

УДК 539.1.08, 539.198

Є.А. Нодь, В.Ф. Гедеон, В.Ю. Лазур

Ужгородський національний університет, Україна, 88000, Ужгород, вул. Волошина, 54
e-mail: vfg-vik@yandex.ua

ЗБУДЖЕННЯ ЕЛЕКТРОННИМ УДАРОМ $3s3p\ ^3P^0$ -СТАНУ МАГНІЮ З ОСНОВНОГО СТАНУ

Метод R -матриці з B -сплайнами використаний для розрахунків *ab initio* диференціальних перерізів збудження електронним ударом метастабільного стану $3s3p\ ^3P^0$ атома магнію з основного стану при енергіях до 60 еВ. Для точного представлення хвильових функцій мішені використовувався багатоконфігураційний метод Хартрі-Фока з неортогональними орбіталями. Розклад сильного зв'язку включав 37 нижніх зв'язаних станів атома магнію. Отримано прийнятне узгодження розрахованих перерізів збудження з новітніми експериментальними даними.

Ключові слова: атом магнію, розсіяння електронів, B -сплайни, R -матриця.

Вступ

В наших попередніх працях [1-3] були розглянуті різноманітні аспекти розрахунку структури атома магнію методом R -матриці з B -сплайнами (BSR) [4] та характеристик елементарних процесів, що супроводжують зіткнення $e+Mg$. Зокрема, в наближенні 37 станів сильного зв'язку каналів (BSR37) нами були отримані [1] диференціальні перерізи (ДП) пружного розсіяння електронів на магнії та ДП збудження резонансного стану 3^1P^0 , а також ДП переходів $3s^2\ ^1S - 3s4s\ ^1S$, $3s^2\ ^1S - 3s3d\ ^1D$ і $3s^2\ ^1S - 3s4p\ ^1P$. Результати були порівняні з новітніми абсолютними експериментальними вимірюваннями ДП [5-7], відносними вимірюваннями [8-9], а також з більш ранніми дослідженнями [10-11]. Порівняння наших даних з іншими теоретичними розрахунками у методі збіжного сильного зв'язку (ССС) [9, 12], методах R -матриці з псевдостанами (RMPS) [9] та релятивістських спотворених хвиль (RDW) [13], а також менш вишуканих наближень [14-19] показало на хорошу точність методу BSR, який майже не поступався за надійністю передбачень прецизійному і трудомісткому методу ССС. У роботі [1] були наведені також і наші результати для ДП збудження метастабільного стану 3^3P^0 при енергіях 20 та 40 еВ. Проте за відсутності експериментальних даних в абсолютній

шкалі одиниць, ці результати носили дещо академічний характер. Ситуація змінилася з появою новітніх абсолютних вимірювань ДП збудження стану 3^3P^0 атома Mg при п'яти різних енергіях: 10, 15, 20, 40 та 60 еВ [20]. Виникла можливість прямого порівняння теорії та експерименту з метою перевірки точності розрахунку чи вимірювання, та внесення відповідних коректив у теоретичні моделі і обставини експерименту. Нижче ми представляємо попередні результати розрахунку методом BSR відповідних ДП збудження метастабільного стану 3^3P^0 атома Mg. Наші BSR37-дані порівнюються з експериментальними ДП [20], а також з результатами відносних вимірювань [9], [21] і наявними теоретичними обчисленнями.

Методи розрахунку

Ми застосовуємо до розрахунку збудження метастабільного стану 3^3P^0 лужноземельного атома Mg ту ж методику, що і при розгляді пружного розсіяння електронів на Mg та збудження станів 3^1P^0 , 3^1D , 4^1S і 4^1P^0 . Загальна теорія BSR-розрахунків структури атомних мішеней і електрон-атомного розсіяння, а також опис комп'ютерних програм пакету BSR наведені в [4]. Особливості застосування методу BSR та MCHF-BSR до розрахунку атома Mg дета-

льно викладені у наших працях [1-3]. У даній роботі обчислення структури мішені та розрахунки розсіяння здійснювалися в рамках наближення BSR37 [1]. Для точного представлення хвильових функцій атома Mg використовувався багатоконфігураційний метод Хартрі-Фока з неортогональними орбіталями [4], а самі чисельні розрахунки були здійснені за допомогою пакетів BSR [4] і MCHF [22, 23].

