичай використовувалися у розрахунках зіткнення. Зокрема, дані хвильові функції мішені містять як валентну, так і кор-валентну кореляції *ab initio*, через багатоконфігураційні розклади з відкритим кором.

Отримані в даному дослідженні диференціальні та інтегральні по куту перерізи для пружного розсіяння знаходяться в дуже хорошому узгодженні з останніми по часу здійснення вимірюваннями Предоевич та ін. [175] у широкому діапазоні енергій, включаючи результати при 15, 60 та 80 еВ, для яких до цього часу було відсутнє порівняння з теорією. Для сильного дипольно-дозволеного збудження стану $(3s3p) {}^1P^o$ дані диференціальні по куту пере-

різи добре узгоджуються з наявними вимірюваннями ДП і, зокрема, проявляють помітне поліпшення для прогнозованого ДП при 15 еВ. У той же час, мають місце суттєві відмінності з обширними СЗ-розрахунками [200] щодо інтегрованих по куту перерізів при малих і проміжних енергіях. Ці розходження потребують подальших досліджень стосовно збіжності розкладу сильного зв'язку. Для збудження спин-забороненого стану $(3s3p) \ ^3P^o$ і експериментальні, і теоретичні дані є дещо розпливчатыми і суперечливими. Це може частково бути пояснено тим, що для цього переходу перерізи є відносно малими, тому і опис мішені, і ефекти зв'язку каналів, включаючи зв'язок з іонізаційним континуумом, як очікується, будуть важливими.

Збудження вище розміщених станів $(3s4s) \ ^1S$, $(3s3d) \ ^1D$ і $(3s4p) \ ^1P^o$ у Mg являє собою ще один чутливий тест для перевірки теоретичних концепцій. Для інтегрованих по куту перерізів було встановлено хороше узгодження з експериментом для малих енергій при 10 та 20 еВ, але мають місце помітні і неочікувані розбіжності при вищих енергіях 40 та 60 еВ. Тому цей діапазон енергій пропонується в якості об'єкта для подальших ретельних досліджень, як експериментальних, так і теоретичних. В загальному, для цих станів було отримано значно краще узгодження з експериментом у порівнянні з попередніми розрахунками в наближеннях СЗ5 [203] та РСХ [202], особливо при низьких енергіях.

Нарешті, збудження стану $(3s4s) \ ^1S$ виявилось серйозною проблемою для теорії. Встановлено, що ефекти зв'язку каналів є надзвичайно важливими для цього переходу. Хоча було отримано значне удосконалення для диференціальних по куту перерізів при 10 еВ, даний СЗ-розклад і, відповідно, дані розрахунки, основані на цьому розкладі, напевно, не є повністю збіжним при вибраній кількості зв'язаних станів. Отже, дуже бажаними є ще більш обширні розрахунки. Такі обчислення вимагають розпаралелювання використовуваних комп'ютерних кодів. Робота в цьому напрямку в даний час ведеться.

3.5 Висновки до розділу 3

1) 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 $(3s4p)^1P^o$ при енергіях зіткнення від 10 до 100 еВ. Встановлена важливість врахування кореляційних ефектів при низьких енергіях, та більшої кількості парціальних хвиль при високих.

2) Виявлено сильну чутливість перерізів до ефектів електронної кореляції як у N -електронній мішені Mg, так і в $(N + 1)$ -електронній системі розсіяння e -Mg. Перевагою наближення БСР є можливість врахування цих ефектів через швидкозбіжне сплайн-представлення неортогональних орбіталей. 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.

3) 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 для ряду значень 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.

4) На прикладі зіткнення електронів з атомами магнію встановлено в загальному добре узгодження результатів прецизійних розрахунків у наближеннях БСР та збіжного сильного зв'язку; для з'ясування деяких розбіжностей було б доцільно провести повторні вимірювання з більш високою роздільною здатністю.

РОЗДІЛ 4

РОЗСІЯННЯ ЕЛЕКТРОНІВ НА АТОМІ СТРОНЦЮ

4.1 Стан досліджень процесів розсіяння e –Sr

Атом Sr, на відміну від інших лужноземельних елементів – Mg, Ca, Ba, є порівняно слабо вивченим. Вимірювання повного інтегрального перерізу розсіяння електронів на атомі Sr, виконані Романюк та ін. [181] в інтервалі енергій від 0.1 до 10 еВ, наразі є єдиними експериментальними дослідженнями його енергетичної залежності і резонансної структури. Будь-які вимірювання диференціальних перерізів розсіяння електронів на Sr на даний час відсутні. Хіба що в роботі Казакова та ін. [217] представлена енергетична залежність струму пружного розсіяння електронів на кут 90° .

З теоретичних досліджень відзначимо розрахунки Фабриканта [218] у наближенні сильного зв'язку двох каналів, СЗ2, розрахунки Смітківського і Сенкевича [219] у наближенні релятивістських поляризованих орбіталей і Юань та ін. [220] методом кореляційно-поляризаційного потенціалу, – всі вони стосувалися повних ІП при енергіях до 10 еВ. Релятивістські розрахунки Юань і Жанг [221] та Юань [222] є джерелом даних про ДП пружних зіткнень електронів із атомом Sr при цих же енергіях.

Ще в одній праці Юаня [223] у рамках R -матричної схеми методу сильного зв'язку 11 та 21 станів, були досліджені перерізи розсіяння електронів на атомах Sr та Ba, відповідно, з описом резонансів і припорогових структур. Для стронція, зокрема, представлені результати з розсіяння електронів низьких енергій на Sr та фоторозщеплення від'ємних іонів Sr^- . Набір ДП та ІП, перерізів переносу імпульсу та функцій Шермана для пружного розсіяння електронів на атомах Ba та Sr при енергіях нижче 1 кеВ представлено Адібзадех і Теодосіо [224]. Розрахунки виконані у відносно простому напівемпіричному наближенні (НЕН) з одним підгоночним параметром.

Недавно Фелфлі та ін. [225] у рамках методу полюсів Редже здійснили

розрахунки енергій спорідненості для атомів Ca, Sr та Ce і представили ряд результатів з характеристик розсіяння для вказаних атомів. Так, для атома Sr наведена енергетична залежність інтегрального та парціальних перерізів пружного розсіяння в ультрахолодній області енергій до 0.25 eV з вузьким резонансним піком при 0.054 eV, не спостережуваним у попередніх дослідженнях.

В загальному, на початок наших досліджень процесів e –Sr картина поведінки відповідних енергетичних залежностей повних ІП та кутових розподілів ДП пружного розсіяння виглядала досить фрагментарно. Розрізнені дані, нараховані в достатньо простих наближеннях, вимагали перевірки більш прецизійними обчисленнями з метою встановлення ролі різних фізичних і обчислювальних ефектів. Тому нові детальні розрахунки характеристик розсіяння для всього спектру елементарних переходів у атомі Sr під дією електронного удару є актуальними. Представлені в даному розділі розрахунки розсіяння електронів на атомі стронцію були виконані за допомогою пакету BSR [21], в одному ряду з більш ранніми БСР-розрахунками зіткнення електронів з іншими лужноземельними атомами: e –Ca [205, 226, 227] та e –Mg [1, 4]. Як для випадку кальцію, так і для випадку магнію, окрім „чистих” БСР-обчислень були здійснені також додаткові проміжні розрахунки, виконані у наближенні БКХФ-БСР [4], що поєднує в собі певні обчислювальні переваги обох наближень, реалізованих у пакетах прикладних програм MCHF [22] та BSR [21]. Ці проміжні розрахунки виконувалися з ціллю додаткової перевірки збіжності розкладу сильного зв’язку та контролю точності отримуваних результатів. Проте, розраховані в наближенні БКХФ-БСР атомні характеристики у цілому ряді випадків не поступаються в точності більш „рафінованим” підходам, а подеколи, можливо й випадково, вказують на краще узгодження з експериментом, ніж дані більш витончених методів. Тому якраз це наближення БКХФ-БСР і було обране в якості основного теоретичного методу для дослідження процесів e –Sr. Звичайно, для нейтральної системи Sr I із заря-

дом ядра $Z = 38$ бажаним було би здійснення суто релятивістських розрахунків як структури атома-мішені, так і процесу розсіяння $e\text{--Sr}$. Проте, на час здійснення даного дослідження розсіяння $e\text{--Sr}$ повністю релятивістська версія методу R -матриці з B -сплайнами, основана на розв'язанні рівняння Дірака (ДБСР) [167], ще не була готова. Навпаки, нерелятивістські розрахунки атома стронцію і виявлені при цьому проблеми слугували додатковим стимулом для розробників новітнього програмного продукту. Забігаючи наперед зазначимо, що релятивістські ДБСР-розрахунки розсіяння $e\text{--Sr}$, при умові їх здійснення, стануть логічним завершенням представлених у даному розділі досліджень. Нижче описано порядок розрахунку в наближенні БКХФ-БСР31 перерізів пружного та повного розсіяння електронів на атомі Sr і представлено отримані при цьому результати [5].

4.2 Розрахунки структури атома Sr та розсіяння $e\text{--Sr}$

Як зазначено вище, в розрахунках лужноземельного атома Sr була використана методика, апробована до цього на атомних системах Mg [1, 4] та Ca [205, 226, 227]. Подібно до атомів Ca [227] та Mg [4], розрахунки структури мішені Sr у даному дослідженні були здійснені за допомогою пакету MCHF [22, 57]. Загальна теорія БСР-розрахунків розсіяння та опис комп'ютерних програм пакету BSR наведені в [21]. Особливості застосування методу БКХФ-БСР до розрахунків атомів Ca та Mg, багато в чому подібних за будовою до Sr, викладені, відповідно, у працях [227] та [4].

Даний розклад сильного зв'язку включав 31 нижній спектроскопічний стан атома Sr, аж до стану $5s4f\ ^1F^o$. Розмір a „боксу” R -матриці приймався рівним $a = 80\ a_0$ (де $a_0 = 0.529 \times 10^{-10}$ м, – борівський радіус). Збереження суттєвих каналів у розкладі сильного зв'язку дозволило додатково врахувати частину валентної кореляції, у той час як кор-валентна кореляція була включена шляхом використання багатоконфігураційного розкладу для ста-

нів мішені Sr у вигляді

$$\phi(4p^6nl n'l') = a_{nl}\phi_{HF}(4p^6nl n'l') + \sum_{\bar{n}l\bar{n}'l'} b_{\bar{n}l\bar{n}'l'}\chi(4p^55s\bar{n}l\bar{n}'l'), \quad (4.1)$$

де хартрі-фоківські хвильові функції $\phi_{HF}(4p^6nl n'l')$ були покращені кореляційними функціями χ при $4p$ -збудженому корі. Кореляційні орбіталі $\bar{n}l$ були оптимізовані для кожного стану окремо.

У дані розрахунки були включені 119 B -сплайнів порядку 8. У кінцевому розкладі станів мішені зберігалися тільки конфігурації з коефіцієнтами розкладу більшими за 0.004, і отримані розклади містять від 50 до 270 конфігурацій для кожного стану. Стани мішені, включені в дані розрахунки розсіювання, наведені в таблиці А.3, де розраховані енергії збудження цих станів порівняні з експериментальними значеннями Мур [228] (зауважимо, що на час здійснення розрахунків Sr I, структурні дані НІСТ [229] для цієї нейтральної атомної системи були відсутні; проте вказана обставина ажніяк не впливає на сутність і зміст подальшого обговорення). Узгодження з експериментом є достатньо хорошим, з похибками, в цілому, меншими за 0.1-0.2 еВ (а подекуди й 0.01 еВ), за винятком стану $4d5p\ ^1F^o$ (див. табл. А.3).

Розрахунки $(N+1)$ -електронної задачі розсіювання e -Sr у внутрішній області ($r \leq a$) подібні до виконаних перед цим для Mg [1,4]. Як і при розрахунку структури Sr, тут використані 119 B -сплайнів порядку 8, з R -матричним радіусом $a = 80a_0$. Парціально-хвильові вклади розраховувалися до $L = 50$. Перерізи обчислювалися за стандартною R -матричною схемою, з використанням для зовнішньої області пакету FARM [230].

4.3 Результати розрахунків розсіювання e -Sr

На рис. 4.1 зображені пружні і повні ІП розсіювання e -Sr. Поряд з оригінальними значеннями вимірюваних на експерименті ІП [181], на рисунку представлені калібровані (зі зсувом вправо на 0.98 еВ) та нормовані (фактором

1.2) експериментальні ІІ, рис. 4.1а.

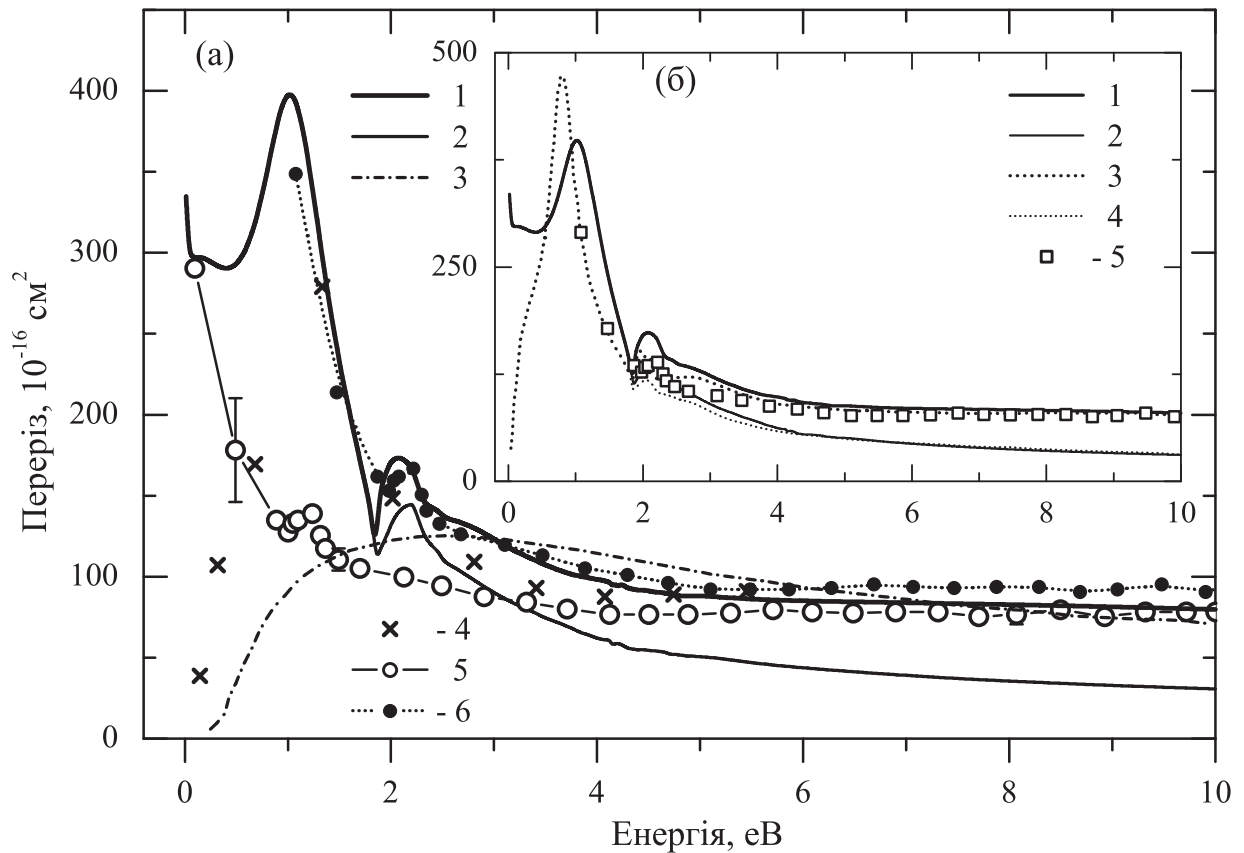


Рис. 4.1. Повний і пружний перерізи розсіяння електронів на атомі Sr в області енергій до 10 еВ.

а) Теорія: 1 – БКХФ-БСРЗ1, повний переріз [5]; 2 – БКХФ-БСРЗ1, пружний переріз [5]; 3 – наближення релятивістських поляризованих орбіталей [219]; 4 – СЗ2 [218]. Експеримент: 5 – Романюк та ін. [181]; 6 – Романюк та ін. [181], дані калібровані зі зсувом вправо на 0.98 еВ та нормовані фактором 1.2.

б) 1 – БКХФ-БСРЗ1, повний переріз [5]; 2 – БКХФ-БСРЗ1, пружний переріз [5]; 3 – РМ11 [223], повний переріз; 4 – РМ11 [223], пружний переріз; 5 – Романюк та ін. [181], дані калібровані зі зсувом вправо на 0.98 еВ, без нормування.

Калібрування та нормування проводилися з метою якнайкращого візуального узгодження вимірюваних в експерименті [181] і розрахованих у наближенні БКХФ-БСРЗ1 перерізів в області енергій до 4 еВ над порогом реакції. Зокре-

ма, контролювався максимально точний збіг малих піків у експериментальних і теоретичних залежностях ІП вище порогу збудження стану 5^3P^o . На рис. 4.1а показані також СЗ2-перерізи Фабриканта [218] та ІП наближення релятивістських поляризованих орбіталей Смітковського і Сенкевича [219], що майже не відтворюють резонансну структуру експериментального ІП в області енергій до 2.5 еВ.

На рис. 4.1б представлені калібровані в даному дослідженні експериментальні ІП [181], але вже без нормування. На цьому ж рисунку, перерізи БКХФ-БСР31 порівнюються з РМ11-перерізами Yuan [223], з якими практично збігаються при енергіях вище ~ 3.5 еВ. З порівняння даних, наведених у вікнах (а) та (б) рис. 4.1, видно, що нормування (фактором 1.2) виміряних ІП, є не зовсім виправданим. Воно було здійснене з допоміжною ціллю, щоб наочно обґрунтувати необхідність калібрування експериментальних ІП, шляхом їх зсуву вправо на 0.98 еВ. Як видно з рис. 4.1б, наближення БКХФ-БСР31 в області енергій до ~ 3.5 еВ на 5-20% завищує значення пружного (і відповідно повного) перерізів розсіяння $e-Sr$. Що стосується наведеного у роботі Фелфлі та ін. [225] резонансного піку у d -хвилі в ІП пружного розсіяння при енергії 0.054 еВ, то ця структура нами не підтверджується.

Проте поведінка отриманого у даних розрахунках парціального $^2P^o$ -перерізу в околі ~ 0.041 еВ низькоенергетичної області не виключає можливості прояву резонансу форми $5s^25p[^2P^o]$ при більш детальному розгляді ультрахолодного діапазону енергій. У той же час, висновок Юаня [223] щодо обумовленості припорогового максимуму в повному ІП резонансом форми 2D в околі 0.8 еВ і щодо наявності меншого піку вище порогу збудження 5^3P^o узгоджується з нашими даними. Проте потужний резонанс форми $5s^24d[^2D]$ в ІП пружного розсіяння у даних розрахунках спостерігається в околі енергії 1.0373 еВ, а неповністю проявлений (через відкриття нових каналів розсіяння) резонанс $5s5p^2[^1D]^2D$ – при енергії 1.8600 еВ. Останній, до речі, окрім прояву в ІП пружного розсіяння, формує також припороговий резонансний

пік в ІІІ збудження стану $5s5p[{}^3P^o]$, що дає можливість чітко „привязати” до нього менший з піків у повному перерізі зіткнення $e\text{--Sr}$ [181] і, таким чином, відкалібрувати цей експериментальний переріз. Щоб завершити тему резонансів в ІІІ розсіяння $e\text{--Sr}$ у припороговій області до 2 еВ, зазначимо, що ще один чіткий резонансний пік спостерігається при енергії 1.9868 еВ у парціальній ${}^2D^o$ -хвилі ІІІ пружного розсіяння на атомі Sr у метастабільному стані $5s5p[{}^3P^o]$ і відповідає утворенню резонансу форми $5s5p[{}^3P^o]4d[{}^2D^o]$. Мінімум Рамзауера-Таундерса в парціальній s -хвилі спостерігається при енергії ~ 0.068 еВ. Відмінності в результатах наближення БКХФ-БСР31 та методології полюсів Редже авторів статті Фелфлі та ін. [225] – щодо трактування поведінки інтегральних та парціальних перерізів розсіяння $e\text{--Sr}$ в області ультранизьких енергій зв’язані, насамперед, з різним способом розрахунку структури мішені атома Sr і, відповідно, різним способом врахування електронної кореляції у вказаних підходах. Очевидно, що застосований у [225] до розрахунку мішені Sr метод Томаса-Фермі поступається в точності методу БКХФ, тому вважатимемо результати даного дослідження прийнятнішими.

На рис. 4.2 та 4.3 приведені кутові залежності ДП пружного розсіяння $e\text{--Sr}$ для енергій 0.05, 0.1, 1.0, 1.6, 2, 3, 5 та 10 еВ. Дані БКХФ-БСР31 порівняні з даними R -матричного наближення РМ11 Юань і Жанг [221], результатами підходу Дірака-Фока (ДФ), Юань [222], і напівемпіричного наближення Адібзадех і Теодосіо [224]. Наші ДП якісно узгоджуються з даними [221, 222] для всіх енергій, крім 0.05 еВ, однак дещо відрізняються по величині.

Перерізи, отримані в [221, 222] при енергії 0.05 еВ, мають два локальні мінімуми, що навряд чи вірно для таких малих енергій. Результати Юаня [222] у наближенні Дірака-Фока, за винятком енергій 0.05 і 0.1 еВ, близькі до даних БКХФ-БСР31. Кутова залежність напівемпіричних ДП [224] для енергії 1.0 еВ якісно відрізняється від обох R -матричних результатів та даних Юаня [222]. З ростом енергії результати Адібзадех і Теодосіо [224] дещо зближуються з нашими даними, рис. 4.3.

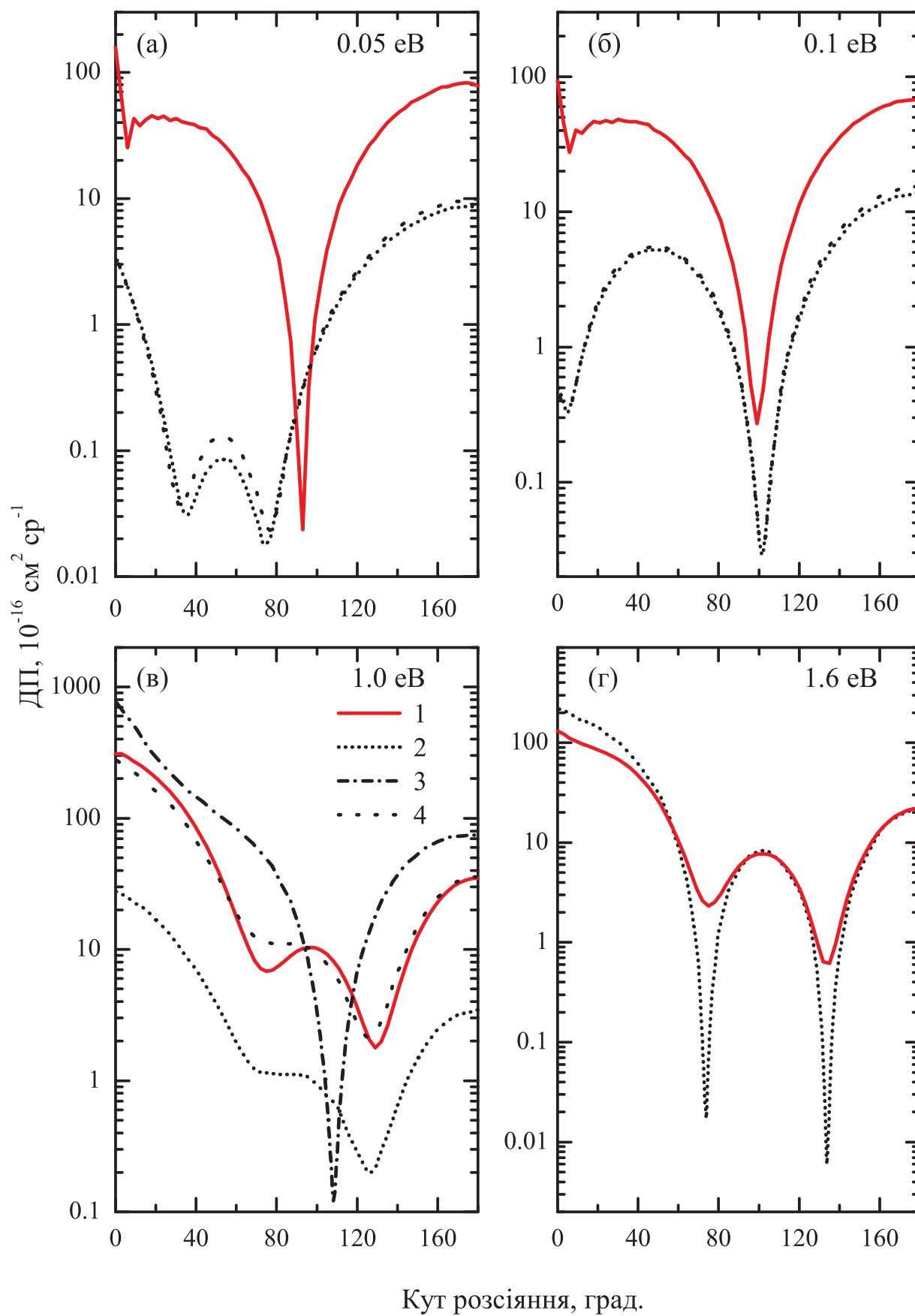


Рис. 4.2. Диференціальні перерізи пружного розсіяння e – Sr .

Теорія: 1 – БКХФ-БСР31 [5]; 2 – РМ11 [221]; 3 – НЕН [224]; 4 – ДФ [222].

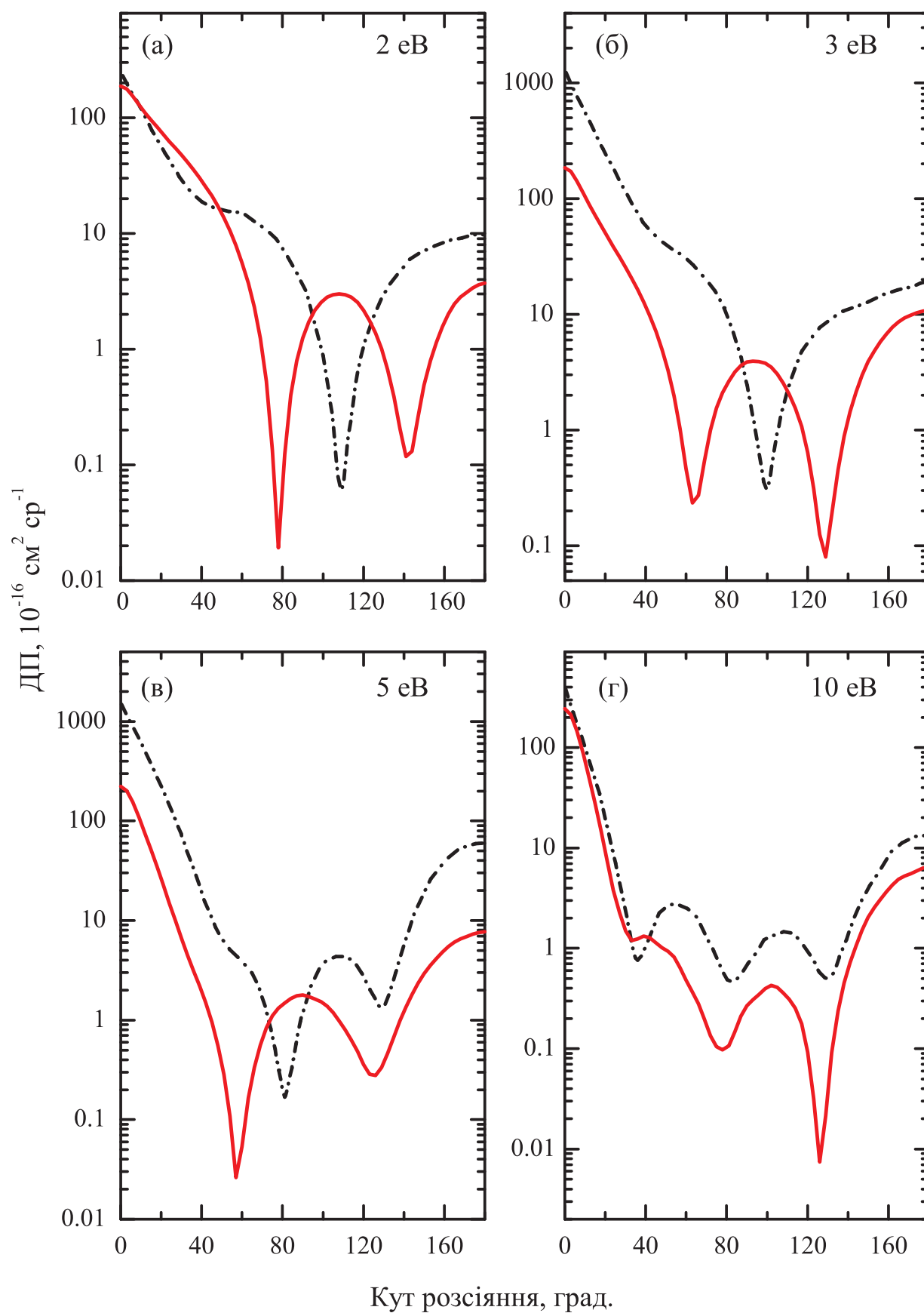


Рис. 4.3. Диференціальні перерізи пружного розсіяння $e\text{--Sr}$. Позначення як на рис. 4.2.

4.4 Висновки до розділу 4

1) У комбінованому наближенні БСР-БКХФ31 із залежними від терму неортогональними орбіталями здійснено чисельні розрахунки зіткнення низькоенергетичних електронів з атомом стронцію. Отримано енергетичні залежності ІП пружного розсіювання та збудження 31 нижчих станів атома Sr, включених у розклад сильного зв'язку, і побудовано повний переріз зіткнення $e\text{--Sr}$ в області енергій до 10 еВ.

