

УДК 539.1.08, 539.198

Л.О. Бандурина<sup>1</sup>, С.В. Гедеон<sup>2</sup><sup>1</sup>Інститут електронної фізики НАН України, вул. Університетська, 21, Ужгород, 88000<sup>2</sup>Ужгородський національний університет, вул. Волошина, 54, Ужгород, 88000

e-mail: gedsv@narod.ru

## ДИФЕРЕНЦІАЛЬНІ ПЕРЕРІЗИ РОЗСІЯННЯ ЕЛЕКТРОНІВ НА АТОМІ БОРУ

Методом  $R$ -матриці з  $B$ -сплайнами (BSR) здійснено розрахунки диференціальних перерізів розсіяння електронів на атомі бору в основному стані  $1s^2 2s^2 2p^2 P$  для енергій від порогу реакції до  $\sim 30$  еВ. Для генерування і точного представлення хвильових функцій мішені був використаний багатоконфігураційний метод Хартрі-Фока з неортогональними орбіталями. Розклад сильного зв'язку включав 28 станів атома бору: 8 фізичних і 20 псевдостанів. Представлено диференціальні 3D-перерізи пружного розсіяння, а також збудження найважливіших переходів з основного стану бору.

**Ключові слова:** атом бору, розсіяння електронів, метод  $R$ -матриці з  $B$ -сплайнами, диференціальні 3D-перерізи розсіяння.

### Вступ

При реалізації керованого термоядерного синтезу у токамаках поверхня стінок і внутрішніх елементів камер установки піддається сильному опроміненню частинками плазми. Покриття цих поверхонь матеріалами з малим зарядом ядра  $Z$ , такими як берилій, бор і вуглець, виявилось ефективним способом отримання дуже чистої плазми, необхідної при керованих термоядерних реакціях [1, 2]. Зрозуміло, що при проведенні експериментів з термоядерного синтезу контроль за ступенем ерозії вказаних легуючих матеріалів, а також моделювання переносу плазми вимагає повної і точної інформації щодо розсіяння електронів на названих легких елементах.

Для берилію і вуглецю систематичні розрахунки для значної кількості швидкостей збудження та іонізації вже виконані раніше (див. напр., [3-6]). Хоча електронна оболонка атома бору  $1s^2 2s^2 2p^2 P^o$ , що містить всього п'ять електронів, належить до достатньо простих атомних структур, експериментальні перерізи збудження його станів електронним ударом не визначені. Експеримент Кученєва і Смірнова [7] з вимірювання перерізів переходів  $2s^2 2p^2 P^o - 2s^2 3s^2 S$  та  $2s^2 2p^2 P^o - 2s 2p^2^2 D$  в атомі В при зіткненні з електронами є доволі неодноточним. З теоретичних даних, які від-

повідали б сучасним критеріям щодо точності та систематичності отримуваних результатів, варто згадати розрахунки [8-10], проведені у різних наближеннях методу  $R$ -матриці з псевдостанами (RMPS). Аналіз результатів, отриманих у [8-10], був проведений у недавньому дослідженні нашої наукової групи [11]. У ньому метод  $R$ -матриці з  $B$ -сплайнами (BSR) [12] був застосований до вивчення збудження електронним ударом атома бору в діапазоні енергій від порогу і до 60 еВ. Для генерування і точного представлення хвильових функцій мішені використовувався багатоконфігураційний метод Хартрі-Фока з неортогональними орбіталями. Розклад сильного зв'язку включав 28 станів атома бору: 8 фізичних станів атома-мішені, розміщених нижче першого порогу іонізації, і 20 псевдостанів. Для найважливіших переходів з основного стану в нижні збуджені стани у роботі [11] були представлені інтегральні перерізи (ІІ) розсіяння.

Метою даної роботи є подальше BSR-дослідження процесів розсіяння  $e + B$ , розпочате в [11]. Нижче ми наводимо набори кутових залежностей диференціальних перерізів (ДП) розсіяння електронів на атомі бору в основному стані  $2s^2 2p^2 P^o$ . Представлені також 3D-поверхні енергетично-кутових залежностей ДП пружного розсіяння та переходів у п'ять

нижніх збуджених станів з основного стану бору. Незалежні розрахунки ДП розсіювання  $e + B$  здійснені нами з використанням високоточних хвильових функцій мішені, описаних в [11], зі значно поліпшеним у порівнянні з попередніми роботами [8, 9] описом структури атома В.

### Методи розрахунку

Оскільки дана робота спирається на розрахунки структури мішені та процесу розсіювання  $e + B$ , детально описані у праці [11], наведемо тут тільки їх основні моменти.