Даний розклад сильного зв'язку включав 37 нижніх спектроскопічних станів Mg, аж до стану $3s8s\ ^1S$. Розмір a „боксу” R -матриці приймався рівним $a=80a_0$ (де $a_0=0.529\times 10^{-10}$ м – борівський радіус). Збереження суттєвих каналів у розкладі сильного зв'язку дозволило нам додатково врахувати частину валентної кореляції, у той час як корвалентна кореляція була включена шляхом використання багатоконфігураційного розкладу для станів мішені Mg у вигляді

$$\phi(2p^6nl\ n'l') = a_{nl}\phi_{HF}(2p^6nl\ n'l') + \sum_{\bar{n}l\ \bar{n}'l'} b_{\bar{n}l\ \bar{n}'l'}\chi(2p^5\bar{n}l\ \bar{n}'l'), \quad (1)$$

де хартрі-фоківські хвильові функції $\phi_{HF}(2p^6nl\ n'l')$ були покращені кореляційними функціями χ при $2p$ -збудженому корі. Кореляційні орбіталі $\bar{n}l$ були оптимізовані для кожного стану окремо.

У дані розрахунки ми включили 110 B -сплайнів порядку 8. У кінцевому розкладі станів мішені ми зберігали тільки конфігурації з коефіцієнтами розкладу більшими за 0.004. Отримані розклади містять від 20 до 50 конфігурацій для кожного стану і їх використання для розрахунків розсіяння не викликає обчислювальних проблем.

Стани мішені, включені в дані розрахунки розсіяння, наведені в табл. 1 [1], де розраховані енергії збудження порівняні з експериментальними значеннями [24]. Загальне узгодження між експериментом і теорією є достатньо хорошим, з похибками по енергії, в цілому, меншими за 0.1-0.15 еВ, а здебільшого й 0.01 еВ.

Розрахунки $(N+1)$ -електронної задачі розсіяння $e+Mg$ у внутрішній області ($r \leq a$) аналогічні до виконаних нами для збудження інших переходів атома Mg у працях [1-3]. Ми використовували ті ж 110 B -

сплайнів порядку 8, а R -матричний радіус також був рівним $a=80a_0$. Парціально-хвильові вклади чисельно розраховувалися аж до $L = 60$. Перерізи обчислювалися за стандартною R -матричною схемою, з використанням для зовнішньої області пакету *FARM* [25].

Результати і їх обговорення

На рис. 1-5 представлені ДП збудження електронним ударом стану 3^3P^0 атома Mg при енергіях 10, 15, 20, 40 та 60 еВ, відповідно. На рис. 6 показана 3D-поверхня енергетичних і кутових залежностей ДП розсіяння $e+Mg$. Поряд з абсолютними експериментальними ДП [20] і нашими BSR37-перерізами на рис. 1, 3 та 4, представлені також дані інших експериментальних вимірювань та теоретичних розрахунків. Для енергій 15 і 60 еВ, рис. 2 і 5, наші теоретичні дані є наразі єдиними.

