## УДК 539.1.08, 539.198

## В.Ф. Гедеон

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

# РОЗСІЯННЯ ЕЛЕКТРОНІВ НА ІОНІ Si<sup>-</sup>

У рамках методу *R*-матриці з *B*-сплайнами досліджено процеси розсіяння електронів на від'ємному іоні кремнію в області енергій до 100 еВ. Для точного представлення хвильових функцій мішені використовувався багатоконфігураційний метод Хартрі-Фока з неортогональними орбіталями. Розраховано інтегральні перерізи розсіяння е + Si<sup>-</sup> для всіх переходів між зв'язаними станами  $1s^22s^22p^63s^23p^3$   ${}^4S^{\circ}$ ,  ${}^2D^{\circ}$  та  ${}^2P^{\circ}$  від'ємного іона. Представлено 3D-поверхні енергетично-кутових залежностей відповідних диференціальних перерізів розсіяння.

Ключові слова: від'ємний іон кремнію, розсіяння електронів, *R*-матриця, *B*-сплайни, інтегральні та диференціальні перерізи.

#### Вступ

Кремній належить до найбільш поширених елементів природи. Проте дослідження розсіяння електронів як на самому атомі Si, так і на його від'ємному іоні Siпрактично знаходяться у зародковому стані. Повністю відсутні які-небудь експериметальні роботи з вимірювання характеристик розсіяння e + Si та e + Si<sup>-</sup>. З теоретичних праць варті згадування хіба що розрахунки диференціальних (ДП) та інтегральних (IП) перерізів переходів між підрівнями триплету  $np^{2} {}^{3}P$  [1] та перерізів збудження синглетного рівня  $np^{2}$  <sup>1</sup>D [2] в атомі Si. Тільки зовсім недавно вийшла з друку наша зі співавторами стаття [3], у якій було детально розглянуто процеси пружного розсіяння та збудження, що супроводжують зіткнення електрона з атомом Si.

Від'ємні іони відіграють важливу роль у слабо іонізованих газах, і багато різновидів плазми можуть бути акуратно змодельовані тільки при включенні в розгляд від'ємних іонів. Так наявність останніх у зірковій фотосфері є головним джерелом непрозорості атмосфери більшості зірок. В атмосфері Землі від'ємний заряд при висотах аж до 70 км також створюється головним чином від'ємними іонами [4]. Відповідно, властивості атмосферної плазми сильно залежать від її негативного заряду у вигляді високошвидкісних електронів чи малорухливих аніонів. Для коректного моделювання такої плазми важливо знати енергетичні залежності перерізів для різноманітних процесів зіткнення, в яких беруть участь аніони.

Що стосується прикладного застосування аніонів, то генерування негативно заряджених атомів і молекул є вкрай необхідним, наприклад, для мас-спектрометрії прискорювачів, де вихід потужних потоків стабільних аніонів є передумовою для надвисокої чутливості цієї техніки [5, 6].

Доволі обширний матеріал з розщеплення різноманітних атомних та молекулярних аніонів електронним ударом зібраний у *PhD*-дослідженні Seiersen [7]. Проте процеси пружного розсіяння електронів на аніонах, а тим більше переходи між енергетичними рівнями аніона в дисертації Seiersen [7] не розглядалися. Тільки відносно недавно в короткому повідомленні Tanĉić and Nikolić [8] та статті Semennikhina *et al.* [9] були наведені інтегральні (ПП) і диференціальні (ДП) перерізи пружного розсіяння електронів на аніоні літію, розраховані в рамках багаточастинкової теорії.

Структура і властивості від'ємних іонів суттєво відрізняються від їхніх нейтральних або позитивно заряджених аналогів, що обумовлено відмінностями у відповідних потенціалах зв'язку. У той час, як для нейтральних атомів та додатних іонів домінує довгодіюча кулонівська взаємодія, зовнішній електрон в аніоні зв'язується за рахунок виникнення короткодіючої дипольної взаємодії.

