

РОЗСІЯННЯ ЕЛЕКТРОНІВ НА КАЛЬЦІЇ ПРИ НАДНИЗЬКИХ ЕНЕРГІЯХ

С.В. Гедеон

Ужгородський національний університет,
вул. Волошина, 54, 88000, Ужгород

Метод R -матриці з B -сплайнами використано для дослідження пружного розсіювання електронів на атомі кальцію в діапазоні енергій від порога до 0.5 eV. Для точного представлення хвильових функцій мішені використовувався багатоконфігураційний метод Хартрі-Фока з неортогональними орбіталями. Розклад сильного зв'язку включав 39 зв'язаних станів нейтрального кальцію, охоплюючи всі стани від основного стану до $4s8s\ ^1S$. Розраховані парціальні фази та повний і парціальні інтегральні перерізи задовільно узгоджуються з даними інших теоретичних розрахунків. Основні розбіжності спостерігаються в поведінці парціальної хвилі $^2P^o$.

Вступ

Розсіювання електронів було і є одним з кращих інструментів для дослідження структури та інших властивостей матерії в газоподібному, чи конденсованому стані. З освоєнням способів утримання та маніпуляції з бозонною і ферміонною матерією при екстремально низьких температурах, були відкриті нові можливості для прецизійного аналізу електронного розсіювання та фотоіонізації атомів в ультрахолодних газах.

Інтерес до ультрахолодних зіткнень постійно зростає, – для прикладу, з'явилися повідомлення про абсолютні вимірювання перерізів електронного розсіювання в магнітно-оптичних пастках та Бозе-Енштейнівському конденсаті а також про розрахунки довжини розсіювання для електронних зіткнень із важкими атомами лужних металів, із використанням діраківського R -матричного методу для квазііонно-електронних мішеней (див. [1])

Під час вивчення розповсюдження плазми, знайшли підтвердження сильні ефекти кореляції електронів і спостерігалось утворення рідбергівських атомів при електрон-іонній рекомбінації в плазмі, що розширюється. За допомогою розсіювання наднизькоенергетичних електронів на ульт-

трахолодних бозонних і ферміонних вироджених газах можна також вивчати різні статистичні закономірності, що мають місце при захопленні атомних часток [1].

Що стосується лужноземельних атомів, то пастки для них також широко застосовувалися в останні кілька років, у зв'язку з інтересом до метрології та оптичних стандартів частоти. Лужноземельні атоми в загальному мають певні переваги перед лужними атомами внаслідок відсутності міжоболонкової взаємодії для стійкої групи II ізотопів. Проте, не зважаючи на актуальність дослідження ультрахолодних зіткнень електронів з атомними частками, донедавна були відсутні детальні розрахунки цих процесів для лужноземельних атомів. Нарешті, в роботі [1] було здійснено розрахунок довжини розсіювання електронів у зіткненнях при наднизькій енергії ($T_e < 1-10$ K) електронів для лужноземельних атомів Mg, Ca та Sr. У цій роботі нерелятивістський R -матричний метод [2] був застосований для розрахунку зсуву фаз при зіткненні електронів з вказаними мішенями.

Крім вказаного R -матричного методу, низькоенергетичне розсіювання електронів на лужноземельних атомах досліджувалося в рамках статично-обмінного формалізму [3], основаному на припущенні, що розсія-

ний електрон зазнає тієї самої взаємодії, що і зовнішній електрон у від'ємному іоні атома-мішені. Результати з низькоенергетичного розсіяння електронів на атомах Ca, Sr, Ba та Ra наведені в [3] для енергій від 0.01 до 5 eV.

В зв'язку з невеликою кількістю наявних на даний момент теоретичних розрахунків розсіяння ультрахолодних електронів на кальції а також для оцінки застосовності різних теоретичних моделей до таких досліджень нами був проведений альтернативний R -матричний розрахунок процесу пружного зіткнення.