2) Виявлено наявність двох максимумів у енергетичних залежностях ІП розсіювання $e\text{--Sr}$ при енергіях зіткнення 1.04 еВ та 1.86 еВ. Встановлено, що перший з них відповідає потужному резонансу форми $5s^24d[{}^2D]$ у 2D -хвилі, а другий – неповністю проявленому (через відкриття та конкуренцію нових каналів непружного розсіювання) резонансу $5s5p^2[{}^1D]{}^2D$.

3) Детальне порівняння спостережуваних енергетичних залежностей ІП розсіювання $e\text{--Sr}$ із передбаченнями моделі БСР-БКХФ31 підтвердило висновок Юаня [223] про необхідність калібрування експериментальних перерізів Романюк та ін. [181] шляхом їх зсуву (вверх) по енергії на 0.98 ± 0.05 еВ.

РОЗДІЛ 5

РОЗСІЯННЯ ЕЛЕКТРОНІВ НА АТОМІ КРЕМНІЮ

5.1 Стан досліджень процесів розсіяння e –Si

Атом кремнію належить до напоширеніших елементів природи і точні атомні дані для пружного розсіяння і збудження електронним ударом цієї мішені є важливими для моделювання різних видів астрофізичної плазми. Зокрема, кремній дає значний вклад у сонячну і зоряну непрозорість в ультрафіолетовій області. Композитні матеріали кремнію і його гало-суміші також використовуються в різних плазмових пристроях. Віднедавна кремній став широко застосовуватися в нанотехнологіях [231–233]. Він утворює майже досконалі інертні поверхні для нанесення на них біомолекул, і є також придатним для моделювання реакцій радіаційного детектора.

Тому необхідне детальне знання різноманітних властивостей кремнію, включаючи точні дані з перерізів електронного розсіяння. Проте, в літературі майже відсутні перерізи розсіяння електронів на атомі кремнію. Відсутність даних з вимірюваних перерізів пояснюється труднощами отримання достатньої кількості атомів кремнію в газоподібній фазі у добре визначеному початковому стані. У свою чергу, відсутність експериментальних даних аж ніяк не мотивувала проведення досконалих теоретичних досліджень: останні з нечисленних розрахунків були здійснені майже 40 років тому [234]. Їхні автори використовували прості описи структури мішені та моделі електрон-атомного зітнення і цікавилися тільки пружним розсіянням на основному стані та кількома переходами між нижчими збудженими станами.

У даному розділі представлені результати досліджень [2], що мали на меті отримання обширних наборів даних з перерізів пружного розсіяння та збудження атома кремнію електронним ударом. Розрахунки були здійснені у рамках методу R -матриці з B -сплайнами (сильний зв'язок) за допомогою прецизійної програми BSR [21]. Впродовж останнього десятиріччя програма BSR

(разом з її повністю релятивістським розширенням DBSR [235]) була успішно застосована до ряду мішеней (див. напр. [236]) і в більшості випадків перерізи були точніші, ніж отримані з використанням стандартної R -матричної техніки. Зазначимо, що набір програм BSR формує загальний код для багатоелектронних мішеней, і його переваги, зокрема, проявляються у випадку розсіяння електронів на системах зі складною структурою конфігурацій, що включають кілька відкритих оболонок. Для прикладу назвемо розсіяння електронів на атомах з відкритими оболонками O [237], S [238] та C [239], останній з яких має електронну структуру подібну до атома кремнію, який розглядається тут.

Матеріал даного розділу організовано наступним чином. Після обговорення опису структури мішені наводяться найбільш важливі аспекти розрахунків зіткнення. Аналіз результатів супроводжується представленням перерізів найважливіших переходів, починаючи з пружного розсіяння електронів на Si в його основному стані і двох нижніх збуджених станах. За відсутності доступних для порівняння експериментальних результатів, тут представлено два набори розрахунків, відповідно, з 34 і 41 станами мішені, включеними в розклад сильного зв'язку. Перша модель містить тільки фізичні зв'язані стани, в той час як друга включає також поляризаційні псевдостани. Порівняння результатів цих двох обчислень дає певне уявлення про чутливість розрахованих перерізів до деталей використовуваної моделі.

5.2 Методика розрахунку розсіяння електронів на Si I

5.2.1 Розрахунки структури. Атом кремнію може розглядатися як сильно корельована чотири-електронна система в потенціалі кора $1s^2 2s^2 2p^6$. Це робить дуже важким отримання точних хвильових функцій за допомогою стандартного методу Хартрі-Фока або багатоконфігураційного методу Хартрі-Фока. Як показали останні великомасштабні БКХФ-розрахунки сил

осциляторів Si [240], добре збіжні результати були отримані тільки з дуже обширними розкладами, що містять аж до 20 000 конфігурацій. У даних розрахунках станів мішені Si проявилось намагання врахувати всі кореляційні ефекти, у той же час маючи на увазі, що результуючі багатоконфігураційні розклади повинні бути використані в подальшому розрахунку зіткнення, де треба врахувати ще один зв'язаний електрон. Оскільки в мішені атома кремнію релятивістські ефекти є відносно малими, стани мішені для розрахунків зіткнення були згенеровані за допомогою B -сплайнового обмеженого у боксі методу сильного зв'язку [207] в нерелятивістському наближенні LS -зв'язку.

Зокрема, структура багатоканального розкладу мішені була вибрана у вигляді

$$\begin{aligned} \Phi(3s^2 3pnl, LS) = & \sum_{nl} \{\phi(3s^2 3p)P(nl)\}^{LS} + \sum_{nl} \{\phi(3s 3p^2)P(nl)\}^{LS} + \\ & + \sum_{nl} \{\phi(3s^2 3d)P(nl)\}^{LS} + \sum_{nl} \{\phi(3s^2 4s)P(nl)\}^{LS} + \\ & + a_{LS} \varphi(3s^2 3p^2)^{LS} + b_{LS} \varphi(3s 3p^3)^{LS}. \end{aligned} \quad (5.1)$$

Тут $P(nl)$ позначає хвильову функцію зовнішнього валентного електрона, а ϕ та φ – функції, що відповідають іонним та окремим атомним станам у розкладі взаємодії конфігурацій. Ці розклади були згенеровані в окремих БКХФ-розрахунках для кожного стану з використанням програми MCHF [241]. Розклад (5.1) може розглядатися, як модель для повних рідбергівських серій зв'язаних станів $3s^2 3pnl$ атома Si, розрахованих за допомогою пертурбаційних станів $3s^2 3p^2$ і $3s 3p^3$ для окремих LS -термів. Кожна з сум, наявних у представленому розкладі, описує головні дипольні переходи $3s - 3p$, $3p - 3d$ та $3p - 4s$ між станами іона, включаючи, таким чином кор-валентну (далекодійну) кореляцію для зовнішніх електронів. Внутрішньокорова (близькодійна) кореляція включається через НК-розклад іонних станів. Ці розклади включають всі одно-, дво- і трьохкратні збудження з $3s$ та $3p$ -орбіталей у $4l$ та $5l$ ($l = 0 - 4$) кореляційні орбіталі, які були згенеровані окремо для кожного

стану. Щоб отримати скінченні розклади прийнятної розміру для атомних станів, всі іонні вклади з величинами коефіцієнтів розкладу меншими за 0.01 були опущені.

Невідомі функції $P(nl)$ для зовнішнього валентного електрона були розкладені в B -сплайновому базисі, а відповідні рівняння були розв'язані з накладеними крайовими умовами, що зануляють хвильову функцію на границі. Коефіцієнти B -сплайнів для валентних орбіталей $P(nl)$ разом з коефіцієнтами a_{LS} і b_{LS} для пертурбацій були отримані шляхом діагоналізації атомного гамільтоніана. Розглянута вище схема дає набір залежних від терму одноелектронних орбіталей для кожної валентної орбіталі, а також включає важливі взаємодії між рідбергівськими серіями $3s^23pnl$ та $3s3p^3$ -пертурбаціями.

Оскільки B -сплайнові (сильний зв'язок) розрахунки зв'язаних станів генерують різні неортогональні набори орбіталей для кожного стану атома, їх подальше використання є дещо ускладненим. З іншого боку, дані конфігураційні розклади для станів атомної мішені містили не більше 200 конфігурацій для кожного стану і, отже, могли використовуватися в розрахунках зіткнення з помірними обчислювальними ресурсами.

В таблиці А.4 розрахований спектр атома кремнію порівнюється з експериментальними значеннями [242] для різних мультиплетів. Узгодження між експериментом і теорією є достатньо хорошим, з відмінностями в енергіях зв'язку меншими ніж 0.02 еВ для більшості станів. Максимальна відмінність між даними результатами і експериментом складає 0.08 еВ для стану $3s^23p^2\ ^1S$.

Якість даного опису мішені може бути оцінена також шляхом порівняння результатів для сил осциляторів різних переходів з експериментальними даними та іншими теоретичними передбаченнями. Таке порівняння даних БСР-результатів з недавніми великомасштабними БКХФ-розрахунками Фрозе Фішер [240] і експериментальними даними О'Брайен і Левлер [243] наведено в таблиці А.5. Експериментальні gf -значення для переходів тонкої структури

були перетворені до мультиплетних LS -значень шляхом їх об'єднання, з урахуванням відповідних ваг. У більшості випадків спостерігається хороше узгодження з експериментальними даними, хоча деякі передбачення виходять за межі експериментальних похибок. У загальному, має місце також близьке узгодження отриманих БСР-даних з відповідними БКХФ-результатами [240]. Наявні ж невідповідності можуть бути пояснені набагато меншими розкладами мішені, використовуваними в даних розрахунках.

5.2.2 Поляризовані псевдостани. Для пружного розсіювання при малих енергіях дуже важливо включити до повного розкладу поляризацію основного стану мішені. Поляризованість станів Si є відносно великою (див. нижче). Крім того, зазвичай більше 50% повної поляризації спричиняється збудженням континууму мішені. Врахування останнього може приводити до повільної збіжності розкладу сильного зв'язку, який повинен містити велике число псевдостанів, щоб відтворити зв'язок з каналами іонізації. З обчислювальної сторони це приводить до дуже обширних розрахунків.

Більш ефективним у даному випадку шляхом врахування поляризації мішені є, на наш погляд, використання так званих „поляризаційних псевдостанів”. Вони були розглянуті у задачі розсіювання, наприклад, Бьорком і Мітчеллом [244]. У найпростішому випадку атомного S -стану відповідний поляризаційний псевдостан ψ_p може бути визначений у відповідності до вимоги, щоб статична електрична дипольна поляризація атомного стану ψ_0 була визначена одним доданком згідно

$$\alpha = 2 \frac{|\langle \psi_0 | D^{(1)} | \psi_0 \rangle|^2}{E_p - E_0}, \quad (5.2)$$

де $D^{(1)}$ - електричний дипольний оператор, у той час як E_0 і E_p - повна енергія основного стану і поляризаційного псевдостану, відповідно. Як показали Бьорк і Мітчелл [244], ψ_p є нормованим розв'язком рівняння

$$(H - E_0)\psi_p = D^{(1)}\psi_0, \quad (5.3)$$

з енергію, що задається як

$$E_p = \langle \psi_p | H | \psi_p \rangle . \quad (5.4)$$

У більш загальному випадку стану з ненульовим орбітальним моментом, псевдостани мають бути визначені для кожного оптично дозволеного переходу, і їхні вклади до дипольної поляризації повинні бути складені одні з одними (див. табл. А.6). Як було показано не так давно для розсіюння електронів на Кг [245], поляризаційні псевдостани дозволяють дуже точний опис низькоенергетичного пружного розсіювання, оснований на першопринципах, без використання будь-яких напівемпіричних поляризаційних потенціалів.

Поляризаційні псевдостани в даних розрахунках були отримані для кількох станів мішені з того ж розкладу (5.1), що і для спектроскопічних зв'язаних станів. Для запобігання подвійного підрахунку, на включені в розклад зв'язані стани були накладенні додаткові обмеження ортогональності. Зокрема, була відтворена поляризація чотирьох нижніх зв'язаних станів. Енергії обговорюваних поляризаційних псевдостанів наведені в табл. А.4, у той час як відповідні поляризації представлені в табл. А.6.

Повна статична поляризація основного стану знаходиться в близькому узгодженні з представленими в інших недавніх розрахунках. Псевдостани також відтворюють деякі ефекти зв'язку з дуже важливими каналами збудження у високорозміщені стани зі збудженим кором $3s3p^3\ ^1P$, 3P і 1D , які безпосередньо не включалися у розклад сильного зв'язку. Ці $3s3p^3$ стани є автоіонізаційними станами, що дуже сильно взаємодіють зі спряженим континуумом. Відмітимо, що пряме обчислення цих станів за допомогою стандартних програм для розрахунку атомної структури є дуже важким.

5.2.3 Розрахунки розсіювання. Розклад сильного зв'язку в даному дослідженні включав 34 спектроскопічні стани атома кремнію плюс 7 поляризаційних псевдостанів, які перераховані у таблиці А.4. Відповідні рівняння

сильного зв'язку були розв'язані методом R -матриці, з використанням пакету програм BSR [21]. Відмітною особливістю методу є використання B -сплайнів у якості універсального базису для представлення орбіталей розсіювання у внутрішній області $r \leq a$. Отже, R -матричний розклад у цій області приймає форму аналогічну до (2.12), де каналні функції $\bar{\Phi}_i$ були побудовані з N -електронних станів мішені, а в якості базисних функцій $u_j(r_{N+1})$ використовувалися B -сплайни $B_j(r_{N+1})$, що представляють континуальні орбіталі. Функції χ_i є додатковими $(N + 1)$ -електронними зв'язаними станами, обговореними вище.

Проте, в даній моделі зв'язані канали були використані тільки для опису дійсно зв'язаних станів зіткнувальної системи e -Si, а саме станів $3s^2 3p^3 \ ^4S$, $\ ^2D$ і $\ ^2P$ від'ємного іона Si^- . Для цих станів використовувалися обширні розклади БКХФ, щоб гарантувати близькість їхніх енергій до експериментальних значень -1.389 , -0.527 і -0.029 еВ, відповідно, [246]. Оскільки функції χ_i уже побудовані в багатоконфігураційній формі, коефіцієнти d_{ik} у даному дослідженні представляють повний розклад $(N + 1)$ -електронних зв'язаних станів. Така процедура має практичні переваги щодо уникнення в розв'язках розсіювання псевдорезонансних структур.

Значення R -матричного радіусу було встановлено рівним $60a_0$, де $a_0 = 0.529 \times 10^{-10}$ м – борівський радіус. Воно є достатньо великим, щоби всі орбіталі мішені ефективно занулялися на границі. Для охоплення вказаного радіального діапазону в даних розрахунках використовувалися 140 B -сплайнів. Така відносно велика кількість сплайнів робить можливим охоплення енергій електрона аж до 150 еВ. Парціальні хвилі для повного кутового моменту до $L = 20$ розраховувалися чисельно, а далі використовувалася процедура додаткового підсумовування (top-up), щоб оцінити внесок у перерізи від вищих значень L . Обчислення для зовнішньої області були виконані з використанням гнучкого асимптотичного R -матричного пакету FARM [230].

5.3 Результати розрахунку розсіяння e –Si

Енергетичні залежності перерізів для найбільш важливих переходів з основного і метастабільних станів Si I представлені на рис. 5.1-5.4. Всі енергії електронів дані відносно основного стану $3s^2 3p^2 \ ^3P$. Через майже повну відсутність інших теоретичних результатів і експериментальних даних, тут здебільшого порівнюються два набори розрахунків, виконаних з включенням і без включення поляризаційних псевдостанів. Це дозволяє перевірити, по крайній мірі до деякої степені, чутливість результатів до деталей моделі.

Пружні перерізи і перерізи переносу імпульсу для розсіяння електронів на Si I у трьох станах основної конфігурації $3s^2 3p^2$ представлені на рис. 5.1. Всі перерізи проявляють подібну одна до одної енергетичну залежність з крутим максимумом при 4.2 еВ, який спричинений сильним $3s 3p^4 \ ^4P$ -резонансом. Вузький максимум у пружному порозі також викликається 4P -парціальною хвилею в ks -каналі розсіяння, вказуючи, таким чином, на велику довжину розсіяння. Мають місце й інші резонансні особливості, проте, їхній вклад є незначним. На рис. 5.1 показано тільки розрахунки з поляризаційними псевдостанами. Модель розсіяння БСР з 34-ма станами дає дуже подібні результати за винятком близької до порогу області нижче 0.01 еВ, де включення псевдостанів зменшує припороговий максимум.

Перерізи збудження для деяких важливих переходів з основного стану $3s^2 3p^2 \ ^3P$ представлені на рис. 5.2. Спін-заборонені переходи в стани 1D і 1S тієї ж самої конфігурації проявляють поведінку, типову для обмінних переходів: перерізи мають домінуючий максимум при низьких енергіях і швидко зменшуються при вищих енергіях. Псевдостани мають малий вплив для спін-заборонених переходів. Відзначимо, що виявлений ефект є дещо несподіваним, – тести показали, що його причиною є домінування резонансних вкладів у окремих парціальних хвилях.

Як видно з графічних вікон для переходів у стани $3p 4s \ ^3P^o$, $3p 3d \ ^3D^o$ і

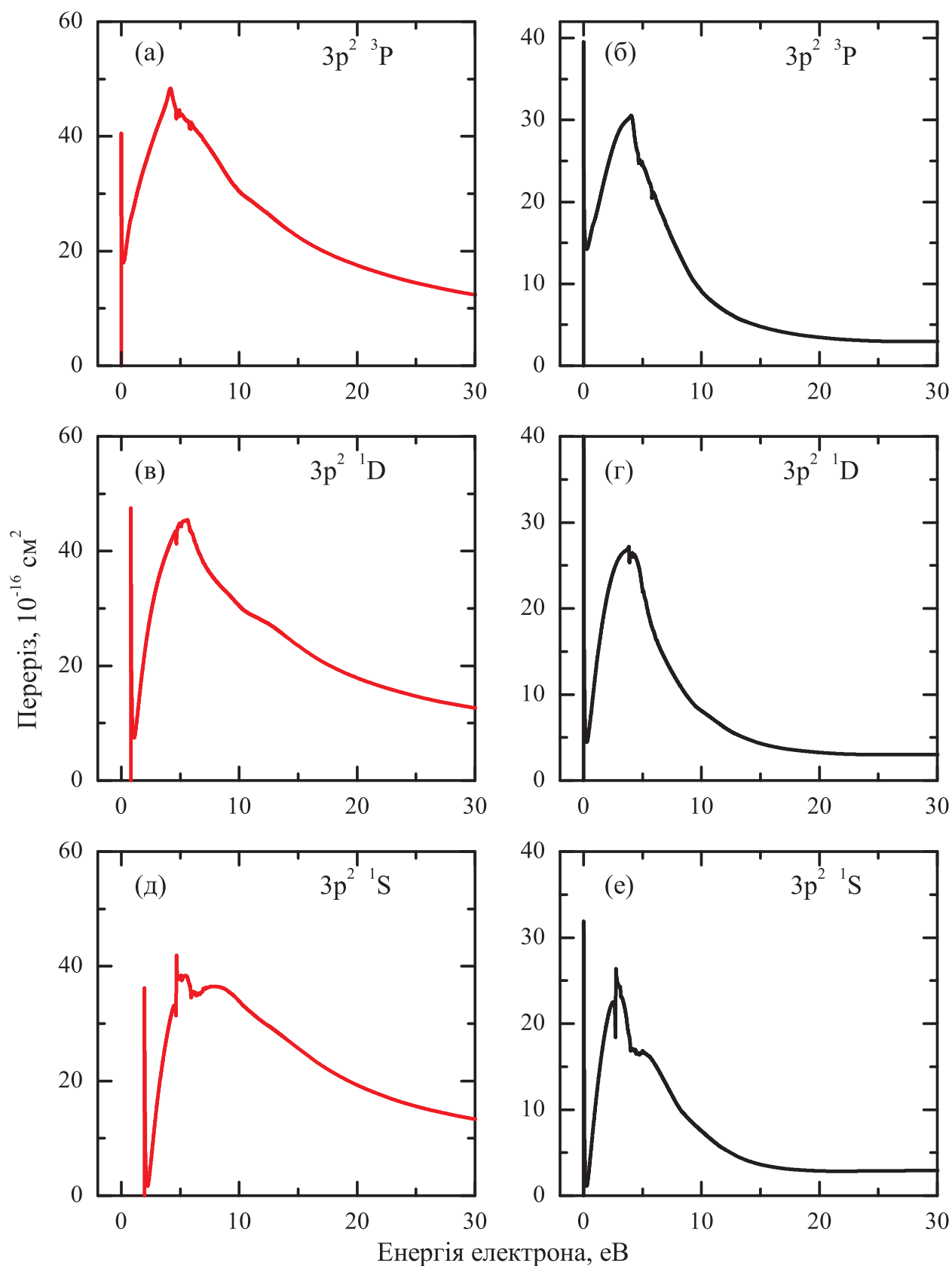


Рис. 5.1. Пружні перерізи (на панелях зліва) і перерізи переносу імпульсу (на панелях справа) для розсіяння електронів на атомі Si у трьох станах основної конфігурації $3s^2 3p^2$.

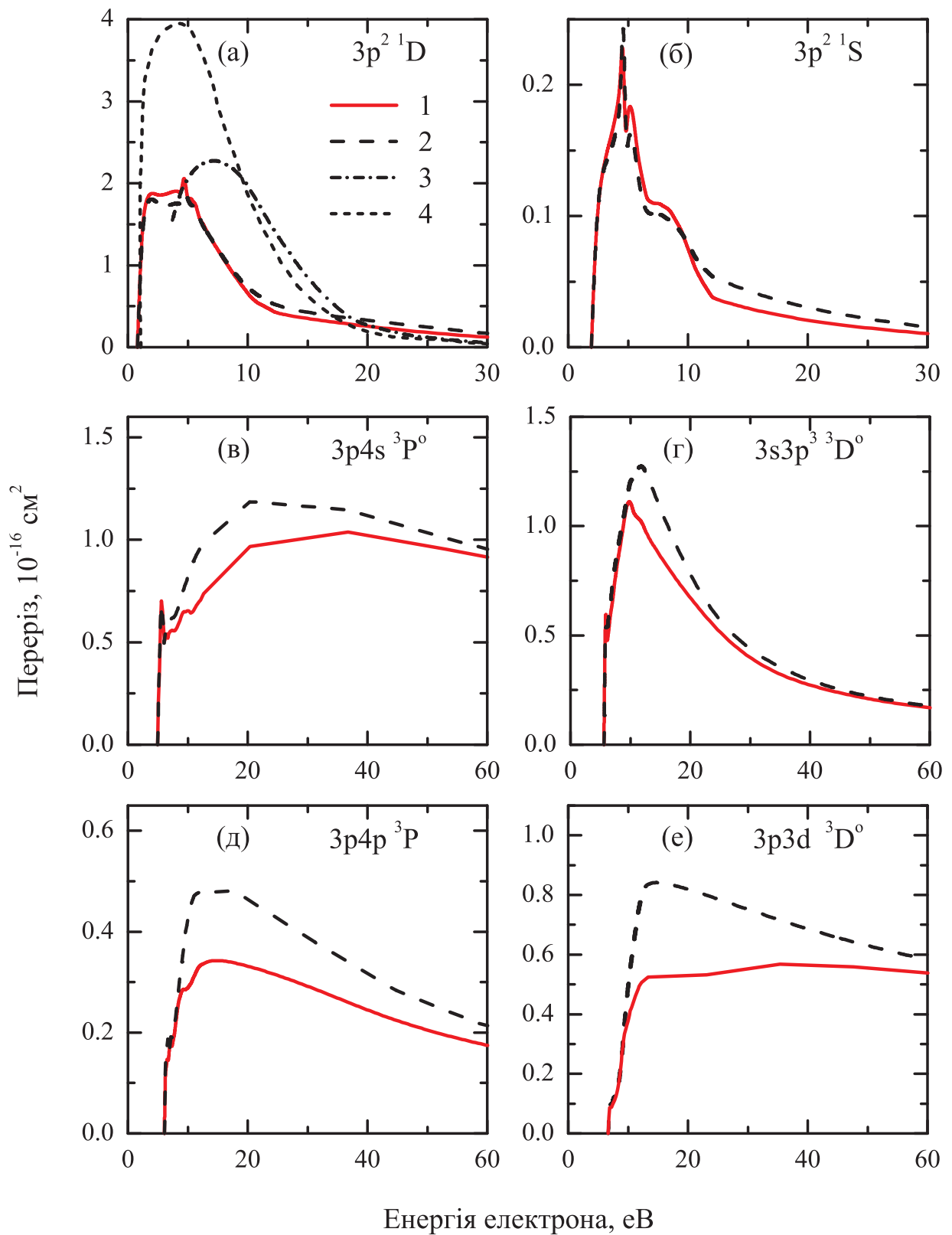


Рис. 5.2. Енергетичні залежності ІП найважливіших переходів з основного стану $3s^2 3p^2 \ ^3P$ атома Si: 1, 2 – наші дані БСР41 та БСР34 [2], відповідно, з урахуванням 7 поляризаційних псевдостанів і без такого; 3, 4 – результати наближення спотворених хвиль для переходу $^3P \rightarrow ^1D$: метод Хартрі-Фока та адіабатично-обмінний метод, відповідно [234].

$3p4p\ ^3P$, поляризаційні псевдостани, однак, мають суттєвий вплив на спін-дозволені переходи у широкому діапазоні енергії налітаючого електрона. Тести показують, що чутливість результатів до включення цих станів поширюється на кілька парціально-хвильових симетрій. Оскільки поляризаційні псевдостани описують, зокрема, збудження континууму мішені, можна покласти, що для високорозміщених станів розклад сильного зв'язку збігається повільно.

З більш ранніх результатів, доступних для порівняння, у наявності є розрахунки у наближенні спотворених хвиль Піндзоли та ін. [234] для переходу $3s^23p\ ^3P \rightarrow ^1S$ у межах основної конфігурації атома кремнію. Ці автори використовували наближення Хартрі-Фока і адіабатично-обмінне наближення, – останнє включає адіабатичний поляризаційний потенціал для розсіяного електрона. Вони встановили, що обмінні і поляризаційні ефекти є надзвичайно важливими для процесів $^3P \rightarrow ^1S$ -збудження і що ефекти неортогональності між орбіталями розсіяння і зв'язаними орбіталями тієї ж симетрії відіграють важливу роль. Порівняння з цими СХ-розрахунками також показане на рис. 5.2.

Суттєві відмінності СХ-результатів від даних БСР-розрахунків, ймовірно, спричинені різницею в точності хвильових функцій мішені, а також ефектами зв'язку каналів, включеними в дану модель. Адіабатично-обмінне наближення передбачає аналогічні енергетичні залежності, але значно відрізняється по величині перерізів. В загальному ж, варто, напевно, приєднатися до твердження Піндзоли та ін. [234], що їх передбачення мають точність, яка може спричиняти відмінності від істинних значень аж до фактору 2.

Результати збудження з метастабільних станів $3s^23p^2\ ^1D$ і $3s^23p^2\ ^1S$, представлені на рис. 5.3 і рис. 5.4, проявляють подібну одні до одних поведінку. Включення псевдостанів знову призводить до істотних змін у результатах для спін-дозволених переходів, і ці поправки є більш значними для слабких переходів. З іншого боку, збудження дозволеного переходу з $3s^23p^2\ ^1D$ у

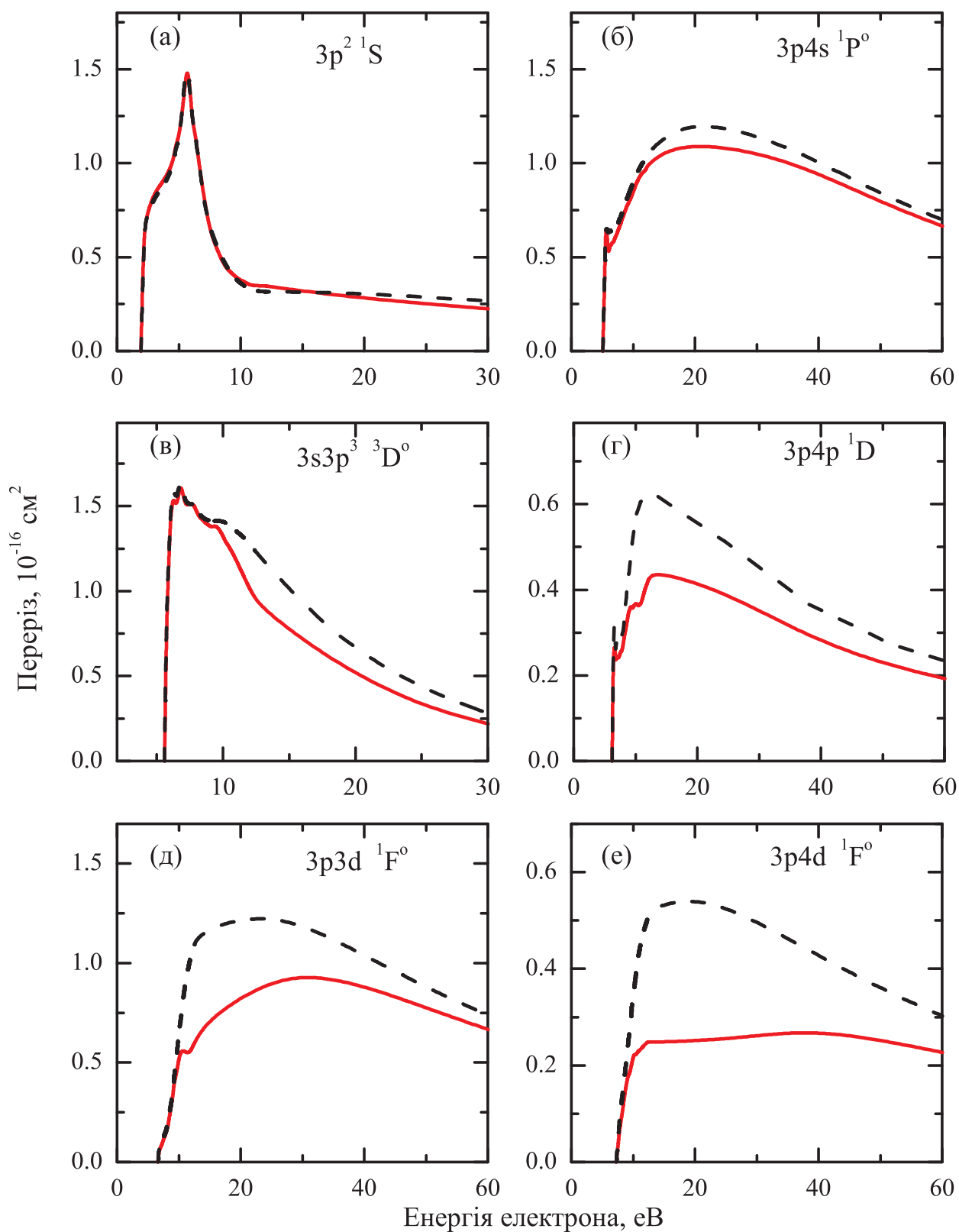


Рис. 5.3. Енергетичні залежності ІП найважливіших переходів з метастабільного стану $3s^2 3p^2 \ ^1D$ атома Si. Позначення як на рисунку 5.2.