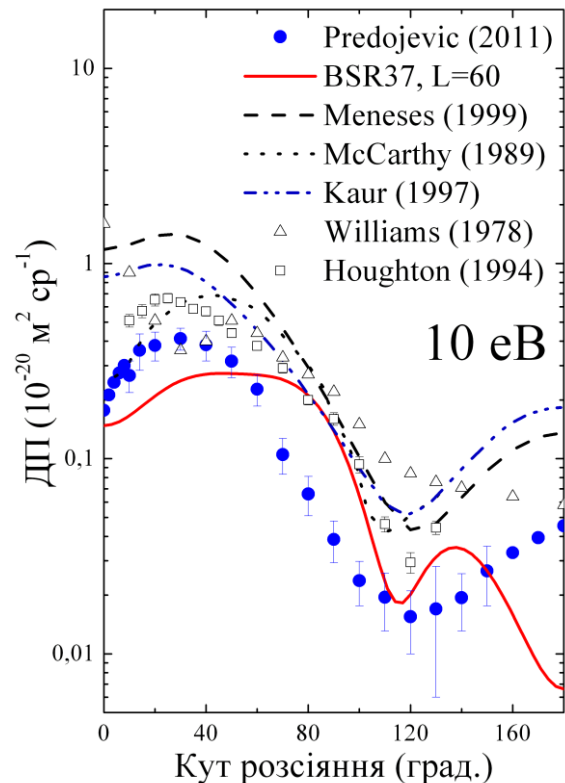


Рис. 1. Диференціальні перерізи збудження електронним ударом стану 3^3P^0 атома Mg при енергії 10 еВ. Теоретичні дані BSR37 порівнюються з експериментом Predojevic *et al.* [20] та даними інших досліджень: Williams and Trajmar [10], Houghton *et al.* [21], Meneses *et al.* [16], McCarthy *et al.* [15] та Kaur *et al.* [18]. Маркування кутових залежностей ДП наведено у графічному вікні.

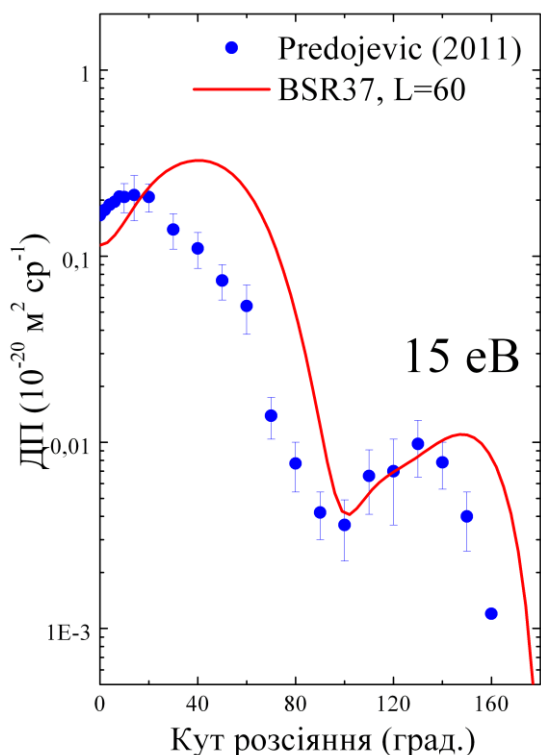


Рис. 2. Диференціальні перерізи збудження електронним ударом стану 3^3P^o атома Mg при енергії 15 еВ. Позначення як на рис. 1.

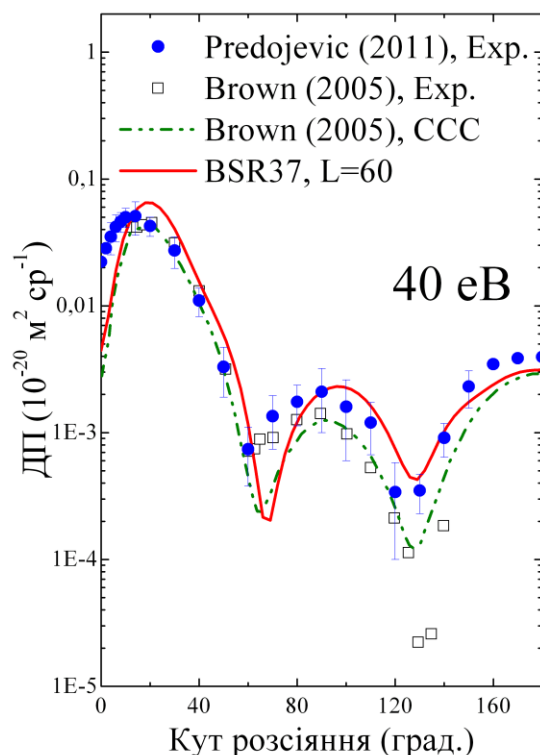


Рис. 4. Диференціальні перерізи збудження електронним ударом стану 3^3P^o атома Mg при енергії 40 еВ. Позначення як на рис. 3.