В даній роботі в рамках методу R -матриці з B -сплайнами (BSR) [4] були розраховані перерізи та парціальні фази розсіяння електронів на атомі кальцію в ультрахолодній області енергій до 0.5 eV. Цей метод добре зарекомендував себе при дослідженні процесів зіткнення електронів з атомами лужноземельних елементів. Зокрема (див. [5–7]), нами було отримано хороше узгодження між теоретичними розрахунками в наближенні BSR та наявними експериментальними даними з диференціальних та інтегральних перерізів, а також псевдостоксових параметрів розсіяння електронів на атомі кальцію.

Перед обговоренням отриманих результатів варто звернути увагу як на сильні сторони, так і на потенційні труднощі в застосуванні R -матричної розрахункової моделі для дослідження низькоенергетичних зіткнень. Це тим більше актуально, що до опису ультрахолодного розсіяння електронів на Ca були застосовані два суттєво відмінних R -матричних підходи: перший, наближення RMPS, у роботі [1], другий, наближення BSR39, – у наших розрахунках.

Однією з переваг R -матричного методу є те, що він базується на розкладі сильного зв'язку, та надає можливість для врахування кореляції. Вважається загальноприйнятим положення, що обчислення низькоенергетичного розсіяння електронів не вимагає використання сум з врахуванням великої кількості станів мішені. Для прикладу, багато розрахунків пружного розсіяння електронів із благородними газами були здійснені у розкладі сильного зв'язку

тільки двох станів, тобто основного стану і псевдостану $^1P^0$, що був, зокрема, призначений для врахування дипольної поляризованості мішені в напрямку початкового пучка. Представлення цієї дипольної поляризованості динамічним чином, – через зв'язок із закритим каналом, замість використання напівемпіричного, часто локального і незалежного від енергії поляризаційного потенціалу є суттєвою перевагою розглядуваного методу.

З іншого боку, добре відомо, що багатоканальні розрахунки сильного зв'язку можуть зустрітися з обчислювальними труднощами, зокрема коли енергія реакції знаходиться поблизу порогу і коли наявні сильно закриті канали. В додаток до всього, у випадку R -матричного методу ускладнення можуть виникати від розкладу хвильової функції реакції по базисних функціях поза R -матричним „боксом”. Тут вирішальним є уникнення проблем з недосконалою ортогональністю наборів орбіталей зв'язаних станів і континууму. Треба також бути обережним щодо можливого переповнення базису псевдоорбіталей, якщо такі використовуються для вдосконалення опису мішені. Нарешті, опис мішені сам по собі може істотно впливати на результат. Розрахунки свідчать, що врахування поляризації кора та ефектів релаксації є важливим при обчисленні рівнів енергії та сил осциляторів (див. [1]). Наші дані BSR39 підтверджують також важливість врахування при опису мішені валентної та корвалентної кореляцій, про що йшлося в [5].

У світлі описаних вище труднощів, які можуть зустрічатися під час розрахунків, очевидно, мають бути прикладені серйозні зусилля, щоб отримати прийнятні результати при екстремально низьких енергіях зіткнення. Крім того, в ультрахолодній області енергій наразі наявні тільки одні експериментальні дані електронного розсіяння, отримані за допомогою модифікованого методу електронної пастки і модуляції атомного пучка [8] де похибка визначення перерізу становила 38%, а порівняння з передбаченнями інших теоретичних методів [1, 3], хоча й важливі для визначення загальної тенденції, мають обмежене значення. У своїх BSR39-розрахунках ми здійснили

деякі суттєві внутрішні перевірки результатів, представлених нижче. В роботі була також досліджена чутливість передбачень шляхом порівняння результатів, отриманих за допомогою різних структурних моделей та моделей зіткнення.