*А. Розрахунки структури.* Будова атома бору була розрахована методом  $R$ -матриці з  $B$ -сплайнами за допомогою програмного пакету BSR [12]. Останній неодноразово використовувався нами для досліджень електрон-атомного розсіювання, починаючи від перших застосувань до атомів С [5] і Са [13-14] та закінчуючи недавніми розрахунками атома F [15]. Ключовою особливістю цього підходу є істотне поліпшення опису мішені шляхом використання компактних розкладів взаємодії конфігурацій, що включають неортогональні набори залежних від терму одноелектронних орбіталей. Особливістю пакета BSR є можливість застосування неортогональних орбіталей для представлення як хвильових функцій зв'язаних станів, так і хвильової функції неперервного спектру  $(N + 1)$ -електронної задачі розсіювання. Це дозволяє незалежно оптимізувати атомні хвильові функції для різних станів і отримати точніший опис мішені, ніж ті, що були використані в більш ранніх розрахунках зіткнення  $e + B$ . При цьому побудова багатоелектронного базису функцій конфігураційних станів (т. з. CSF-базису [16, 17]), використовуваного для розкладу хвильової функції нерелятивістського рівняння Шредінгера для атома, а також відповідного  $B$ -сплайнового базису є найскладнішим етапом реалізації даного методу.

Стани мішені атома бору в даних розрахунках були отримані шляхом поєднання багатоконфігураційного методу Хартрі-Фока (МCHF) [16-17] з  $B$ -сплайновим обмеженням у „боксі” методом сильного

зв'язку [18]. Зазначимо, що кор-валентна кореляція була врахована *ab initio*, шляхом включення в розгляд конфігурацій зі збудженими станами мішені. Остаточні багатоканальні розклади для мішені атома бору мали структуру:

$$\Phi(2s^2nl, LS) = A \sum_{i, L', S'} \{ \phi(2s^2, L'S') P(n; l_i) \}^{LS} + \\ + A \sum_{i, L', S'} \{ \phi(2s2p, L'S') P(n; l_i) \}^{LS} + \\ + \sum_i \chi(2sn_i l_i (L'S') n_i' l_i') \quad , \quad (1)$$

де  $A$  – оператор антисиметризації. Перша сума відповідає за далекодійну кореляцію, в той час як друга сума містить члени короткодійної кореляції. Для стислості позначень, будемо вважати, що коефіцієнти розкладу включені в невідомі функції  $P(nl)$  для зовнішніх валентних електронів. Ці  $P(nl)$ -функції були розкладені за  $B$ -сплайновим базисом, і відповідні рівняння були розв'язані за умови, що хвильові функції перетворюються в нуль на границі внутрішньої  $R$ -матричної області. Така схема дає набір ортогональних одноелектронних орбіталей для кожного зв'язаного стану, що належить до певного терму. Але орбіталі з різних наборів не є ортогональними одна до одної, тобто залежні від терму ефекти безпосередньо включені в хвильові функції мішені. Кількість фізичних станів, які можна генерувати в цьому методі, залежить від  $r$  – розміру  $R$ -матричного „боксу”. Вибираючи  $r = 60 a_0$  (де  $a_0$  – радіус Бора), ми отримали хороший опис для всіх включених у розгляд нижчих станів атома В, аж до  $2s7d^2 2S$ . Поряд з фізичними станами, описана вище схема використовує також набір псевдостанів. Вводячи у розкладі сильного зв'язку (1) достатню кількість каналів, можна врахувати і валентну кореляцію.

Даний розклад сильного зв'язку включав вісім зв'язаних станів атома В, отриманих із конфігурацій  $1s^2 2s^2 2p$ ,  $1s^2 2s 2p^2$ ,  $1s^2 2s^2 3l$  ( $l = 0, 1, 2$ ), і двадцять псевдостанів. Перелік фізичних станів мішені, включених у розрахунки розсіювання, наведено у таблиці 1. Їхні енергії збудження  $E_{ex}$  порівняні з такими ж енергіями ре-

комендованими NIST [19] та даними RMPS-обчислень [10]. Загальне узгодження між експериментом і теорією є добрим.

Таблиця 1

**Енергії збудження  $E_{ex}$  фізичних станів бору, включених у даний розклад сильного зв'язку (в eV)**

| № п/п | Стан              | $E_{ex}$<br>NIST,<br>[19] | $E_{ex}$<br>BSR28 | $\Delta E_{ex}$<br>BSR28 | $\Delta E_{ex}$<br>RMPS<br>[10] |
|-------|-------------------|---------------------------|-------------------|--------------------------|---------------------------------|
| 1     | $2s^2 2p \ ^2P^o$ | 0.000                     | 0.000             | 0.000                    | 0.000                           |
| 2     | $2s 2p^2 \ ^4P$   | 3.580                     | 3.545             | 0.035                    | 0.029                           |
| 3     | $2s^2 3s \ ^2S$   | 4.964                     | 4.986             | -0.022                   | -0.029                          |
| 4     | $2s 2p^2 \ ^2D$   | 5.934                     | 5.936             | -0.002                   | -0.066                          |
| 5     | $2s^2 3p \ ^2P^o$ | 6.027                     | 6.014             | 0.013                    | 0.014                           |
| 6     | $2s^2 3d \ ^2D$   | 6.790                     | 6.722             | 0.068                    | 0.002                           |
| 7     | $2s 2p^2 \ ^2S$   | 7.881                     | 7.868             | 0.013                    |                                 |
| 9     | $2s 2p^2 \ ^2P$   | 8.992                     | 9.045             | -0.053                   |                                 |