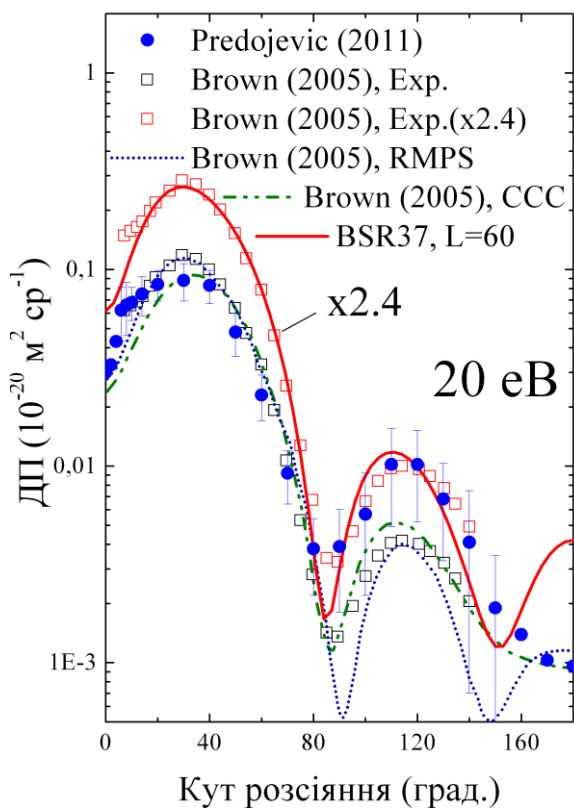


Рис. 3. Диференціальні перерізи збудження електронним ударом стану 3^3P^o атома Mg при енергії 20 еВ. Позначення як на рис. 1. Крім даних розрахунку BSR37 і експерименту Predojevic *et al.* [20] наведені результати роботи Brown *et al.* [9], а також нормовані нами фактором 2.4 дані експерименту [9].

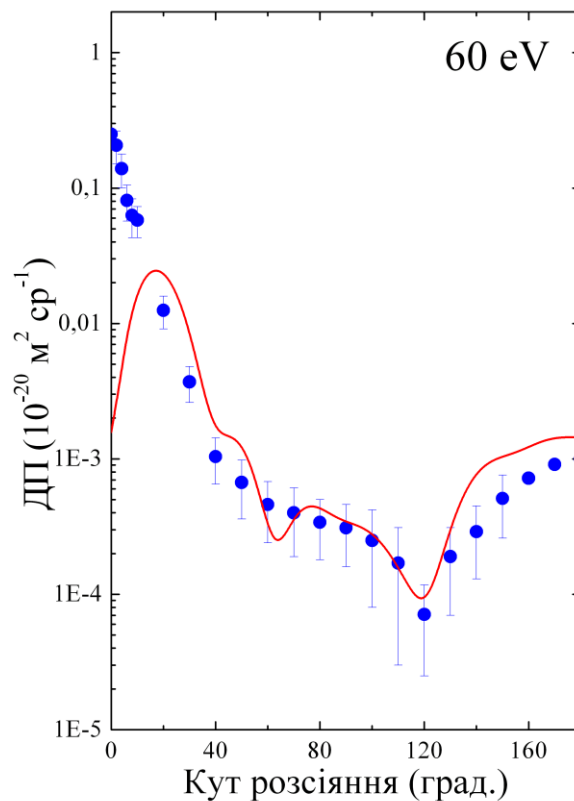


Рис. 5. Диференціальні перерізи збудження електронним ударом стану 3^3P^o атома Mg при енергії 60 еВ. Позначення як на рис. 2.