Методи розрахунку

Порядок розрахунку структури атома мішені у нашому підході викладений в [5], тому ми не будемо зупинятися тут на цьому питанні. Зазначимо тільки, що для основного стану і для низькорозміщених збуджених станів Ca важливими є валентна і кор-валентна кореляції. В даному наближенні ми включили кор-валентну кореляцію *ab initio* шляхом добавлення конфігурацій мішені зі збудженим кором. Для точного представлення хвильових функцій мішені використовувався багатоконфігураційний метод Хартрі-Фока з неортогональними орбіталями. Розклад сильного зв'язку включав 39 зв'язаних станів нейтрального кальцію, охоплюючи всі стани від основного стану до $4s8s\ ^1S$.

Як зазначалося в [5], загальне узгодження між експериментом і теорією для енергетичного спектру атома мішені є достатньо хорошим, з відмінностями в похибках по енергії меншими за 0.1 еВ, за винятком нижчих станів $4s^2\ ^1S$ та $4s4p\ ^3P$.

Оцінка якості опису мішені за допомогою сил осциляторів різних переходів була здійснена в статті [5] і показала хороше узгодження з наявними експериментальними та теоретичними даними.

Також важливим показником надійності хвильових функцій мішені, що використовуються в даній роботі є підтвердження існування стабільного від'ємного іона Ca^- утвореного у конфігурації $4s^24p\ ^2P^o$ (див. [5]).

Для розрахунків розсіяння використовувалась *R*-матрична програма з *B*-сплайнами [4]. Особливості наближення BSR, а також спосіб його застосування для розрахунку розсіяння електронів на атомі кальцію описані, зокрема, в роботах [5–7].

У розрахунках розсіяння, як і при обчисленні зв'язаних станів мішені, ми використовували 118 *B*-сплайнів порядку 8, *R*-

матричний радіус був рівним $a = 80a_0$ (де $a_0 = 0.529 \times 10^{-10}$ м – борівський радіус). Перерізи обчислювалися за стандартною *R*-матричною схемою, з використанням для зовнішньої області пакету *FARM* [9]. Для можливості прямого порівняння з експериментом у розрахунках розсіяння ми використовували експериментальні енергії збудження мішені.

Результати і обговорення

На рис. 1 представлено порівняння повних і парціальних перерізів розсіяння електронів на атомі Ca в ультрахолодній області енергій до 0.5 еВ, розрахованих у наближенні BSR39 та RMPS [1]. Як видно з рисунка, основна відмінність між перерізами, нарахованими у двох *R*-матричних підходах, зумовлена поведінкою $^2P^o$ -парціальної хвилі. У той же час, парціальні перерізи для парціальних хвиль $^2S^e$ та $^2D^e$, розраховані у вказаних наближеннях, практично співпадають.

На рисунку також приведені експериментальні дані для інтегрального перерізу пружного розсіяння [8]. Як видно з рисунка, результати різних *R*-матричних наближень задовільно узгоджуються з експериментом в межах похибки, вказаної в [8]. Проте, як зазначалося в [5] даний експеримент імовірно потребує перекалібровки енергетичної шкали (в межах розкиду електронів по енергії зазначеного в [8]). Так, якщо зсунути експериментальні точки на ~0.35 еВ в сторону більших енергій як це було запропоновано в [5], то в ультрахолодній діапазон енергій 0÷0.5 еВ, розглядуваний тут, попадає тільки одна експериментальна точка. Тому на часі стоїть питання проведення нових прецизійних експериментів з розсіяння $e+\text{Ca}$ в ультрахолодній області енергій.

На Рис. 2 показано порівняння парціальних $^2S^e$, $^2P^o$ та $^2D^e$ -фаз розсіяння електронів на атомі Ca в ультрахолодній області енергій, отриманих у двох різних *R*-матричних підходах: BSR39 (даний розрахунок) і RMPS [1] та методі статично-обмінного формалізму [3].

У роботі [1] для здійснення розрахунків структури використовувалися набли-

ження п'яти і двох станів, при яких у розклад сильного зв'язку включалися, відповідно, п'ять нижчих станів мішені, або точний основний стан і стан $4s4p\ ^1P^o$. При генеруванні опису мішені в [1] брався до уваги як випадок із врахуванням псевдоорбіталей (.5s, .5p, .4d) для поліпшення представлення станів мішені, так і випадок без врахування псевдоорбіталей.

