

Є.А. НОДЬ, В.Ф. ГЕДЕОН, С.В. ГЕДЕОН, В.Ю. ЛАЗУР

Ужгородський національний університет

(Вул. Волошина, 54, Ужгород 88000; e-mail: viktor.gedeon@uzhnu.edu.ua)

УДК 539.186.2

**ЗБУДЖЕННЯ РЕЗОНАНСНОГО ПЕРЕХОДУ  
 $5^1S - 5^1P^o$  АТОМА Sr ЕЛЕКТРОННИМ УДАРОМ**

Викладено основні аспекти нової версії методу  $R$ -матриці з  $B$ -сплайнами (BSR), що ґрунтується на використанні неортогональних орбіталей. Наближення BSR використане для розрахунків резонансної структури інтегральних перерізів переходу  $5^1S \rightarrow 5^1P^o$  при розсіянні електронів на атомі стронцію в області енергій до 10 еВ. Для точного представлення хвильових функцій мішені використовувався багатоконфігураційний метод Хартрі–Фока з неортогональними орбіталями. Розклад у випадку сильного зв'язку включав 31 зв'язаний стан атома стронцію – від основного і аж до стану  $5s5f^1F^o$ . Отримано добре узгодження розрахованих перерізів з наявними експериментальними даними і дана вичерпна теоретична інтерпретація останніх. Обговорено структуру резонансної особливості в перерізах розсіяння  $e$ -Sr в околі енергії 4 еВ.

*Ключові слова:* атом стронцію, електрон-атомні зіткнення, резонансний перехід, метод  $R$ -матриці з  $B$ -сплайнами, перерізи розсіяння, резонанси.

**1. Вступ**

Потреби практики, які пов'язані з розробкою нових типів лазерів на електронних переходах в атомах, цілеспрямованим пошуком засобів діагностики плазми в пристроях керованого термоядерного синтезу, розвитком плазмохімічних технологій і т.д., вимагають нових методів і базованих на них засобів для розрахунку атомних структур та характеристик розсіяння електронів на складних атомах. Реалізована в наших роботах [1–8] BSR-версія методу  $R$ -матриці, яка ґрунтується на використанні неортогональних орбіталей та  $B$ -сплайнів як базисних функцій, є на сьогодні одним з найдієвіших інструментів для вивчення ефектів атомної структури в процесах низькоенергетичного розсіяння електронів на багатоелектронних атомах. Впродовж останнього десятиріччя на основі пропонованої версії методу  $R$ -матриці нашою дослідницькою групою проведені систематичні розрахунки хара-

ктеристик елементарних процесів (пружного розсіяння, збудження та іонізації), які відбуваються при зіткненні повільних електронів з атомами Ca [1, 2], Mg [3], Sr [4], Si [5], F [6], Al [7] та B [8]. Для всіх названих атомних систем результати розрахунків виявилися добре узгодженими з наявними експериментальними даними. За такими показниками, як точність і детальність розрахунків, збіжність, повнота урахування обмінних, кореляційних та резонансних ефектів, метод  $R$ -матриці з  $B$ -сплайнами [1–9] має значні переваги перед традиційними методами [10] теорії електрон-атомних (ЕА) зіткнень. Він особливо зручний при розрахунках розсіяння електронів складними атомами, коли необхідно використовувати багатоконфігураційні хвильові функції мішені. Все це дозволяє систематично одержувати коректні результати в області малих та проміжних енергій зіткнення.

Дана робота є логічним продовженням досліджень процесів  $e$ -Sr-розсіяння, розпочатих авторами у роботі [4]. На сьогодні процеси взаємодії повільних електронів з атомами стронцію, на від-