$3s^23p^2\ ^1S$ майже не зачіпається наявністю псевдостанів. Це пов'язано з домінуючим вкладом $3s3p^4\ ^2D$ -резонансу, який призводить до того, що в перерізі для цього переходу проявляється сильний максимум при 5.6 еВ. Той же резонанс приводить також до сильного припорогового максимуму в збудженні $3s3p^3\ ^3D^o$ -стану.

Нарешті, представляє інтерес порівняти дані результати для зіткнень e -Si з відповідними перерізами зіткнення електронів з вуглецем. Хоча вуглець належить до тієї ж групи періодичної системи елементів Менделєєва, що і кремній, ефекти кореляції в цих двох елементах суттєво відрізняються. У кремнії $3d$ -орбіталь локалізується у тому ж радіальному діапазоні, що й $3s$ та $3p$ -орбіталі, які визначають конфігурацію основного стану. Отже, точне визначення хвильових функцій мішені, особливо в нейтральному атомі, є для кремнію значно важчим, ніж це мало місце для вуглецю, де $3d$ -орбіталь сконцентрована набагато далі, за просторовими рамками поширення інших $3l$ -орбіталей.

На рис. 5.5 порівняні перерізи збудження з основного стану для шести найнижчих рівнів C та Si. Енергії електронів наведені в одиницях порогових енергій для можливості прямого порівняння. Також показано масштабні множники для перерізів розсіяння e -C. За винятком збудження стану $3s3p^3\ ^3D$, можна відзначити сильну схожість енергетичних залежностей відповідних перерізів для C та Si, причому перерізи e -Si загалом (знову за винятком $^3D^o$ -стану) мають значно більшу величину.

5.4 Обговорення результатів розрахунку атома Si. Вплив кореляції на величину атомних характеристик

Вище представлені теоретичні перерізи для пружного розсіяння і збудження електронним ударом Si у його основному стані і метастабільних збуджених станах. Обчислення були здійснені програмним пакетом BSR [21], в

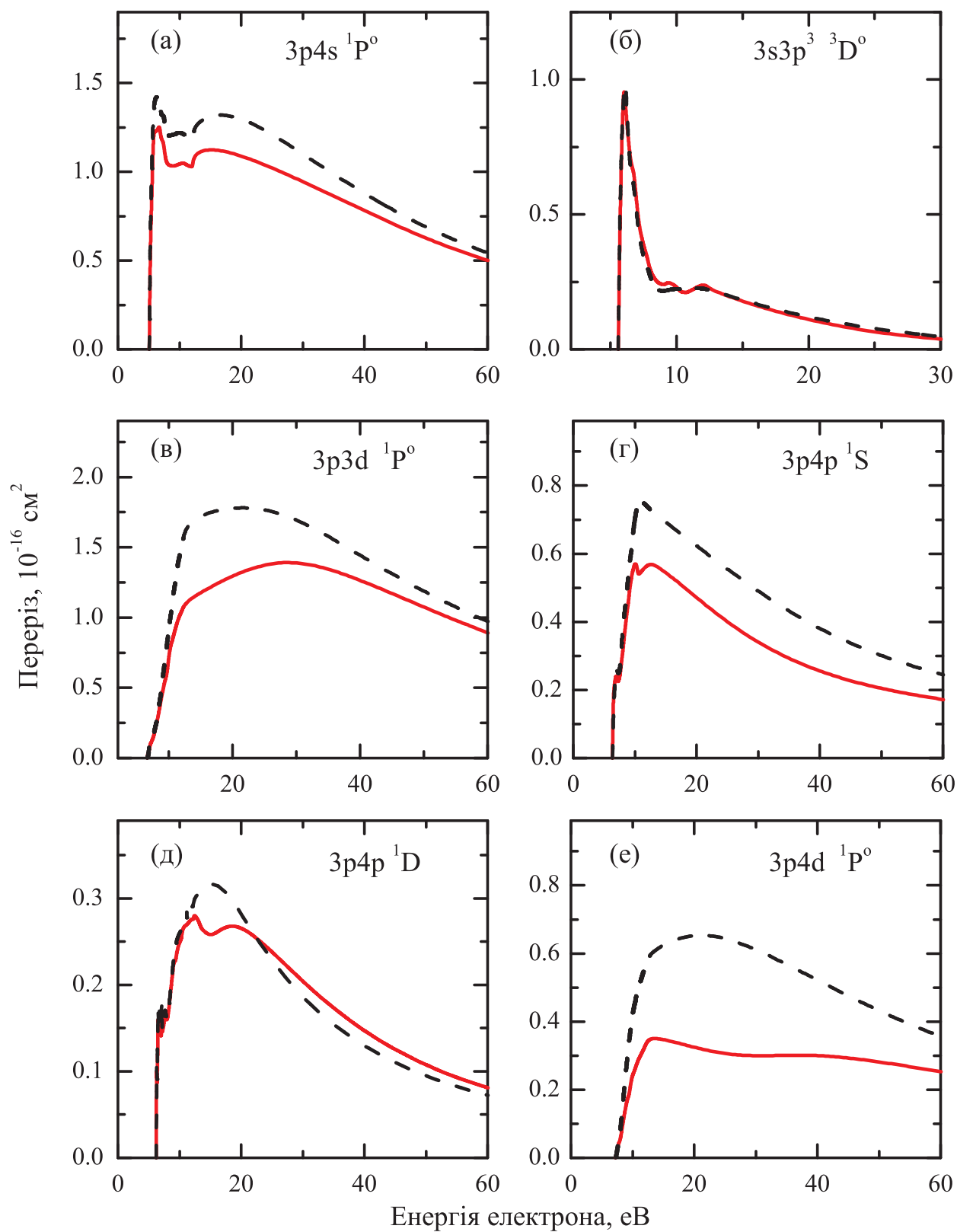


Рис. 5.4. Енергетичні залежності ІП найважливіших переходів з метастабільного стану $3s^2 3p^2 \ ^1S$ атома Si. Позначення як на рисунку 5.2.

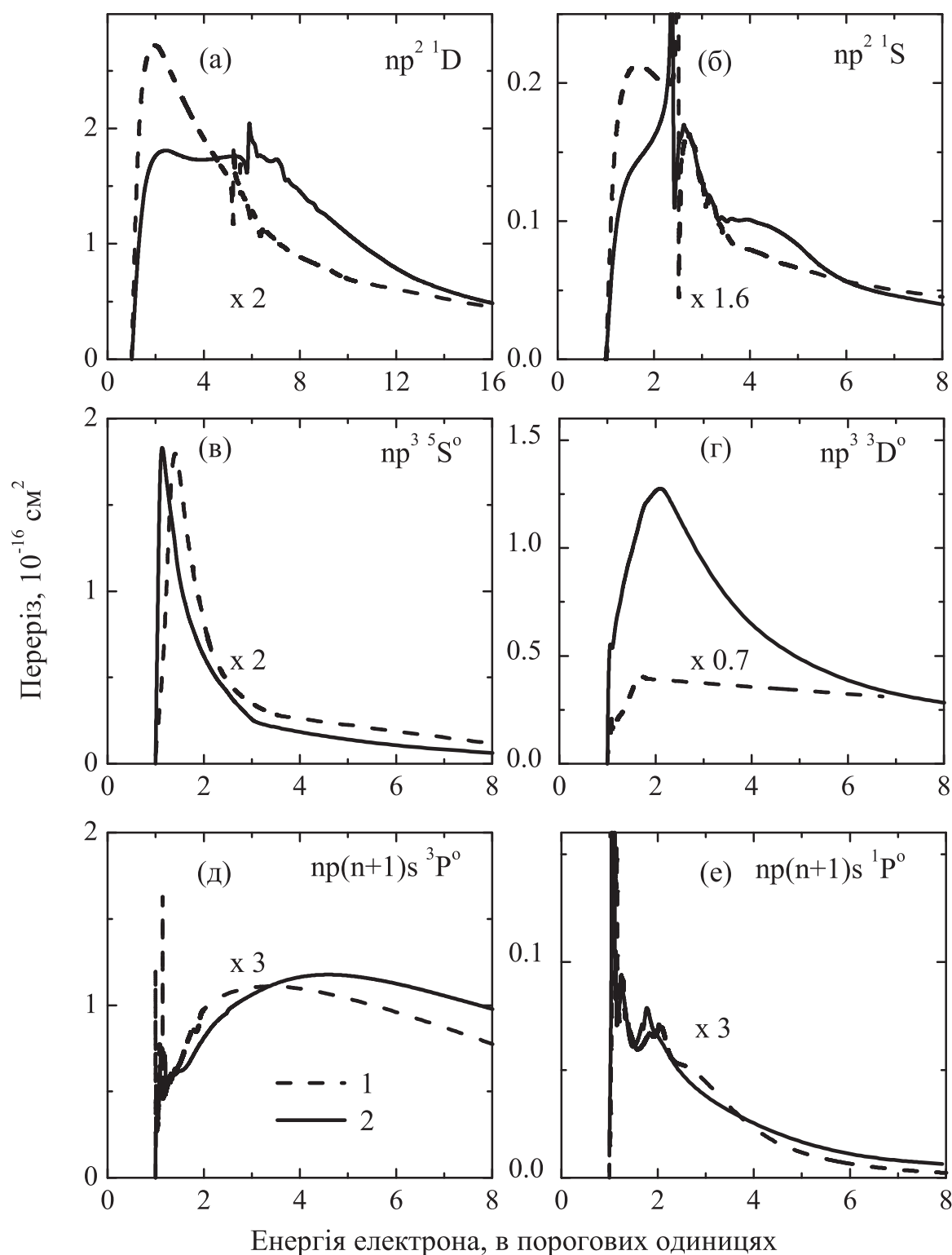


Рис. 5.5. Перерізи збудження електронним ударом кремнію і вуглецю у їх відповідних основних станах: результати розрахунку БСР34 для $e\text{--Si}$ [2] порівнюються з даними розрахунку БСР29 для $e\text{--C}$ [239]. Фактичні перерізи для С помножені на масштабні коефіцієнти, показані в графічних вікнах. 1 – атом вуглецю ($n=2$); 2 – атом кремнію ($n=3$).

якому для представлення функцій континууму всередині R -матричної сфери використовується B -сплайновий базис. Іншою відмітною рисою БСР-розрахунків є використання неортогональних орбіталей як для побудови хвильових функцій мішені, так і для представлення функцій розсіювання. Ця техніка дозволяє оптимізувати атомну хвильову функцію для кожного стану незалежно, і, таким чином, генерувати більш точний опис мішені.

За відсутності в доступних літературних джерелах експериментальних даних важливо, щоб теоретичні передбачення були якимось чином підтверджені. З цією метою, у даному дослідженні використовувалися дві моделі розсіювання для перевірки таких важливих ефектів як поляризація мішені і збудження континууму мішені, тобто іонізації. Встановлено, що перерізи для пружного розсіювання, так само як і для переходів з основного та метастабільних станів, є дуже подібними в обох моделях розсіювання, що забезпечує певну довіру до точності цих чисел. Проте, для деяких переходів у високорозташовані стани істотні відмінності між результатами вказаних двох обчислень вказують на повільну збіжність розкладів сильного зв'язку для цих випадків. На жаль, виконання більш обширних обчислень наразі виходить за межі доступних обчислювальних ресурсів.

5.5 Висновки до розділу 5

1) У рамках модифікованої БСР-версії R -матричного методу детально досліджено процеси зіткнення $e-Si$ в діапазоні енергій від порогу до 100 еВ. Для точного представлення хвильових функцій мішені застосований БКХФ-метод з неортогональними орбіталями та B -сплайнами в якості базисних функцій. Розклад сильного зв'язку включав 34 зв'язані стани атома кремнію, утворених з конфігурацій $[Ne] 3s^2 3p^2$, $3s 3p^3$, $3s^2 3p 4s$, $3s^2 3p 5s$, $3s^2 3p 4p$, $3s^2 3p 5p$, $3s^2 3p 3d$ та $3s^2 3p 4d$, а також сім псевдостанів для повного відтворення поляризованості основного стану і трьох нижчих збуджених станів атома кремнію.

2) Для найважливіших переходів із основного $3s^2 3p^2 \ ^3P$ і двох метастабільних $3s^2 3p^2 \ ^1D$ та $3s^2 3p^2 \ ^1S$ станів атома Si вперше розраховано енергетичні залежності ІП пружного розсіяння та збудження Si електронним ударом. Встановлено, що для точних розрахунків перерізів важливим є якомога повне врахування як кореляційних, так і поляризаційних ефектів.

3) Збіжність R -матричного розкладу перевірялася шляхом порівняння результатів розрахунку, отриманих у наближеннях БСР41 та БСР34 з урахуванням та без урахування додаткових поляризаційних псевдостанів. Показано, що включення в розклад сильного зв'язку додаткових поляризаційних псевдостанів може приводити до суттєвої зміни (аж до фактора 2) ІП збудження високорозташованих станів атома Si. Така поведінка ІП вказує на слабку збіжність розкладу сильного зв'язку, оскільки для переходів у високорозташовані стани суттєвим стає ефект збудження континууму мішені, тобто іонізація.

РОЗДІЛ 6

РОЗСІЯННЯ ЕЛЕКТРОНІВ НА АТОМІ ФТОРУ

6.1 Вступні зауваження

Перерізи електронних зіткнень у газах фтору необхідні в якості вхідних даних для розрахунків хімічних і електричних властивостей технологічної плазми та лазерів на інертних газах і фторі. При проходженні багатьох процесів у плазмі атоми фтору використовуються в якості домінуючих присадок. Фтор є одним з найбільш реактивних елементів, і його висока хімічна активність робить важким отримання надійних значень перерізів електронних зіткнень шляхом прямих вимірювань. З наявних у літературі перерізів для атомарного фтору експериментально були визначені тільки перерізи іонізації. Необхідні для застосувань моделювання перерізи пружного розсіяння, переносу імпульсу та збудження електронним ударом повинні братися з теоретичних оцінок. Атомарні перерізи можуть бути також використані для передбачення перерізів різних сполук фтору.

Переріз пружного розсіяння електронів на атомі фтору був розрахований багато десятиліть тому Робінсоном і Гельтманом [247], для енергій електронів до 10 еВ. Ці автори використовували модель центрального поля для зв'язаних і континуальних станів, у яких модельний потенціал був скоригований для отримання спостережуваних енергій зв'язку від'ємного іона. Їх переріз пружного розсіяння проявляє плавну залежність від енергії. Пізніше Ормонде [248] використав метод сильного зв'язку і представив дуже вузькі шейп-резонанси 1P і 1D у d -хвилі для $e-F$ розсіяння, вельми близько до пружного порогу. Ці резонанси, у разі підтвердження, призвели б до дуже великих припорогових значень перерізів електронного- і фоторозщеплення F^- , і могли би вплинути на швидкість виділення енергії при електронно-променевій накачці сумішей H_2/F_2 та „інертний газ/ F_2 ”. Коли ці розрахунки в методі СЗ були пізніше повторені Роббом і Генрі [249] за допомогою незалежної комп'ютерної

СЗ-програми, вони не виявили жодних ознак низькоенергетичних резонансів форми. Цей висновок був підтверджений Ресцігно та ін. [250] в їх розрахунках з модельними поляризаційними потенціалами. Зауважимо, що в цих роботах не було представлено жодних інтегрованих по куту пружних перерізів.

Наскільки нам відомо, єдиний розрахунок перерізів збудження для розсіяння електронів на атомі фтору було представлено Баліян і Батя [182]. Вони використовували стандартний белфастівський метод R -матриці [71] і представили сили зіткнення для всіх переходів між 11 нижчими станами нейтрального фтору, при енергіях налітаючих електронів до 40 еВ. Автори вважали, що їхні результати мають високу точність у розглядуваній області енергій, але можуть бути невірними при вищих енергіях, коли у СЗ-розклад буде включено більше станів мішені.

Переріз іонізації електронним ударом для атома фтору був виміряний Хейсом та ін. [251] від порогу до 200 еВ. Абсолютна точність даних була оцінена в $\pm 20\%$. Наскільки нам відомо, в літературі не було представлено жодних обчислень для іонізації фтору.

Метою цього розділу роботи є представлення обширних і повних (для більшості модельних застосувань) наборів даних з розсіяння електронів на нейтральному фторі, включаючи пружне розсіяння, перенос імпульсу, збудження та іонізацію з основного стану. Розрахунки, представлені нижче, були здійснені за допомогою високоточної програми R -матриці з B -сплайнами (сильний зв'язок) BSR [21]. Відмінною рисою підходу є його здатність використовувати залежні від терму неортогональні орбіталі в описі станів мішені. Як зазначалося вище, набір програм BSR утворює загальний код для багатоелектронних мішеней. Його переваги особливо видно у випадках розсіяння електронів на системах зі складною конфігураційною структурою, в тому числі з кількома відкритими оболонками. Приклади застосування програмного комплексу включають розсіяння електронів на атомах з відкритими оболонками O [237], S [238], Si [2] і Cl [252], з яких останній має структуру валентної

електронної оболонки, аналогічну до розглядуваного тут атома фтору.

Матеріали даного розділу дисертаційної роботи викладені у наступній послідовності. Після обговорення опису структури мішені, наводиться резюме найбільш важливих аспектів розрахунків зіткнення. За цим слідує представлення перерізів найбільш важливих переходів, починаючи з пружного розсіяння на атомі F в основному стані. У зв'язку з відсутністю доступних для порівняння експериментальних результатів, нижче представлені два набори розрахунків у наближеннях БСР39 та БСР690 із включенням у розклад сильного зв'язку 39 і 690 станів мішені, відповідно. Перша модель містить тільки фізичні зв'язані стани, а друга включає також псевдостани континууму. Порівняння результатів цих двох розрахунків дає деяке уявлення про чутливість прогнозованих перерізів до деталей моделі. Для оцінки ролі кореляційної взаємодії представлені також результати одноконфігураційних розрахунків структури F у наближенні Хартрі-Фока, а для контролю збіжності розкладу сильного зв'язку – розрахунок у наближенні БСР300.

6.2 Методика розрахунку процесів розсіяння $e-F$

6.2.1 Розрахунки структури. Стани мішені фтору в даних розрахунках були згенеровані шляхом поєднання багатоконфігураційного методу Хартрі-Фока і B -сплайнового обмеженого у боксі методу сильного зв'язку [132]. Найважливіше було адекватно врахувати головні кореляційні ефекти, у той же час пам'ятаючи про те, що остаточні багатоконфігураційні розклади повинні бути використані в подальшому розрахунку зіткнення ще з одним електроном, що зв'язується з системою. Оскільки релятивістські ефекти для фтору є відносно малими, для обчислень використовувалося наближення нерелятивістського LS -зв'язку з структурою багатоканального розкладу мішені вибраною у вигляді

$$\begin{aligned}
\Phi(2s^2 2p^4 nl, LS) = & \sum_{nl, L'S'} \{ \phi(2s^2 2p^4, L'S') P(nl) \}^{LS} + \\
& + \sum_{nl, L'S'} \{ \phi(2s 2p^5, L'S') P(nl) \}^{LS} + a \varphi(2s^2 2p^5)^2 P + b \varphi(2s 2p^6)^2 S.
\end{aligned}
\tag{6.1}$$

Тут $P(nl)$ позначає хвильову функцію зовнішнього валентного електрона, в той час як ϕ і φ – функції, визначені для розкладів взаємодіючих конфігурацій необхідних іонних і вибраних атомних станів, відповідно. Ці розклади були отримані в окремих БКХФ-розрахунках для кожного стану за допомогою програми MCHF [241]. Розклад (6.1) можна розглядати як модель для всіх $2s^2 2p^4 nl$ і $2s 2p^5 nl$ рідбергівських серій станів фтору, включаючи автоіонізаційні стани і псевдостани континууму. Внутрі-корова (короткодійна) кореляція включена за допомогою НК-розкладу іонних станів. Ці розклади включають всі одно- та двократні збудження з $2s$ - і $2p$ -орбіталей на $4l$ і $5l$ ($l = 0-4$) кореляційні орбіталі, також отримані з окремих БКХФ-розрахунків. Кор-валентна кореляція для $2s^2 2p^4 nl$ -станів частково була врахована через наявність іонних станів $2s 2p^5$. Це відповідає включенню кореляційних конфігурацій з важливою $2s \rightarrow 2p$ взаємодією. Більш обширний опис кор-валентної кореляції потребує наявності в розкладі додаткових іонних станів, таких як $2s^2 2p^3 3s$ або $2s^2 2p^3 3d$, щоб описати важливі $2p \rightarrow 3s$ та $2p \rightarrow 3d$ переходи. Їх включення, однак, значно збільшує розклади мішені і зробить їх непридатними для подальших розрахунків розсіяння. Щоб звести остаточні розклади для атомних станів до прийнятного розміру, всі іонні внески з коефіцієнтами розкладу меншими за 0.01 були знехтувані.

Невідомі функції $P(nl)$ для зовнішнього валентного електрона були розкладені за B -сплайновим базисом, а відповідні рівняння були розв'язані за умови, що хвильові функції зануляються на границі. Коефіцієнти B -сплайнів для валентних орбіталей $P(nl)$, поряд з коефіцієнтами a і b , були отрима-

ні шляхом діагоналізації N -електронного атомного гамільтоніану. Оскільки B -сплайнові (сильний зв'язок) розрахунки зв'язаних станів генерують різні неортогональні набори орбіталей для кожного атомного стану, їх подальше використання є дещо ускладненим. З іншого боку, дані конфігураційні розклади для станів атомної мішені містять від 100 до 500 конфігурацій для кожного стану i , отже, можуть бути використані в розрахунках зіткнення з наразі наявними обчислювальними ресурсами.

Кількість спектроскопічних зв'язаних станів, що можуть бути згенеровані за наведеною вище схемою, залежить від радіусу B -сплайнового боксу. У даних розрахунках цей радіус був установлений рівним $30 a_0$, де $a_0 = 0.529 \times 10^{-10} \text{ м}$ – радіус Бора. Це дозволило отримати хороший опис станів фтору з головним квантовим числом валентного електрона аж до $n = 5$.

В Таблиці А.7 розрахований у даному дослідженні спектр фтору порівняний з експериментальними значеннями [253] для різних мультиплетів, включених у розрахунки розсіяння (див. нижче). Загальне узгодження між експериментом і теорією є хорошим, з відмінностями по енергії, що становлять менше 0.05 eV для більшості станів. Більші відхилення – аж до ~ 0.2 eV – спостерігаються тільки для станів конфігурації $2p^4 3s$. Очікується, що подібне має місце через неврахування кор-валентної кореляції, котра не могла бути в достатній мірі включена у наші розклади мішені, як це обговорювалося вище.

Якість даного БСР39-опису мішені можна додатково оцінити шляхом порівняння результатів для сил осциляторів різних переходів з експериментальними даними та іншими теоретичними передбаченнями. В таблиці А.8 наведено порівняння даних сил осциляторів з найостаннішими великомасштабними БКХФ-розрахунками (Фрозе Фішер та Тачієв [254]) та компіляцією експериментальних даних НІСТ [253]. Експериментальні gf -значення для переходів тонкої структури були перетворені до мультиплетних LS -значень. Експериментальні дані є доступними тільки для декількох переходів між $3s$

і $3p$ -рівнями, і спостерігається хороша узгодженість з експериментом для всіх цих переходів. У загальному, має місце близька узгодженість із БКХФ-результатами [254] для більшості переходів, з помітною різницею тільки для слабких переходів із gf -значеннями меншими за 0.1. Таблиця А.8 також містить відношення теоретичних сил осциляторів, отриманих у формах довжини (f_L) та швидкості (f_V) електричного дипольного оператора. Ці відношення, у деякій мірі, можна розглядати як міру точності для розрахованих f -значень. Для більшості переходів значення f у формах довжини та швидкості узгоджуються у межах кількох відсотків – як у БСР-, так і в БКХФ-розрахунках.

6.2.2 Розрахунки зіткнення. Розклад сильного зв'язку в найбільш обширній із розглянутих нами моделей включає 690 станів нейтрального фтору. З них 53 стани відносяться до дискретного спектру, а інші 637 станів належать континууму мішені, що відповідає іонізації $2p$ і $2s$ -підоболонок. У розгляд були включені всі дублетні і кватретні стани мішені конфігурацій $2s^2 2p^4 nl$ і $2s 2p^5 nl$ з орбітальним кутовим моментом $l = 0-3$ для зовнішнього електрона і повним орбітальним кутовим моментом $L = 0-5$. Псевдостани континууму в даних розрахунках покривають область енергій аж до 20 еВ вище межі іонізації. Ця модель нижче буде називатися БСР690. Для перевірки чутливості результатів стосовно врахування взаємодії з високорозміщеними рідбергівськими станами, а також з іонізаційним континуумом, поряд з наближенням БСР690 був здійснений розрахунок з 39 спектроскопічними станами мішені (БСР39), переліченими у таблиці А.7. Ці стани мають такі ж самі розклади мішені, що і відповідні стани в моделі БСР690.

Рівняння сильного зв'язку були розв'язані за допомогою методу R -матриці з використанням розпаралеленої версії програми BSR [21]. Відмітною особливістю методу є використання B -сплайнів у якості універсального базису для представлення орбіталей розсіяння у внутрішній області $r \leq a$. Отже,

R -матричний розклад у цій області має вигляд (2.12), із зауваженнями, зробленими нами вище для атома Si (розд. 5.2.3).

Як правило, зв'язані канали у БСР-розрахунках використовуються для більш точного опису істинно зв'язаних станів у зіткнувальній системі, наприклад, зв'язаного стану $2s^2 2p^6 \ ^1S$ від'ємного іона F^- . У даних розрахунках у розклад (2.12) не включалися жодні $(N + 1)$ -електронні кореляційні конфігурації. З використанням тільки чистого розкладу сильного зв'язку, для електронної спорідненості фтору було отримане значення -3.254 еВ. Воно є близьким до експериментального значення -3.401 еВ [255], вказуючи, що дані розклади мішені містять всі основні кореляційні поправки.

B -сплайновий базис у даних розрахунках містив 68 сплайнів порядку 8, з максимальним інтервалом вибраної сітки $0.65a_0$. Цього цілком достатньо для адекватного представлення хвильових функцій розсіяного електрона при енергіях до 150 еВ. Модель зіткнення БСР690 містить до 1727 каналів розсіяння, що приводить до узагальнених задач на власні значення з розмірами матриць аж до 100 000 у B -сплайновому базисі. Прямі чисельні розрахунки були виконані для парціальних хвиль з повним орбітальним моментом $L \leq 25$. Беручи до уваги повний спін і парність, це приводить у цілому до 156 парціальних хвиль. Для оцінки вкладу від вищих значень L , при необхідності, була використана процедура підсумовування, основана на апроксимації геометричними рядами. Розрахунок для зовнішньої області проводився з використанням розпаралеленої версії програми STGF [256].

6.3 Результати з розсіяння $e-F$

На рис. 6.1 представлено результати для пружних перерізів розсіяння електронів на фторі в основному стані, де отримані в наближеннях БСР39 і БСР690 результати порівнюються з напівемпіричними розрахунками Робінсона і Гельтмана [247]. За винятком двох дуже вузьких структур між 12 та

15 еВ, всі розрахунки передбачають подібні одні до одних гладкі енергетичні залежності з максимумом біля 10 еВ. Включення континуальних псевдостанів у моделі БСР690 зменшує максимум приблизно на 15% у порівнянні з розрахунками БСР39. Перерізи БСР690 регулярно перевищують результати розрахунків з модельним потенціалом [247], із загальним хорошим узгодженням енергетичної залежності. Дані пружні перерізи є скінченими в області порогових енергій. Довжини розсіювання у випадку БСР690 для парціальних хвиль $^1P^o$ і $^3P^o$ відповідно рівні 0.487 і 0.212. Вони різко відрізняються від довжини розсіювання для випадку розсіювання електронів на хлорі [252]. Конфігурація зовнішньої оболонки основного стану хлору, $3p^5$, є аналогічною до такої ж для основного стану фтору, $2p^5$, і тому можна би, здавалося, очікувати подібних результатів. Проте, довжини розсіювання хлору є від'ємними, а пружний переріз має поблизу порогу мінімум Рамзауера, тоді як довжини розсіювання фтору є додатними, а пружний переріз плавно зменшується в напрямку до порогу.

Енергетичні залежності перерізів для найбільш важливих переходів з основного стану, а також між збудженими станами представлені на рис. 6.2-6.4, для дипольних, недипольних та обмінних переходів, відповідно. Всі енергії електронів дано відносно основного стану. У зв'язку з майже повною відсутністю інших теоретичних результатів і експериментальних даних, на рисунках порівнюються дані передбачення для двох наборів розрахунків, БСР690 і БСР39, які відрізняються включенням псевдостанів континууму. Це дозволяє перевірити, принаймні в деякій мірі, збіжність розкладу сильного зв'язку.