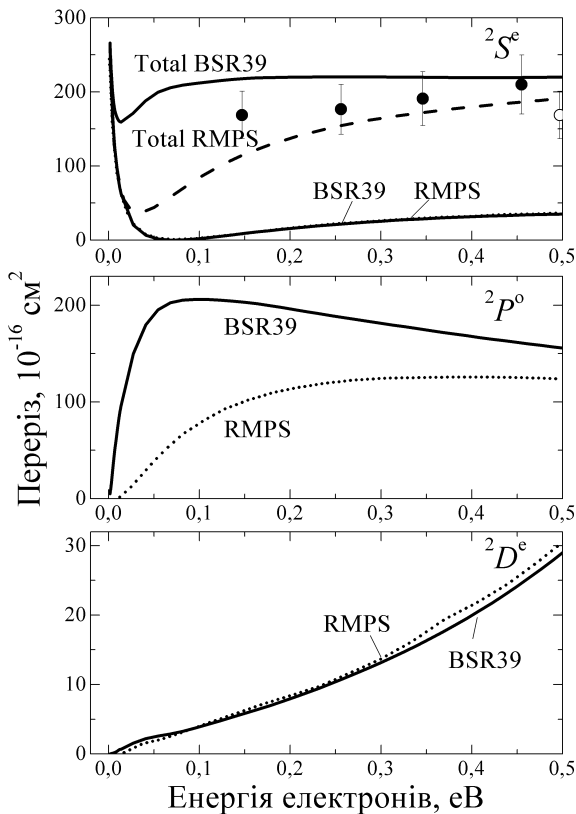


Рис. 1. Повні і парціальні перерізи розсіяння електронів на атомі Са в ультрахолодній області енергій до 0.5 еВ: (●) – експеримент [8], без перекалібровки; (○) – експеримент [8], дані перекалібровані згідно [5]; (—) – BSR39, даний розрахунок; (- -) – RMPS [1].

Оскільки Ca^- утворює стабільний від'ємний іон у конфігурації $4s^24p\ ^2P^o$, на рис. 1 відсутній „довгий” p -хвильовий шейп-резонанс. Замість цього, на рис. 2 p -хвильовий зсув фаз для даних [1] починається з додатного значення, але тут же перетворюється на від'ємне при дуже низькій енергії зіткнення (приблизно 0.02 еВ). Як видно з рис. 2, наші передбачення для $^2D^e$ - та $^2S^e$ -фаз досить добре узгоджуються з такими ж у [1] та задовільно з даними [3]. Проте, залишаються істотні відмінності в зсуві фаз для p -хвилі у всьому діапазоні

енергій. У даній роботі ми не розраховували довжини розсіяння, та, як показано в [1], передбачення для цієї величини є відносно нечутливими до деталей моделі.

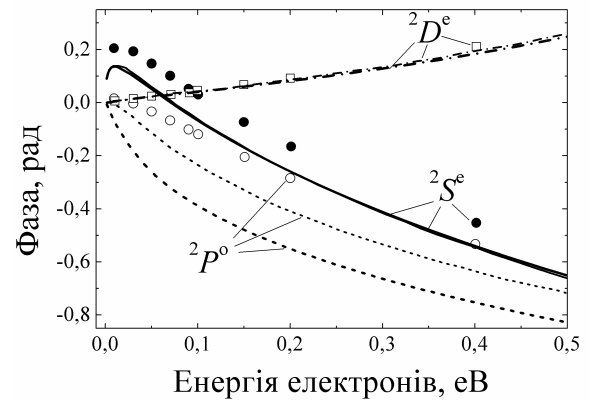


Рис. 2. Парціальні $^2S^e$, $^2P^o$ та $^2D^e$ -фази розсіяння електронів на атомі Са в ультрахолодній області енергій до 0.5 еВ: потовщені лінії – розрахунок BSR39; тонкі лінії – розрахунок RMPS [1]. Окремими точками (знаки „●”, „○”, „□”) позначені результати розрахунків [3].