*Б. Розрахунки розсіювання.* Розрахунки розсіювання були здійснені нами в наближенні  $R$ -матриці з  $B$ -сплайнами [12]. Тут  $B$ -сплайновий базис використовується не тільки для побудови хвильової функції  $N$ -електронної мішені, але і для представлення континуальних функцій у внутрішній області. Основною перевагою  $B$ -сплайнів є те, що вони ефективно утворюють повний базис і, отже, ніякі додаткові корекції  $R$ -матриці в даному випадку не потрібні. Амплітуди хвильових функцій на межі „боксу”, які необхідні для оцінки  $R$ -матриці, задаються коефіцієнтом останнього сплайна, який є єдиним ненульовим сплайном на границі. Інша особливість пакету програм BSR стосується згаданої неортогональності одноелектронних радіальних функцій мішені. При цьому і орбіталі неперервного спектру не повинні бути ортогональними з орбіталами зв'язаних станів. Це дозволяє незалежно оптимізувати атомні хвильові функції для різних станів, і отримати в результаті опис мішені, точніший за використані в попередніх розрахунках розсіювання [8-10].

$R$ -матричний радіус ( $r = 60 a_0$ ) і кількість  $B$ -сплайнів ( $k = 86$ ) у розрахунках розсіювання були обрані такими ж, як і при розрахунку зв'язаних станів. Радіус  $r$  є

достатньо великим, щоб всі зв'язані орбіталі ефективно занулялися на межі „боксу”. Чисельно розраховано парціальні хвилі до  $L = 15$ . Для спін-дозволених переходів була використана т. з. „top-up”-процедура – для оцінки внесків у переріз від не врахованих явно вищих значень  $L$ . Розрахунок для зовнішньої області проводився за допомогою гнучкого асимптотичного  $R$ -матричного пакету FARM [20].

### Результати і обговорення

За відсутності в літературі результатів інших авторів з розрахунку ДП розсіювання  $e + B$ , дані наближення BSR28 були порівняні в робочому порядку з нашими ж результатами, отриманими для атома бору в наближенні MCHF-BSR, детально описаному в праці [21]. В підході MCHF-BSR ми врахували в розкладі сильного зв'язку ті ж 28 станів, що і в наближенні BSR28. Отримані методом MCHF-BSR28 результати практично дуже близькі до даних BSR28, що свідчить про стійкість вибраних нами для розрахунку розсіювання  $e + B$  обчислювальних процедур. Це позбавляє нас необхідності окремо виділяти результати наближення MCHF-BSR28, і в даній роботі наводяться тільки дані BSR28.

На рис. 1 представлена 3D-поверхня ДП пружного розсіювання електронів на атомі бору в основному стані  $2s^2 2p \ ^2P^o$ . На рис. 2 відображені характерні зрізи цієї поверхні в площині кутів залежностей при фіксованих значеннях енергії зіткнення. З рис. 1 та 2 видно, що, починаючи з енергії зіткнення  $\sim 0.5$  eV, на кутівих залежностях ДП просліджується чітко сформована впадина, яка з ростом енергії стає чи не основним структурним елементом вказаних перерізів. Цей мінімум на кутівих залежностях ДП має тенденцію переміщуватися з ростом енергії в область все менших кутів: від  $\sim 135^\circ$  при  $E = 0.5$  eV і до  $\sim 110^\circ$  при  $E = 10$  eV. З порівняння рис. 1. та 2 видно, що енергетично-кутові 3D-залежності ДП пружного розсіювання  $e + B$  більш зручні для якісного аналізу поведінки ДП з ростом енергії чи кута розсіювання, у той час як кутіві залежності ДП при фіксованих енергіях дають можливість точно-

го кількісного порівняння різноманітних ДП.

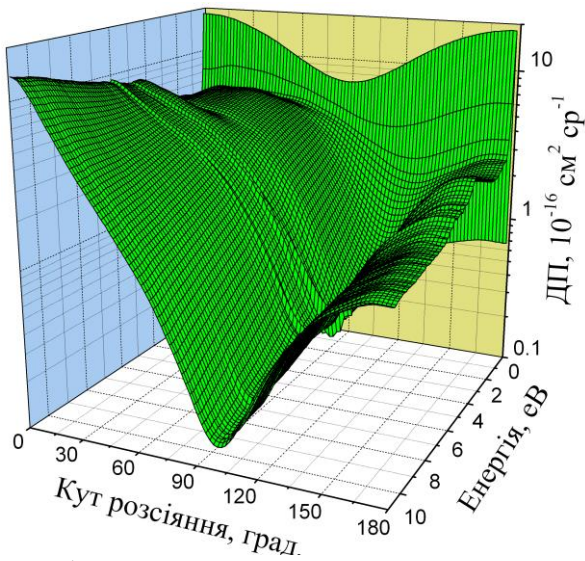


Рис. 1. Поверхня енергетично-кутових залежностей ДП пружного розсіяння електронів на атомі бору в основному стані  $2s^2 2p^2 P^0$ .