Як видно з рис. 6.2, включення псевдостанів континууму приводить до суттєвого зменшення передбачуваних перерізів при низьких і проміжних енергіях електронів для переходів з основного стану $2p^5$. Найбільш помітним цей ефект є для збудження $2p \rightarrow 3d$. Це дуже скидається на результати, отримані для збудження електронним ударом Ne [257], з основним станом $2p^6$, та Ar [258], з основним станом $3p^6$. З іншого боку, для переходів між збуджени-

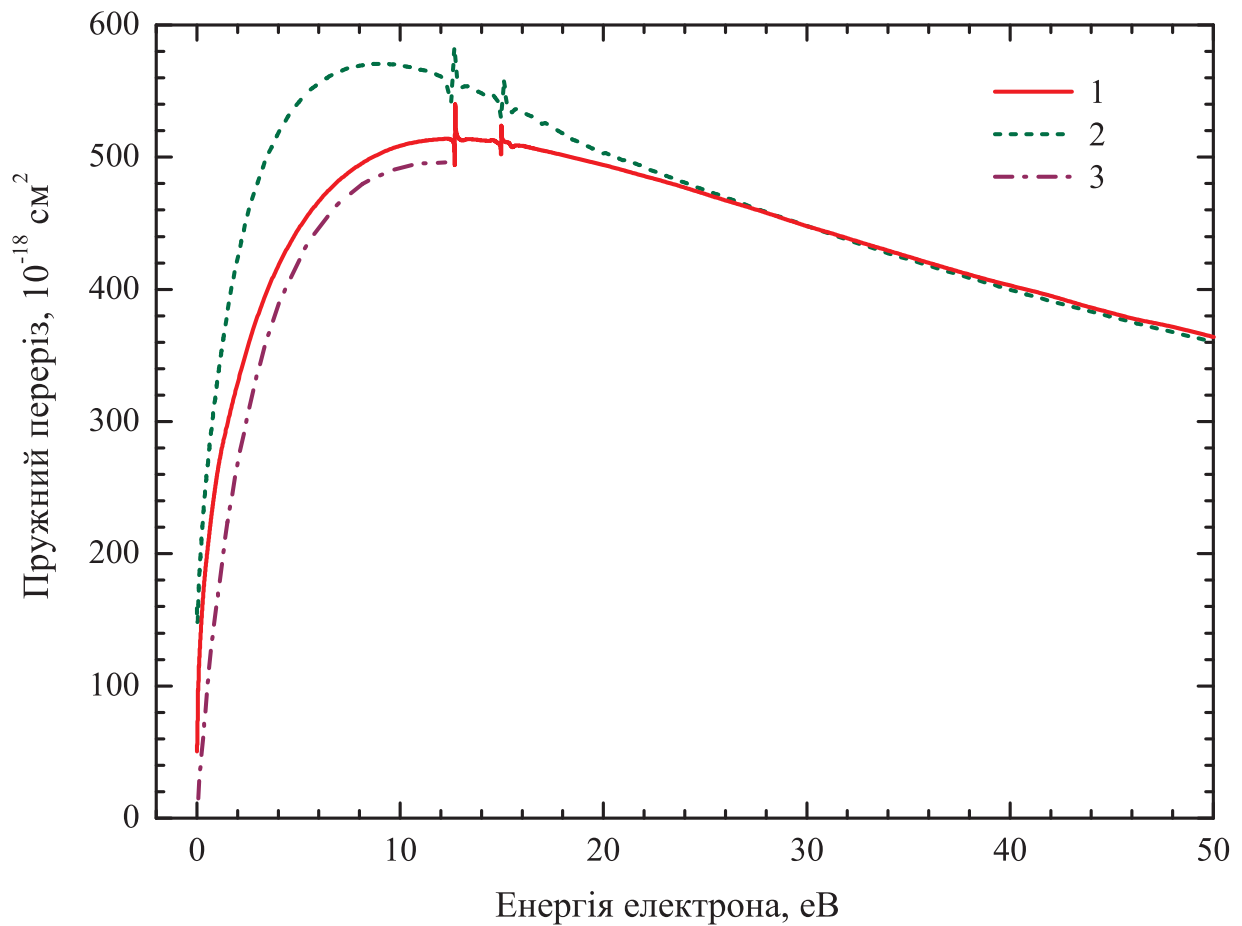


Рис. 6.1. Переріз пружного розсіяння електронів на атомі фтору в основному стані $(2p^5) ^2P^o$: 1, 2 – наші дані БСР690 та БСР39 [3], відповідно; 3 – наближення модельного потенціалу [247].

ми станами за участю збудження тільки одного зовнішнього електрона, вплив псевдостанів континууму є значно менш важливим. Тим не менше, подібне не є загальним правилом для всіх одноелектронних переходів, як це буде видно нижче для недипольних переходів. Дипольні переходи між збудженими станами зазвичай є дуже сильними в порівнянні з відповідними переходами із основного стану, а тому поправки від ефектів зв'язку каналів, як очікувалося, є значно меншими.

Єдиними більш ранніми результатами, доступними для порівняння, є дані R -матричного обчислення з урахуванням 11 станів (РМ11) від Баліян і Батя [182]. Вони представили сили зіткнення для енергій налітаючого електрона аж до 40 еВ. Порівняння з розрахунками РМ11 вказує на досить до-

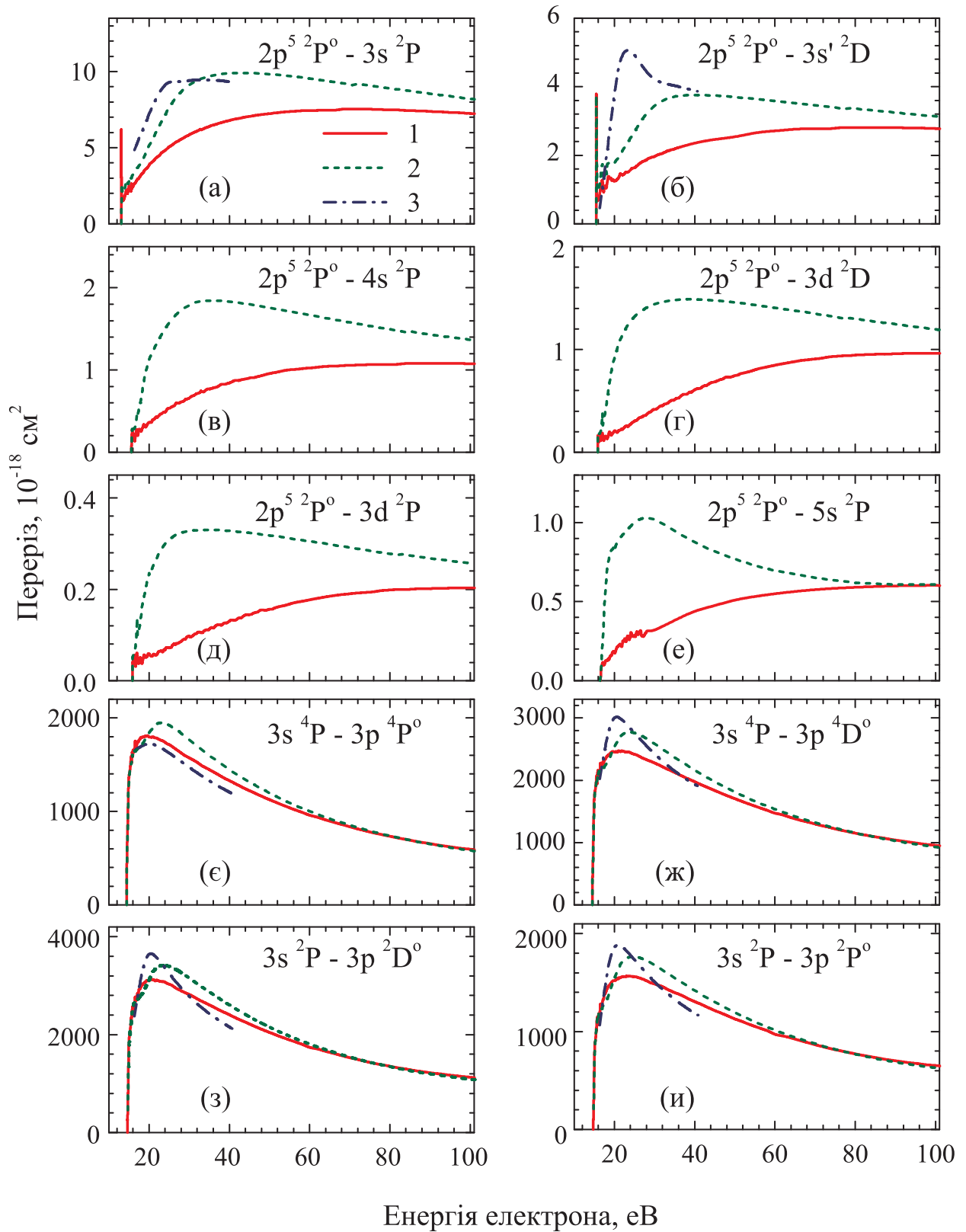


Рис. 6.2. Енергетичні залежності ІП зіткнення $e-F$ для найважливіших дипольних переходів: 1, 2 – наші дані БСР690 та БСР39 [3], відповідно; 3 – РМ-11 [182]. Апостроф у позначенні стану $3s' 2D$ показує на кор $(2p^4)^1 D$.

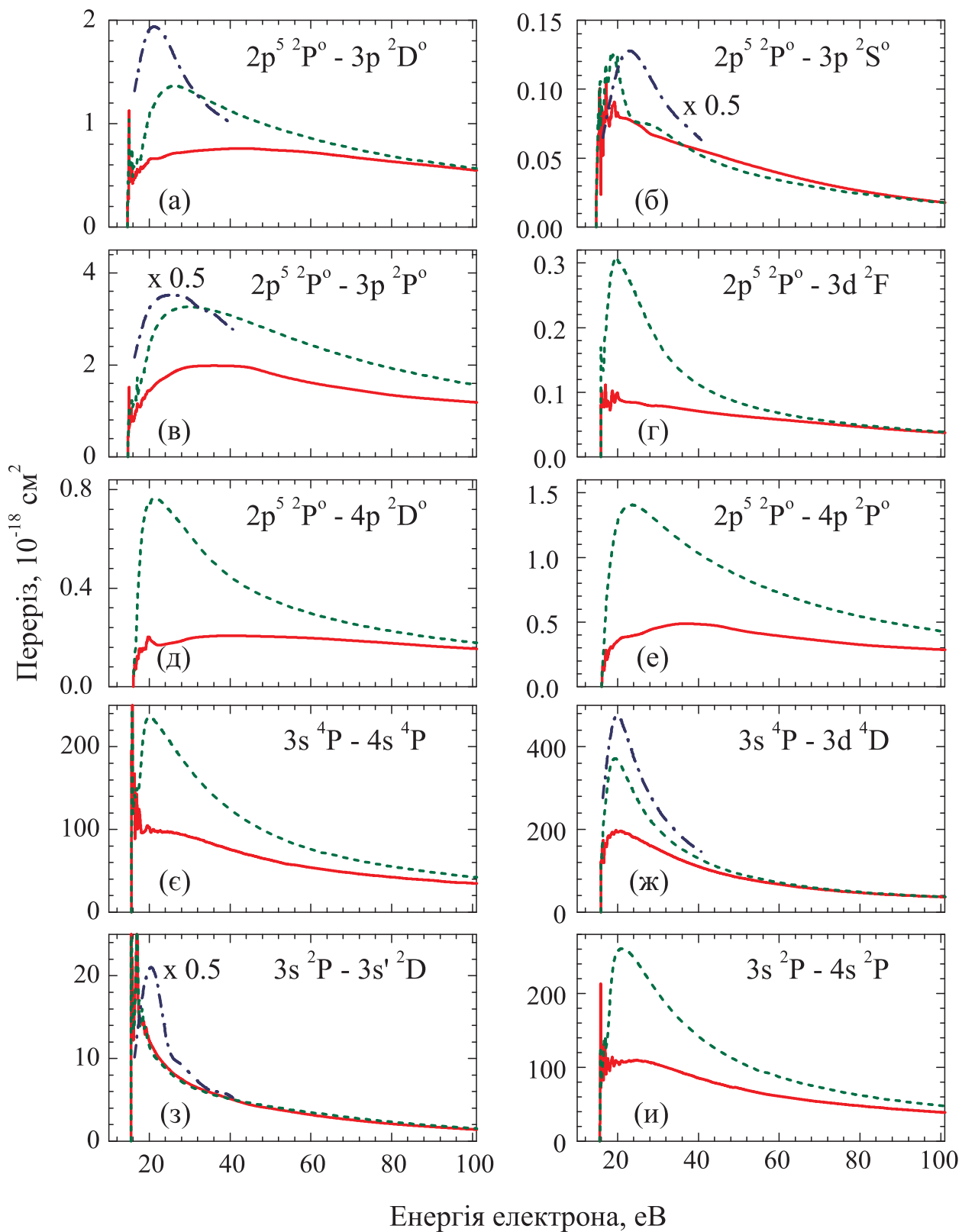


Рис. 6.3. Енергетичні залежності ІП зіткнення $e-F$ для найважливіших недипольних переходів. Позначення як на рис. 6.2.

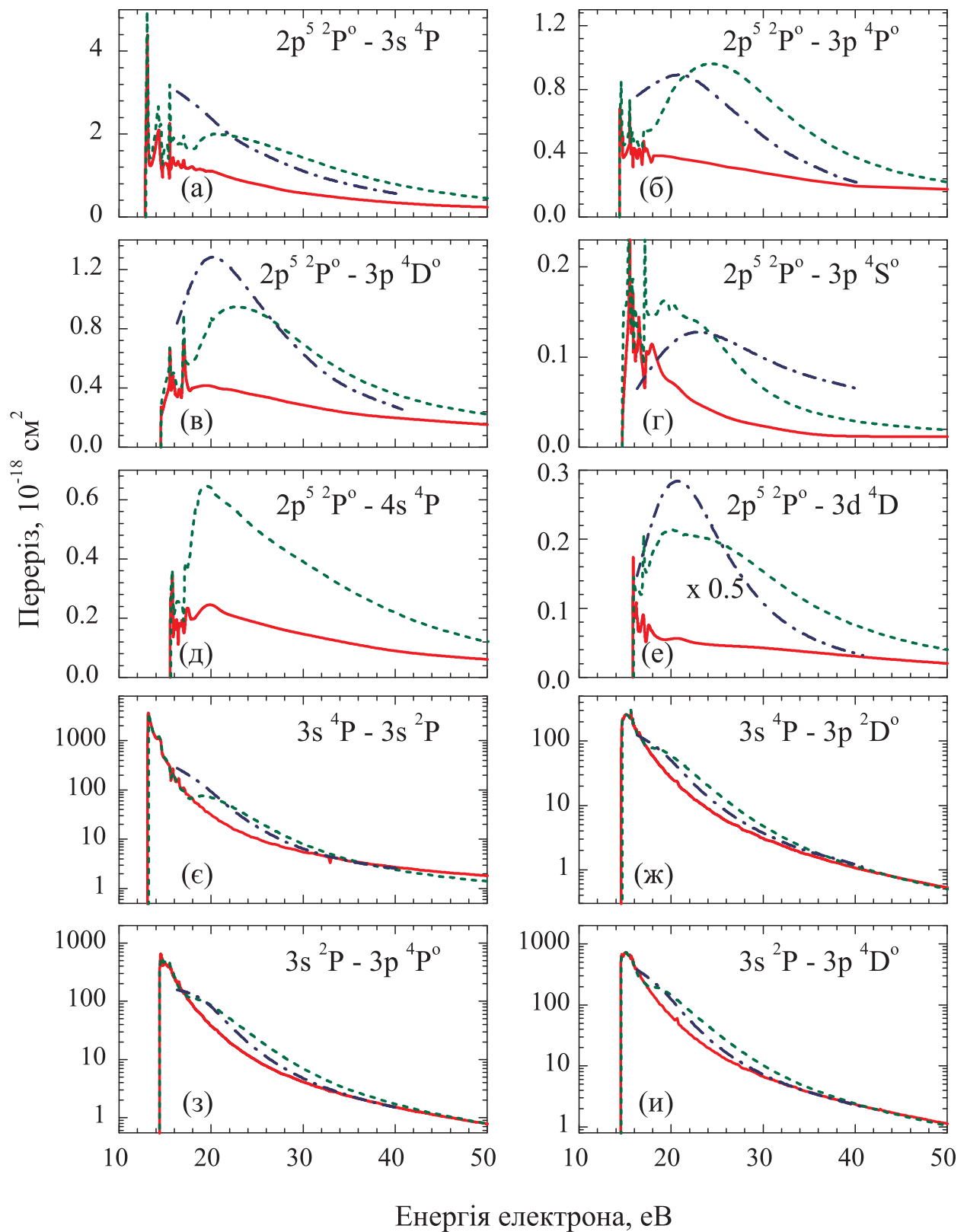


Рис. 6.4. Енергетичні залежності ІІІ зіткнення $e-F$ для найважливіших обмінних переходів. Позначення як на рис. 6.2.

бре їх узгодження з нашими БСР39-результатами для резонансного переходу $(2p^5)^2P^o - [2p^4(^3P)3s]^2P$ і для одноелектронних переходів між збудженими станами. Однак, встановлена велика відмінність для переходу $(2p^5)^2P^o - [2p^4(^1D)3s]^2D$. Причина цієї розбіжності не повністю ясна, але, скоріше за все, вона зв'язана з різними конфігураційними розкладами для даного стану в РМ11 та наших розрахунках БСР. Нагадаємо, що в БСР-підході використовуються залежні від терму орбіталі, тоді як у стандартних РМ11-розрахунках орбіталі $3s$ є, наприклад, тією ж самою для повного набору $2p^4(L'S')3s$ з різними батьківськими термами.

Сильний вплив континуальних псевдостанів виявлено також для недипольних переходів, представлених на рис. 6.3. Тут великі поправки через зв'язок з континуумом спостерігаються як для переходів з основного стану, так і для переходів між збудженими станами. Ці переходи є відносно слабкими і, отже, очікується, що ефекти сильного зв'язку будуть набагато важливішими у даних випадках. Винятком є строго заборонений перехід $3s\ ^2P - 3s'\ ^2D$, який відбувається в основному за рахунок обміну і повинен розглядатися окремо. Для недипольних переходів узгодження з результатами РМ11 є набагато гіршим, ніж для дипольних переходів, розглянутих вище. У цьому випадку навіть БСР39-перерізи узгоджуються з результатами РМ11 тільки в межах фактора 2.

Обмінні переходи, показані на рис. 6.4, демонструють якісно таке ж узгодження між різними моделями, як дипольні переходи. Поправки на взаємодію з континуумом мішені є більшими для збудження з основного стану. Тут перерізи демонструють широкі припорогові максимуми, які сильно подавлені при проміжних енергіях у моделі БСР690. Результати РМ11 знаходяться в розумному узгодженні з передбаченнями БСР39. Оскільки обмінні матричні елементи більш чутливі до представлення мішені, різниця між БСР39 і РМ11 результатами, швидше за все, пов'язана з різними хвильовими функціями мішені. Перерізи переходів між збудженими станами є на два-три порядки

величини більшими, ніж такі ж з основного стану. В результаті вони набагато менш чутливі до ефектів зв'язку каналів і всі моделі забезпечують дуже подібні результати.

Перерізи іонізації представлені на рис. 6.5. Ці перерізи в наближенні БСР690 були отримані як сума перерізів збудження в усі автоіонізаційні стани фтору і псевдостани континууму. При цьому приймалося, що радіаційний розпад автоіонізаційних станів є нехтуваним у порівнянні з каналом автоіонізації. БСР690-результати близько узгоджуються з вимірюваннями [251].

Хоча теоретичні перерізи є систематично нижчими (приблизно на $\sim 15\%$) за експериментальні дані, вони знаходяться в межах 20% оцінки невизначеності вимірювань. При вищих енергіях теоретичні передбачення починають швидко зменшуватися зі збільшенням енергії. Це частково можна пояснити недостатнім охопленням континууму мішені даними псевдостанами, а частково через відкриття додаткових каналів іонізації або іонізаційного збудження.

На рис. 6.5 також показані перерізи для окремих кінцевих іонних станів. Ці перерізи були отримані шляхом проекції псевдостанів континууму на даний канал іонізації, як описано в недавній роботі стосовно іонізаційного збудження гелію [259]. Домінуючим каналом іонізації є той, що приводить до нижчого стану іона $2p^4\ ^3P$, але канал іонізації для наступного іонного стану, $2p^4\ ^1D$, також є важливим. Вкладами від іонного стану $2p^4\ ^1S$, а також від $2s$ -іонізації (не показана на рисунку) можна знехтувати.

Нарешті, на рис. 6.6 показано „великий” повний переріз для зіткнення електронів з атомами фтору в їх основному стані $(2p^5)\ ^2P^o$, тобто сума інтегрованих по куту пружного перерізу і перерізів збудження та іонізації. У той час як переріз пружного розсіяння забезпечує найбільший вклад у показаному діапазоні енергій, іонізація дає істотний вклад при 100 еВ і вище. Процеси збудження, в сумі, дають вклад менше 10% від загального повного перерізу. Оскільки саме переріз передачі імпульсу, а не пружний переріз, як правило, є важливим для моделювання плазми, він також показаний на рис. 6.6. Різ-

ниці між двома ІІ є істотною у всьому діапазоні енергій і, отже, пружний переріз розсіяння не рекомендується для заміни перерізу передачі імпульсу у випадку, коли результати для останнього недоступні.

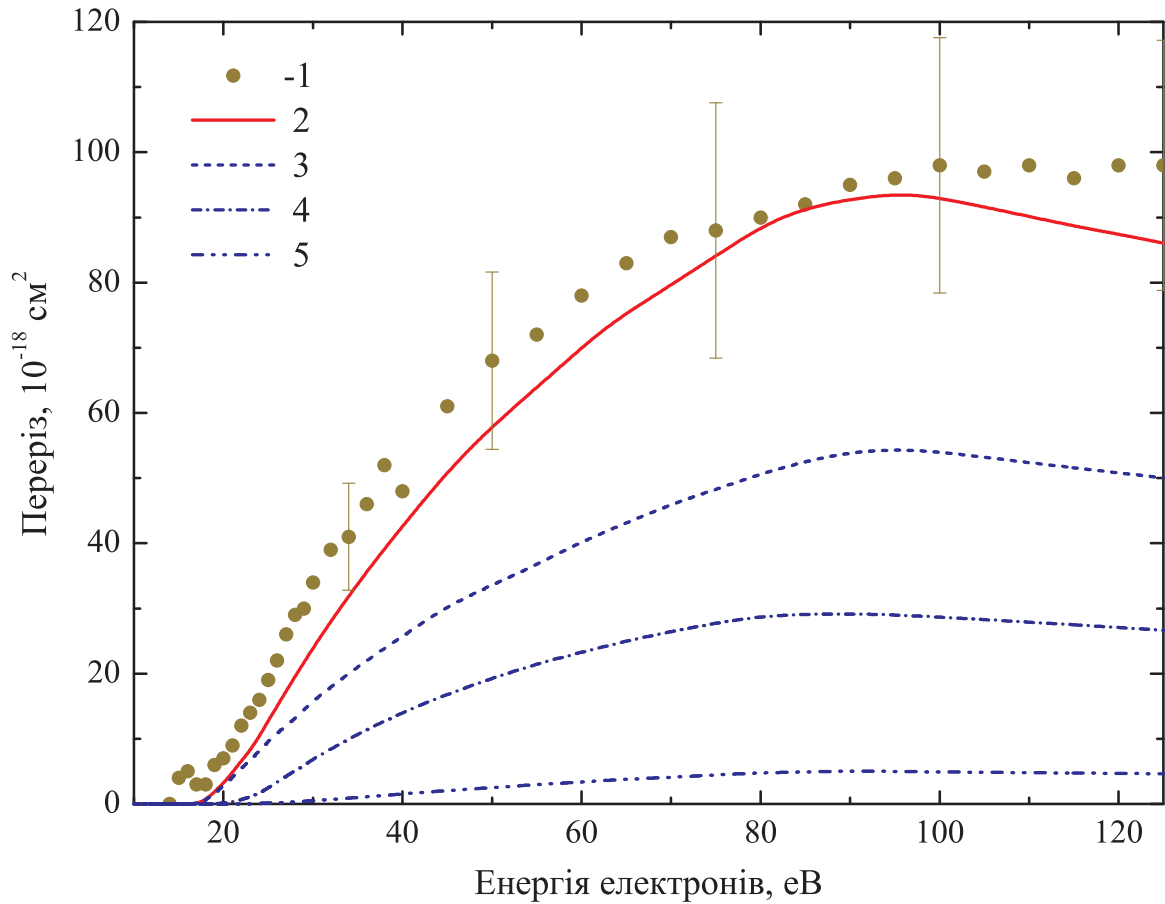


Рис. 6.5. Переріз іонізації електронним ударом атома фтору в основному стані $(2s^2 2p^5) \ ^2P^o$. Експеримент: 1 – Хейс та ін. [251]. Теорія: 2 – наші дані БСР690 [3]; 3, 4, 5 – парціальні БСР690-перерізи з утворення станів $2p^4 \ ^3P$, 1D та 1S іона F^+ .

Дані розрахунки показали наявність багатої резонансної структури для більшості електронно-індукованих переходів у атомі фтору при низьких енергіях. Приклади резонансних особливостей представлені на рис. 6.7 для кількох обраних переходів з основного стану. Як видно з цих прикладів, більшість резонансних особливостей є дуже вузькими і, отже, загальний вклад резонансів у відповідні коефіцієнти швидкості, як очікується, буде нехтуваним.

Звичайно, з фундаментальної точки зору, як і раніше, представляє інтерес аналіз цих особливостей.

Для класифікації резонансної структури, був здійснений парціально-хвильовий аналіз, оснований на розрахунку власних фазових сум для кожної парціальної хвилі. Приклад цього показаний на рис. 6.8. Енергетичні області, де власна фазова сума δ збільшується на π , були перераховані з малим кроком по енергії аж до 10^{-4} еВ, щоб визначити похідну по енергії від власних фазових сум з високою точністю. В резонансній області ця похідна приймає форму лоренціану, чий максимум визначає положення резонансу, в той час як ширина резонансу у місті розміщення резонансу рівна $2/(d\delta/dE)$. Зауважимо, що метод R -матриці не надає безпосереднього рецепту для класифікації резонансів. Щоб отримати деякі непрямі докази, що стосуються класифікації, був проаналізований каналний розклад R -матричних полюсів у безпосередній близькості до найбільш характерних особливостей. При необхідності, найбільший вклад від закритих каналів приймався в якості основної компоненти розглядуваного резонансу. У таблиці А.9 наведені резонансні особливості, виявлені в цих розрахунках на основі моделі БСР39. Оскільки резонанси виникають при відносно низьких енергіях поблизу порогів збудження, ці результати, як очікується, будуть дуже близькі до таких же, отримуваних у моделі БСР690. Останні, однак, вимагають непомірно багато часу для таких детальних розрахунків.

Найбільш характерною особливістю є резонанс $2p^4(^3P)3s^2$, який проявляється як помітна структура при 12.39 еВ навіть у великому перерізі пружного розсіяння (див. рис. 6.1). Його положення знаходиться в розумному узгодженні зі значенням 12.29 еВ із БКХФ-розрахунків Кларка [260]. Відмітимо, що в розрахунках сильного зв'язку положення резонансу безпосередньо зв'язане з положенням станів мішені. Тут використовувалися теоретичні енергії мішені, і помилки у визначенні енергій рівнів мішені відповідно впливали на положення резонансів.

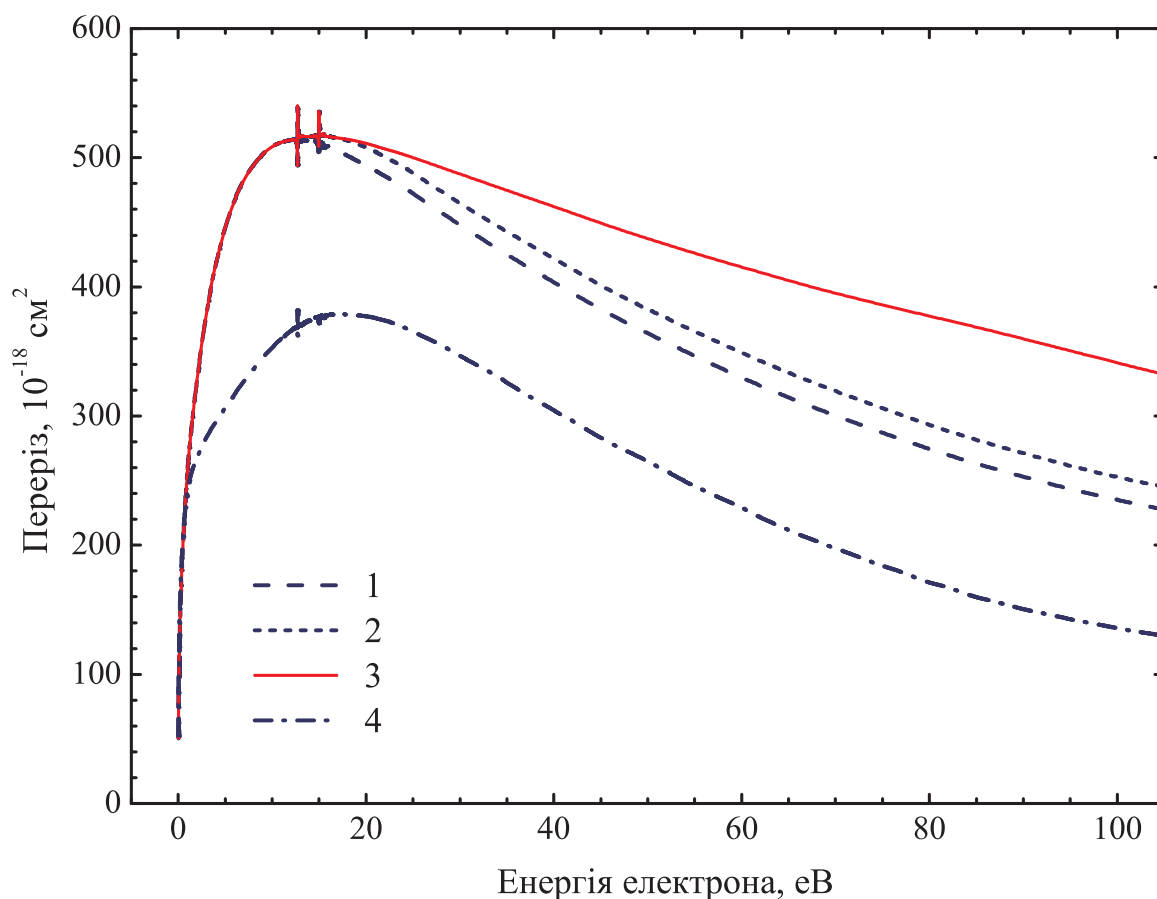


Рис. 6.6. Великий повний переріз зіткнення електронів з атомами фтору в основному стані $(2p^5) \, ^2P^o$, наближення БСР690: 1 – пружний переріз; 2 – пружний + збудження; 3 – повний переріз; 4 – переріз переносу імпульсу.