© Є.А. НОДЬ, В.Ф. ГЕДЕОН, С.В. ГЕДЕОН,  
В.Ю. ЛАЗУР, 2018

міну від інших лужноземельних елементів – Mg, Ca і Ba, залишаються маловивченими як експериментально, так і теоретично. Така ситуація є дивним прикладом пасивності теорії за умов нестачі експериментальних даних, котра зовсім не носить принципового характеру, а скоріше пов'язана з труднощами формування моноенергетичних електронних та атомних пучків. При малих енергіях процеси розсіяння електронів на атомах стронцію вперше були досліджені у роботах [11, 12] оптичними методами. В результаті були отримані експериментальні дані з перерізів збудження великої сукупності спектральних ліній атома Sr та їх енергетичних залежностей у доволі широкому діапазоні енергій зіткнення. На деяких кривих спостерігалися слабо виражені структурні особливості. Згодом Чен та ін. [13] виміряли функції збудження (ФЗ) атомної та іонних резонансних ліній, а також енергетичні залежності їх ступеня поляризації. На ФЗ синглетного переходу  $5^1S_0 \rightarrow 5^1P_1^o$  була виявлена характерна особливість в околі енергії 4 еВ, яка корелює за енергією з особливістю в енергетичній залежності їх ступеня поляризації. Згадана структура на ФЗ резонансної лінії в області 4 еВ пояснювалася в [13] каскадними переходами з  $6^1S_0$ -рівня (поріг збудження 3,79 еВ) та включенням нових каналів збудження.

У роботі ужгородської групи експериментаторів проф. О.Б. Шпеніка [14] методом електронної спектроскопії була досліджена структура енергетичних спектрів електронів, розсіяних атомами стронцію. Зокрема, в енергетичній залежності струму пружно розсіяних (на кут  $90^\circ$ ) електронів були виявлені резонансні особливості, зумовлені утворенням короткоживучих від'ємних іонів  $Sr^-$ . У згаданій роботі [14] обговорювалася також резонансна структура ФЗ спектральної лінії  $\lambda = 460,7$  нм, що відповідає переходу  $5^1S_0 \rightarrow 5^1P_1^o$ . При цьому, на ФЗ вказаного резонансного переходу, як і в роботі [13], була виявлена помітна особливість в околі енергії 4 еВ. Згідно з [14], ця особливість зумовлена не тільки каскадами з верхнього  $6^1S_0$ -рівня, а й резонансами, пов'язаними з утворенням автовідривних станів від'ємного іона  $Sr^-$ , родоначальниками яких є групи розташованих вище рівнів, у тому числі  $6^1S_0$ ,  $6^3P_{012}$  та  $6^1P_1$ . За оцінкою авторів роботи [14], відхилення від рівномірного зростання ФЗ резонансного пере-

ходу проявляється вже при енергії  $3,66 \pm 0,05$  еВ, що майже збігається з порогом збудження  $6^3S_1$ -рівня (3,60 еВ). Очевидно, що для з'ясування природи особливості в околі 4 еВ на ФЗ переходу  $5^1S_0 \rightarrow 5^1P_1^o$ , необхідно вдатися до більш детального теоретичного аналізу структурних особливостей перерізів елементарних збуджень, які супроводжують низькоенергетичне розсіяння електронів на атомі стронцію.

У даній роботі методом  $R$ -матриці з  $B$ -сплайнами (див. [1–9], а також розділ 2) проведені розрахунки інтегральних перерізів електронного збудження резонансного переходу  $5^1S \rightarrow 5^1P^o$  в атомі Sr у діапазоні енергій до 10 еВ. Хвильові функції атомних станів Sr обчислювалися за допомогою багатоконфігураційного методу Хартрі–Фока (multiconfiguration Hartree–Fock method – MCHF) [15, 16]. При цьому в розкладі сильного зв'язку задачі ЕА-розсіяння враховувалися основний та 30 нижчих збуджених станів атома стронцію (наближення BSR31).

Дана робота організована таким чином. У розділі 2 висвітлено, перш за все, ключові аспекти BSR-версії методу  $R$ -матриці, яка ґрунтується на використанні неортогональних орбіталей та  $B$ -сплайнів як базисних функцій. Після короткого опису електронної структури атома-мішені Sr (п. 2.2) ми підсумовуємо у наступному п. 2.3 найбільш важливі особливості обчислювальної схеми BSR-розрахунків процесу  $e$ -Sr-зіткнення. В розділі 3 наведено результати наших обчислень інтегрального та парціальних перерізів збудження  $5^1P^o$ -рівня атома Sr електронним ударом. У цьому ж розділі проведено фізичну інтерпретацію резонансних особливостей у перерізах  $5^1P^o$ -збудження (в околі енергії 4 еВ), виявлених у експериментах [13, 14].