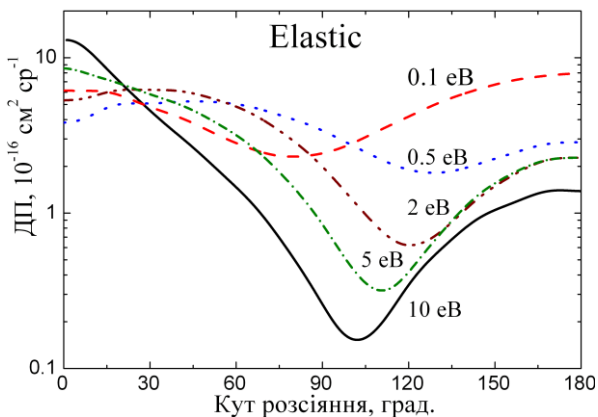


Рис. 2. Кутові залежності ДП пружного розсіяння електронів на атомі бору в основному стані  $2s^2 2p^2 P^0$  при енергіях зіткнення 0.1, 0.5, 2, 5 та 10 еВ.

3D-поверхня диференціальних перерізів, як це видно з рис. 1, являє собою складну структуру і містить практично всю інформацію про пружне розсіяння електронів на борі в основному стані. Питання за малим: створенні ефективних методів для опрацювання інформації, прихованої в структурах 3D-поверхні ДП. Детально аналізуючи „хребти” і „впадини” вказаної 3D-поверхні ДП пружного розсіяння, ми отримуємо ключ для визначення наскільки важливими є супутні до пружного розсіяння елементарні процеси, що утворюють різні канали процесу розсіяння  $e + B$ .

На рис. 3-4 представлені, відповідно, 3D-поверхня енергетично-кутових залежностей ДП збудження електронним ударом переходу  $2s^2 2p^2 P^0 - 2s 2p^2 4P$  в атомі бору та криві кутових залежностей ДП збудження цього ж переходу при фіксованих енергіях зіткнення. Фактично лінії на рис. 4 являють собою зрізи розглядуваної 3D-поверхні в площині кутових залежностей при цікавій для нас енергії зіткнення.

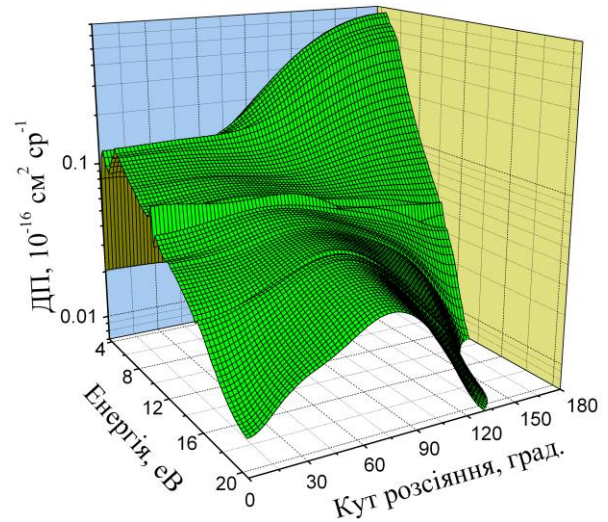


Рис. 3. Поверхня енергетично-кутових залежностей ДП збудження електронним ударом переходу  $2s^2 2p^2 P^0 - 2s 2p^2 4P$  в атомі бору.

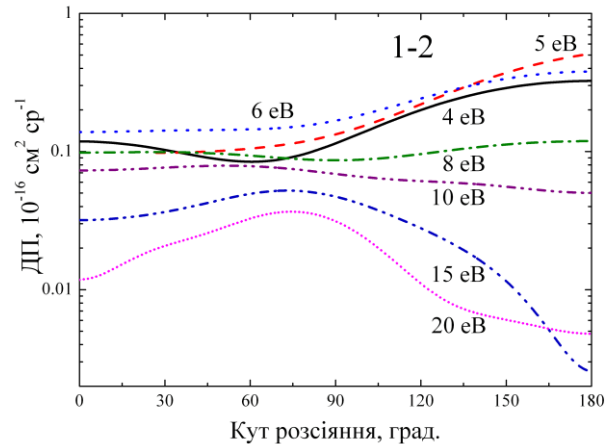


Рис. 4. Кутові залежності ДП збудження електронним ударом переходу  $2s^2 2p^2 P^0 - 2s 2p^2 4P$  в атомі бору при енергіях зіткнення 4, 5, 8, 10, 15 та 20 еВ.

На рис. 5-6, 7-8, 9-10 та 11-12 попарно представлені такі ж залежності для збудження з основного стану бору станів  $2s^2 3s^2 S$ ,  $2s 2p^2 2D$ ,  $2s^2 3p^2 P^0$ ,  $2s^2 3d^2 D$ , відповідно.