Єдиний експериментальний доказ резонансів від'ємного іона F^- був отриманий Едвардс і Каннінгем [261]. Вони виміряли спектр вибитих електронів у зіткненнях F^- з He і спостерігали ряд піків. Пік при 14.85 ± 0.04 еВ було пов'язано з авторозпадними станами F^- . Ця особливість була класифікована як стан $F^- \, 2p^4(^1D)3s^2$, на підставі узгодження енергії з неопублікованим розрахунком Метьюз, Раунтрі і Генрі, виконаним таким же чином, як у їх більш ранній роботі по хлору [262]. Отримане в даному дослідженні передбачення цього стану при 14.98 еВ також можна розглядати як додаткове підтвердження для цієї класифікації. Останній $2p^4(^1S)3s^2$ -стан цієї конфігурації лежить при набагато вищій енергії 17.93 еВ і не здійснює помітного впливу на перерізи збудження, – швидше за все через велику кількість можливих каналів роз-

паду, в тому числі подвійне авторозщеплення. Отримана у БСР-наближенні енергія також перебуває у розумному узгодженні з БКХФ-розрахунками Бакмен і Кларк [263], які дають для цього стану енергію 17.69 еВ.

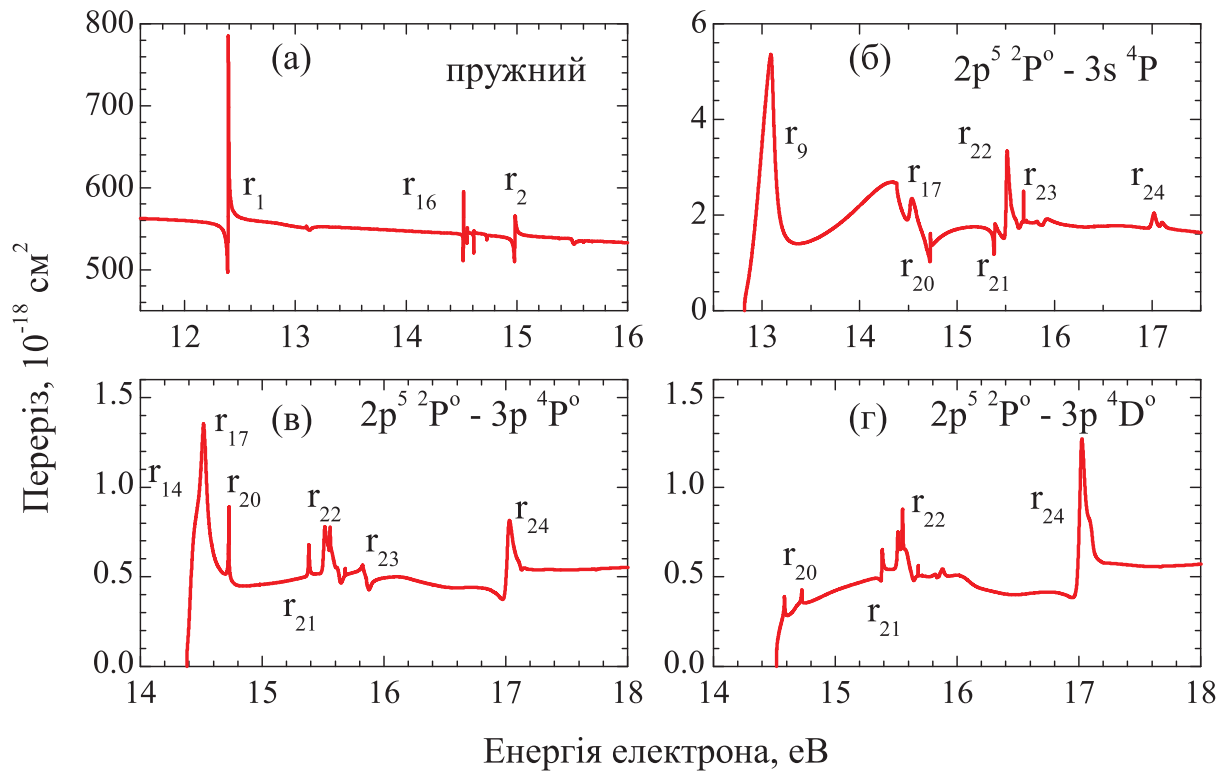


Рис. 6.7. Приклад резонансної структури в ІП для вибраних переходів з основного стану атома F. Перерізи були отримані в моделі БСР39.

Інші резонанси, представлені в таблиці А.9 також є резонансами феш-бахівського типу з великим варіюванням ширин: від дуже вузьких до дуже широких. Деякі з цих резонансних піків зображені на рис. 6.7, відповідно до їх нумерації у таблиці А.9. На жаль, в літературі відсутні які-небудь розрахунки розсіювання електронів на F, які б включали в себе вивчення резонансної структури.

6.4 Роль кореляцій у розрахунках розсіювання $e-F$

Обговорені у попередніх підрозділах систематичні розрахунки характеристик атома фтору з використанням методу R -матриці з B -сплайнами про-

демонстрували визначальну роль врахування електронної кореляції в отриманні точних характеристик електрон-атомного розсіяння. Як зазначалося в розділі 2.3, точне врахування ефектів електронної кореляції традиційно є однією з найскладніших проблем теорії атома. Нижче загальні положення щодо кількісної оцінки кореляційного вкладу ілюструються прикладами з розрахунку структури атома фтору.

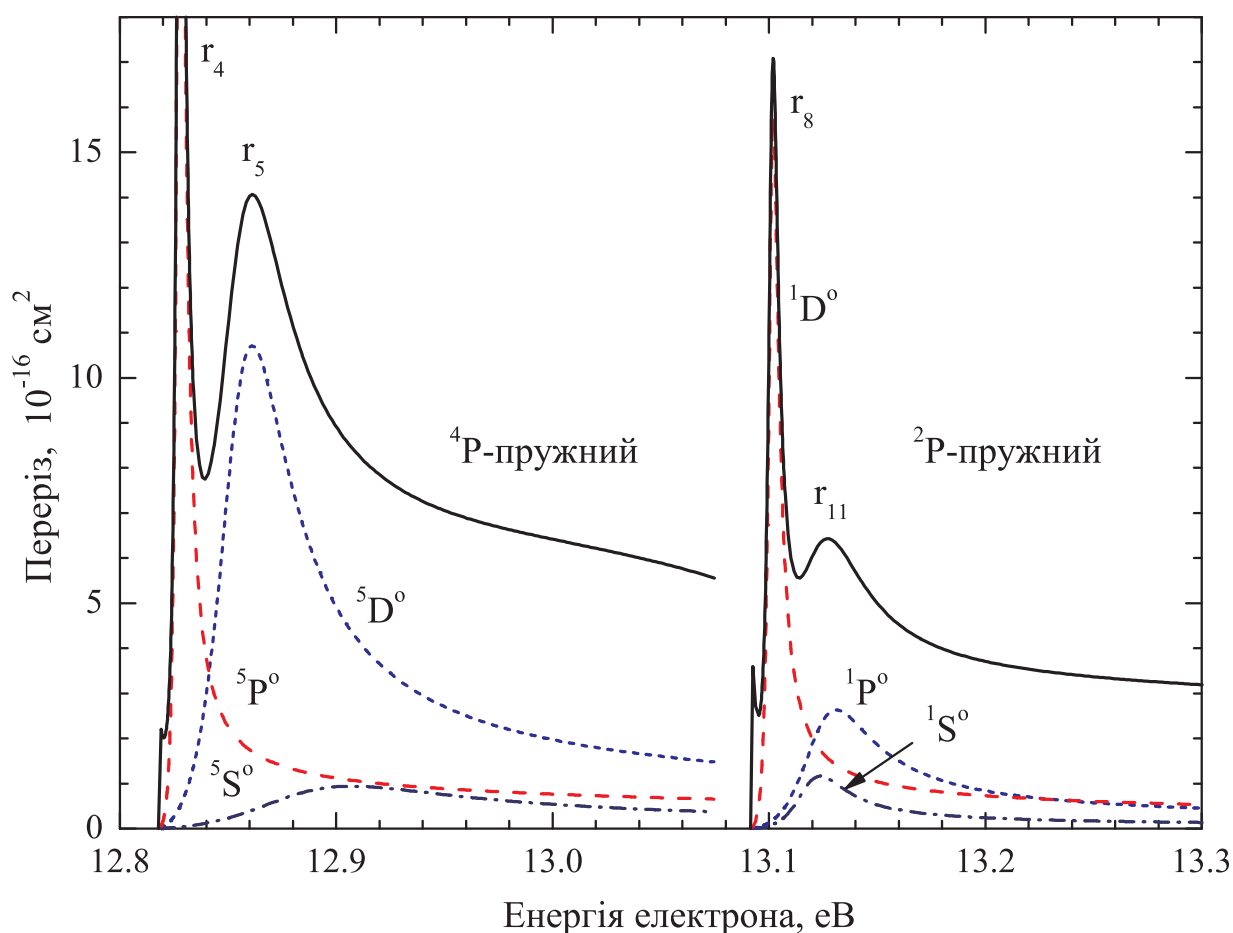


Рис. 6.8. Приклад парціально-хвильового аналізу, використаного для класифікації резонансних особливостей. Перерізи були отримані у рамках моделі БСР39.

Систематичний розрахунок атомних характеристик нейтральної системи F I, а також процесів зіткнення e -F, включаючи пружне розсіяння, збудження та іонізацію [3], був предметом обговорення у кількох попередніх підрозділах. Резюмуючи, зазначимо, що для розрахунку як структури атома F,

так і процесів розсіяння $e-F$ був застосований метод БСР [21]; хвильові функції мішені визначалися методом БКХФ [22, 57] у поєднанні з B -сплайновими розкладами. Чутливість результатів до розміру базису перевірялася шляхом порівняння даних, отриманих у наближеннях БСР39 та БСР690. У першому з них було враховано 39 фізичних станів мішені у розкладі сильного зв'язку, в другому, окрім вказаних 39 станів – понад 650 континуальних псевдостанів. У БСР-розрахунках [3], які є основою даного дослідження, було встановлено, що для точних розрахунків перерізів є важливими як кореляційні, так і поляризаційні ефекти. Значний вплив на переходи з основного стану та, меншою мірою, на сильні переходи між збудженими станами чинить також зв'язок з континуумом мішені.

Проте, в [3] і, відповідно, в підрозділах 6.1-6.3 за браком місця не знайшли відображення результати ряду допоміжних наближень, які використовувалися для контролю точності отримуваних даних та збіжності розкладу сильного зв'язку, і які самі по собі є важливими при визначенні ролі кореляційної взаємодії. Такими, зокрема, є наближення БСР300 та БСР39pol, а також простий одноконфігураційний розрахунок мішені в методі Хартрі-Фока. У наближенні БСР300 була застосована менша, у порівнянні з БСР690, кількість континуальних псевдостанів – понад 260, що дало змогу оцінити збіжність розкладів. У підході БСР39pol, окрім 39 фізичних станів мішені, були враховані також 3 поляризаційні псевдостани (див., напр., [264]) – для точного відображення поляризації мішені атома фтору. В одноконфігураційному методі ХФ були розраховані енергії та хвильові функції 40 нижніх станів мішені F. Усе це знайшло відображення в недавній праці [7].

Як було встановлено в підрозділі 2.4, величина ефекту електронної кореляції визначається як різниця істинного значення деякої спостережуваної величини (наприклад енергії) і значення цієї величини, обчисленого методом Хартрі-Фока з використанням електронних орбіталей. Неоднозначність подібного трактування обговорювалася вище. Проте при здійсненні розрахунків

поняття про кореляційні ефекти піддається природному якісному тлумаченню і має достатньо визначений обчислювальний сенс.

Вище були також виділені можливі складові похибки, що виникає при розрахунку енергетичних характеристик: релятивістські ефекти, поляризація, неповнота базисного набору та власне ефекти електронної кореляції. В контексті необхідності отримання точних розрахункових даних і врахування значної частини кореляції через підбір одноелектронних орбіталей, особливу увагу, природно, слід приділити вдосконаленню базисних наборів.

Хоча в класифікації похибок вплив недосконалості базисного набору був відділений від впливу кореляційної взаємодії, ясно, що акуратний підбір ФКС-базису надає чітко визначену процедуру урахування кореляції. Перехід від ФКС-базису до *B*-сплайнових базисних розкладів, як це робиться у методі БСР, відкриває ще ширші можливості подібного урахування.

Для випадку фтору вибір функцій конфігураційних станів у наближенні БСР був достатньо детально обґрунтований вище. Поряд з БСР-розрахунком [3] структури мішені, в рамках даного дослідження було здійснене незалежне обчислення енергій і хвильових функцій мішені $F\ I$ в одноконфігураційному наближенні Хартрі-Фока [7]. У розгляд включалися 40 нижчих станів фтору (згідно [253]), перші 26 з яких повністю співпадають із 26 нижчими станами, використаними у БСР-розрахунках [3]. У Таблиці А.10 розрахований у наближеннях БСР та ХФ спектр фтору порівняно з експериментальними значеннями [253] для різних мультиплетів, включених у розрахунки розсіювання. Загальне узгодження між експериментом і теорією є досить добрим, з відмінностями по енергії, що становлять менше 0.05 еВ для більшості станів, включених у БСР-розрахунок [3], і трохи гіршими, але все ще прийнятними показниками для ХФ-розрахунку [7].

Порівняння компіляційних енергій зв'язку НІСТ [253] з енергіями, отриманими у розрахунках БСР [3] та ХФ [7], дає досить наочне представлення про значимість урахування в обчисленнях кореляційних ефектів. Як видно

з таблиці, абсолютні значення похибок при обчисленні положення енергетичних рівнів свідчать про безумовну перевагу методу БСР над наближенням ХФ у врахуванні міжелектронної кореляції. Тільки для 3 рівнів з 26 значення ХФ-енергій є ближчими до експериментальних значень, ніж дані БСР.

Якість опису мішені в тому чи іншому підході можна додатково оцінити шляхом порівняння результатів для сил осциляторів різних переходів з експериментальними даними та іншими теоретичними передбаченнями. В таблиці А.11 наведено порівняння сил осциляторів, отриманих у розрахунках БСР [3] та ХФ [7], між собою та з останніми великомасштабними БКХФ-розрахунками [254]. Принагідно зауважимо, що порівняння сил осциляторів [3] та [254] з компіляцією поодиноких експериментальних даних НІСТ [253] було здійснено вище, в табл. А.8 і тут не наводиться.

Експериментальні дані є доступними тільки для декількох переходів між $3s$ і $3p$ -рівнями. Вище вже була констатована добра узгодженість даних БСР [3] з експериментом для всіх цих переходів, як і їх близька узгодженість з БКХФ-результатами [254] для більшості переходів. Помітні відмінності спостерігалися тільки для слабких переходів з gf -значеннями меншими за 0.1. Для більшості переходів значення (f_L) та (f_V) узгоджуються у межах кількох відсотків як у БСР-, так і в БКХФ-розрахунках. Навпаки, відношення f_L/f_V сил осциляторів, отримані з ХФ-розрахунків, часто проявляють значне відхилення від одиниці. Порівняння даних з таблиць А.10 і А.11 приводить до висновку, що хвильові функції (на базі яких розраховуються сили осциляторів) є значно чутливішими до ефектів міжелектронної кореляції, ніж енергії нижчих спектроскопічних станів.

Задамося питанням: чи можна різницю між даними ХФ-наближення і БСР-результатами вважати „чистим” вкладом електронної кореляції? Відповідь у значній мірі впливає з контексту сказаного вище: так, – якщо розрахунки порівнюваних характеристик є збіжними, а збільшення і оптимізація базису включають у себе все більш значну частину кореляційної взаємодії.

Факт збіжності БСР-розрахунків можна встановити порівнянням результатів трьох врахованих у даному дослідженні наближень: БСР39, БСР300 та БСР690. На рис. 6.9 представлені перерізи дипольних переходів між станами $F\ I$ – порядок їх розрахунку описано вище. Ці перерізи обчислені у вказаних трьох підходах, і з їх порівняння видно, що результати, отримані в наближенні БСР300, практично співпадають з даними БСР690. Останнє свідчить про збіжність БСР-розрахунків. Тому за відсутності експериментальних результатів можемо вважати результати наближення БСР690 певною мірою еталонними і порівнювати з ними одноконфігураційні ХФ-результати для встановлення ролі електронної кореляції.

Зауважимо, однак, що подібне пряме порівняння наразі можливо здійснити лише для енергій, табл. А.10, для яких значення енергій БСР39 та БСР690 відрізняються мінімально. В табл. А.11 наведено сили осциляторів, розраховані тільки в підході БСР39, бо отримання у явному вигляді аналогічних даних для випадку БСР690 стикається зі значними обчислювальними труднощами. Скоріше за все, ХФ-результати відрізнялися б від БСР690-даних ще більше, ніж від результатів БСР39-розрахунку. На користь подібного твердження говорить достатньо сильна асиметрія значень відношення f_L/f_V , отримана для ряду переходів у ХФ-наближенні, що свідчить про гіршу якість хвильових функцій, ніж у підході БСР39.

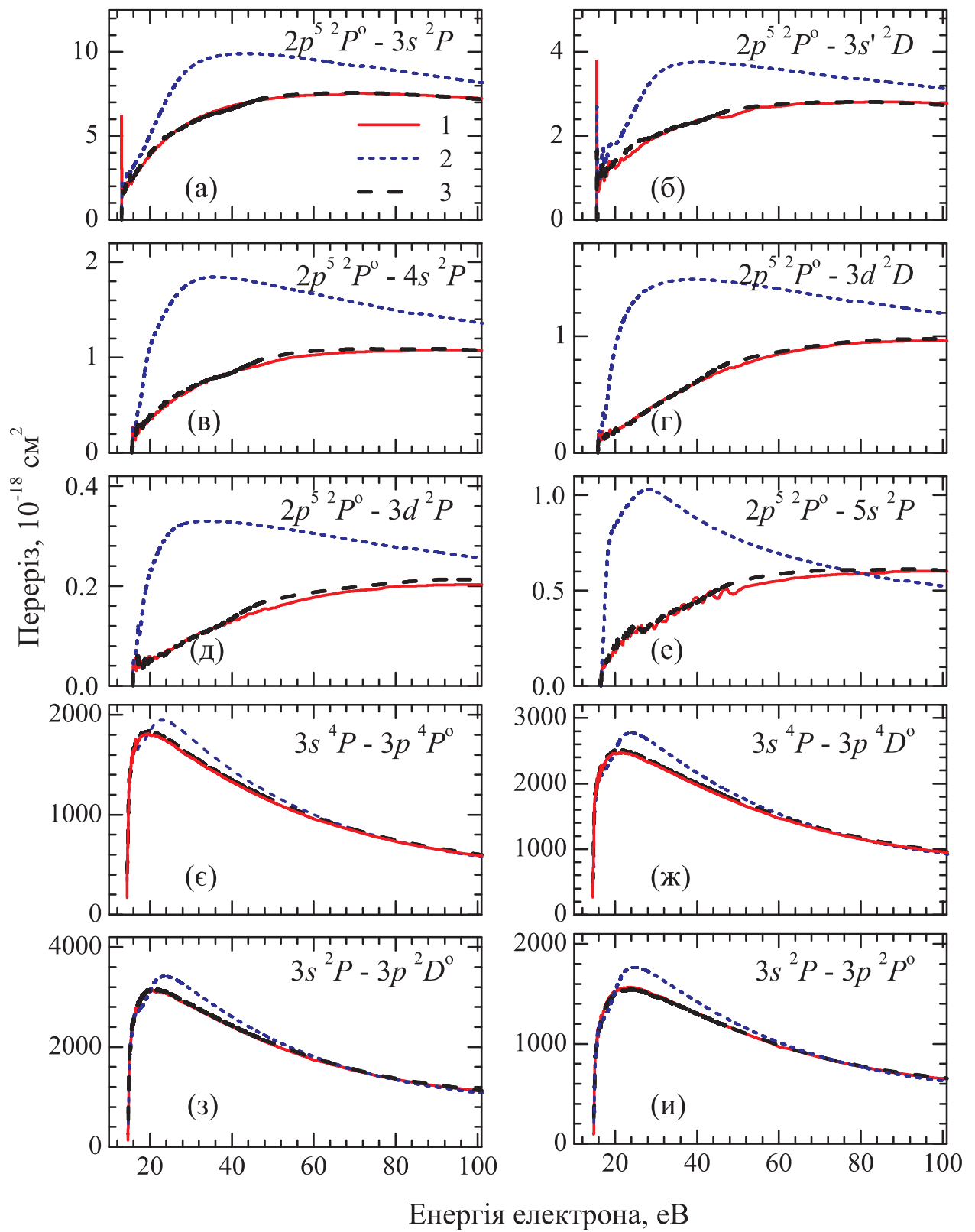


Рис. 6.9. Перерізи збудження дипольних переходів: 1, 2 – БСР690 та БСР39 [3], відповідно; 3 – БСР300 [7].

6.5 Висновки до розділу 6

1) Проведено систематичне дослідження процесів низькоенергетичного розсіяння електронів на атомі фтору. У рамках двох різних наближень БСР39 та БСР690 методу R -матриці розраховано характеристики процесів пружного розсіяння, 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.

2) Представлено енергетичні залежності ІІ пружного розсіяння та іонізації з основного стану $(2s^2 2p^5) \ ^2P^o$ атома фтору, а також для найбільш важливих переходів між 26 нижчими станами атома фтору. Виявлено, що поправки на взаємодію дискретних станів з континуумом мішені є значно 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. Показано також, 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%.

3) Виявлено багату резонансну структуру в енергетичних залежностях ІІ розсіяння електронів на атомі фтору, яка зумовлена утворенням та розпадом у процесі зіткнення $e-F$ автовідривних станів 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.

ВИСНОВКИ

Сформулюємо основні результати, отримані в дисертації. Всі ці результати були отримані в роботі вперше.

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 пакетів комп'ютерних програм БКХФ та БСР способом числового моделювання систематично досліджено велику сукупність елементарних процесів з перерозподілом у повільних зіткненнях електронів з атомами Mg, Sr, Si та F, які становлять значний інтерес як для розвитку атомної фізики в цілому так і для чисельних застосувань у суміжних галузях. Переважна частина розрахованих у рамках роботи атомних характеристик (інтегральних і диференціальних перерізів розсіювання, швидкостей переходів) для прийнятих до розгляду атомів отримана вперше.
3. Проведено розрахунки диференціальних та інтегральних перерізів низькоенергетичного розсіювання електронів на атомі Mg, які охоплюють пружне розсіювання та збудження п'яти нижніх станів $3s3p\ ^{1,3}P^o$, $3s4p\ ^1P^o$, $3s3d\ ^1D$ та $3s4s\ ^1S$. 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 $e\text{--Sr}$ в діапазоні енергій зіткнення до 10 еВ. Виявлено потужний резонанс форми $5s^2 4d\ ^2D$ 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 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^- . 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^- .

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

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).
4. Диференціальні перерізи розсіяння 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 розсіяння 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 розсіяння електронів на атомі фтору / Є.А. Нодь, В.Ю. Лазур // Наук. вісник УжНУ. Серія „Фізика”. — 2015. — Вип. 37. — С. 128–138.
8. Cross sections for electron scattering from magnesium / O. Zatsarinny, K. Bartschat, S. Gedeon, V. Gedeon, V. Lazur, E. Nagy // International Conference on the Physics of Electronic and Atomic Collision (XXVI ICPEAC). Kalamazoo, Michigan, USA, 22-28 July, 2009. — J. Phys.: Conf. Ser. — 2009. — Vol. 194, Iss. 4. — P. 042029 (1).
9. Нодь Е.А. Перерізи розсіяння електронів на атомі Sr / Е.А. Нодь,

- В.Ф. Гедеон, В.Ю. Лазур // XII Міжнародна молодіжна науково-практична конференція „Людина і космос” (XII-ЛІК). Дніпропетровськ: НЦАОМУ, Україна, 7-9 квітня, 2010 р. — Дніпропетровськ. — 2010. — С. 58.
10. Нодь Є.А. Розрахунки розсіювання електронів на атомах лужноземельних елементів / Є.А. Нодь, В.Ю. Лазур, В.Ф. Гедеон // XIII Міжнародна молодіжна науково-практична конференція „Людина і космос” (XIII-ЛІК). Дніпропетровськ: НЦАОМУ, Україна, 13-15 квітня, 2011 р. — Дніпропетровськ. — 2011. — С. 82.
 11. Нодь Є.А. Розрахунки розсіювання електронів на атомах Mg та Sr / Є.А. Нодь, В.Ф. Гедеон, В.Ю. Лазур // Міжнародна конференція молодих учених і аспірантів (ІЕФ-2011). Ужгород, Україна, 24-27 травня, 2011 р. — Ужгород. — 2011. — С. 190.
 12. Нодь Є.А. Збудження $3s3p\ ^3P^o$ -стану атома магнію електронним ударом / Є.А. Нодь, В.Ф. Гедеон, В.Ю. Лазур // XIV Міжнародна молодіжна науково-практична конференція „Людина і космос” (XIV-ЛІК). Дніпропетровськ: НЦАОМУ, Україна, 11-13 квітня, 2012 р. — Дніпропетровськ. — 2012. — С. 56.
 13. Нодь Є. Розсіювання електронів на атомі Si / Є. Нодь, С. Гедеон, В. Лазур // Міжнародна конференція студентів і молодих науковців з теоретичної та експериментальної фізики (ЕВРИКА-2012). Львів, Україна, 19-22 квітня, 2012 р. — Львів. — 2012. — С. A19.
 14. 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.
 15. Нодь Є.А. Врахування кореляцій у розрахунках розсіювання електронів на атомі кремнію / Є.А. Нодь, В.Ф. Гедеон, В.Ю. Лазур // XV Між-

- народна молодіжна науково-практична конференція „Людина і космос” (XV-ЛІК). Дніпропетровськ: НЦАОМУ, Україна, 10-12 квітня, 2013 р. — Дніпропетровськ. — 2013. — С. 62.
16. Нодь Є.А. Розрахунки розсіювання електронів на атомі Si / Є.А. Нодь, В.Ф. Гедеон, В.Ю. Лазур // Міжнародна конференція молодих учених і аспірантів (ІЕФ-2013). Ужгород, Україна, 20-23 травня, 2013 р. — Ужгород. — 2013. — С. 211.
 17. Врахування міжелектронної кореляції у розрахунках характеристик атома фтору / Є.А. Нодь, В.Ю. Лазур, С.В. Гедеон, В.Ф. Гедеон // XVI Міжнародна молодіжна науково-практична конференція „Людина і космос” (XVI-ЛІК). Дніпропетровськ: НЦАОМУ, Україна, 10-12 квітня, 2014 р. — Дніпропетровськ. — 2014. — С. 61.
 18. Комплексні розрахунки розсіювання електронів на атомі фтору / С.В. Гедеон, В.Ю. Лазур, Є.А. Нодь, В.Ф. Гедеон // XVI Міжнародна молодіжна науково-практична конференція „Людина і космос” (XVI-ЛІК). Дніпропетровськ: НЦАОМУ, Україна, 10-12 квітня, 2014 р. — Дніпропетровськ. — 2014. — С. 48.
 19. Нодь Є.А. Резонансна структура перерізів розсіювання електронів на атомі фтору / Є.А. Нодь, В.Ю. Лазур, В.Ф. Гедеон // XVII Міжнародна молодіжна науково-практична конференція „Людина і космос” (XVII-ЛІК). Дніпропетровськ: НЦАОМУ, Україна, 8-10 квітня, 2015 р. — Дніпропетровськ. — 2015. — С. 45.
 20. Нодь Є.А. Розрахунок перерізів розсіювання електронів на атомі фтору / Є.А. Нодь, В.Ф. Гедеон, В.Ю. Лазур // Міжнародна конференція молодих учених і аспірантів (ІЕФ-2015). Ужгород, Україна, 18-22 травня, 2015 р. — Ужгород. — 2015. — С. 70.
 21. Zatsarinny O. BSR: *B*-spline atomic *R*-matrix codes / O. Zatsarinny // Comput. Phys. Commun. — 2006. — Vol. 174, No 4. — P. 273–356.