Для результатів всіх наведених експериментальних і теоретичних досліджень характерною є достатньо значна відмінність від даних аналогічних вимірювань чи розрахунків інших авторів. Винятком є випадок збудження при енергії 40 еВ, де дані, отримані у наближеннях BSR37 та ССС [9], більш-менш збігаються між собою і з даними експериментів Predojevic *et al.* [20] та Brown *et al.* [9].

Щодо результатів новітнього експерименту [20] варто зауважити, що, при всій точності представлених результатів, екстраполяція вимірених даних в області малих (менше $\sim 10^\circ$) і великих (більше $\sim 150^\circ$) кутів, носить достатньо довільний характер і не є самоочевидною. Це, зокрема, видно із порівняння даних різних досліджень для ДП при 10 еВ, рис. 1.

Стосовно наших результатів для збудження при 60 еВ, рис. 5, слід відмітити явно недостатню кількість врахованих парціальних хвиль. Очевидно, їх число ($L=60$) є неповним для даного випадку, про що свідчить певна хвилястість у графічному представленні кутових залежностей ДП. На жаль, наразі ми позбавлені можливості довести кількість розрахованих парціальних хвиль хоча б до $L=200$.

Для повноти картини збудження стану 3^3P^0 на рис. 6 наведена відповідна 3D-поверхня енергетично-кутових залежностей ДП, розрахованих у підході BSR37. На ній показано також зріз кутової залежності ДП при енергії збудження 10 еВ. З рис. 6 видно, що пологий характер кутової залежності ДП, що спостерігається нами при розсіяння на малі кути для енергії 10 еВ, рис. 1, вже при енергії 12-13 еВ стає більш кругим, як для енергій збудження 15 еВ, рис. 2. Для енергії 20 еВ наші BSR37-дані чудово корелюють з перенормованими множителем 2.4 відносними даними експерименту [9]. Ці дані у свій час були нормовані на результати ССС-розрахунків, виконаних у тій же роботі [9]. Щодо новітніх даних [20], то наші BSR37-перерізи, у рамках експериментальних похибок, відмінно узгоджуються з виміреними даними при кутах розсіяння в діапазоні ~ 70 - 150° , проте проявляють помітну розбіжність з ними

при кутах ~ 10 - 70° . Зауважимо, що дані розрахунків у методі ССС проявляють протилежну тенденцію.

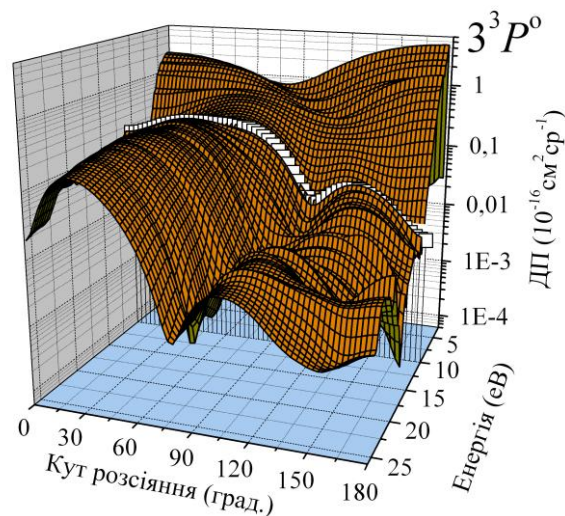


Рис. 6. 3D-поверхня енергетично-кутових залежностей ДП збудження метастабільного стану 3^3P^0 атома Mg при енергіях до 25 еВ. Значками „□” показано зріз кутової залежності ДП при енергії 10 еВ.

Достатньо посереднє узгодження експерименту [20] з результатами всіх без винятку теоретичних розрахунків, а також з іншими експериментальними даними при енергії 10 еВ, рис. 1, свідчить про необхідність більш точного врахування кореляційних ефектів, роль яких є визначальною в теоретичних розрахунках розсіяння електронів на атомах при низьких енергіях.