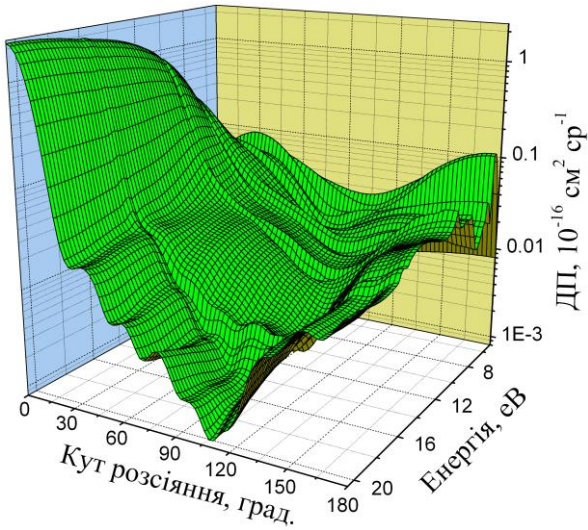


Рис. 5. Те, що і на рис. 3 для переходу  $2s^2 2p^2 P^o - 2s^2 3s^2 S$ .

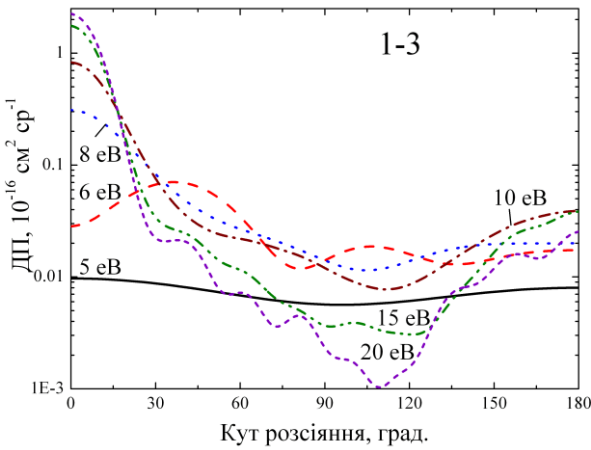


Рис. 6. Те, що і на рис. 4 для переходу  $2s^2 2p^2 P^o - 2s^2 3s^2 S$  при енергіях зіткнення 5, 6, 8, 10, 15 та 20 еВ.

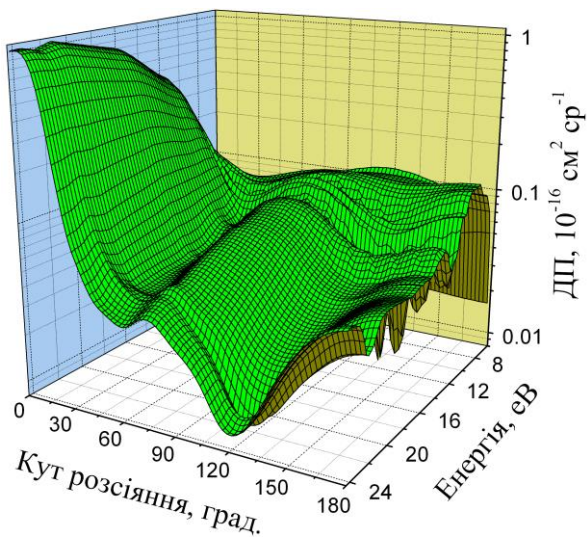


Рис. 7. Те, що і на рис. 3 для переходу  $2s^2 2p^2 P^o - 2s^2 3p^2 D$ .

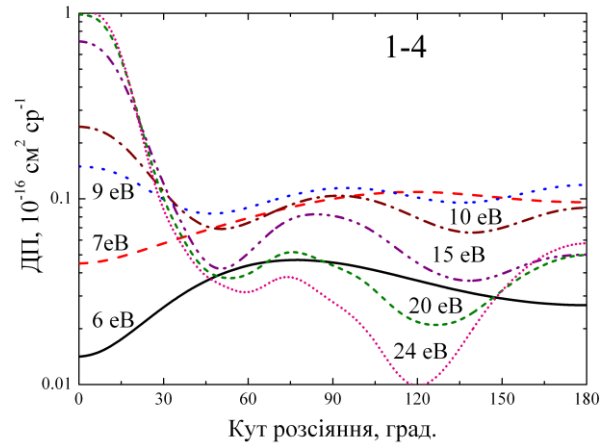


Рис. 8. Те, що і на рис. 4 для переходу  $2s^2 2p^2 P^o - 2s^2 3p^2 D$  при енергіях зіткнення 6, 7, 9, 10, 15, 20 та 24 еВ.