22. Froese Fischer C. The MCHF atomic-structure package / C. Froese Fischer // Comput. Phys. Commun. — 1991. — Vol. 64, No 3. — P. 369–398.
23. Goldberger M.L. Collision Theory / M.L. Goldberger, K.M. Watson. — New York : John Wiley and Sons, Inc., 1964. — 919 p.
24. Lengyel V.I. Electron Scattering on Complex Atoms (Ions) / V.I. Lengyel, O. Zatsarinny, E. Remeta. — Huntington, N.Y. : Nova Science Publishers, Inc., 2000. — 474 p.
25. Смирнов Б.М. Моделирование газоразрядной плазмы / Б.М. Смирнов // УФН. — 2009. — Т. 179, Вып. 6. — С. 591–604.
26. Müller A. Electron-ion collisions: Fundamental processes in the focus of applied research / Alfred Müller // Adv. At., Mol., Opt. Phys. [Ed. Ennio Arimondo, Paul R. Berman, Chun C. Lin, Academic Press]. — 2008. — Vol. 55. — P. 293–417.
27. Фортов В.Е. Научная программа в новом международном центре фундаментальной физики — Европейском центре антипротонных и ионных исследований FAIR / В.Е. Фортов, Б.Ю. Шарков, Х. Штокер // УФН. — 2012. — Т. 182, Вып. 6. — С. 621–644.
28. Ильгисонис В.И. Классические результаты Б.Б. Кадомцева и вращение плазмы в современных токамаках / В.И. Ильгисонис // УФН. — 2009. — Т. 179, Вып. 7. — С. 790–800.
29. Schunk R.W. Ionospheres: Physics, Plasma Physics and Chemistry / Robert W. Schunk, Andrew F. Nagy. — Cambridge : Cambridge University Press, 2000. — 570 p.
30. Slanger T.G. Airglow Processes in Planetary Atmospheres / T.G. Slanger, B.C. Wolven. — Atmospheres in the Solar System: Comparative Aeronomy. Geophysical Monograph 130 [Ed. M. Mendillo, A. Nagy, J.H. Waite]. Washington, D.C. : American Geophysical Union, 2002. — 77 p.
31. How America can look within to achieve energy security and reduce global

- warming / Burton Richter, David Goldston, George Crabtree [et al] // *Rev. Mod. Phys.* — 2008. — Vol. 80, Iss. 4. — P. S1–S109.
32. Osterbrock D.E. *Astrophysics of gaseous nebulae and active galactic nuclei* / Donald E. Osterbrock. — Mill Valley, CA : University Science Books, 1989. — 422 p.
 33. Dalgarno A. *Spectroscopy of astrophysical plasmas* / A. Dalgarno, D. Layzer. — Cambridge : Cambridge University Press, 1987. — 371 p.
 34. Hartquist T.W. *Molecular Astrophysics* / T.W. Hartquist. — Cambridge : Cambridge University Press, 1990. — 484 p.
 35. Спектры полых ионов в сверхплотной лазерной плазме / И.Ю. Скобелев, А.Я. Фаенов, Т.А. Пикуз, В.Е. Фортов // *УФН.* — 2012. — Т. 182, Вып. 1. — С. 49–75.
 36. Создание экзотических состояний вещества с помощью рентгеновского излучения, генерируемого при фокусировке петаваттного лазерного импульса на твердотельные мишени / С.А. Пикуз, А.Я. Фаенов, И.Ю. Скобелев, В.Е. Фортов // *УФН.* — 2014. — Т. 184, Вып. 7. — С. 759–765.
 37. Woodruff D.P. *Modern Techniques of Surface Science (2nd edn)* / D.P. Woodruff, T.A. Delchar. — Cambridge : Cambridge University Press, 1994. — 608 p.
 38. Тимофеев А.В. К теории плазменной переработки отработавшего ядерного топлива / А.В. Тимофеев // *УФН.* — 2014. — Т. 184, Вып. 10. — С. 1101–1133.
 39. Карлов Н.В. Лазерное разделение изотопов / Н.В. Карлов, А.М. Прохоров // *УФН.* — 1976. — Т. 118, Вып. 4. — С. 583–609.
 40. Пятницкий Л.Н. Оптический разряд в поле лазерного бесселева пучка / Л.Н. Пятницкий // *УФН.* — 2010. — Т. 180, Вып. 2. — С. 165–184.
 41. Недоспасов А.В. Вращение газа в разрядах в продольном магнитном поле / А.В. Недоспасов // *УФН.* — 2015. — Т. 185, Вып. 6. — С. 613–617.

42. Born M. Fundamental investigations of mercury-free automotive discharge lamps / M. Born, M. Strösser // J. Phys. D: Appl. Phys. — 2007. — Vol. 40, No 13. — P. 3823–3828.
43. Плис Ю.А. Современное состояние физики и техники получения пучков поляризованных частиц / Ю.А. Плис, Л.М. Сороко // УФН. — 1972. — Т. 107, Вып. 6. — С. 281–319.
44. Субашиев А.В. Эффективные эмиттеры поляризованных электронов на основе полупроводниковых наноструктур / А.В. Субашиев // УФН. — 2001. — Т. 171, Вып. 12. — С. 1376–1379.
45. Andersen N. Collisional alignment and orientation of atomic outer shells I. Direct excitation by electron and atom impact / Nils Andersen, Jean W. Gallagher, Ingolf V. Hertel // Phys. Rep. — 1988. — Vol. 165, Iss. 1-2. — P. 1–188.
46. Fernow R.C. Introduction to Experimental Particle Physics / R.C. Fernow. — Cambridge : Cambridge University Press, 1989. — 432 p.
47. High quality electron beams from a laser wakefield accelerator / S.M. Wiggins, R.C. Issac, G.H. Welsh *et al* // Plasma Phys. Control. Fusion. — 2010. — Vol. 52, No 12. — P. 124032 (8).
48. Эксилампы – эффективные источники спонтанного УФ- и ВУФ-излучения / М.И. Ломаев, В.С. Скакун, Э.А. Соснин [и др.] // УФН. — 2003. — Т. 173, Вып. 2. — С. 201–217.
49. Католюминесцентные источники света (современное состояние и перспективы) / А.С. Бугаев, В.Б. Киреев, Е.П. Шешин, А.Ю. Колодяжный // УФН. — 2015. — Т. 85, Вып. 8. — С. 853–883.
50. Pfeifer T. Femtosecond x-ray science / T. Pfeifer, C. Spielmann, G. Gerber // Rep. Prog. Phys. — 2006. — Vol. 69, No 2. — P. 443–505.
51. Воеводин В.В. Параллельные вычисления / В.В. Воеводин, Вл.В. Воеводин. — СПб. : БХВ-Петербург, 2002. — 608 с.

52. Grant I.P. Relativistic atomic structure: past, present and future / I.P. Grant // J. Phys. B. — 2010. — Vol. 43, Iss. 7. — P. 074033 (11).
53. Grant I.P. Relativistic Quantum Theory of Atoms and Molecules: Theory and Computation / I.P. Grant. — Springer Series on Atomic, Optical, and Plasma Physics, Vol. 40, New York : Springer, 2007. — 799 p.
54. Bray I. Convergent Close-Coupling Method: A „Complete Scattering Theory”? / Igor Bray, Dmitry V. Fursa // Phys. Rev. Lett. — 1996. — Vol. 76, Iss. 15. — P. 2674–2677.
55. Zatsarinny O. The *B*-spline *R*-matrix method for atomic processes: application to atomic structure, electron collisions and photoionization / O. Zatsarinny, K. Bartschat // J. Phys. B. — 2013. — Vol. 46, No 11. — P. 112001 (39).
56. Bray I. Calculation of ionization within the close-coupling formalism / Igor Bray, Dmitry V. Fursa // Phys. Rev. A. — 1996. — Vol. 54, Iss. 4. — P. 2991–3004.
57. Froese Fischer C. Computational Atomic Structure: An MCHF Approach / C. Froese Fischer, T. Brage, P. Jönsson. — Bristol and Philadelphia : Institute of Physics Publishing, 1997. — 279 p.
58. „Plasma Sources”. Low Temperature Plasmas: Fundamentals, Technologies, and Techniques (2nd ed.) / R. Hippler, H. Kersten, M. Schmidt, K. M. Schoenbach, eds. — Wiley-VCH, 2008. — 945 p.
59. Друкарев Г.Ф. Теория столкновений электронов с атомами / Г.Ф. Друкарев. — М. : Физматгиз, 1963. — 219 с.
60. Rudge M.R.H. Theory of the Ionization of Atoms by Electron Impact / M.R.H. Rudge // Rev. Mod. Phys. — 1968. — Vol. 40, Iss. 3. — P. 564–590.
61. Мотт М. Теория атомных столкновений / М. Мотт, Г. Месси. — М. : Мир, 1969. — 756 с.
62. Вайнштейн Л.А. Сечение возбуждения атомов и ионов электронами. Сводка формул и таблицы для определения сечений электрон-атомных

- столкновений и вероятностей радиационных переходов / Л.А. Вайнштейн, И.И. Собельман, Е.А. Юков. — М. : Наука, 1973. — 143 с.
63. Гайлитис М.К. Метод сильной связи в теории электронно-атомных столкновений / М.К. Гайлитис // УФН. — 1975. — Т. 116, Вып. 8. — С. 665–686.
 64. Burke P.G. The *R*-Matrix Theory of Atomic Processes / P.G. Burke, W.D. Robb // Adv. At., Mol., Opt. Phys. [Ed. D. R. Bates and B. Bederson, Academic Press]. — 1976. — V. 11. — P. 143–214.
 65. Burke P.G. Potential Scattering in Atomic Physics / P.G. Burke. — New York : Plenum Publishing Corporation, 1977. — 138 p.
 66. Друкарев Г.Ф. Столкновения электронов с атомами и молекулами / Г.Ф. Друкарев. — М. : Наука, 1978. — 255 с.
 67. Лендзел В.И. Нерелятивистская квантовая теория рассеяния: учеб. пособие / В.И. Лендзел, М. Салак. — Львов : Вища школа, 1983. — 136 с.
 68. Burke P.G. Atomic and molecular processes: an *R*-matrix approach / P.G. Burke, K.A. Berrington. — Bristol: Institute of Physics, 1993. — 416 p.
 69. Burke P.G. Theory of Electron Atom Collisions: Part 1: Potential Scattering / P.G. Burke, C.J. Joachain. — New York : Springer, 1995. — 255 p.
 70. Positron Collisions with Atoms / H.R.J. Walters, A.A. Kernoghan, M.T. McAlinden, C.P. Campbell // Photon and Electron Collisions with Atoms and Molecules [Ed. P.G. Burke, C.J. Joachain, Springer US]. — 1997. — Physics of Atoms and Molecules. — P. 313–345.
 71. Burke P.G. *R*-Matrix Theory of Atomic Collisions / P.G. Burke. — Berlin : Springer, 2011. — 746 p.
 72. Shevelko V. Atomic Processes in Basic and Applied Physics / V. Shevelko. — Springer Series on Atomic, Optical, and Plasma Physics [Ed. H. Tawara] Berlin : Springer, 2012. — 498 p.

73. Condon E.U. The Theory of Atomic Spectra / E.U. Condon, G.H. Shortley. — Cambridge, UK : Cambridge University Press, 1953. — 442 p.
74. Bethe H.A. Quantum Mechanics of One- and Two-Electron Atoms / H.A. Bethe, E.E. Salpeter. — Heidelberg, Berlin : Springer, 1957. — 368 p.
75. Зоммерфельд А. Строение атома и спектры: пер. с нем. А.Н. Матвеева и Б.В. Медведева / А. Зоммерфельд; под ред. Я.А. Смородинского. — М. : Изд-во технико-теоретической литературы, 1956. — Т. 2. — 694 с.
76. Hartree D.R. The Calculation of Atomic Structures / D.R. Hartree. — New York : Wiley, 1957. — 181 p.
77. Slater J.C. Quantum theory of atomic structure / J.C. Slater. — New York : McGraw-Hill, 1960. — 2 Vols. — 1065 p.
78. Собельман И.И. Введение в теорию атомных спектров / И.И. Собельман. — М. : Физматгиз, 1963. — 640 с.
79. Синагоглу О. Многоэлектронная теория атомов, молекул и их взаимодействий: пер. с англ. / О. Синагоглу. — М. : Мир, 1966. — 152 с.
80. Юцис А.П. Математические основы теории атома / А.П. Юцис, А.Ю. Савукина. — Вильнюс. : Минтис, 1973. — 480 с.
81. Froese Fischer C. The Hartree–Fock method for atoms. A numerical approach / C. Froese Fischer. — New York : John Wiley and Sons, 1977. — 320 p.
82. Cowan R.D. The Theory of Atomic Structure and Spectra / R.D. Cowan. — Berkeley, CA : University of California Press, Ltd, 1981. — 650 p.
83. Shevelko V.P. Atomic Structure and Spectra / V.P. Shevelko // Atoms and Their Spectroscopic Properties. — 1997. — Springer Series on Atoms + Plasmas, V. 18. — P. 3–39.
84. Wijesundera W. Electron scattering from atomic targets: application of Dirac R -matrix theory / W. Wijesundera, I. Grant and P. Norrington // Many-body atomic physics [Ed. J.J. Boyle, M.S. Pindzola]. — 1998. — Cambridge : Cambridge University Press. — P. 325–348.

85. Martin R.M. *Electronic Structure: Basic Theory and Practical Methods* / R.M. Martin. — Cambridge : Cambridge University Press, 2004. — 624 p.
86. Лендшел В.И. Теория резонансных явлений в электрон-атомных столкновениях / В.И. Лендшел, В.Т. Навроцкий, Е.П. Сабад. — К. : Наукова думка, 1988. — 216 с.
87. Feshbach resonances in ultracold gases / Cheng Chin, Rudolf Grimm, Paul Julienne, Eite Tiesinga // *Rev. Mod. Phys.* — 2010. — Vol. 82, Iss. 2. — P. 1225–1286.
88. Miroshnichenko A.E. Fano resonances in nanoscale structures / Andrey E. Miroshnichenko, Sergej Flach, Yuri S. Kivshar // *Rev. Mod. Phys.* — 2010. — Vol. 82, Iss. 3. — P. 2257–2298.
89. Löwdin P.O. Quantum Theory of Many-Particle Systems. III. Extension of the Hartree-Fock Scheme to Include Degenerate Systems and Correlation Effects / P.O. Löwdin // *Phys. Rev.* — 1955. — Vol. 97, Iss. 6. — P. 1509–1520.
90. Laforge A. Study of the correlation effects in a three-electron model system using the projected Hartree-Fock method and the natural spin orbital formalism / A. Laforge, J. Čížek, J. Paldus // *J. Chem. Phys.* — 1973. — Vol. 59, Iss. 5. — P. 2560–2571.
91. Brage T. Systematic calculations of correlation in complex ions / Tomas Brage, Charlotte Froese Fischer // *Phys. Scr.* — 1993. — Vol. 1993, T47. — P. 18–28.
92. Practical Means for the Study of Electron Correlation in Atoms / R.W. van Boeyen, N. Watanabe, J.P. Doering [et al] // *Phys. Rev. Lett.* — 2004. — Vol. 92, Iss. 22. — P. 223202 (4).
93. Doublet-quartet energy separation in boron: A partitioned-correlation-function-interaction method / Charlotte Froese Fischer, Simon Verdebout, Michel Godefroid [et al] // *Phys. Rev. A.* — 2013. — Vol. 88, Iss. 6. — P. 062506 (6).

94. Изюмов Ю.А. Материалы с сильными электронными корреляциями / Ю.А. Изюмов, Э.З. Курмаев // УФН. — 2008. — Т. 178, Вып. 1. — С. 25–60.
95. Approaches to Perfect/Complete Scattering Experiments in Atomic and Molecular Physics / H. Kleinpoppen, B. Lohmann, A. Grum-Grzhimailo, U. Becker // Adv. At., Mol., Opt. Phys. [Ed. H. H. Stroke, Academic Press]. — 2005. — Vol. 51. — P. 471–534.
96. Hotop H. Binding Energies in Atomic Negative Ions: II / H. Hotop, W.C. Lineberger // J. Phys. Chem. Ref. Data. — 1985. — Vol. 14, No 3. — P. 731–750.
97. Месси Г.С.У. Отрицательные ионы : Пер. с англ. / Г.С.У. Месси. — М. : Мир, 1979. — 754 с.
98. Low energy super-elastic scattering studies of calcium over the complete angular range using a magnetic angle changing device / Martyn Hussey, Andrew Murray, William MacGillivray, George King // J. Phys. B. — 2008. — Vol. 41, No 5. — P. 055202 (10).
99. Murray A. Theoretical modeling of resonant laser excitation of atoms in a magnetic field / Andrew James Murray, William MacGillivray, Martyn Hussey // Phys. Rev. A. — 2008. — Vol. 77, Iss. 1. — P. 013409 (12).
100. Electron impact ionization and excitation studies of laser prepared atomic targets / Andrew James Murray, Martyn Hussey, Alex Knight-Percival [et al] // J. Phys: Conf. Ser. — 2012. — Vol. 388, Part 1. — P. 012009 (8).
101. Lengyel V.I. Resonance phenomena in electron-atom collisions / V.I. Lengyel, V.T. Navrockij, E.P. Sabad. — Springer Series on Atomic, Optical, and Plasma Physics, Vol. 11, Heidelberg : Springer, 1992. — 188 p.
102. Gargioni E. Electron scattering from argon: Data evaluation and consistency / E. Gargioni, B. Grosswendt // Rev. Mod. Phys. — 2008. — Vol. 80, Iss. 2. — P. 451–480.

103. Pegg D.J. Structure and dynamics of negative ions / David J. Pegg // Rep. Prog. Phys. — 2004. — Vol. 67, No 6. — P. 857–905.
104. Fursa D.V. Fully Relativistic Convergent Close-Coupling Method for Excitation and Ionization Processes in Electron Collisions with Atoms and Ions / Dmitry V. Fursa, Igor Bray // Phys. Rev. Lett. — 2008. — Vol. 100, Iss. 11. — P. 113201 (4).
105. Williams I.D. Electron-ion scattering / I.D. Williams // Rep. Prog. Phys. — 1999. — Vol. 62, No 10. — P. 1431–1469.
106. Burke P.G. Photon and Electron Collisions with Atoms and Molecules / Philip G. Burke, Charles J. Joachain (ed.). — New York : Plenum Press, 1997. — 386 p.
107. Fano U. Effects of Configuration Interaction on Intensities and Phase Shifts / U. Fano // Phys. Rev. — 1961. — Vol. 124, Iss. 6. — P. 1866–1878.
108. Fano U. Correlations of two excited electrons / U. Fano // Rep. Prog. Phys. — 1983. — Vol. 46, No 2. — P. 97–166.
109. Seaton M.J. Quantum defect theory / M.J. Seaton // Rep. Prog. Phys. — 1983. — Vol. 46, No 2. — P. 167–258.
110. Drake G.W.F. Energies and Asymptotic Analysis for Helium Rydberg States / G.W.F. Drake // Adv. At., Mol., Opt. Phys. [Ed. Sir David Bates, Benjamin Bederson, Academic Press]. — 1993. — Vol. 31. — P. 1–62.
111. Pachucki K. Higher-order recoil corrections to helium fine structure / Krzysztof Pachucki, Jonathan Sapirstein // J. Phys. B. — 2003. — Vol. 36, No 5. — P. 803–810.
112. The properties of hydrogen and helium under extreme conditions / Jeffrey M. McMahon, Miguel A. Morales, Carlo Pierleoni, David M. Ceperley // Rev. Mod. Phys. — 2012. — Vol. 84, Iss. 4. — P. 1607–1653.
113. Schmelcher P. Atoms and Molecules in Strong External Fields / P. Schmelcher, W. Schweizer (Eds.). — US : Springer, 1998. — 336 p.

114. Lai D. Matter in strong magnetic fields / D. Lai // *Rev. Mod. Phys.* — 2001. — Vol. 73, Iss. 3. — P. 629–662.
115. Попов В.С. Атом водорода в сильном магнитном поле / В.С. Попов, Б.М. Карнаков // *УФН.* — 2014. — Т. 184, Вып. 3. — С. 273–296.
116. Cold atoms in cavity-generated dynamical optical potentials / Helmut Ritsch, Peter Domokos, Ferdinand Brennecke, Tilman Esslinger // *Rev. Mod. Phys.* — 2013. — Vol. 85, Iss. 2. — P. 553–601.
117. Thirumalai A. Energy Levels of Light Atoms in Strong Magnetic Fields / Anand Thirumalai, Jeremy S. Heyl // *Adv. At., Mol., Opt. Phys.* [Ed. Ennio Arimondo, Paul R. Berman, Chun C. Lin, Academic Press]. — 2014. — Vol. 63, Ch. 5. — P. 323–358.
118. Смирнов Б.М. Высоковозбужденные состояния атомов / Б.М. Смирнов // *УФН.* — 1980. — Т. 131, № 8. — С. 577–616.
119. Gallagher T.F. Dipole-Dipole Interactions of Rydberg Atoms / Thomas F. Gallagher, Pierre Pillet // *Adv. At., Mol., Opt. Phys.* [Ed. Arimondo [et al], Academic Press]. — 2008. — Vol. 56, Ch. 4. — P. 161–218.
120. Vaillant C.L. Multichannel quantum defect theory of strontium bound Rydberg states / C.L. Vaillant, M.P.A. Jones, R.M. Potvliege // *J. Phys. B.* — 2014. — Vol. 47, No 15. — P. 155001 (19).
121. Cold Rydberg Atoms / J.-H. Choi, B. Knuffman, T. Cubel Liebisch [et al] // *Adv. At., Mol., Opt. Phys.* [Ed. P.R. Berman, C.C. Lin, E. Arimondo, Academic Press]. — 2007. — Vol. 54. — P. 131–202.
122. Saffman M. Quantum information with Rydberg atoms / M. Saffman, T.G. Walker, K. Mølmer // *Rev. Mod. Phys.* — 2010. — Vol. 82, Iss. 3. — P. 2313–2363.
123. King W.H. Isotope Shifts in Atomic Spectra / W.H. King. — US : Springer, 1984. — 210 p.
124. Cardona M. Isotope effects on the optical spectra of semiconductors /

- Manuel Cardona, M.L.W. Thewalt // *Rev. Mod. Phys.* — 2005. — Vol. 77, Iss. 4. — P. 1173–1224.
125. Curtis L.J. *Atomic Structure and Lifetimes: A Conceptual Approach* / Lorenzo J. Curtis. — Cambridge : Cambridge University Press, 2003. — 282 p.
 126. Blackwell D.E. An appraisal of the accuracy of furnace gf measurements; their extension by use of a hollow cathode source / D.E. Blackwell // *Atomic Spectra and Oscillator Strengths for Astrophysics and Fusion Research* [Ed. J. E. Hansen, North-Holland, Amsterdam]. — 1990. — Laboratory measurements of atomic data. — P. 160–164.
 127. Spruch L. Pedagogic notes on Thomas-Fermi theory (and on some improvements): atoms, stars, and the stability of bulk matter / Larry Spruch // *Rev. Mod. Phys.* — 1991. — Vol. 63, Iss. 1. — P. 151–209.
 128. Kohn W. Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects / W. Kohn, L.J. Sham // *Phys. Rev.* — 1965. — Vol. 140, Iss. 4A. — P. A1133–A1138.
 129. Fiolhais C. *A Primer in Density Functional Theory* / C. Fiolhais, F. Nogueira, M. Marques (Eds.) // *Chapter in Lecture Notes in Physics.* — 2003. — Vol. 620. — P. 1–267.
 130. *Electronic structure calculations with dynamical mean-field theory* / G. Kotliar, S.Y. Savrasov, K. Haule [et al] // *Rev. Mod. Phys.* — 2006. — Vol. 78, Iss. 3. — P. 865–951.
 131. Kümmel S. *Orbital-dependent density functionals: Theory and applications* / S. Kümmel, L. Kronik // *Rev. Mod. Phys.* — 2008. — Vol. 80, Iss. 1. — P. 3–60.
 132. Zatsarinny O. *Atomic structure calculations using MCHF and BSR* / Oleg Zatsarinny, Charlotte Froese Fischer // *Comput. Phys. Commun.* — 2009. — Vol. 180, Iss. 11. — P. 2041–2065.

133. Froese Fischer C. B-splines in variational atomic structure calculations / Charlotte Froese Fischer // *Adv. At., Mol., Opt. Phys.* [Ed. E. Arimondo, P.R. Berman, C.C. Lin, Academic Press]. — 2008. — V. 55. — P. 235–291.
134. Safronova M.S. All-Order Methods for Relativistic Atomic Structure Calculations / M.S. Safronova, W.R. Johnson // *Adv. At., Mol., Opt. Phys.* [Ed. E. Arimondo, P.R. Berman, C.C. Lin, Academic Press]. — 2008. — Vol. 55. — P. 191–233.
135. Feldman G. The relativistic Hartree-Fock and random phase approximations for many-electron atoms / G. Feldman, T. Fulton // *Ann. Phys.* — 1986. — Vol. 172, Iss. 1. — P. 40–66.
136. Feldman G. Relativistic many-electron atoms in perturbation and dirac-fock theory / G. Feldman, T. Fulton // *Ann. Phys.* — 1987. — Vol. 179, Iss. 1. — P. 20–51.
137. Johnson W.R. Many-body perturbation-theory calculations of energy levels along the lithium isoelectronic sequence / W.R. Johnson, S.A. Blundell, J. Sapirstein // *Phys. Rev. A.* — 1988. — Vol. 37, Iss. 8. — P. 2764–2777.
138. Relativistic all-order calculations of energies and matrix elements for Li and Be^+ / S.A. Blundell, W.R. Johnson, Z.W. Liu, J. Sapirstein // *Phys. Rev. A.* — 1989. — Vol. 40, Iss. 5. — P. 2233–2246.
139. Chang T. Many-body Theory of Atomic Structure and Photoionization / T. Chang. — Singapore : World Scientific, 1993. — 408 p.
140. Becker U. VUV and Soft X-Ray Photoionization / U. Becker, D.A. Shirley. — *Physics of Atoms and Molecules*, US : Springer, 2012. — 651 p.
141. Theories of photoelectron correlation in laser-driven multiple atomic ionization / Wilhelm Becker, XiaoJun Liu, Phay Jo Ho, Joseph H. Eberly // *Rev. Mod. Phys.* — 2012. — Vol. 84, Iss. 3. — P. 1011–1043.
142. Lin C.-D. Classifications and Properties of Doubly Excited States of Atoms / C.-D. Lin (Ed.). — *Review of Fundamental Processes and Applications of Atoms and Ions*, Singapore : World Scientific, 1993. — 357–402 p.

143. Powell C.J. Innershell Ionization Cross Sections (Chapter 6) / C.J. Powell.
— Electron Impact Ionization [ed. T.D. Mark, G.H. Dunn], Berlin : Springer,
1985. — 198–231 p.
144. March N.H. The Many-body Problem in Quantum Mechanics / N.H. March,
W.H. Young, S. Sampanthar. — Cambridge : Cambridge Univ. Press, 1967.
— 459 p.
145. Amusia M.Ya. Atomic Photoeffect / M.Ya. Amusia. — US : Springer, 1990.
— 318 p.
146. Kelly H.P. Advances in Theoretical Physics, Vol. 2 / H.P. Kelly [ed.
K.A. Brueckner]. — New York : Academic Press, 1968. — 75–169 p.
147. Pines D. The many-body problem / D. Pines. — New York : Benjamin,
1961. — 457 p.
148. Descouvemont P. The R -matrix theory / P. Descouvemont, D. Baye // *Rep. Prog. Phys.* — 2010. — Vol. 73, No 3. — P. 036301 (44).
149. Kieffer L.J. Electron Impact Ionization Cross-Section Data for Atoms,
Atomic Ions, and Diatomic Molecules: I. Experimental Data / L.J. Kieffer,
G.H. Dunn // *Rev. Mod. Phys.* — 1966. — Vol. 38, Iss. 1. — P. 1–35.
150. Moiseiwitsch B.L. Electron Impact Excitation of Atoms / B.L. Moisei-
witsch, S.J. Smith // *Rev. Mod. Phys.* — 1968. — Vol. 40, Iss. 2. — P. 238–
353.
151. Bederson B. Total Electron – Atom Collision Cross Sections at Low Energies
– A Critical Review / B. Bederson, L.J. Kieffer // *Rev. Mod. Phys.* — 1971.
— Vol. 43, Iss. 4. — P. 601–640.
152. Recommended Data on the Electron Impact Ionization of Light Atoms and
Ions / K.L. Bell, H.B. Gilbody, J.G. Hughes [et al] // *J. Phys. Chem. Ref.*
Data. — 1983. — Vol. 12, Iss. 4. — P. 891–916.
153. Märk T.D. Electron collision cross sections / T.D. Märk, Y. Hatano, F. Lin-
der // *Atomic and molecular data for radiotherapy and radiation research.*
Final report of a co-ordinated research programme IAEA-TECDOC-799,

- International Atomic Energy Agency, Austria. — 1995. — Chap. 3. — P. 163–276.
154. Heddle D.W.O. Measurements of electron impact optical excitation functions / D.W.O. Heddle, Jean W. Gallagher // *Rev. Mod. Phys.* — 1989. — Vol. 61, Iss. 2. — P. 221–278.
 155. Bederson B. The perfect scattering experiment. I / B. Bederson // *Comments At. Mol. Phys.* — 1969. — Vol. 1. — P. 41–64.
 156. Bederson B. The perfect scattering experiment. II / B. Bederson // *Comments At. Mol. Phys.* — 1969. — Vol. 1. — P. 64–81.
 157. 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.* — 2002. — Vol. 35, No 15. — P. R117–R146.
 158. Electron- and photon-impact atomic ionisation / I. Bray, D.V. Fursa, A.S. Kadyrov [et al] // *Phys. Rep.* — 2012. — Vol. 520, Iss. 3. — P. 135–174.
 159. Bostock C.J. Relativistic convergent close-coupling method calculation of the spin polarization of electrons scattered elastically from zinc and mercury / Christopher J. Bostock, Dmitry V. Fursa, Igor Bray // *Phys. Rev. A.* — 2012. — Vol. 85, Iss. 6. — P. 062707 (6).
 160. Bostock C.J. Relativistic convergent close-coupling calculation of spin asymmetries for electron-thallium scattering / Christopher J. Bostock, Dmitry V. Fursa, Igor Bray // *Phys. Rev. A.* — 2012. — Vol. 86, Iss. 6. — 062701 (6).
 161. Burke P.G. Electron – Atom Scattering Theory and Calculations / P.G. Burke // *Adv. At., Mol., Opt. Phys.* [Ed. Benjamin Bederson and Alexander Dalgarno, Academic Press]. — 1994. — Vol. 32. — P. 39–55.
 162. Schneider B.I. The Role of Theory in the Evaluation and Interpretation of Cross-Section Data / Barry I. Schneider // *Adv. At., Mol., Opt. Phys.* [Ed. Mitio Inokuti, Academic Press]. — 1994. — Vol. 33. — P. 183–214.