Розщеплення аніонів у процесі зіткнення як з електронами, так і з фотонами є важливим джерелом інформації про їх структурні властивості. З ряду причин електронне розсіяння на від'ємних іонах є менш вивченим, ніж процеси фоторозщеплення. Що стосується кремнію, то фотоіонізація аніона Si<sup>-</sup> була розглянута в працях [10-12], у яких досліджувалися парціальні і повні перерізи фоторозщеплення hv+Si<sup>-</sup> і були прояснені їх форма і резонансні параметри. Нічого подібного поки що не мало місця для розсіяння e+Si<sup>-</sup>.

Дане дослідження було ініційоване необхідністю більш досконального встановлення динаміки зіткнення вільних електронів з негативно зарядженими іонами кремнію і важливістю цього процесу для великої кількості можливих ситуацій, що виникають у плазмі. Безпосередня мета даної роботи полягає у розрахунку ІП та ДП розсіяння електронів на аніоні кремнію і аналізі їх енергетичних і кутових залежностей.

### Методи розрахунку

Від'ємні іони надають унікальну можливість точної перевірки та подальшого розвитку атомної і молекулярної теорії. Внаслідок високого ступеня електронної кореляції в цих системах, вони є дуже чутливими до різноманітних наближень, застосовуваних до розрахунків їх структурних чи динамічних властивостей. Тому будь-які експериментальні дослідження були б вкрай важливими для тестування якості різноманітних теоретичних моделей.

Енергію зв'язку зовнішнього електрона в аніоні називають *спорідненістю електрона* (electron affinity – EA). В атомах чи молекулах з додатними EA можна зв'язати зовнішній електрон, у той час як для атомних частинок на зразок інертних газів, з від'ємним значенням спорідненості електрона, заборонене утворення від'ємних іонів. Спорідненість електронів може бути визначена з високою точністю (Hotop and Lineberger [13]), а положення і ширини резонансів авторозщеплення отримуються шляхом вимірювання відносного перерізу фоторозщеплення (див., напр., Esaulov [14], Andersen [15]). Вимірювання абсолютних перерізів фоторозщеплення дає можливість кількісного порівняння з теоретичними передбаченнями, забезпечуючи, таким чином, чутливе тестування опису електронної кореляції (див., напр., Balling *et al.* [10]).

Від'ємні іони є складними системами, що важко піддаються теоретичному моделюванню. Утворення від'ємного іона вимагає від електрона приєднання до нейтральної частинки, – задача, що з самого початку видається дуже проблематичною. Проте, біля 80% всіх базових елементів [7] здатні утворювати від'ємний іон, що досягається індукуванням дипольного моменту, створюваного переупорядкуванням електронів у полі зовнішнього електрона. Останній сильно корелює зі зв'язаними електронами, що значно ускладнює опис атомної системи. Ще більш трудною для теоретичної імітації є задача, у якій розглядаються утворення діаніонів.

Розрахунок структури аніона є тільки першим кроком при розгляді задачі зіткнення e+Si<sup>-</sup>. Опис власне процесу розсіяння електронів на від'ємних іонах є не менш трудною задачею. Особливо це стосується зіткнень, що призводять до розщеплення аніонів (див, напр., [7]). Теоретичні дослідження тоді стикаються з довгодіючою сумарною кореляцією між двома (розсіяним і вибитим) вільними електронами. У даній роботі ми обмежимося розглядом пружного розсіяння електронів на аніоні кремнію в основному  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^3 {}^4S^\circ$  і метастабільних  ${}^{2}D^{\circ}$  та  ${}^{4}P^{\circ}$ -станах, а також переходами, викликаними електронним ударом, між вказаними станами Si<sup>-</sup>.