Висновки

Ми представили диференціальні перерізи збудження електронним ударом стану 3^3P^0 атома Mg при енергіях 10, 15, 20, 40 та 60 еВ. Обчислення були виконані методом R -матриці з B -сплайнами [4]. У розкладі сильного зв'язку враховувалися 37 нижніх спектроскопічних станів атома Mg. Результати BSR37-розрахунків диференціальних перерізів збудження стану 3^3P^0 атома Mg у загальному прийнятно узгоджуються з результатами новітнього експерименту [20]. Зроблено висновок про необхідність більш точного врахування кореляційних ефектів при низьких енергіях та більшій кількості парціальних хвиль при високих.

Автори висловлюють подяку д-ру Зацарінному О.І. та проф. Бартшату К. за до-

помогу у проведенні досліджень, що привели до появи даної роботи.

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

- Zatsarinny O., Bartschat K., Gedeon S., Gedeon V., Lazur V., and Nagy E. Cross sections for electron scattering from magnesium // *Phys. Rev. A.* – 2009. – V.79. – No 5. – P. 052709 (10pp).
- Zatsarinny O., Bartschat K., Gedeon S., Gedeon V., Lazur V., and Nagy E. Cross sections for electron scattering from magnesium // *Journal of Physics: Conference Series.* – 2009. – V. 194. – No 4. – P. 042029 (1pp).
- Гедеон В., Гедеон С., Зацарінний О., Лазур В., Нодь Є. Диференціальні перерізи розсіяння електронів на атомі магнію // *Наук. вісник Ужгородського ун-ту. Серія Фізика.* – 2008. – № 23. – С. 23-35.
- Zatsarinny O. BSR: B-spline atomic R-matrix codes // *Comput. Phys. Commun.* – 2006. – V.174. – P. 273-356.
- Filipovic D.M., Predojevic B., Pejcev V., Šević D., Marinkovic B. P., Srivastava Rajesh and Stauffer A. D. Electron scattering by magnesium: excitation of the $3s3p\ ^1P_1$ state // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* – 2006. – V.39. – P. 2583-2592.
- Predojevic B., Pejcev V., Filipovic D.M., Šević D. and Marinkovic B. P. Elastic electron scattering by a magnesium atom // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* – 2007. – V.40. – P. 1853-1861.
- Predojevic B., Pejcev V., Filipovic D.M., Šević D. and Marinkovic B. P. Electron scattering by magnesium: excitation of the $3s4s\ ^1S_0$, $3s3d\ ^1D_2$ and $3s4p\ ^1P_1$ states // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* – 2008. – V.41. – P. 015202 (10pp).
- Brown D.O., Cvejanović D. and Crowe A. 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 // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* – 2003. – V.36. – P. 3411-3423.
- Brown D.O., Crowe A., Fursa D.V., Bray I. and Bartschat K. Electron scattering from magnesium at an incident energy of 20 eV // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* – 2005. – V.38. – P. 4123-4134.
- Williams W. and Trajmar S. Electron impact excitation of magnesium at 10, 20 and 40 eV impact energies // *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* – 1978. – V.11. – P. 2021-2029.
- Brunger M.J., Riley J.L., Scholten R.E. and Teubner P. J. O. Electron impact excitation of the 3^1P state in magnesium // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* – 1988. – V.21. – P. 1639-1648.
- Fursa Dmitry V. and Bray Igor. Excitation of the 3^1P state of magnesium by electron impact from the ground state // *Phys. Rev. A.* – 2001. – V.63. – P. 032708 (9 pp).
- Sharma Lalita, Srivastava Rajesh, and Stauffer A. D. Electron excitation of the $3s4s\ ^1S_0$ and $3s4p\ ^1P_1$ states of magnesium // *Phys. Rev. A.* – 2008. – V.78. – P. 014701 (3 pp).
- Mitroy J. and McCarthy I.E. Differential cross sections and Stokes parameters for electron-magnesium scattering // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* – 1989. – V.22. – P. 641-654.
- McCarthy I.E., Ratnavelu K. and Zhou Y. Coupled-channels optical calculation of electron-magnesium scattering // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* – 1989. – V.22. – P. 2597-2603.
- Meneses G.D., Pagan C.B., Machado L.E. Excitation of the $3\ ^{1,3}P$ states of Mg by electron impact // *Phys. Rev. A.* – 1990. – V.41. – P. 4740-4750.
- Clark R.E.H., Csanak G. and Abdallah J., Jr. Theoretical studies on the electron-impact excitation of neutral magnesium. // *Phys. Rev. A.* – 1991. – V.44. – P. 2874-2882.
- Kaur Savinder, Srivastava R., McEachran R.P. and Stauffer A.D. Electron impact