Висновки

Нами представлені результати розрахунку парціальних фаз та повних і парціальних інтегральних перерізів пружного розсіяння електронів на атомі кальцію в діапазоні енергій від порога до 0.5 еВ, отримані в рамках методу R -матриці з B -сплайнами [4]. Порівняння з результатами інших теоретичних розрахунків, виконаних в наближеннях RMPS [1] та в рамках статично-обмінного формалізму [3] показало в цілому на їх добре узгодження. Розбіжності в результатах різних методів розрахунку спостерігаються тільки для парціальної хвилі $^2P^o$.

Отримане також задовільне узгодження розрахованих нами повних інтегральних перерізів в ультрахолодній області з даними експерименту [8]. Проте, як зазначалося в [5], результати даного експерименту імовірно потребують перекалібровки і, в такому випадку, постає питання щодо проведення нових експериментальних досліджень розсіяння електронів на атомі кальцію в області наднизьких енергій. Це дозволило б оцінити переваги та недоліки застосування тих чи інших методів теоре-

тичного вивчення подібних процесів, а також детальніше дослідити чутливість теоретичних передбачень.

Автор висловлює подяку проф. Лазуру В.Ю., д-ру Зацарінному О.І. і проф. Бартшату К. за співпрацю, що сприяла появі даної роботи.

Література

1. Bartschat K. and Sadeghpour H.R. Ultralow-energy electron scattering from alkaline-earth atoms: the scattering-length limit // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* – 2003. – V.36. – P.L9–L15.
2. Berrington K.A., Eissner W.B. and Norrington P.H. RMATRIX1: Belfast atomic R-matrix codes // *Comput. Phys. Commun.* – 1995. – V.92. – P. 290-420.
3. Yuan J. and Zhang Z. Alternative static-exchange formalism: Low-energy electron scattering with heavy alkaline-earth atoms // *Phys. Rev. A.* – 1990. – V.42. – P. 5363-5373.
4. Zatsarinny O. BSR: B-spline atomic R-matrix codes // *Comput. Phys. Commun.* – 2006. – V.174. – P. 273-356.
5. Zatsarinny O., Bartschat K., Gedeon S., Gedeon V. and Lazur V. Low-energy electron scattering from Ca atoms and photodetachment of Ca^- // *Phys. Rev. A.* – 2006. – V.74. – P.052708(10 pp).
6. Зацарінний О., Бартшат К., Бандуріна Л., Гедеон С., Лазур В. Розсіяння електронів на атомі кальцію // *Наук. вісник УжНУ. Серія Фізика.* – 2007. – № 21. – С. 205-214.
7. Zatsarinny O., Bartschat K., Bandurina L. and Gedeon S. Electron-impact excitation of calcium // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* – 2007. – V.40. – P.4023-4031.
8. Romanyuk N.I., Shpenik O.B. and Zapesochnyi I.P. The electron impact cross sections and features an calcium, strontium and barium atoms // *Pis'ma Zh. Eksp. Teor. Fiz.* – 1980. – V.32. – P.472-475 [*JETP Lett.* – 1980. – V.32. – P.452-455].
9. Burke V.M., Noble C.J. FARM: The atomic R-matrix program // *Comp. Phys. Commun.* – 1995. – V. 85. – P. 471-500.

THE ULTRALOW-ENERGY ELECTRON-IMPACT SCATTERING ON CALCIUM

S. Gedeon

Uzhhorod National University, 54 Voloshyna str., Uzhhorod, 88000

The *B*-spline *R*-matrix method is used to investigate elastic electron scattering from neutral calcium in the ultralow-energy range from threshold to 0.5 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 39 bound states of neutral calcium, covering all states from the ground state to $4s8s\ ^1S$. The present calculations of scattering phases and both total and partial integral cross sections yield satisfactory agreement with the few available theoretical data for elastic electron scattering. The ground discrepancy observed in behavior of partial $^2P^o$ -wave.