163. Kallman T.R. Atomic data for x-ray astrophysics / T.R. Kallman, P. Palmeri // Rev. Mod. Phys. — 2007. — Vol. 79, Iss. 1. — P. 79–133.
164. Bransden B.H. Physics of Atoms and Molecules / B.H. Bransden, C.J. Joachain. — London : Prentice Hall, 2003. — 1114 p.
165. Kim Y.-K. Scaling of plane-wave Born cross sections for electron-impact excitation of neutral atoms / Yong-Ki Kim // Phys. Rev. A. — 2001. — Vol. 64, Iss. 3. — P. 032713 (10).
166. Kim Y.-K. Binary-encounter-dipole model for electron-impact ionization / Yong-Ki Kim, M. Eugene Rudd // Phys. Rev. A. — 1994. — Vol. 50, Iss. 5. — P. 3954–3967.
167. Froese Fischer C. A *B*-spline Galerkin method for the Dirac equation / Charlotte Froese Fischer, Oleg Zatsarinny // Comput. Phys. Commun. — 2009. — Vol. 180, Iss. 6. — P. 879–886.
168. Zatsarinny O. A general program for computing angular integrals of the Breit–Pauli Hamiltonian with non-orthogonal orbitals / Oleg Zatsarinny, Charlotte Froese Fischer // Comput. Phys. Commun. — 2000. — Vol. 124, Iss. 2–3. — P. 247–289.
169. ALTDSE: An Arnoldi–Lanczos program to solve the time-dependent Schrodinger equation / Xiaoxu Guan, C.J. Noble, O. Zatsarinny, K. Bartschat, B.I. Schneider // Comput. Phys. Commun. — 2009. — Vol. 180, Iss. 12. — P. 2401–2409.
170. Applications of *B*-splines in atomic and molecular physics / H. Bachau, E. Cormier, P. Decleva [et al] // Rep. Progr. Phys. — 2001. — Vol. 64, No 12. — P. 1815–1943.
171. de Boor C. A practical guide to splines / C. de Boor. — New York : Springer-Verlag, 1978. — 392 p.
172. Brown D.O. The scattering of 40 eV electrons from magnesium: a polarization correlation study for the 3^1P state and differential cross sections for elastic scattering and excitation of the 3^1P and 3^3P states / D.O. Brown,

- D. Cvejanović, A. Crowe // J. Phys. B. — 2003. — Vol. 36, No 16. — P. 3411–3423.
173. Electron scattering from magnesium at an incident energy of 20 eV / D.O. Brown, A. Crowe, D.V. Fursa [et al] // J. Phys. B. — 2005. — Vol. 38, No 22. — P. 4123–4134.
174. Electron scattering by magnesium: excitation of the $3s3p\ ^1P_1$ state / D.M. Filipović, B. Predojević, V. Pejčev [et al] // J. Phys. B. — 2006. — Vol. 39, No 11. — P. 2583–2592.
175. 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.
176. Electron scattering by magnesium: excitation of the $3s4s\ ^1S_0$, $3s3d\ ^1D_2$ and $3s4p\ ^1P_1$ states / B. Predojević, V. Pejčev, D.M. Filipović [et al] // J. Phys. B. — 2008. — Vol. 41, No 1. — P. 015202 (10).
177. Electron impact excitation of the $3s3p\ ^3P$ state of magnesium from the ground state / B. Predojević, V. Pejčev, D.M. Filipović [et al] // J. Phys. B. — 2011. — Vol. 44, No 5. — P. 055208 (6).
178. Williams W. Electron impact excitation of magnesium at 10, 20 and 40 eV impact energies / W. Williams, S. Trajmar // J. Phys. B. — 1978. — Vol. 11, No 11. — P. 2021–2029.
179. Electron impact excitation of the 3^1P state in magnesium / M.J. Brunger, J.L. Riley, R.E. Scholten, P.J.O. Teubner // J. Phys. B. — 1988. — Vol. 21, No 9. — P. 1639–1648.
180. Electron impact excitation of the 3^3P state in magnesium / R.K. Houghton, M.J. Brunger, G. Shen, P.J.O. Teubner // J. Phys. B. — 1994. — Vol. 27, No 15. — P. 3573–3580.
181. Romanyuk N.I. Cross sections and characteristics of electron scattering by calcium, strontium and barium atoms / N.I. Romanyuk, O.B. Shpenik,

- I.P. Zapesochnyi // Pis'ma Zh. Eksp. Teor. Fiz. — 1980. — Vol. 32, No 7. — P. 472–475.
182. Baliyan K.S. Electron-impact collision strengths for neutral fluorine / K.S. Baliyan, A.K. Bhatia // Phys. Rev. A. — 1994. — Vol. 50, Iss. 4. — P. 2981–2988.
 183. Ньютон Р. Теория рассеяния волн и частиц / Р. Ньютон. — М. : Мир, 1969. — 607 с.
 184. Mark T.D. Electron impact ionization / T.D. Mark, C.H. Dunn. — N.Y. : Springer, 1985. — 384 p.
 185. Казанский А.К. Рассеяние медленных электронов на молекулах / А.К. Казанский, И.И. Фабрикант // УФН. — 1984. — Т. 143, Вып. 8. — С. 601–640.
 186. Froese Fischer C. Spline algorithms for continuum functions / C. Froese Fischer, M. Idrees // Comput. Phys. — 1989. — Vol. 3, No 3. — P. 53–58.
 187. Saraph H.E. Excitation of Forbidden Lines in Gaseous Nebulae I. Formulation and Calculations for $2p^q$ Ions / Hannelore E. Saraph, M.J. Seaton, Jillian Shemming // Phil. Trans. R. Soc. Lond. — 1969. — Vol. 264, Iss. 1149. — P. 77–105.
 188. Zatsarinny O. Nonperturbative B -spline R -matrix-with-pseudostates calculations for electron-impact ionization of helium / O. Zatsarinny, K. Bartschat // Phys. Rev. A. — 2012. — Vol. 85, Iss. 6. — P. 062709 (10).
 189. Bray I. Explicit demonstration of the convergence of the close-coupling method for a Coulomb three-body problem / I. Bray, A.T. Stelbovics // Phys. Rev. Lett. — 1992. — Vol. 69, Iss. 1. — P. 53–56.
 190. Bray I. Convergent close-coupling calculations of electron-hydrogen scattering / I. Bray, A.T. Stelbovics // Phys. Rev. A. — 1992. — Vol. 46, Iss. 11. — P. 6995–7011.

191. Bray I. Box-based convergent close-coupling method for solving Coulomb few-body problems / I. Bray, K. Bartschat, A.T. Stelbovics // Phys. Rev. A. — 2003. — Vol. 67, Iss. 6. — P. 060704 (4).
192. Bartschat K. Electron – atom scattering at low and intermediate energies using a pseudo-state *R*-matrix basis / K. Bartschat, E.T. Hudson, M.P. Scott [et al] // J. Phys. B. — 1996. — Vol. 29, No 1. — P. 115–123.
193. Burke P.G. *R*-Matrix Theory of Electron Scattering at Intermediate Energies / P.G. Burke, C.J. Noble, Penny Scott // Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences. — 1987. — Vol. 410, No 1839. — P. 289–310.
194. Jucys A.P. On the Hartree-Fock Method in Multi-Configuration Approximation / A.P. Jucys // Adv. Chem. Phys. — 1969. — Vol. 14. — P. 191–206.
195. Веселов М.Г. Теория атома: Строение электронных оболочек / М.Г. Веселов, Л.Н. Лабзовский. — М. : Наука, ГРФМЛ, 1986. — 328 с.
196. Racah G. Theory of complex Spectra. IV / Giulio Racah // Phys.Rev. — 1949. — Vol. 76, Iss. 9. — P. 1352–1364.
197. Froese Fischer Ch. A *B*-spline Hartree-Fock program / Charlotte Froese Fischer // Comput. Phys. Commun. — 2011. — Vol. 182. — P. 1315–1326.
198. Лицарев М.С. Системы матрично-векторных уравнений в многоконфигурационном методе Харттии-Фока / М.С. Лицарев, О.В. Иванов // Краткие сообщ. физ. — 2010. — Т. 37, № 9. — С. 37–46.
199. Electron-impact excitation of the $3s3p\ ^1P_1$ state of magnesium: Electron scattering at small angles / D.M. Filipović, B. Predojević, D. Šević [et al] // Int. J. Mass Spectrom. — 2006. — Vol. 251, No 1. — P. 66–72.
200. Fursa D.V. Excitation of the $3\ ^1P$ state of magnesium by electron impact from the ground state / D.V. Fursa, I. Bray // Phys. Rev. A. — 2001. — Vol. 63, Iss. 3. — P. 032708 (7).
201. Srivastava R. Excitation of the *D* states of magnesium / R. Srivastava,

- R.P. McEachran, A.D. Stauffer // J. Phys. B. — 2001. — Vol. 34, No 11. — P. 2071–2079.
202. Sharma L. Electron excitation of the $3s4s\ ^1S_0$ and $3s4p\ ^1P_1$ states of magnesium / L. Sharma, R. Srivastava, A.D. Stauffer // Phys. Rev. A. — 2008. — Vol. 78, Iss. 1. — P. 014701 (3).
203. 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.
204. 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.
205. Low-energy electron scattering from Ca atoms and photodetachment of Ca^- / O. Zatsarinny, K. Bartschat, S. Gedeon [et al] // Phys. Rev. A. — 2006. — Vol. 74, Iss. 5. — P. 052708 (10).
206. Zatsarinny O. Benchmark calculations for electron collisions with zinc atoms / O. Zatsarinny, K. Bartschat // Phys. Rev. A. — 2005. — Vol. 71, Iss. 2. — P. 022716 (8).
207. Zatsarinny O. Oscillator strengths for transitions to high-lying excited states of carbon / O. Zatsarinny, C. Froese Fischer // J. Phys. B. — 2002. — Vol. 35, No 22. — P. 4669–4683.
208. NIST Atomic Spectra Database (ver. 3.0.1) [Электронный ресурс] / Yu. Ralchenko, A. E. Kramida, J. Reader, NIST ASD Team // National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD. — 2008. — Режим доступа: <http://physics.nist.gov/asd3>.
209. Jönsson P. MCHF calculations of isotope shifts and oscillator strengths for transitions between low-lying states in Be-like systems and neutral magnesium / P. Jönsson, C. Froese Fischer, M.R. Godefroid // J. Phys. B. — 1999. — Vol. 32, No 5. — P. 1233–1245.

210. Kelleher D.E. Atomic Transition Probabilities of Sodium and Magnesium. A Critical Compilation / D.E. Kelleher, L.I. Podobedova // J. Phys. Chem. Ref. Data. — 2008. — Vol. 37, Iss. 1. — P. 267–706.
211. Khare S.P. Elastic scattering of electrons and positrons by magnesium atoms at intermediate energies / S.P. Khare, A. Kumar, K. Lata // J. Phys. B. — 1983. — Vol. 16, No 23. — P. 4419–4426.
212. Meneses G.D. Excitation of the $3^{1,3}P$ states of Mg by electron impact / G.D. Meneses, C.B. Pagan, L.E. Machado // Phys. Rev. A. — 1990. — Vol. 41, Iss. 9. — P. 4740–4750.
213. Electron impact excitation of magnesium and zinc atoms in the relativistic distorted-wave approximation / Savinder Kaur, R. Srivastava, R.P. McEachran, A.D. Stauffer // J. Phys. B. — 1997. — Vol. 30, No 4. — P. 1027–1042.
214. Effective cross sections for scattering of electrons by magnesium atoms in the energy range 0.1–10 eV / N.I. Romanyuk, O.B. Shpenik, A.I. Zhukov, I.P. Zapesochnyi // Pis'ma Zh. Tekh. Fiz. — 1980. — Vol. 6. — P. 877–879.
215. 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. — 2004. — Vol. 37, No 13. — P. 2617–2639.
216. Leep D. Excitation of the Mg and Mg^+ resonance lines by electron impact on Mg atoms / D. Leep, A. Gallagher // Phys. Rev. A. — 1976. — Vol. 13, Iss. 1. — P. 148–155.
217. Резонансные явления, наблюдаемые при взаимодействии медленных электронов с атомами стронция / С.М. Казаков, Н.И. Романюк, О.В. Христофоров, О.Б. Шпенник // Опт. и спектр. — 1985. — Т. 59, № 1. — С. 38–43.
218. Фабрикант И.И. Столкновение медленных электронов с атомами щелочноземельных элементов. / И.И. Фабрикант. — В сб. "Атомные процессы" [ред. Р.К. Петеркоп] Рига : Зинатне, 1975. — 80–123 с.

219. Szmytkowski R. Elastic scattering of electrons by strontium and barium atoms / R. Szmytkowski, J.E. Sienkiewicz // *Phys. Rev. A.* — 1994. — Vol. 50, Iss. 5. — P. 4007–4012.
220. Yuan J. Elastic scattering of low-energy electrons with Sr atoms / J. Yuan, Z. Zhang, H. Wan // *Phys. Rev. A.* — 1990. — Vol. 41, Iss. 9. — P. 4732–4739.
221. Yuan J. Enhanced spin polarization of elastic electron scattering from alkaline-earth-metal atoms in Ramsauer-Townsend and low-lying shape resonance regions / J. Yuan, Z. Zhang // *Phys. Rev. A.* — 1993. — Vol. 48, Iss. 3. — P. 2018–2023.
222. Yuan J. Intra-atomic relativistic effects on the spin polarization in low-energy electron scattering from Ca, Sr, Ba, and Yb atoms / J. Yuan // *Phys. Rev. A.* — 1995. — Vol. 52, Iss. 6. — P. 4647–4655.
223. Yuan J. The resonance structures of electron interaction with Sr and Ba atoms: low-energy electron scattering and photodetachment of the negative ions / J. Yuan // *J. Phys. B.* — 2003. — Vol. 36, No 10. — P. 2053–2071.
224. Adibzadeh M. Elastic electron scattering from Ba and Sr / M. Adibzadeh, C.E. Theodosiou // *Phys. Rev. A.* — 2004. — Vol. 70, Iss. 5. — P. 052704 (11).
225. Felfli Z. Simple method for electron affinity determination: results for Ca, Sr and Ce / Z. Felfli, A.Z. Msezane, D. Sokolovski // *J. Phys. B.* — 2008. — Vol. 41, No 4. — P. 041001 (6).
226. Electron-impact excitation of calcium / O. Zatsarinny, K. Bartschat, L. Bandurina, S. Gedeon // *J. Phys. B.* — 2007. — Vol. 40, No 20. — P. 4023–4031.
227. Гедеон С. Розрахунки перерізів розсіяння електронів на атомі Ca / С. Гедеон, В. Лазур // *Наук. вісник УжНУ. Серія "Фізика".* — 2009. — Вип. 25. — С. 130–140.

228. Moore C.E. Atomic Energy Levels as Derived from the Analysis of Optical Spectra — Molybdenum through Lanthanum and Hafnium through Actinium / C.E. Moore. — Nat. Stand. Ref. Data Ser. 35, Vol. III (Reprint of NBS Circ. 467, Vol. III, 1958) Nat. Bur. Stand, U.S. 1971. — 245 p.
229. NIST Atomic Spectra Database (ver. 5.2) [Электронный ресурс] / A. Kramida, Yu. Ralchenko, J. Reader, NIST ASD Team // National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD. — 2014. — Режим доступа: <http://physics.nist.gov/asd>.
230. Burke V.M. Farm — A flexible asymptotic R -matrix package / V.M. Burke, C.J. Noble // Comput. Phys. Commun. — 1995. — Vol. 85, Iss. 3. — P. 471–500.
231. Gold nanoparticle patterning of silicon wafers using chemical e-beam lithography / Y. Chen, P.M. Mendes, S. Jacke [et al] // Strathprints: The University of Strathclyde institutional repository, Langmuir. — 2004. — Vol. 20, No 9. — P. 3766–3768.
232. Biskupek J. Heat- and electron-beam-induced transport of gold particles into silicon oxide and silicon studied by in situ high-resolution transmission electron microscopy / J. Biskupek, U. Kaiser, F. Falk // J. Electron Microsc. — 2008. — Vol. 57, Iss. 3. — P. 83–89.
233. Electron-induced adhesion and patterning of gold nanoparticles / I. Torchinsky, N. Amdursky, A. Inberg, G. Rosenman // Appl. Phys. Lett. — 2010. — Vol. 96, Iss. 9. — P. 093106 (3).
234. Pindzola M.S. Electron-impact excitation of carbon and silicon in the distorted-wave approximation / M.S. Pindzola, A.K. Bhatia, A. Temkin // Phys. Rev. A. — 1977. — Vol. 15, Iss. 1. — P. 35–42.
235. Zatsarinny O. Relativistic B -spline R -matrix method for electron collisions with atoms and ions: Application to low-energy electron scattering from Cs / O. Zatsarinny, K. Bartschat // Phys. Rev. A. — 2008. — Vol. 77, Iss. 6. — P. 062701 (7).

236. Zatsarinny O. Accurate Cross-section Calculation for Low-Energy Electron-Atom Collisions / O. Zatsarinny, K. Bartschat // 7th international conference on atomic and molecular data and their applications (ICAMDATA-2010). Vilnius, Lithuania, 21-24 September, 2010. — AIP Conf. Proc. — 2011. — Vol. 1344. — P. 125–138.
237. Zatsarinny O. *R*-matrix calculation with non-orthogonal orbitals for electron-impact excitation of atomic oxygen / O. Zatsarinny, S.S. Tayal // J. Phys. B. — 2002. — Vol. 35, No 2. — P. 241–253.
238. Zatsarinny O. Low-energy electron collisions with atomic sulfur: *R*-matrix calculation with non-orthogonal orbitals / O. Zatsarinny, S.S. Tayal // J. Phys. B. — 2001. — Vol. 34, No 17. — P. 3383–3400.
239. Electron-impact excitation of carbon / O. Zatsarinny, K. Bartschat, L. Bandurina, V. Gedeon // Phys. Rev. A. — 2005. — Vol. 71, Iss. 4. — P. 042702 (9).
240. Froese Fischer Charlotte Breit-Pauli lifetimes and transition probabilities for Si I / Charlotte Froese Fischer // Phys. Rev. A. — 2005. — Vol. 71, Iss. 4. — P. 042506 (7).
241. An MCHF atomic-structure package for large-scale calculations / C. Froese Fischer, G. Tachiev, G. Gaigalas, M.R. Godefroid // Comput. Phys. Commun. — 2007. — Vol. 176, No 8. — P. 559–579.
242. NIST Atomic Spectra Database (ver. 4.0.0) [Электронный ресурс] / Yu. Ralchenko, A.E. Kramida, J. Reader, NIST ASD Team // National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD. — 2010. — Режим доступа: <http://physics.nist.gov/asd>.
243. O'Brian T.R. Radiative lifetimes in Si I from laser-induced fluorescence in the visible, ultraviolet, and vacuum ultraviolet / T.R. O'Brian, J.E. Lawler // Phys. Rev. A. — 1991. — Vol. 44, Iss. 11. — P. 7134–7143.
244. Burke P.G. Polarized pseudo-states for low energy electron-atom scattering

- / P.G. Burke, J.F.B. Mitchell // J. Phys. B. — 1974. — Vol. 7, No 6. — P. 665–673.
245. Zatsarinny O. High-resolution experiments and *B*-spline *R*-matrix calculations for elastic electron scattering from krypton / O. Zatsarinny, K. Bartschat, M. Allan // Phys. Rev. A. — 2011. — Vol. 83, Iss. 3. — P. 032713 (5).
246. Systematic study of the stable states of C^- , Si^- , Ge^- , and Sn^- via infrared laser spectroscopy / M. Scheer, R.C. Bilodeau, C.A. Brodie, H.K. Haugen // Phys. Rev. A. — 1998. — Vol. 58, Iss. 4. — P. 2844–2856.
247. Robinson E.J. Single- and Double-Quantum Photodetachment of Negative Ions / E.J. Robinson, S. Geltman // Phys. Rev. — 1967. — Vol. 153, Iss. 1. — P. 4–8.
248. Ormonde S. Effect of Resonances on the Near-Threshold Electron Detachment Cross Sections of F^- / S. Ormonde // Phys. Rev. Lett. — 1977. — Vol. 38, Iss. 13. — P. 690–693.
249. Robb W.D. Close-coupling calculations of electron scattering by atomic fluorine / W.D. Robb, R.J.W. Henry // Phys. Rev. A. — 1977. — Vol. 16, Iss. 6. — P. 2491–2492.
250. Rescigno T.N. Comments on the existence of low-energy *d*-wave resonances in electron-fluorine atom scattering / T.N. Rescigno, A.U. Hazi, N. Winter // Phys. Rev. A. — 1977. — Vol. 16, Iss. 6. — P. 2488–2490.
251. 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.
252. Fine-structure-resolved electron collisions from chlorine atoms in the $(3p^5) \ ^2P_{3/2}^o$ and $(3p^5) \ ^2P_{1/2}^o$ states / Y. Wang, O. Zatsarinny, K. Bartschat, J.-P. Booth // Phys. Rev. A. — 2013. — Vol. 87, Iss. 2. — P. 022703 (4).
253. NIST Atomic Spectra Database (ver. 5.0) [Электронный ресурс] / Yu. Ralchenko, A.E. Kramida, J. Reader, NIST ASD Team // National

- Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD. — 2013. — Режим доступа: <http://physics.nist.gov/asd>.
254. Froese Fischer C. Breit-Pauli energy levels, lifetimes, and transition probabilities for the beryllium-like to neon-like sequences / C. Froese Fischer, G. Tachiev // At. Data Nucl. Data Tables. — 2004. — Vol. 87, Iss. 1. — P. 1–184.
 255. High-resolution determination of the electron affinity of fluorine and bromine using crossed ion and laser beams / C. Blondel, P. Cacciani, C. Delsart, R. Trainham // Phys. Rev. A. — 1989. — Vol. 40, Iss. 7. — P. 3698–3701.
 256. Badnell N.R. A perturbative approach to the coupled outer-region equations for the electron-impact excitation of neutral atoms / N.R. Badnell // J. Phys. B. — 1999. — Vol. 32, No 23. — P. 5583–5591.
 257. Zatsarinny O. Electron-impact excitation of neon at intermediate energies / O. Zatsarinny, K. Bartschat // Phys. Rev. A. — 2012. — Vol. 86, Iss. 2. — P. 022717 (8).
 258. Zatsarinny O. Electron-impact excitation of argon at intermediate energies / O. Zatsarinny, Y. Wang, K. Bartschat // Phys. Rev. A. — 2014. — Vol. 89, Iss. 2. — P. 022706 (8).
 259. Zatsarinny O. Benchmark calculation of total cross sections for ionization-excitation of helium / O. Zatsarinny K. Bartschat // J. Phys. B. — 2014. — Vol. 47, Iss. 6. — P. 061001 (4).
 260. Clark C.W. Advances in laser science – I / C.W. Clark. – [Ed. W.C. Stwalley and M. Lapp] New York : American Institute of Physics, 1986. — 379 p.
 261. Edwards A.K. Autodetaching state of F^- and autoionizing states of F / A.K. Edwards, D.L. Cunningham // Phys. Rev. A. — 1974. — Vol. 9, Iss. 2. — P. 1011–1012.
 262. Matese J.J. Doubly Excited Feshbach States of Cl^- / J.J. Matese, S.P. Rountree, R.J.W. Henry // Phys. Rev. A. — 1973. — Vol. 8, Iss. 6. — P. 2965–2968.

- 263. Buckman S.J. Atomic negative-ion resonances / S.J. Buckman, C.W. Clark // Rev. Mod. Phys. — 1994. — Vol. 66, Iss. 2. — P. 539–655.
- 264. Multipole polarizabilities and long-range interactions of the fluorine atom / O. Zatsarinny, K. Bartschat, J. Mitroy, J.-Y. Zhang // J. Chem. Phys. — 2009. — Vol. 130, Iss. 12. — P. 124310 (6).
- 265. Maroulis G. Static dipole (hyper)polarizability of the silicon atom / G. Maroulis, C. Pouchan // J. Phys. B. — 2003. — Vol. 36, No 10. — P. 2011–2017.
- 266. Lupinetti C. Polarizabilities and hyperpolarizabilities for the atoms Al, Si, P, S, Cl, and Ar: Coupled cluster calculations / C. Lupinetti, A.J. Thakkar // J. Chem. Phys. — 2005. — Vol. 122, Iss. 4. — P. 044301 (7).
- 267. Relativistic and electron correlation effects in static dipole polarizabilities for the group-14 elements from carbon to element $Z=114$: Theory and experiment / C. Thierfelder, B. Assadollahzadeh, P. Schwerdtfeger [et al] // Phys. Rev. A. — 2008. — Vol. 78, Iss. 5. — P. 052506 (7).

Додаток А

Таблиця А.1

Енергії збудження $E_{\text{збуд}}$ і зв'язку $E_{\text{зв}}$ (в еВ) для спектроскопічних станів мішені Mg. Експериментальні значення $E_{\text{зв}}$ (НІСТ [208]) порівняні з енергіями зв'язку, розрахованими методом БСР37 [1]

Конфігурація	Терм	НІСТ [208]		БСР37 [1]	Різниця
		$E_{\text{збуд}}$	$E_{\text{зв}}$	$E_{\text{зв}}$	
$3s^2$	1S	0.000	-7.646	-7.527	0.119
$3s3p$	$^3P^o$	2.714	-4.932	-4.882	0.050
$3s3p$	$^1P^o$	4.346	-3.300	-3.241	0.059
$3s4s$	3S	5.108	-2.538	-2.511	0.027
$3s4s$	1S	5.394	-2.253	-2.226	0.027
$3s3d$	1D	5.753	-1.893	-1.887	0.006
$3s4p$	$^3P^o$	5.932	-1.715	-1.705	0.010
$3s3d$	3D	5.946	-1.700	-1.693	0.007
$3s4p$	$^1P^o$	6.118	-1.528	-1.509	0.019
$3s5s$	3S	6.431	-1.215	-1.206	0.009
$3s5s$	1S	6.516	-1.130	-1.12	0.010
$3s4d$	1D	6.588	-1.058	-1.054	0.004
$3s4d$	3D	6.719	-0.927	-0.924	0.003
$3s5p$	$^3P^o$	6.726	-0.920	-0.916	0.004
$3s4f$	$^1F^o$	6.779	-0.867	-0.867	0.000
$3s4f$	$^3F^o$	6.779	-0.867	-0.867	0.000
$3s5p$	$^1P^o$	6.783	-0.863	-0.856	0.007
$3s6s$	3S	6.930	-0.717	-0.712	0.005
$3s6s$	1S	6.966	-0.680	-0.675	0.005
$3s5d$	1D	6.981	-0.665	-0.662	0.003
$3s5d$	3D	7.063	-0.583	-0.581	0.002

Продовження таблиці А.1

Конфігурація	Терм	НІСТ [208]		БСР37 [1]	Різниця
		$E_{\text{збуд}}$	$E_{\text{зв}}$	$E_{\text{зв}}$	
$3s6p$	$^3P^o$	7.069	-0.577	-0.575	0.002
$3s5f$	$^1F^o$	7.092	-0.554	-0.554	0.000
$3s5f$	$^3F^o$	7.092	-0.554	-0.554	0.000
$3s6p$	$^1P^o$	7.094	-0.552	-0.549	0.003
$3p^2$	3P	7.173	-0.473	-0.446	0.027
$3s7s$	3S	7.173	-0.473	-0.47	0.003
$3s7s$	1S	7.192	-0.454	-0.449	0.005
$3s6d$	1D	7.194	-0.452	-0.449	0.003
$3s6d$	3D	7.246	-0.400	-0.394	0.006
$3s7p$	$^3P^o$	7.250	-0.396	-0.387	0.009
$3s6f$	$^1F^o$	7.262	-0.384	-0.379	0.005
$3s6f$	$^3F^o$	7.262	-0.384	-0.379	0.005
$3s7p$	$^1P^o$	7.263	-0.383	-0.371	0.012
$3s8s$	3S	7.310	-0.336	-0.302	0.034
$3s8s$	3S	7.322	-0.325	-0.282	0.043
$3p^2$	1S	8.465	0.819	0.949	0.130

Таблиця А.2

Сили осциляторів для Mg. Теоретичні результати були отримані у формі
довжини електричного дипольного оператора

Початковий стан	Кінцевий стан	Даний розрахунок БСР37 [1]	НІСТ [210]
$(3s^2) \ ^1S$	$(3s3p) \ ^1P^o$	1.738	1.800
	$(3s4p) \ ^1P^o$	0.116	0.113
	$(3s5p) \ ^1P^o$	0.026	0.024
$(3s3p) \ ^3P^o$	$(3s4s) \ ^3S$	0.138	0.136
	$(3s5s) \ ^3S$	0.016	0.016
	$(3s3d) \ ^3D$	0.626	0.594
	$(3s4d) \ ^3D$	0.126	0.120
$(3s3p) \ ^1P^o$	$(3s4s) \ ^1S$	0.158	0.155
	$(3s5s) \ ^1S$	0.007	0.006
	$(3s3d) \ ^1D$	0.252	0.245
	$(3s4d) \ ^1D$	0.108	0.106
$(3s4s) \ ^3S$	$(3s4p) \ ^3P^o$	1.320	1.370
$(3s4s) \ ^1S$	$(3s4p) \ ^1P^o$	1.249	1.160
$(3s3d) \ ^1D$	$(3s4p) \ ^1P^o$	0.138	0.146
$(3s4p) \ ^3P^o$	$(3s3d) \ ^3D$	0.014	0.017
	$(3s5s) \ ^3S$	0.281	0.277
	$(3s4d) \ ^3D$	0.623	0.613
$(3s4p) \ ^1P^o$	$(3s5s) \ ^1S$	0.301	0.296
	$(3s4d) \ ^1D$	0.934	0.934

Таблиця А.3

Енергії збудження (в еВ) нижніх спектроскопічних станів мішені Sr.