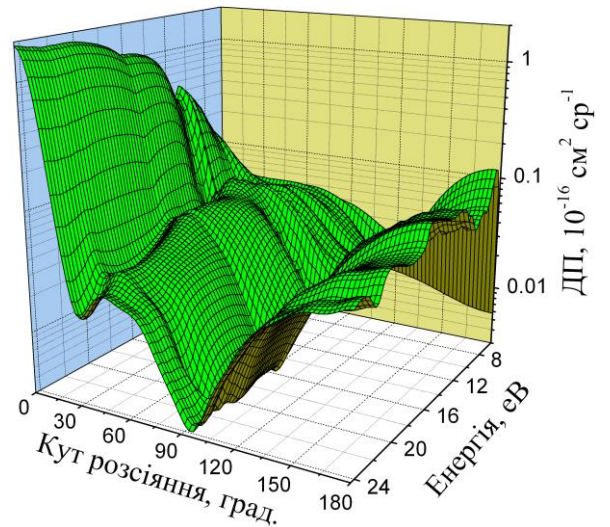


Рис. 9. Те, що і на рис. 3 для переходу  $2s^2 2p^2 P^o - 2s^2 3p^2 P^o$ .

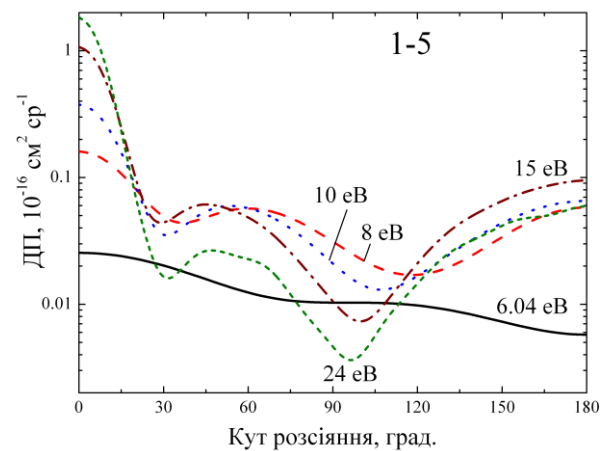


Рис. 10. Те, що і на рис. 4 для переходу  $2s^2 2p^2 P^o - 2s^2 3p^2 P^o$  при енергіях зіткнення 6.04, 8, 10, 15 та 24 еВ.

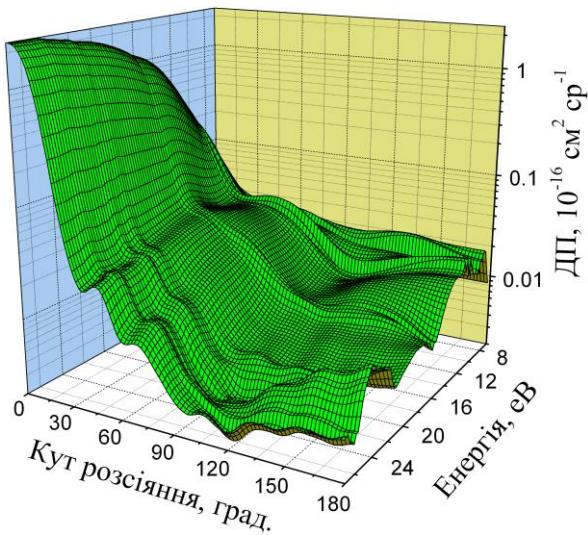


Рис. 11. Те, що і на рис. 3 для переходу  $2s^2 2p^2 P^o - 2s^2 3d^2 D$ .

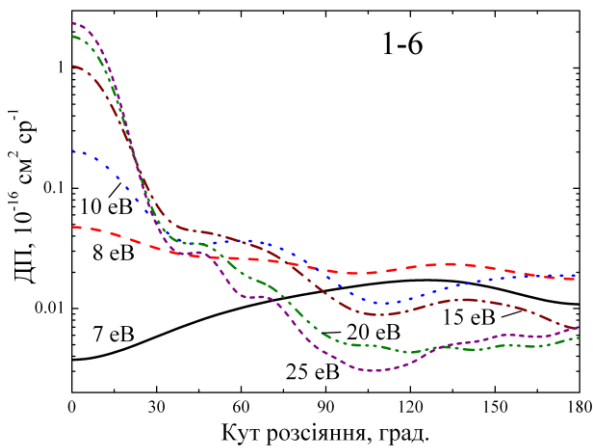


Рис. 12. Те, що і на рис. 4 для переходу  $2s^2 2p^2 P^o - 2s^2 3d^2 D$  при енергіях зіткнення 7, 8, 10, 15, 20 та 25 еВ.

Гладкий характер 3D-поверхонь ДП, відсутність на них збрижень, а також псевдорезонансних структур, свідчить про достатню кількість врахованих при обчисленні ДП парціальних хвиль, як це має місце для пружного розсіяння – в області енергій налітаючого електрона до 10 еВ (рис. 1). І навпаки: збрижена 3D-поверхня ДП, усіяна дрібними складками (див. рис. 11) для переходу  $2s^2 2p^2 P^o - 2s^2 3d^2 D$  при енергіях вище  $\sim 20$  еВ, вказує на необхідність врахування більшого числа парціальних хвиль у розрахунках розсіяння. Основна проблема аналізу 3D-поверхонь полягає у відсутності адекватних математичних методів і розрахункових методик „обробки” цифрової інформації з візуально „зрозумілих” зображень.