## 2. Методи розрахунку

### 2.1. Загальна схема наближення BSR

Нижче коротко зупинимося на ключових аспектах запропонованої в роботах [1–9] BSR-версії методу  $R$ -матриці, яка ґрунтується на використанні неортогональних орбіталей та  $B$ -сплайнів як базисних функцій. Як і в стандартному методі  $R$ -матриці [10], повна хвильова функція  $(N + 1)$ -електронної системи “атом+налітаючий електрон”

зображається у вигляді розкладу:

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

Тут  $A$  – оператор антисиметризації;  $\bar{\Phi}_i^{\Gamma}$  – хвильова функція каналу, що утворюється шляхом векторного зв'язку хвильової функції  $N$ -електронної мішені  $\Phi_i(X) \equiv \Phi_i(x_1, \dots, x_N)$  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;  $X \equiv (x_1, \dots, x_N)$ ,  $\Gamma \equiv (\gamma L S M_L M_S \pi)$ , а  $x_i \equiv (\mathbf{r}_i, \sigma_i)$  позначає сукупність просторової  $\mathbf{r}_i$  та спінової  $\sigma_i$  координат  $i$ -го електрона. У формулі (1)  $\chi_j^{\Gamma}(X, x_{N+1})$  – набір квадратично інтегровних антисиметричних кореляційних функцій, які враховують ефекти віртуального захоплення електрона в одну із незаповнених підоболонкок мішені  $i$ , разом з  $\bar{\Phi}_i^{\Gamma}$ , вважаються відомими. Індекс  $\alpha$  характеризує початкові умови і зазвичай позначає вхідний канал розсіяння. Задача полягає в знаходженні радіальних функцій розсіяного електрона  $F_{i\alpha}^{\Gamma}$  та коефіцієнтів розкладу  $c_j$ . У випадку складних атомів хвильові функції  $\Phi_i(X)$  будуються у вигляді багатоконфігураційного розкладу

$$\Phi_i(x_1, \dots, x_N) = \sum_j c_{ij} \varphi_j(x_1, \dots, x_N), \quad (2)$$

де  $\varphi_j$  – заданий набір антисиметризованих одноконфігураційних функцій. Коефіцієнти  $c_{ij}$  у розкладі (2) можна отримати при діагоналізації  $N$ -електронного гамільтоніана  $H_N$  мішені:

$$\langle \Phi_i | H_N | \Phi_j \rangle = E_i(Z, N) \delta_{ij}. \quad (3)$$

Базисні функції  $\varphi_j$  та  $\chi_j^{\Gamma}$  у розкладах (1), (2) будуються із одноелектронних атомних орбіталей  $\varphi_{\alpha_i}$ , які у наближенні центрального поля мають вигляд

$$\varphi_{\alpha_i}(x) = \frac{1}{r} P_{n_i l_i}(r) Y_{l_i m_i}(\hat{r}) \chi(m_S | \sigma), \quad x \equiv (\mathbf{r}, \sigma), \quad (4)$$

де  $\alpha_i$  – скорочене позначення набору квантових чисел  $n_i, l_i, m_i$  та  $m_S$ . У стандартному підході Бьорка [10] 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

$$\int_0^{\infty} P_{n_j l_j}(r) F_{i\alpha}^{\Gamma}(r) dr = 0 \quad \text{при } l_j = l_i. \quad (5)$$

Очевидно, що ця умова є чисто математичною, а не фізичною вимогою і не впливає із загальних квантово-механічних принципів, оскільки радіальні орбіталі  $P_{n_j l_j}$  та  $F_{i\alpha}^{\Gamma}$  є власними функціями різних гамільтоніанів.

Задача низькоенергетичного розсіяння електрона на  $N$ -електронному атомі зводиться до розв'язування рівняння Шредингера:

$$(H_{N+1} - E) \Psi_{\alpha}^{\Gamma}(X, x_{N+1}) = 0, \quad H_{N+1} = \sum_{i=1}^{N+1} \left( -\frac{1}{2} \nabla_i^2 - \frac{Z}{r_i} \right) + \sum_{i>j=1}^{N+1} \frac{1}{r_{ij}} \quad (6)$$

з відповідними граничними умовами. Тут  $E$  і  $H_{N+1}$  – повна енергія та гамільтоніан  $(N+1)$ -електронної системи “атом + налітаючий електрон”,  $Z$  – заряд ядра. Гамільтоніан  $H_{N+1}$  (6) діагональний по відношенню до повного орбітального моменту  $L$ , повного спіну  $S$ , їх проекцій  $M_L, M_S$  на задану вісь та парності  $\pi$ . Функція  $\Psi_{\alpha}^{\Gamma}(X, x_{N+1})$ , яку зазвичай називають “хвильовою функцією зіткнення”, являє собою повністю антисиметризовану хвильову функцію  $(N+1)$ -електронної системи.