Розраховані значення $E_{\text{теор}}$ [5] порівняні з даними Мур [228] ($E_{\text{Мур}}$).

$$\text{Тут } \Delta E = E_{\text{Мур}} - E_{\text{теор}}$$

№ п/п	Стан	$E_{\text{Мур}}$ [228]	$E_{\text{теор}}$ [5]	ΔE
1	$5s^2 \ ^1S$	0.0	0.0	0.0
2	$5s5p \ ^3P^o$	1.8231	1.8471	-0.0240
3	$5s4d \ ^3D$	2.2635	2.2723	-0.0089
4	$5s4d \ ^1D$	2.4986	2.4797	0.0188
5	$5s5p \ ^1P^o$	2.6906	2.6731	0.0175
6	$5s6s \ ^3S$	3.6008	3.6325	-0.0316
7	$5s6s \ ^1S$	3.7934	3.7142	0.0791
8	$4d5p \ ^3F^o$	4.1731	4.1109	0.0622
9	$4d5p \ ^1D^o$	4.1945	4.1961	-0.0015
10	$5s6p \ ^3P^o$	4.2067	4.2218	-0.0151
11	$5s6p \ ^1P^o$	4.2282	4.2411	-0.0129
12	$5s5d \ ^1D$	4.3062	4.3107	-0.0045
13	$5s5d \ ^3D$	4.3437	4.3613	-0.0176
14	$5p^2 \ ^3P$	4.4057	4.4076	-0.0019
15	$4d5p \ ^3D^o$	4.5187	4.5680	-0.0493
16	$5p^2 \ ^1D$	4.5831	4.4989	0.0843
17	$5p^2 \ ^1S$	4.6079	4.5897	0.0182
18	$4d5p \ ^3P^o$	4.6277	4.7673	-0.1395
19	$5s7s \ ^3S$	4.6407	4.5786	0.0621
20	$4d5p \ ^1F^o$	4.7130	4.9440	-0.2310
21	$5s7s \ ^1S$	4.7671	4.9537	-0.1866
22	$5s4f \ ^3F^o$	4.8054	4.7335	0.0719
23	$5s7p \ ^1P^o$	4.8245	4.8095	0.0149

Продовження таблиці А.3

№ π/π	Стан	$E_{\text{Мур}}$ [228]	$E_{\text{теор}}$ [5]	ΔE
24	$5s7p\ ^3P^o$	4.8908	4.8853	0.0055
25	$5s4f\ ^1F^o$	4.9028	4.7540	0.1488
26	$5s6d\ ^3D$	4.9223	4.8845	0.0377
27	$5s6d\ ^1D$	4.9269	4.8591	0.0679
28	$5s8s\ ^3S$	5.0544	5.0080	0.0464
29	$5s8s\ ^1S$	5.0905	5.2155	-0.1249
30	$5s4f\ ^3F^o$	5.1294	5.0492	0.0802
31	$5s4f\ ^1F^o$	5.1483	5.1402	0.0082

Таблиця А.4

Енергії зв'язку (в еВ) для спектроскопічних станів та псевдостанів
мішені Si

№ п/п	Конфігурація	Терм	БСР41 [2]	НІСТ [242]	Різниця
1	$3p^2$	3P	-8.124	-8.145	0.021
2	$3p^2$	1D	-7.326	-7.383	0.057
3	$3p^2$	1S	-6.175	-6.255	0.080
4	$3s3p^3$	$^5S^o$	-4.093	-4.032	-0.061
5	$3p4s$	$^3P^o$	-3.180	-3.222	0.042
6	$3p4s$	$^1P^o$	-3.043	-3.082	0.039
7	$3s3p^3$	$^3D^o$	-2.529	-2.547	0.018
8	$3p4p$	1P	-2.294	-2.302	0.008
9	$3p3d$	$^1D^o$	-2.281	-2.293	0.012
10	$3p4p$	3D	-2.184	-2.193	0.009
11	$3p4p$	3P	-2.057	-2.073	0.016
12	$3p4p$	3S	-2.039	-2.039	0.000
13	$3p3d$	$^3F^o$	-1.961	-1.969	0.008
14	$3p4p$	1D	-1.917	-1.941	0.024
15	$3p3d$	$^3P^o$	-1.886	-1.899	0.013
16	$3p4p$	1S	-1.748	-1.765	0.017
17	$3p3d$	$^1F^o$	-1.540	-1.548	0.008
18	$3p3d$	$^1P^o$	-1.525	-1.545	0.020
19	$3p3d$	$^3D^o$	-1.434	-1.441	0.007
20	$3p5s$	$^3P^o$	-1.409	-1.416	0.007
21	$3p5s$	$^1P^o$	-1.360	-1.361	0.001
22	$3p4d$	$^1D^o$	-1.154	-1.158	0.004
23	$3p4d$	$^3P^o$	-1.146	-1.134	-0.012
24	$3p5p$	1P	-1.122	-1.124	0.002

Продовження таблиці А.4

№ п/п	Конфігурація	Терм	БСР41 [2]	НІСТ [242]	Різниця
25	$3p5p$	3D	-1.089	-1.085	-0.004
26	$3p5p$	3P	-1.048	-1.047	-0.001
27	$3p4d$	$^3F^o$	-1.040	-1.036	-0.004
28	$3p5p$	3S	-1.043	-1.030	-0.013
29	$3p5p$	1D	-0.998	-0.998	-0.000
30	$3p5p$	1S	-0.936	-0.934	-0.002
31	$3p4d$	$^1P^o$	-0.862	-0.874	0.012
32	$3p4d$	$^1F^o$	-0.862	-0.862	0.000
33	$3p4d$	$^3D^o$	-0.843	-0.839	-0.004
34	pol1	$^3P^o$	0.876		
35	pol2	$^3D^o$	1.189		
36	pol3	$^1F^o$	1.360		
37	$3s3p^3$	$^3S^o$	1.781	1.713	0.068
38	pol4	$^1P^o$	2.186		
39	pol5	$^1D^o$	2.221		
40	pol6	$^3S^o$	3.837		
41	pol7	5P	4.143		

Таблиця А.5

Порівняння зважених сил осциляторів gf для Si

Нижній рівень	Верхній рівень	БСР34 [2]	БКХФ [240]	Експеримент [243]
$3s^23p^2\ ^3P$	$3s^23p4s\ ^3P^o$	1.907	1.908	1.893 ± 0.098
	$3s^23p3d\ ^3P^o$	0.404	0.378	0.461 ± 0.024
	$3s3p^3\ ^3D^o$	0.471	0.394	0.501 ± 0.026
	$3s^23p3d\ ^3D^o$	1.885	2.165	
$3s^23p^2\ ^1D$	$3s^23p3d\ ^1F^o$	1.488	1.539	1.409 ± 0.073
	$3s^23p4s\ ^1P^o$	0.878	0.873	0.811 ± 0.042
	$3s^23p3d\ ^1D^o$	0.193	0.182	0.197 ± 0.010
	$3s^23p3d\ ^1P^o$	0.011	0.016	0.014 ± 0.001
$3s^23p^2\ ^1S$	$3s^23p4s\ ^1P^o$	0.103	0.097	0.091 ± 0.005
	$3s^23p3d\ ^1P^o$	0.323	0.345	0.330 ± 0.017

Таблиця А.6

Поляризації (в ат. од.) чотирьох найнижчих станів мішені Si [2]

Стан	Кінцева симетрія	Вклад до α	Інші розрахунки
$3s^2 3p^2 \ ^3P$	$\ ^3S^o$	2.84	
	$\ ^3P^o$	15.20	
	$\ ^3D^o$	19.41	
	Sum	37.45	37.40 [265] 37.17 [266] 37.31 [267]
$3s^2 3p^2 \ ^1D$	$\ ^1F^o$	11.57	
	$\ ^1P^o$	10.23	
	$\ ^1D^o$	19.60	
	Sum	41.30	
$3s^2 3p^2 \ ^1S$	$\ ^1P^o$	50.08	
$3s 3p^3 \ ^5S^o$	$\ ^5P$	33.00	

Таблиця А.7

Енергії зв'язку (в еВ) для спектроскопічних станів атома фтору
включених у даний розклад сильного зв'язку

№	Стан	Терм	БСР39 [3]	НІСТ [253]	Різниця
1	$2p^5$	$^2P^o$	-17.367	-17.406	0.039
2	$2p^4(^3P)3s$	4P	-4.549	-4.706	0.157
3	$2p^4(^3P)3s$	2P	-4.275	-4.424	0.149
4	$2p^4(^3P)3p$	$^4P^o$	-2.985	-3.041	0.056
5	$2p^4(^3P)3p$	$^4D^o$	-2.848	-2.899	0.051
6	$2p^4(^3P)3p$	$^2D^o$	-2.783	-2.827	0.044
7	$2p^4(^3P)3p$	$^2S^o$	-2.697	-2.742	0.045
8	$2p^4(^3P)3p$	$^4S^o$	-2.694	-2.740	0.046
9	$2p^4(^3P)3p$	$^2P^o$	-2.639	-2.671	0.032
10	$2p^4(^1D)3s$	2D	-1.871	-2.059	0.188
11	$2p^4(^3P)4s$	4P	-1.807	-1.827	0.020
12	$2p^4(^3P)4s$	2P	-1.739	-1.753	0.014
13	$2p^4(^3P)3d$	4D	-1.540	-1.541	0.001
14	$2p^4(^3P)3d$	2D	-1.531	-1.532	0.001
15	$2p^4(^3P)3d$	4F	-1.515	-1.500	-0.015
16	$2p^4(^3P)3d$	2F	-1.514	-1.500	-0.014
17	$2p^4(^3P)3d$	4P	-1.501	-1.487	-0.014
18	$2p^4(^3P)3d$	2P	-1.499	-1.472	-0.027
19	$2p^4(^3P)4p$	$^4P^o$	-1.366	-1.373	0.007
20	$2p^4(^3P)4p$	$^4D^o$	-1.326	-1.331	0.005
21	$2p^4(^3P)4p$	$^2D^o$	-1.304	-1.297	-0.007
22	$2p^4(^3P)4p$	$^2S^o$	-1.281	-1.286	0.005
23	$2p^4(^3P)4p$	$^4S^o$	-1.280	-1.277	-0.003
24	$2p^4(^3P)4p$	$^2P^o$	-1.268	-1.254	-0.014

Продовження таблиці А.7

№	Стан	Терм	БСР39 [3]	НІСТ [253]	Різниця
25	$2p^4(^3P)5s$	4P	-0.968	-0.968	0.000
26	$2p^4(^3P)5s$	2P	-0.941	-0.924	-0.017
27	$2p^4(^1D)3p$	$^2F^o$	-0.287		
28	$2p^4(^1D)3p$	$^2P^o$	-0.235		
29	$2p^4(^1D)3p$	$^2D^o$	-0.156	-0.226	0.070
30	$2p^4(^1D)4s$	2D	0.802	0.762	0.040
31	$2p^4(^1S)3s$	2S	0.955	0.791	0.164
32	$2p^4(^1D)3d$	2P	1.055	1.043	0.012
33	$2p^4(^1D)3d$	2G	1.059	1.047	0.012
34	$2p^4(^1D)3d$	2D	1.078	1.066	0.012
35	$2p^4(^1D)3d$	2F	1.088	1.076	0.012
36	$2p^4(^1S)3s$	2S	1.100	1.074	0.026
37	$2p^4(^1S)3p$	$^2P^o$	2.747		
38	$2p^4(^1S)4s$	2S	3.692		
39	$2p^4(^1S)3d$	2D	4.057		

Таблиця А.8

Порівняння зважених сил осциляторів для атома фтору

Нижній рівень	Верхній рівень	БСР39 [3]		БКХФ [254]		НІСТ [253]
		gf_L	f_L/f_V	gf_L	f_L/f_V	gf_L
$2p^5 \ ^2P^o$	$2p^4 3s \ ^2P$	0.559	1.00	0.586	1.00	
	$2p^4 3s \ ^2D$	0.286	0.98	0.306	0.99	
	$2p^4 4s \ ^2P$	0.106	1.01	0.585	1.01	
	$2p^4 3d \ ^2D$	0.125	1.08	0.150	1.28	
	$2p^4 3d \ ^2P$	0.028	1.12	0.041	1.28	
	$2p^4 5s \ ^2P$	0.039	1.00			
$2p^4 3s \ ^4P$	$2p^4 3p \ ^4P^o$	3.815	1.12	3.834	1.03	3.48
	$2p^4 3p \ ^4D^o$	6.637	0.96	6.734	1.10	6.36
	$2p^4 3p \ ^4S^o$	1.337	1.20	1.420	1.16	1.32
	$2p^4 4p \ ^4D^o$	0.056	0.89			
$2p^4 3s \ ^2P$	$2p^4 3p \ ^2D^o$	3.303	0.97	3.166	0.97	3.18
	$2p^4 3p \ ^2S^o$	0.662	1.16	0.661	1.04	0.66
	$2p^4 3p \ ^2P^o$	2.158	1.02	2.060	0.92	2.04
	$2p^4 4p \ ^2P^o$	0.030	1.07			
$2p^4 3p \ ^4P^o$	$2p^4 4s \ ^4P$	1.691	1.06			
	$2p^4 3d \ ^4D$	8.032	0.99	8.954	1.18	
	$2p^4 3d \ ^4P$	2.675	1.05	2.935	1.16	
	$2p^4 5s \ ^4P$	0.193	1.08			
$2p^4 3p \ ^4D^o$	$2p^4 4s \ ^4P$	3.453	1.00			
	$2p^4 3d \ ^4D$	2.794	1.05	2.844	1.04	
	$2p^4 3d \ ^4F$	15.42	0.97	16.15	1.26	
	$2p^4 3d \ ^4P$	0.147	1.12	0.230	1.56	
	$2p^4 5s \ ^4P$	0.315	1.01			
$2p^4 3p \ ^2D^o$	$2p^4 4s \ ^2P$	1.662	1.00			

Продовження таблиці А.8

Нижній рівень	Верхній рівень	БСР39 [3]		БКХФ [254]		НІСТ [253]
		gf_L	f_L/f_V	gf_L	f_L/f_V	gf_L
	$2p^4 3d \ ^2D$	1.421	1.04	1.388	0.97	
	$2p^4 3d \ ^2F$	7.875	0.96	7.859	1.03	
	$2p^4 3d \ ^2P$	0.081	1.09	0.107	1.51	
	$2p^4 5s \ ^2P$	0.167	1.01			
$2p^4 3p \ ^4S^o$	$2p^4 4s \ ^4P$	0.846	1.09			
	$2p^4 3d \ ^4P$	3.725	1.01	3.645	0.95	
	$2p^4 5s \ ^4P$	0.053	1.15			
$2p^4 3p \ ^2S^o$	$2p^4 4s \ ^2P$	0.379	1.06			
	$2p^4 3d \ ^2P$	1.880	1.02	1.809	0.94	
	$2p^4 5s \ ^2P$	0.032	1.10			
$2p^4 3p \ ^2P^o$	$2p^4 3s \ ^2D$	0.023	0.42	0.009	2.25	
	$2p^4 4s \ ^2P$	1.121	0.98			
	$2p^4 3d \ ^2D$	4.282	1.00	3.751	0.86	
	$2p^4 3d \ ^2P$	1.465	1.05	1.255	0.85	
	$2p^4 5s \ ^2P$	0.096	0.97			
$2p^4 4s \ ^4P$	$2p^4 4p \ ^4P^o$	5.538	1.05			
	$2p^4 4p \ ^4D^o$	9.831	0.98			
	$2p^4 4p \ ^4S^o$	2.061	1.07			
$2p^4 4s \ ^2P$	$2p^4 4p \ ^2D^o$	4.889	0.99			
	$2p^4 4p \ ^2S^o$	1.015	1.06			
	$2p^4 4p \ ^2P^o$	2.945	1.01			
$2p^4 3d \ ^4D$	$2p^4 4p \ ^4P^o$	2.087	0.98			
	$2p^4 4p \ ^4D^o$	0.802	1.01			
$2p^4 3d \ ^2D$	$2p^4 4p \ ^2D^o$	0.422	1.00			
	$2p^4 4p \ ^2P^o$	1.324	1.01			

Продовження таблиці А.8

Нижній рівень	Верхній рівень	БСР39 [3]		БКХФ [254]		НІСТ [253]
		gf_L	f_L/f_V	gf_L	f_L/f_V	gf_L
$2p^4 3d \ ^4F$	$2p^4 4p \ ^4D^o$	4.267	0.97			
$2p^4 3d \ ^2F$	$2p^4 4p \ ^2D^o$	2.285	0.95			
$2p^4 3d \ ^4P$	$2p^4 4p \ ^4P^o$	0.685	1.02			
	$2p^4 4p \ ^4D^o$	0.020	1.11			
	$2p^4 4p \ ^4S^o$	1.053	0.98			
$2p^4 3d \ ^2P$	$2p^4 4p \ ^2D^o$	0.016	1.00			
	$2p^4 4p \ ^2S^o$	0.544	0.99			
	$2p^4 4p \ ^2P^o$	0.467	1.04			
$2p^4 4p \ ^4P^o$	$2p^4 5s \ ^4P$	3.101	1.03			
$2p^4 4p \ ^4D^o$	$2p^4 5s \ ^4P$	6.310	1.00			
$2p^4 4p \ ^2D^o$	$2p^4 5s \ ^2P$	3.045	1.00			
$2p^4 4p \ ^4S^o$	$2p^4 5s \ ^4P$	1.560	1.04			
$2p^4 4p \ ^2S^o$	$2p^4 5s \ ^2P$	0.703	1.03			
$2p^4 4p \ ^2P^o$	$2p^4 5s \ ^2P$	1.850	1.00			

Таблиця А.9

Параметри резонансів в енергетичних залежностях ІІ розсіяння електронів
на атомі фтору [3].

№	Конфігурація	Терм	Енергія (еВ)	Ширина (меВ)
1	$2p^4(^3P)3s^2$	3P	12.394	5.1
2	$2p^4(^1D)3s^2$	1D	14.982	6.8
3	$2p^4(^1S)3s^2$	1S	17.933	23
4	$2p^4(^3P)3s(^4P)3p$	$^5P^o$	12.828	4.4
5		$^5D^o$	12.855	35
6		$^5S^o$	12.880	92
7		$^3P^o$	12.946	215
8	$2p^4(^3P)3s(^2P)3p$	$^1D^o$	13.102	5.4
9		$^3P^o$	13.103	45
10		$^3S^o$	13.106	53
11		$^1S^o$	13.120	24
12		$^1P^o$	13.124	30
13	$2p^4(^3P)3p^2$	5D	14.392	4.4
14		3S	14.410	82
15		5P	14.428	26
16		1D	14.518	0.3
17		3P	14.523	44
18		1P	14.552	1.0
19		1S	14.611	1.1
20	$2p^4(^3P)3p(^4D)3d$	$^3P^o$	14.731	4.0
21	$2p^4(^3P)4s^2$	3P	15.384	8.6
22	$2p^4(^1D)3s(^2D)3p$	$^3P^o$	15.509	22
23	$2p^4(^1D)3s(^2D)3p$	$^3F^o$	15.514	12
24	$2p^4(^1D)3p^2(^3P)$	3D	17.017	42

Таблиця А.10

Енергії зв'язку (в еВ) для станів атома фтору. Експериментальні енергії НІСТ [253] ($E_{\text{НІСТ}}$) порівнюються з даними наближень БСР39 [3] ($E_{\text{БСР}}$)

та ХФ [7] ($E_{\text{ХФ}}$). Показані різниці $\Delta E_{\text{зв-БСР}} = E_{\text{БСР}} - E_{\text{НІСТ}}$

та $\Delta E_{\text{зв-ХФ}} = E_{\text{ХФ}} - E_{\text{НІСТ}}$. Вклад кореляції в енергії рівнів:

$$\Delta E_{\text{корел}} = |\Delta E_{\text{зв-ХФ}}| - |\Delta E_{\text{зв-БСР}}|$$

№ п/п	Конфі- гурація	Терм	$E_{\text{НІСТ}}$ [253]	$\Delta E_{\text{зв-БСР}}$ [3]	$\Delta E_{\text{зв-ХФ}}$ [7]	$\Delta E_{\text{корел}}$
1	$2p^5$	$^2P^o$	17.406	0.039	-0.094	0.055
2	$2p^4(^3P)3s$	4P	4.706	0.157	-0.128	-0.029
3	$2p^4(^3P)3s$	2P	4.424	0.149	-0.007	-0.142
4	$2p^4(^3P)3p$	$^4P^o$	3.041	0.056	-0.118	0.062
5	$2p^4(^3P)3p$	$^4D^o$	2.899	0.051	-0.167	0.116
6	$2p^4(^3P)3p$	$^2D^o$	2.827	0.044	-0.073	0.029
7	$2p^4(^3P)3p$	$^2S^o$	2.742	0.045	-0.069	0.024
8	$2p^4(^3P)3p$	$^4S^o$	2.740	0.046	-0.072	0.026
9	$2p^4(^3P)3p$	$^2P^o$	2.671	0.032	0.118	0.086
10	$2p^4(^1D)3s$	2D	2.059	0.188	-0.188	0
11	$2p^4(^3P)4s$	4P	1.827	0.020	-0.038	0.018
12	$2p^4(^3P)4s$	2P	1.753	0.014	-0.026	0.012
13	$2p^4(^3P)3d$	4D	1.541	0.001	-0.010	0.009
14	$2p^4(^3P)3d$	2D	1.532	0.001	0.004	0.003
15	$2p^4(^3P)3d$	4F	1.500	-0.015	-0.018	0.003
16	$2p^4(^3P)3d$	2F	1.500	-0.014	-0.015	0.001
17	$2p^4(^3P)3d$	4P	1.487	-0.014	-0.015	0.001
18	$2p^4(^3P)3d$	2P	1.472	-0.027	-0.022	-0.005
19	$2p^4(^3P)4p$	$^4P^o$	1.373	0.007	-0.061	0.054
20	$2p^4(^3P)4p$	$^4D^o$	1.331	0.005	-0.055	0.05

Продовження таблиці А.10

№ п/п	Конфі- гурація	Терм	$E_{\text{НІСТ}}$ [253]	$\Delta E_{\text{зв-БСР}}$ [3]	$\Delta E_{\text{зв-ХФ}}$ [7]	$\Delta E_{\text{корел}}$
21	$2p^4(^3P)4p$	$^2D^o$	1.297	-0.007	-0.044	0.037
22	$2p^4(^3P)4p$	$^2S^o$	1.286	0.005	-0.031	0.026
23	$2p^4(^3P)4p$	$^4S^o$	1.277	-0.003	-0.040	0.037
24	$2p^4(^3P)4p$	$^2P^o$	1.254	-0.014	0.018	0.004
25	$2p^4(^3P)5s$	4P	0.968	0.000	-0.022	0.022
26	$2p^4(^3P)5s$	2P	0.924	-0.017	-0.034	0.017

Таблиця А.11

Зважені сили осциляторів для атома F. Порівнюються результати
наближень ХФ40 [7], БСР39 [3] та БКХФ [254]

Нижній рівень	Верхній рівень	ХФ40 [7]		БСР39 [3]		БКХФ [254]	
		gf_L	f_L/f_V	gf_L	f_L/f_V	gf_L	f_L/f_V
1	2	3	4	5	6	7	8
$2p^5 \ ^2P^o$	$2p^4 3s \ ^2P$	0.670	1.74	0.559	1.00	0.586	1.00
	$2p^4 3s \ ^2D$	0.378	1.72	0.286	0.98	0.306	0.99
	$2p^4 4s \ ^2P$	0.110	1.74	0.106	1.01	0.585	1.01
	$2p^4 3d \ ^2D$	0.137	1.28	0.125	1.08	0.150	1.28
	$2p^4 3d \ ^2P$	0.034	1.19	0.028	1.12	0.041	1.28
	$2p^4 5s \ ^2P$	0.033	1.48	0.039	1.00		
$2p^4 3s \ ^4P$	$2p^4 3p \ ^4P^o$	3.488	0.88	3.815	1.12	3.834	1.03
	$2p^4 3p \ ^4D^o$	6.150	0.81	6.637	0.96	6.734	1.10
	$2p^4 3p \ ^4S^o$	1.270	0.90	1.337	1.20	1.420	1.16
	$2p^4 4p \ ^4D^o$	0.016	0.32	0.056	0.89		
$2p^4 3s \ ^2P$	$2p^4 3p \ ^2D^o$	2.205	0.86	3.303	0.97	3.166	0.97
	$2p^4 3p \ ^2S^o$	0.642	0.90	0.662	1.16	0.661	1.04
	$2p^4 3p \ ^2P^o$	2.252	1.25	2.158	1.02	2.060	0.92
	$2p^4 4p \ ^2P^o$	0.085	1.55	0.030	1.07		
$2p^4 3p \ ^4P^o$	$2p^4 4s \ ^4P$	1.527	0.94	1.691	1.06		
	$2p^4 3d \ ^4D$	7.192	1.03	8.032	0.99	8.954	1.18
	$2p^4 3d \ ^4P$	2.342	1.03	2.675	1.05	2.935	1.16
	$2p^4 5s \ ^4P$	0.176	0.89	0.193	1.08		
$2p^4 3p \ ^4D^o$	$2p^4 4s \ ^4P$	3.111	0.90	3.453	1.00		
	$2p^4 3d \ ^4D$	2.593	1.03	2.794	1.05	2.844	1.04
	$2p^4 3d \ ^4F$	14.54	1.09	15.42	0.97	16.15	1.26

Продовження таблиці А.11

1	2	3	4	5	6	7	8
	$2p^4 3d \ ^4P$	0.179	1.91	0.147	1.12	0.230	1.56
	$2p^4 5s \ ^4P$	0.327	0.87	0.315	1.01		
$2p^4 3p \ ^2D^o$	$2p^4 4s \ ^2P$	1.065	0.90	1.662	1.00		
	$2p^4 3d \ ^2D$	0.938	1.00	1.421	1.04	1.388	0.97
	$2p^4 3d \ ^2F$	5.308	1.04	7.875	0.96	7.859	1.03
	$2p^4 3d \ ^2P$	0.084	1.37	0.081	1.09	0.107	1.51
	$2p^4 5s \ ^2P$	0.113	0.87	0.167	1.01		
$2p^4 3p \ ^4S^o$	$2p^4 4s \ ^4P$	0.798	0.95	0.846	1.09		
	$2p^4 3d \ ^4P$	3.613	1.06	3.725	1.01	3.645	0.95
	$2p^4 5s \ ^4P$	0.055	0.92	0.053	1.15		
$2p^4 3p \ ^2S^o$	$2p^4 4s \ ^2P$	0.290	0.93	0.379	1.06		
	$2p^4 3d \ ^2P$	1.862	1.04	1.880	1.02	1.809	0.94
	$2p^4 5s \ ^2P$	0.031	0.92	0.032	1.10		
$2p^4 3p \ ^2P^o$	$2p^4 3s \ ^2D$	0.013	1.12	0.023	0.42	0.009	2.25
	$2p^4 4s \ ^2P$	1.356	1.20	1.121	0.98		
	$2p^4 3d \ ^2D$	4.368	0.94	4.282	1.00	3.751	0.86
	$2p^4 3d \ ^2P$	1.398	0.96	1.465	1.05	1.255	0.85
	$2p^4 5s \ ^2P$	0.078	1.48	0.096	0.97		
$2p^4 4s \ ^4P$	$2p^4 4p \ ^4P^o$	5.234	0.91	5.538	1.05		
	$2p^4 4p \ ^4D^o$	9.506	0.95	9.831	0.98		
	$2p^4 4p \ ^4S^o$	2.008	0.98	2.061	1.07		
$2p^4 4s \ ^2P$	$2p^4 4p \ ^2D^o$	3.288	0.94	4.889	0.99		
	$2p^4 4p \ ^2S^o$	0.930	0.97	1.015	1.06		
	$2p^4 4p \ ^2P^o$	3.038	1.08	2.945	1.01		
$2p^4 3d \ ^4D$	$2p^4 4p \ ^4P^o$	1.491	1.46	2.087	0.98		
	$2p^4 4p \ ^4D^o$	0.661	1.28	0.802	1.01		

Продовження таблиці А.11

1	2	3	4	5	6	7	8
$2p^4 3d \ ^2D$	$2p^4 4p \ ^2D^o$	0.262	1.04	0.422	1.00		
	$2p^4 4p \ ^2P^o$	1.369	0.92	1.324	1.01		
$2p^4 3d \ ^4F$	$2p^4 4p \ ^4D^o$	3.205	1.22	4.267	0.97		
$2p^4 3d \ ^2F$	$2p^4 4p \ ^2D^o$	1.396	1.05	2.285	0.95		
$2p^4 3d \ ^4P$	$2p^4 4p \ ^4P^o$	0.360	1.42	0.685	1.02		
	$2p^4 4p \ ^4D^o$	0.019	7.77	0.020	1.11		
	$2p^4 4p \ ^4S^o$	0.959	1.18	1.053	0.98		
$2p^4 3d \ ^2P$	$2p^4 4p \ ^2D^o$	0.025	0.83	0.016	1.00		
	$2p^4 4p \ ^2S^o$	0.530	1.12	0.544	0.99		
	$2p^4 4p \ ^2P^o$	0.394	0.96	0.467	1.04		
$2p^4 4p \ ^4P^o$	$2p^4 5s \ ^4P$	2.771	0.93	3.101	1.03		
$2p^4 4p \ ^4D^o$	$2p^4 5s \ ^4P$	5.856	0.96	6.310	1.00		
$2p^4 4p \ ^2D^o$	$2p^4 5s \ ^2P$	1.983	0.95	3.045	1.00		
$2p^4 4p \ ^4S^o$	$2p^4 5s \ ^4P$	1.530	0.98	1.560	1.04		
$2p^4 4p \ ^2S^o$	$2p^4 5s \ ^2P$	0.545	0.97	0.703	1.03		
$2p^4 4p \ ^2P^o$	$2p^4 5s \ ^2P$	2.249	1.12	1.850	1.00		

Висловлюю глибоку вдячність і щиру подяку своєму науковому керівнику професору В. Ю. Лазуру та співавторам наукових праць В. Ф. Гедеону, С. В. Гедеону (кафедра теоретичної фізики ДВНЗ „УжНУ”), О. І. Зацарінному та К. Бартшату (Університет Дрейка, Де Мойн, Айова, США) за всебічну допомогу і підтримку при виконанні досліджень за темою дисертаційної роботи.