Для порівняння відносної величини ДП при фіксованій енергії (10 еВ) і різних кутах розсіяння на рис. 13 представлені кутові залежності ДП для елементарних процесів пружного розсіяння та збудження з основного стану п'яти нижніх станів  $2p^2 \ ^4P$ ,  $3s^2 \ ^2S$ ,  $2p^2 \ ^2D$ ,  $3p^2 \ ^2P^o$ ,  $3d^2 \ ^2D$  атома бору при зіткненнях  $e + B$ .

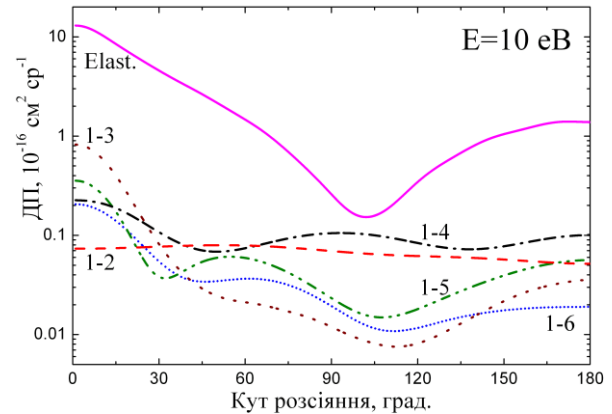


Рис. 13. Кутові залежності ДП пружного розсіяння та збудження електронним ударом п'яти нижніх збуджених станів атома бору при енергії 10 еВ.

### Висновки

Представлено теоретичні ДП для низькоенергетичних зіткнень електронів з атомом бору. Розрахунки здійснені у наближенні сильного зв'язку методом  $R$ -матриці з  $B$ -сплайнами на неортогональними орбіталями, що дозволило отримати більш точні описи структури мішені, ніж ті, що використовувалися в попередніх розрахунках розсіяння  $e + B$ . У роботі вперше представлені 3D-поверхні ДП для переходів з основного стану у п'ять нижніх збуджених станів атома бору при його зіткненні з електронами. Найбільш дивною видається біляпорогова поведінка 3D-поверхні ДП для переходу  $2s^2 2p^2 P^o - 2s^2 2p^2 \ ^4P$ , зі „зворотною” логікою кутової залежності ДП – з максимальними значеннями цих перерізів при розсіянні назад, а не вперед, як для інших переходів. Відзначено значний евристичний потенціал аналізу 3D-поверхонь ДП з точки зору отримання повної інформації про процес зіткнення.

*Автори висловлюють подяку проф. Зацарінному О.І, проф. Бартишату та доц. Гедеону В.Ф. за допомогу в реалізації досліджень, які сприяли появі цієї статті.*

## СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1. Winter J. Plasma deposition of boron-containing hard carbon films a-C/B:H from organic boron compounds / J. Winter, L. Grobusch, T. Rose, J. von Seggern, H. Esser, P. Wienhold // Plasma Sources Sci. Technol. – 1992. – V. 1, Iss. 2. – P. 82-86.
2. Davis J.W. Impurity release from low-Z materials under light particle bombardment / J.W. Davis, A.A. Haasz // J. Nucl. Mater. – 1997. – V. 241-243. – P. 37-51.
3. Colgan J. Electron-impact ionization of all ionization stages of beryllium / J. Colgan, S.D. Loch, M.S. Pindzola, C.P. Ballance, and D.C. Griffin // Phys. Rev. A. – 2003. – V. 68, Iss. 3. – P. 032712 (9).
4. Ballance C.P. Electron-impact excitation of beryllium and its ions / C.P. Ballance, D.C. Griffin, J. Colgan, S.D. Loch, M.S. Pindzola // Phys. Rev. A. – 2003. – V. 68, Iss. 6. – P. 062705(11).
5. Zatsarinny O. Electron-impact excitation of carbon / O. Zatsarinny, K. Bartschat, L. Bandurina, V. Gedeon // Phys. Rev. A. – 2005. – V. 71, Iss. 4. – P. 042702 (9).
6. Wang Y. B-spline R-matrix-with-pseudostates calculations for electron-impact excitation and ionization of carbon / Y. Wang, O. Zatsarinny, K. Bartschat // Phys. Rev. A. – 2013. – V. 87, Iss. 2. – P. 012704 (8).
7. Kuchenev A. Electron-impact excitation cross-sections of boron / A. Kuchenev, Yu. Smirnov // Opt. Spectr. – 1981. – V. 51. – P. 116-118.
8. Marchalant P. Electron-impact excitation of boron / P. Marchalant, K. Bartschat, K. Berrington, S. Nakazaki // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. – 1997. – V. 30, No 8. – P. L279-L284.
9. Marchalant P.J. R-matrix with the pseudostates calculations for electron-impact excitation and ionization of boron / P.J. Marchalant, K. Bartschat // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. – 1997. – V. 30, No 19. – P. 4373-4382.
10. Ballance C.P. Electron-impact excitation of neutral boron using the R-matrix with the pseudostates method / C.P. Ballance, D.C. Griffin, K.A. Berrington, N.R. Badnell // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. – 2007. – V. 40, No 6. – P. 1131-1139.
11. Bandurina L.O. Electron scattering by the boron atom / L.O. Bandurina, V.F. Gedeon // Uzhhorod University Scientific Herald. Series Physics. – 2013. – Iss. 33. – P. 100-105.
12. Zatsarinny O. BSR: B-spline atomic R-matrix codes / O. Zatsarinny // Comput. Phys. Commun. – 2006. – V. 174, No 4. – P. 273-356.
13. Zatsarinny O. Low-energy electron scattering from Ca atoms and photodetachment of Ca<sup>-</sup> / O. Zatsarinny, K. Bartschat, S. Gedeon, V. Gedeon, V. Lazur // Phys. Rev. A. – 2006. – V. 74, Iss. 5. – P. 052708 (10).
14. Zatsarinny O. Electron-impact excitation of calcium / O. Zatsarinny, K. Bartschat, L. Bandurina, S. Gedeon // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. – 2007. – V. 40, No 5. – P. 4023-4031.
15. Gedeon V. 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. – V. 89, Iss. 5. – P. 052713 (9).
16. Froese Fischer C. The MCHF atomic-structure package / C. Froese Fischer // Comput. Phys. Commun. – 1991. – V. 64, No 3. – P. 369-398.
17. Froese Fischer C. Computational Atomic Structure. An MCHF Approach / C. Froese Fischer, T. Brage, O. Jonsson // London: Institute of Physics Publishing, Bristol, 1997. – 279 p.
18. Zatsarinny O. Oscillator strengths for transitions to high-lying excited states of carbon / O. Zatsarinny, C. Froese Fischer // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. – 2002. – V. 35, No 22. – P. 4669-4684.