Підставляючи розклад (1) у рівняння (6), домножуючи його почергово на функції  $\bar{\Phi}_i^{\Gamma}$  і  $\chi_j^{\Gamma}$  та використовуючи умови ортогональності цих функцій, одержимо після інтегрування за всіма змінними, крім  $r_{N+1}$ , систему інтегро-диференціальних рівнянь сильного зв'язку (СЗ) для функцій  $F_i \equiv F_{i\alpha}^{\Gamma}$ :

$$\left( \frac{d^2}{dr^2} - \frac{l_i(l_i+1)}{r^2} + \frac{2Z}{r} + k_i^2 \right) F_i(r) = 2 \sum_j (V_{ij} + W_{ij} + X_{ij}) F_j(r), \quad (7)$$

де  $k_i^2 = 2[E - E_i(Z, N)]$ , а  $V_{ij}, W_{ij}, X_{ij}$  – локальний прямиий, нелокальний обмінний та нелокальний кореляційний потенціали відповідно. Для розсіяння електронів на складних атомах явний вигляд цих потенціалів генерується автоматично програмою BSR [9] залежно від типу вхідних даних.

Застосуємо до розв'язання системи рівнянь СЗ (7) BSR-версію методу  $R$ -матриці, яка ґрунтується на використанні неортогональних орбіталей

та  $B$ -сплайнів як базисних функцій. Такий підхід дозволяє описати в рамках єдиного формалізму різні типи реакцій, такі, як наприклад, пружне розсіяння, збудження та іонізація атома електронним ударом. Головна ідея  $R$ -матричного методу полягає в розбитті конфігураційного простору 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  $r \geq a$ .

Внаслідок обмежень, що накладаються на хвильову функцію зіткнення  $\Psi_\alpha^\Gamma(X, x_{N+1})$  умовами ортогональності  $\langle P_{n_j l_j} | F_i \rangle = 0$ , налітаючий електрон не може бути віртуально захоплений в одну з незаповнених підоболонки мішені. Скінченний набір квадратично інтегрованих кореляційних функцій  $\chi_j^\Gamma(X, x_{N+1})$ , включених у другу суму розкладу (1), дозволяє частково урахувати ефекти, пов’язані з умовами ортогональності функцій  $P_{n_j l_j}$ ,  $F_i$  та обмеженням першої суми в розкладі (1) скінченим числом доданків. Однак це може приводити до появи нефізичної псевдорезонансної структури у перерізах розсіяння та до значного збільшення числа інтегро-диференціальних рівнянь, які підлягають розв’язанню [10].

Очевидно: для урахування можливості віртуального захоплення електрона в незаповнені підоболонки мішені необхідно відмовитися від вимоги ортогональності орбіталей розсіяного електрона  $F_i$  до зв’язаних орбіталей мішені  $P_{n_j l_j}$ . Реалізована в наших роботах [1–8] BSR-версія методу  $R$ -матриці вигідно вирізняється від відомих на даний час методів теорії розсіяння 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.

Як і в стандартному методі  $R$ -матриці [10], повну хвильову функцію  $(N+1)$ -електронної системи у внутрішній області подамо при заданій енергії  $E$  у вигляді розкладу

$$\Psi_E^\Gamma = \sum_k A_{Ek}^\Gamma \Psi_k^\Gamma \quad (8)$$

за незалежним від енергії дискретним базисним набором  $\Psi_k^\Gamma$ :

$$\begin{aligned} \Psi_k^\Gamma(X, x_{N+1}) &= \\ &= A \sum_{i,j} \bar{\Phi}_i^\Gamma(X; \hat{\mathbf{r}}_{N+1}, \sigma_{N+1}) \frac{u_j(r_{N+1})}{r_{N+1}} c_{ijk}^\Gamma + \\ &+ \sum_i \chi_i^\Gamma(X, x_{N+1}) d_{ik}^\Gamma, \end{aligned} \quad (9)$$