У своїх розрахунках ми слідуємо методиці, що з успіхом використовувалася нами (зі співавторами) для атомних систем С [16], Са [17], Mg [18-19] та Si [3] у рамках методу *R*-матриці з *B*-сплайнами [20]. Аніон кремнію може розглядатися як сильно корельована п'ятиелектронна система в потенціалі кора  $1s^22s^22p^6$ . Отримання точних хвильових функцій такої системи за допомогою стандартного методу Хартрі-Фока (HF) або багатоконфігураційного методу Хартрі-Фока (MCHF) [16, 17] є достатньо складним.

великомасштабні Як показали останні МСНF-розрахунки сил осциляторів атома Si [21], добре збіжні результати були отримані тільки з дуже обширними розкладами, що містять до 20 000 конфігурацій. У даних розрахунках станів мішені негативного іона кремнію ми намагалися врахувати всі кореляційні ефекти, маючи, проте, на увазі, що кінцеві багатоконфігураційні розклади повинні бути використані у наступному розрахунку зіткнення Si<sup>-</sup> ще з одним потенційно зв'язаним електроном. Відносна малість релятивістських ефектів у аніоні кремнію дозволила нам генерувати стани мішені для розрахунків зіткнення Si<sup>-</sup> з електронами за допомогою В-сплайнового обмеженого у боксі методу сильного зв'язку [22] у нерелятивістському наближені LS-зв'язку.

Як відомо, від'ємний іон кремнію утворює три зв'язані стани  $2p^63s^23p^3$   ${}^4S^{\circ}$ ,  ${}^2D^{\circ}$  та  ${}^4P^{\circ}$ , з експериментальними енергіями спорідненості –1.389 еВ, –0.527 еВ і –0.029 еВ, відповідно [23]. Розрахунки цих станів були здійснені нами за допомогою пакетів програм MCHF [24] та BSR [20]. Останній передбачає можливість використання в описі мішені неортогональних одноелектронних радіальних орбіталей, що дозволяє нам незалежно оптимізувати енергії та хвильові функції для кожного з вказаних станів Si<sup>-</sup>.

Розрахунки хвильових функцій мішені в багатоконфігураційному наближенні Хартрі-Фока включали в себе наступні кроки. По-перше, за допомогою програми HF пакету MCHF [24] нараховувалися одноконфігураційні орбіталі  $1s^22s^22p^63s^2$  і она Si<sup>2+</sup> з повністю розмороженими оболонками. Після цього, на замороженому корі  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$ послідовно нараховувалися основний стан атома  $3p^{2} {}^{3}P$ , усереднений по термах стан аніона  $3p^3$ \_av, а також спектроскопічні стани аніона  $3p^{3'4}S^{\circ}$ ,  $^{2}D^{\circ}$  і  $^{2}P^{\circ}$ . Далі, у багатоконфігураційних хартрі-фоківських розрахунках за допомогою пакету МСНГ [24], були нараховані вже багатоконфігураційні стани аніона  $3p^{3} {}^{4}S^{\circ}$ ,  ${}^{2}D^{\circ}$  та  ${}^{2}P^{\circ}$ . Для якомога повнішого врахування міжелектронної кореляції, ці стани обчислювалися з розмороженими оболонками  $2p^6$  та  $3s^2$ . Для тонкого збалансування взаємодії електронних систем у самоузгодженому полі аніона Si<sup>-</sup> нами були послідовно використані по два ряди кореляційних орбіталей 7*ℓ* та 8*ℓ* (тут  $\ell$  – орбітальний момент електрона,  $\ell=0-4$ ) для кожного з трьох термів Si<sup>-</sup>. Тобто розклади спектроскопічних станів Si<sup>-</sup> були генеровані в окремих MCHF-розрахунках для кожного стану з використанням наближення МСНГ [24-25]. Щоб отримати кінцеві розклади для станів аніона прийнятного розміру, всі конфігурації з величинами коефіцієнтів розкладу, меншими за 0.006, 0.002 та 0.00075 – для термів  ${}^{4}S^{\circ}$ ,  ${}^{2}D^{\circ}$  та  ${}^{2}P^{\circ}$ , відповідно, - були опущені. В результаті для енергій спорідненості зв'язаних станів аніона Si<sup>-</sup> були отримані значення: -1.3967 eB для терму  ${}^{4}S^{\circ}$ , -0.538 eB для терму  ${}^{2}D^{\circ}$  та -0.0615 eB для терму <sup>2</sup>P<sup>o</sup>. Відмінність від даних [23] складає +0.008 eB, +0.011 eB та +0.033 еВ, відповідно, що є зовсім прийнятним для подальших розрахунків розсіяння e+Si<sup>-</sup>. Отримані радіальні функції аніона були розкладені по В-сплайновому базису, як це описано в [20]. При цьому розмір боксу приймався рівним  $a = 60 a_0$  (де  $a_0 - 60$ рівський радіус), у розкладі використовувалися 140 В-сплайнів порядку 8.