19. NIST Atomic Spectra Database, <http://physics.nist.gov>) Ralchenko Yu., Kramida A.E., Reader J., and NIST ASD Team (2011). NIST Atomic Spectra Database (ver. 4.1.0), [Online].
20. Burke V.M. *Farm – A flexible asymptotic R-matrix package* / V.M. Burke, C.J. Noble // *Comput. Phys. Commun.* – 1995.– V. 85, No 3.– P. 471-500.
21. Гедеон С.В. Розрахунки перерізів розсіяння електронів на атомі Са / С.В. Гедеон, В.Ю. Лазур // *Наук. вісн. Ужгородського університету, сер. “Фізика”*. – 2009. – Вип. 25. – С. 130-140.

Стаття надійшла до редакції 16.01.2015.

L.O. Bandurina<sup>1</sup>, S.V. Gedeon<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Institute of Electron Physics NAS Ukraine, Universytetska Str., 21, Uzhgorod, 88000

<sup>2</sup>Uzhhorod National University, Voloshina Str., 54, Uzhhorod, 88000

## THE DIFFERENTIAL CROSS SECTIONS OF ELECTRON SCATTERING ON NEUTRAL BORON

The calculation of differential cross sections of electron scattering on neutral boron in ground  $1s^2 2s^2 2p^2 P$  state is carried out with the *B*-spline *R*-matrix method (BSR) for energy from reaction threshold to  $\sim 30$  eV. The multiconfiguration Hartree-Fock method with nonorthogonal orbitals was used to generate and represent precisely the target wavefunctions. The close-coupling expansion includes 28 bound states of neutral boron: 8 physical states and 20 pseudostates. The differential 3D cross sections of elastic scattering, and the excitation of important transitions from ground state of boron is presented.

**Key words:** the boron atom, electron scattering, the *B*-spline *R*-matrix method, differential 3D-cross section of scattering.

Л.О. Бандурина<sup>1</sup>, С.В. Гедеон<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Институт электронной физики НАН Украины, ул. Университетская, 21, Ужгород, 88000

<sup>2</sup>Ужгородский национальный университет, ул. Волошина, 54, Ужгород, 88000

## ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫЕ СЕЧЕНИЯ РАССЕЯНИЯ ЭЛЕКТРОНОВ НА АТОМЕ БОРА

Методом *R*-матрицы с *B*-сплайнами (BSR) осуществлены расчеты дифференциальных сечений рассеяния электронов на атоме бора в основном состоянии  $1s^2 2s^2 2p^2 P$  для энергий от порога реакции до  $\sim 30$  эВ. Для генерирования и точного представления волновых функций мишени был использован многоконфигурационный метод Хартри-Фока с неортогональными орбиталями. Разложение сильной связи включало 28 состояний атома бора: 8 физических и 20 псевдосостояний. Представлены дифференциальные 3D-сечения упругого рассеяния, а также возбуждения важнейших переходов из основного состояния бора.

**Ключевые слова:** атом бора, рассеяние электронов, метод *R*-матрицы с *B*-сплайнами, дифференциальные 3D-сечения рассеяния.