- excitation of magnesium and zinc atoms in the relativistic distorted-wave approximation // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. – 1997. – V.30. – P. 1027-1042.
19. Srivastava R., McEachran R.P. and Stauffer A. D. Excitation of the D states of magnesium // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. – 2001. – V.34. – P. 2071-2079.
20. Predojević B., Pejčev V., Filipović D.M., Sević D., Tomčik B. and Marinković B.P. Electron impact excitation of the $3s3p\ ^3P$ state of magnesium from the ground state // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. – 2011. – V.44. – No 5. – P. 055208 (6pp).
21. Houghton R.K., Brunger M.J., Shent G. and Teubner P.J.O. Electron impact excitation of the 3^3P state in magnesium // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. – 1994. – V.27. – P. 3573-3580.
22. Froese Fischer C. The MCHF atomic-structure package // Comput. Phys. Commun. – 1991. – V.64. – P. 369-398.
23. Froese Fischer C., Brage T., Jonsson O. Computational Atomic Structure. An MCHF Approach // London: Institute of Physics Publishing. – Bristol. – 1997. – 279 p.
24. NIST 2005. *Atomic Spectra Database* // http://physics.nist.gov/cgi-bin/AtData/main_asd.
25. Burke V.M., Noble C.J. FARM: The atomic R -matrix program // Comp. Phys. Commun. – 1995. – V.85. – P. 471-500.

Стаття надійшла до редакції 27.05.2011

E.A. Nagy, V.F. Gedeon, V.Yu. Lazur

Uzhhorod National University, Ukraine, 88000, Uzhhorod, 54 Voloshyna Str.

ELECTRON IMPACT EXCITATION OF THE $3s3p\ ^3P^o$ STATE OF MAGNESIUM FROM THE GROUND STATE

The B -spline R -matrix method is used to *ab initio* calculations of electron impact excitation differential cross sections of $3s3p\ ^3P^o$ state of neutral magnesium from ground state in energies up to 60 eV. The multiconfiguration Hartree-Fock method with non-orthogonal orbital sets is employed for an accurate representation of the target wavefunctions. The close-coupling expansion includes 37 lowest bound states of neutral magnesium. The present calculations of differential cross sections yield satisfactory agreement with the recently experimental data.

Key words: calcium atom, electron-impact scattering, B -spline, R -matrix.

Е.А. Нодь, В.Ф. Геден, В.Ю. Лазур

Ужгородский национальный университет, Украина, 88000, Ужгород, ул. Волошина, 54

ВОЗБУЖДЕНИЕ ЭЛЕКТРОННЫМ УДАРОМ $3s3p\ ^3P^o$ - СОСТОЯНИЯ МАГНИЯ ИЗ ОСНОВНОГО СОСТОЯНИЯ

Метод R -матрицы с B -сплайнами использован для расчетов *ab initio* дифференциальных сечений возбуждения электронным ударом метастабильного состояния $3s3p\ ^3P^o$ атома магния из основного состояния при энергиях до 60 эВ. Для точного представления волновых функций мишени использовался многоконфигурационный метод Хартри-Фока с неортогональными орбиталями. Разложение сильной связи включало 37 нижних связанных состояний атома магния. Получено приемлемое согласие рассчитанных сечений с новейшими экспериментальными данными.

Ключевые слова: атом кальция, рассеяние электронов, B -сплайны, R -матрица.