Розрахунки (N+1)-електронної задачі розсіяння e+Si<sup>-</sup> у внутрішній області ( $r \le a$ ) здійснювалися нами за допомогою пакету BSR [20]. Ми використовували ті ж 140 *B*сплайнів порядку 8, а *R*-матричний радіус був рівним  $a = 60 a_0$ . У парціально-хвильовому розкладі чисельно розраховувалися вклади 20 нижчих парціальних хвиль. Перерізи обчислювалися за стандартною *R*матричною схемою, з використанням для зовнішньої області пакету *FARM* [26].

### Результати і їх обговорення

Чи не найважливішими характеристиками будь-якого процесу розсіяння є відповідні інтегральні перерізи. На рис. 1 наведені ІП збудження для переходів  ${}^{4}S^{o} - {}^{2}D^{o}$ ,  ${}^{4}S^{o} - {}^{2}P^{o}$  та  ${}^{2}D^{o} - {}^{2}P^{o}$  між станами Si<sup>-</sup> в результаті зіткнення аніона з електронами. Гладкість отриманих перерізів як для збудження з основного стану  ${}^{4}S^{o}$ , так і з метастабільного стану  ${}^{2}D^{o}$  вказує, насамперед, на відсутність псевдорезонансних структур при середніх енергіях зіткнення, а, отже, й на задовільний розрахунок структури мішені. З іншого



Рис. 1. Інтегральні перерізи збудження  $e+Si^-$ для переходів  ${}^{4}S^{o} - {}^{2}D^{o}$ ,  ${}^{4}S^{o} - {}^{2}P^{o}$  та  ${}^{2}D^{o} - {}^{2}P^{o}$  між станами Si<sup>-</sup> в результаті зіткнення з електронами.

боку, відсутність припорогових резонансних структур свідчить про неможливість утворення короткоживучих компаундстанів діаніона  $Si^{2-}$  у процесі зіткнення е+Si<sup>-</sup>. Останнє може бути пов'язане як з об'єктивною відсутністю утворення діаніонів при розсіянні електронів на Si<sup>-</sup>, так і з недостатнім рівнем урахування міжелектронної кореляції, що могло би призвести до захоплення налітаючого електрона у стаціонарний чи квазістаціонарний стан Si<sup>2-</sup>.

Відзначимо також достатньо просту форму перерізів збудження. Так ІП збудження з основного стану  ${}^{4}S^{0}$  мають вигляд потужного припорогового піку, що змінюється більш-менш повільним спаданням при великих енергіях. Правда, в ІП збудження  ${}^{4}S^{o} - {}^{2}P^{o}$  проглядається певна додаткова – припороговий структура горб. що зв'язаний з шейп-резонансною поведінкою парціального  ${}^{2}P^{e}$ -перерізу. Проте необхідний для резонансу скачок фази (в ~1π рад) для  ${}^{2}P^{e}$  -хвилі відсутній. Отже питання про наявність у вказаних ІП збудження  ${}^{2}P^{e}$  резонансу форми, залишається відкритим.