де  $\bar{\Phi}_i^\Gamma$  та  $\chi_i^\Gamma$  визначаються так само, як і в формулі (1). Функції  $F_{i\alpha}^\Gamma$ , що описують радіальний рух розсіяного електрона в  $i$ -му каналі, ми представили в розкладі (9) у вигляді лінійної комбінації скінченного числа базисних функцій  $u_j$ , які задовольняють граничні умови:  $u_j = 0$ ,  $(a/u_j) du_j/dr|_{r=a} = b$ , де  $b$  – довільна дійсна стала. Для таких базисних функцій гамільтоніан (6) 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  $L_{N+1}$  [10]. Формальний розв’язок (1) рівняння Шредінгера (6) набуває при цьому вигляду

$$\begin{aligned} |\Psi\rangle &= 1/2 \sum_{kj} |\Psi_k^\Gamma\rangle \langle \Psi_k^\Gamma | \bar{\Phi}_j^\Gamma \rangle (E_k - E)^{-1} \times \\ &\times (d/dr_{N+1} - b_j/r_{N+1}) \langle \bar{\Phi}_j^\Gamma | \Psi \rangle. \end{aligned} \quad (10)$$

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

$$F_i^\Gamma(a) = \sum_{j=1}^n R_{ij}^\Gamma(E) \left( a \frac{dF_j^\Gamma}{dr_{N+1}} - b_j F_j^\Gamma \right)_{r_{N+1}=a}, \quad (11)$$

де ми ввели  $R$ -матрицю з елементами

$$R_{ij}^\Gamma(E) = \frac{1}{2a} \sum_k \frac{w_{ik}^\Gamma(a) w_{jk}^\Gamma(a)}{E_k^\Gamma - E}, \quad (12)$$

приведені радіальні функції  $F_i^\Gamma$  і поверхневі амплітуди  $w_{ik}^\Gamma$ . Діагоналізуючи матрицю  $\langle \Psi_k^\Gamma | H_{N+1} + L_{N+1} | \Psi_k^\Gamma \rangle_{\text{int}}$  для кожного набору квантових чисел  $\Gamma$ , можна визначити енергії  $E_k^\Gamma$  і коефіцієнти  $c_{ijk}^\Gamma$ ,  $d_{ik}^\Gamma$  у розкладі (9), тобто хвильові функції  $\Psi_k^\Gamma$  для відповідних базисних станів. Однак це треба зробити лише один раз, щоб визначити  $R$ -матрицю у всьому діапазоні енергій зіткнення.

Як зазначалося вище, включення у вихідний розклад (9) додаткових кореляційних функцій  $\chi_i^\Gamma$

веде у більшості випадків до появи псевдорезонансної структури в перерізах розсіяння та додаткових інтегро-диференціальних рівнянь, які впливають з розкладу (9) і необхідні для реалістичних розрахунків складних атомів.

Вільною від цих утруднень є реалізована в наших роботах [1–8] BSR-версія  $R$ -матричного методу, яка ґрунтується на використанні неортогональних орбіталей та  $B$ -сплайнів як базисних функцій  $u_j(r)$ . Такий вибір  $u_j(r)$  забезпечує швидку збіжність  $R$ -матричного розкладу без уведення в діагональні  $R$ -матричні елементи (12) так званих поправок Баттла (див. [10]). Базисні сплайни володіють чудовими 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  $B$ -сплайни – фінитні функції, які відмінні від нуля лише на своїх інтервалах-носіях.

Наступним кроком є визначення  $K$ -матриці,  $S$ -матриці та фазових зсувів. Оскільки у зовнішній області  $r > a$  усі обмінні та кореляційні потенціали практично дорівнюють нулю, для радіальних функцій  $F_i(r)$  у цій області отримуємо доволі просту систему зв'язаних інтегро-диференціальних рівнянь, які з достатньою точністю розв'язуються чисельно за допомогою сучасних комп'ютерів з одержанням однозначних результатів. Отримані таким чином розв'язки зшиваються при  $r = a$  з розв'язками у внутрішній області  $r < a$ . Після цього легко визначити  $K$ -матрицю із асимптотичного співвідношення

$$F_{i\alpha} \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} k_i^{-1/2} (\delta_{i\alpha} \sin \theta_i + K_{i\alpha} \cos \theta_i), \quad (13)$$

де  $\theta_i$  – асимптотична фаза регулярної кулонівської функції (див., наприклад, [10]), а другий індекс  $\alpha$  вказує номер каналу падаючої хвилі. Матрицю розсіяння  $S_{i\alpha}$  і матрицю переходу  $T_{i\alpha}$  з розмірностями  $n \times n$  можна визначити за допомогою відомих матричних співвідношень  $\mathbf{S} = \mathbf{1} + \mathbf{T} = (\mathbf{1} + i\mathbf{K})/(\mathbf{1} - i\mathbf{K})$ . Ці матриці в подальшому використовуються для розрахунку перерізів розсіяння та всіх інших спостережуваних величин.