Крім енергетичних залежностей ІП для розсіяння е+Si<sup>-</sup>, нами були пораховані також енергетично-кутові залежності диференціальних перерізів як для пружного розсіяння, так і для переходів  ${}^{4}S^{o} - {}^{2}D^{o}, {}^{4}S^{o} - {}^{2}P^{o}$  та  ${}^{2}D^{o} - {}^{2}P^{o}$  між станами Si<sup>-</sup>. Частина результатів обчислення цих залежностей ДП представлені на рис. 2. Зокрема, на рис. 2а наведена 3D-поверхня ДП пружного розсіяння на основному стані  ${}^{4}S^{o}$ , а на рис. 2б –



Рис. 2. Диференціальні перерізи розсіяння e+Si<sup>-</sup>: (а) перерізи пружного розсіяння електронів на Si<sup>-</sup> в основному  $3p^3 {}^4S^{\circ}$ -стані; (б) перерізи збудження для переходу  ${}^4S^{\circ} - {}^2P^{\circ}$  між станами Si<sup>-</sup>.

3D-поверхня ДП збудження  ${}^{4}S^{\circ} - {}^{2}P^{\circ}$ . Аналіз подібних поверхонь енергетично-кутових залежностей ДП являє собою самостійну і непросту область досліджень і наразі залишається поза нашим розглядом. Відзначимо, проте, складний характер отриманих поверхонь, – поряд з їх локальною "гладкістю" (за винятком ДП збудження  ${}^{2}D^{\circ} - {}^{2}P^{\circ}$ , не представленого тут), яка свідчить про достатню кількість врахованих парціальних хвиль.

Найбільш цікавою з отриманих 3Dповерхонь ДП нам видається енергетичнокутова залежність ДП для збудження  ${}^{4}S^{o} - {}^{2}P^{o}$ , рис. 26. Як видно з рисунка, у даному випадку практично відсутнє розсіяння "вперед" і "назад", і 3D-поверхня має форму "морського ската". На поверхні помітна глибока конусоподібна впадина, — область особливих точок, при значеннях кутів і енергій з якої збудження системи є на кілька порядків нижчим, ніж у сусідніх областях. Що стосується можливості утворення діаніона  $\mathrm{Si}^{2-}$ , на користь останнього може свідчити хіба що невелике плато на 3Dповерхні ДП пружного розсіяння е + Si<sup>-</sup> в основному стані в області енергій ~5-10 еВ при кутах розсіяння 50-60°, рис. 2а.

Нарешті, ми порівняли ІП збудження для переходів між трьома нижніми станами аніона та атома кремнію [3]. В загальному, процеси збудження  ${}^{4}S^{o} - {}^{2}D^{o}$ ,  ${}^{4}S^{o} - {}^{2}P^{o}$  та  ${}^{2}D^{o} - {}^{2}P^{o}$  між станами аніона Si<sup>-</sup> йдуть зі значно більшою інтенсивністю, ніж переходи  ${}^{3}P - {}^{1}D$ ,  ${}^{3}P - {}^{1}S$  та  ${}^{1}D - {}^{1}S$  між трьома нижніми станами атома кремнію при тих же енергіях налітаючого електрона.

#### Висновки

Нами представлені ІП та ДП розсіяння е+Si<sup>-</sup>. Розрахунки пружного розсіяння електронів на  $3p^{3} {}^{4}S^{\circ}, {}^{2}D^{\circ}$  і  ${}^{2}P^{\circ}$ -станах аніона Si<sup>-</sup>, а також збудження  ${}^{4}S^{\circ} - {}^{2}D^{\circ}, {}^{4}S^{\circ} - {}^{2}P^{\circ}$  і  ${}^{2}D^{\circ} - {}^{2}P^{\circ},$  здійснені в наближенні BSR [20], носять піонерський характер і виконані вперше. Відмічено, що ІП переходів під дією електронного удару між трьома зв'язаними станами аніона Si<sup>-</sup> при середніх енергіях можуть перевищувати відповідні ІП переходів між трьома нижніми станами атома кремнію. В ІП розсіяння е+Si<sup>-</sup> не вдалося виявити резонансних структур, які б вказували на можливість утворення діаніона Si<sup>2-</sup>.

### СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

- Srivastava R., McEachran R.P., Stauffer A.D. Electron excitation of the Group IV elements // Canadian Journal of Physics. - 2002. - V.80. - P. 687-696.
- Pindzola M.S., Bhatia A.K. and Temkin A. Electron-impact excitation of carbon and silicon in the distorted-wave approximation // Phys. Rev. A. – 1977. – V.15, № 1.– P. 35–42.
- Gedeon V., Gedeon S., Lazur V., Nagy E., Zatsarinny O. and Bartschat K. Electron scattering from silicon // Phys. Rev. A. – 2012. – V.85. – No 2. – P. 022711 (7pp).
- 4. Smirnov B.M. Negative ions // McGraw-Hill Inc. – 1982.
- Nelson D.E., Korteling R.G. and Stott W.R. Carbon-14: Direct detection at natural concentrations // Science. – 1977.– V. 198. – P. 507.
- Bennett C.L., Benkens R.P., Clover M.R., Gove H.E., Liebert R.B., Litherland A.E., Purser K.H., and Sondheim W.E. Radiocarbon dating using electrostatic accelerators: Negative ions provide in key // Science. – 1977. – V. 198. – P. 508.
- Seiersen Klaus. Electron scattering on positive and negative ions studied in heavyions storage rings // PhD thesis. Depart-

ment of Physics and Astronomy, University of Aarhus, Denmark. September, 2003, 119 p.

- Tanĉić A.R. and Nikolić M. Low energy elastic scattering of electron on the negative ions // Publ. Astron. Obs. Belgrade. – 2008. – No 84. – P. 65-68.
- Семенихина В.В., Иванов В.К., Лапкин К.В. Упругое рассеяние электрона на отрицательном ионе лития // ЖТФ. – 2005. – V.75. – Вып. 3. – Р. 24-29.
- Balling P., Kristensen P., Stapelfeldt H., Andersen T., and Haugen H.K. Window resonance in photodetachment of the negative silicon ion: strong interaction of the 3p continuum with the 3p shape resonance // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. – 1993. – V. 26, No 20. – P. 3531-3539.
- Amusia M.Ya., Gribakin G.F., Ivanov V.K. and Chernysheva L.V. Many-electron correlations in negative-ion photodetachment // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. – 1990. – V. 23, No 03. – P. 385-391.
- Gribakin G.F., Gribakina A.A., Gul'tsev B.V. and Ivanov V.K. Correlational autodetachment of the low-lying shape resonances in C<sup>-</sup>, Si<sup>-</sup> and Ge<sup>-</sup> photodetachment // J. Phys. B: At. Mol. Opt.

Phys. - 1992. - V. 25, No 8. - P. 1757-1772.

- Hotop H. and Lineberger W.C. Binding Energies in Atomic Negative Ions: II // J. Phys. Chem. Ref. Data. – 1985. – V. 14, Iss. 3. – P. 731–750.
- Esaulov V.A. Electron detachment from atomic negative ions // Ann. Phys. Fr. – 1986. – V.11. – No 5. – P. 493-592.
- Andersen T. Spectroscopy of Negative Ions // Phys. Scr. – 1991. – V.T34. – P. 23-35.
- Zatsarinny O., Bartschat K., Bandurina L. and Gedeon V. Electron-impact excitation of carbon // Phys. Rev. A. – 2005. – V.71. – № 4. – P. 042702 (9pp).
- Zatsarinny O., Bartschat K., Gedeon S., Gedeon V., Lazur V. Low-energy electron scattering from Ca atoms and photodetachment of Ca<sup>-</sup> // Phys. Rev. A. – 2006. – V.74. – No 5. – P. 052708 (10pp).
- 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. – № 5. – P. 052709 (10pp).
- Гедеон В., Гедеон С., Зацарінний О., Лазур В., Нодь Є. Диференціальні перерізи розсіяння електронів на атомі магнію // Науковий вісник Ужгородського

університету. Серія Фізика. – 2008. – № 23. – С. 23-35.

- Zatsarinny O. BSR: B-spline atomic Rmatrix codes // Comput. Phys. Commun. – 2006. – V. 174, No 4. – P. 273–356.
- 21. Froese Fischer Ch. Breit-Pauli lifetimes and transition probabilities for Si I // Phys. Rev. A. – 2005. – V.71. – No 4. – P. 042506 (7).
- 22. Oleg Zatsarinny and Charlotte Froese Fischer. Oscillator strengths for transitions to high-lying excited states of carbon // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 2002. V.35. № 22. P. 4669-4683.
- Scheer M., Belodeau R.C., Brodie C.A., and Haugen H. K. Systematic study of the stable states of C<sup>-</sup>, Si<sup>-</sup>, Ge<sup>-</sup>, and Sn<sup>-</sup> via infrared laser spectroscopy // Phys. Rev. A. – 1998. – V.58. – No 4. – P. 2844-2856.
- 24. Froese Fischer C. The MCHF atomicstructure package // Comput. Phys. Commun. – 1991. – V.64. – P.369–398.
- Froese Fischer C., Brage T., Jonsson O. Computational Atomic Structure. An MCHF Approach // London: Institute of Physics Publishing, Bristol, 1997. – 279 p.
- 26. Burke V.M. and Noble C.J. Farm A flexible asymptotic R-matrix package // Comput. Phys. Commun. – 1995. – V. 85, No 3. – P. 471-500.

Стаття надійшла до редакції 4.02.2012

## V.F. Gedeon

Uzhhorod National University, 88000, Uzhhorod, Voloshin Str., 54

# ELECTRON SCATTERING ON Si<sup>-</sup> ION

The *B*-spline *R*-matrix method is used to investigate the electron-impact scattering on the negative ion of silicon in the energy regions up to 100 eV. The multiconfiguration Hartree-Fock method with non-orthogonal orbitals is employed for an accurate representation of the target wave functions. The  $e + Si^-$  scattering integral cross sections are calculated for all transitions between bound  $1s^22s^22p^63s^23p^3 {}^4S^0$ ,  ${}^2D^0$ , and  ${}^2P^0$  states of negative ion. The 3D-suface of energy-angle dependence of correspond differential cross sections are presented.

Key words: negative ion of silicon, electron scattering, *R*-matrix, *B*-spline, the integral and differential cross sections.

# В.Ф. Гедеон

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

# РАССЕЯНИЕ ЭЛЕКТРОНОВ НА ИОНЕ Si-

В рамках метода *R*-матрицы с *B*-сплайнами исследованы процессы рассеяния электронов на отрицательном ионе кремния в области энергий до 100 эВ. Для точного представления волновых функций мишени использовался многоконфигурационный метод Хартри-Фока с неортогональными орбиталями. Рассчитаны интегральные сечения рассеяния е + Si<sup>-</sup> для всех переходов между связанными состояниями  $1s^22s^22p^63s^23p^3$   $^4S^{\rm o}$ ,  $^2D^{\rm o}$  и  $^2P^{\rm o}$  отрицательного иона. Представлены 3D-поверхности энергетически-угловых зависимостей соответствующих дифференциальных сечений рассеяния.

Ключевые слова: отрицательный ион кремния, рассеяние электронов, *R*-матрица, *B*-сплайны, интегральные и дифференциальные сечения.