Найбільш важливі з обчислювальної точки зору властивості базисних сплайнів  $B_i$  з компактними носіями описано, наприклад, у роботі [9]. В ній

детально розглянуто сплайн-алгоритми розв'язування диференціальних та інтегро-диференціальних рівнянь задачі розсіяння і задачі на зв'язані стани. Тут варто наголосити, що ці алгоритми мають дві принципові переваги над алгоритмами, що ґрунтуються на скінченно-різницевої апроксимації. По-перше, для числових розрахунків особливо важливі локальні властивості сплайн-алгоритмів, які забезпечуються фінитними властивостями базисних сплайнів з компактними носіями. По-друге, завдяки властивостям фінитності та повноти скінченної системи  $B$ -сплайнів інтегро-диференціальні рівняння після їх дискретизації у внутрішній  $R$ -матричній області  $r < a$  зводяться до системи матрично-векторних алгебраїчних рівнянь скінченного рангу з розрідженими, а саме стрічковими матрицями, що суттєво спрощує чисельний аналіз таких систем.

У наших роботах [1–8] описано також загальні підходи до проблеми урахування кореляції електронів, зокрема метод МСНФ з  $B$ -сплайнами, в основі якого лежить зображення радіальних орбіталей  $P_{nl}(r)$  у вигляді скінченного розкладу за повним базисним набором  $B$ -сплайнів  $\{B_i\}_{i=1}^{n_s}$ . Багатоконфігураційний характер розкладу повної хвильової функції  $\Phi_i(X)$   $N$ -електронної системи (2) дає змогу врахувати значну частину кореляційних ефектів.

Квантово-механічний розрахунок у рамках МСНФ-методу складається з двох етапів: побудови багатоелектронного базису функцій конфігураційних станів (ФКС) та розв'язування багатоконфігураційних рівнянь Хартрі–Фока, з яких визначаються радіальні хвильові функції  $P_{nl}(r)$ , що входять до складу слетерівських детермінантів. Успіх будь-якого практичного розрахунку атомних характеристик сильно залежить від вибору радіальних орбіталей  $P_{nl}(r)$  та конфігурацій, включених у розклад хвильової функції мішені за ФКС-базисом. На відміну від стандартного підходу [10], у даній версії  $R$ -матричного методу в ролі одноелектронних функцій використовуються неортогональні зв'язані орбіталі, які оптимізуються в незалежних МСНФ-розрахунках для кожного окремого терму. Використання таких орбіталей має вирішальне значення для адекватного опису складної резонансної структури перерізів розсіяння електронів на багатоелектронних атомах.

## 2.2. Розрахунок структури атома Sr

Розглянемо тепер особливості застосування методу МСНФ з  $B$ -сплайнами до розрахунків енергетичної структури атома Sr. Різні наближення цього методу відрізняються числом і вибором базисних конфігурацій, врахованих у розкладі станів і псевдостанів  $\Phi_i(X) \equiv \Phi_i(x_1, \dots, x_N)$  мішені. У наших розрахунках такий розклад включав основний та 30 нижчих збуджених спектроскопічних станів атома Sr аж до стану  $5s5f\ ^1F^o$  включно. Всі ці стани є енергетично дозволеними (відповідають так званім відкритим каналам) при розглядуваних у даній праці енергіях зіткнення. Отримані при цьому хвильові функції зв'язаних атомних станів використовуються при визначенні характеристик  $e$ -Sr-розсіяння і, отже, повинні містити достатньо компактні конфігураційні розклади.

Стронцій з його конфігурацією основного стану  $[1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6] 5s^2\ ^1S$  та однократно збудженими станами  $4p^6 5snl\ ^{3,1}L$  багато в чому подібний до гелію, тобто може при певних умовах розглядатися в рамках моделі двох електронів понад Kr-подібним  $[1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6]$ -кором, отримуваним при двократній іонізації атома Sr. Для спрощення позначень замкнуті оболонки іона  $Sr^{2+}$  в подальшому розгляді будуть опускатися. Для основного стану та для низькорозташованих збуджених станів Sr важливими є як валентна, так і кор-валентна кореляції. З огляду на це, ми включили в МСНФ-розклад хвильові функції мішені електронні конфігурації зі збудженим кором.

Розрахунок станів мішені включає такі кроки. Процедура розпочинається з генерування у хартрі-фоківському наближенні орбіталей кора  $Sr^{2+}$ . В результаті обчислень із “замороженим” кором отримуються валентні  $5s$ -,  $5p$ - та  $4d$ -орбіталі для  $Sr^+$ . Використання в розкладі МСНФ найбільш сильно зв'язаних каналів дозволяє врахувати значну частину валентної кореляції, у той час як кор-валентна кореляція враховується шляхом включення в МСНФ-розклад додаткових електронних конфігурацій  $4p^5 \bar{n} \bar{l} \bar{l}'$ :

$$\phi(4p^6 nl) = a_{nl} \phi_{HF}(4p^6 nl) + \sum_{\bar{n} \bar{l} \bar{l}'} b_{\bar{n} \bar{l} \bar{l}'} \chi(4p^5 \bar{n} \bar{l} \bar{l}'), \quad (14)$$

де риска над символом позначає кореляційну, а не фізичну орбіталь. Іншими словами, хартрі-фоківські хвильові функції  $\phi_{HF}(4p^6 nl)$  доповнюються

тут кореляційними функціями  $\chi$  з  $4p$ -збудженим кором. Описані структурні розрахунки виконані нами за допомогою програми МСНФ (multi-configuration Hartree-Fock program) [15, 16]. Оскільки середній радіус  $\bar{n}l$ -орбіталей лежить між середнім радіусом кора і радіусами валентних орбіталей, цей метод дозволяє ефективно врахувати кор-валентну кореляцію за допомогою відносно малої кількості електронних конфігурацій. Зазначимо також, що кореляційні  $\bar{n}l$ -орбіталі були оптимізовані в незалежних розрахунках для кожного стану окремо. При генеруванні методом МСНФ низькорозташованих станів атома Sr кор-валентно корельовані стани іона  $Sr^+$  використовуються як вихідні. Відповідний багатоканальний розклад станів атома-мішені має таку структуру:

$$\begin{aligned} \Phi(4p^6 5snl, LS) = & \mathcal{A} \sum \left\{ \phi(4p^6 5s) P(nl) \right\}^{LS} + \\ & + \mathcal{A} \sum \left\{ \phi(4p^6 5p) P(nl) \right\}^{LS} + \\ & + \mathcal{A} \sum \left\{ \phi(4p^6 4d) P(nl) \right\}^{LS}, \end{aligned} \quad (15)$$

де  $\mathcal{A}$  позначає оператор антисиметризації. Крім того, для спрощення позначень ми вважаємо, що коефіцієнти розкладу в формулі (15) включені в невідомі радіальні функції  $P(nl)$  для зовнішнього валентного електрона. Ці функції були розкладені за  $B$ -сплайновим базисом, а відповідні рівняння були розв'язані за умови, що хвильові функції перетворюються в нуль на межі внутрішньої  $R$ -матричної області. Описана схема дає набір ортогональних одноелектронних орбіталей для кожного зв'язаного стану, але орбіталі з різних наборів не є ортогональними між собою. Ця процедура в літературі часто згадується як використання “не-ортогональних орбіталей”, і саме в цьому розумінні буде вживатися нижче. Нарешті, ми використовуємо один і той самий багатоканальний розклад (14) як для станів  $5snl$ , 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  $a_0 = 0,529 \cdot 10^{-10}$  м позначає борівський радіус), отримуємо адекватний опис всіх низькорозташованих станів Sr аж до  $5s5f\ ^1F^o$ .

В дані розрахунки ми включили 119  $B$ -сплайнів порядку 8. Оскільки згадані вище розрахунки зв'язаних атомних станів методом МСНФ з  $B$ -сплайна-

ми генерують різні набори неортогональних орбіталей, їх подальше використання дещо ускладнюється. З іншого боку, наші конфігураційні розклади для атомних станів мішені Sr містять від 50 до 270 конфігурацій і, таким чином, можуть використовуватися у розрахунках зіткнення з досить скромними обчислювальними ресурсами.

У табл. 1 розраховані нами енергії збудження 31 спектроскопічних станів атома Sr порівнюються з

**Таблиця 1. Енергії збудження (в еВ) для 31 нижніх спектроскопічних станів мішені Sr. Теоретичні значення  $E_{\text{теор}}$  порівняні з експериментальними даними  $E_{\text{експ}}$  Мура [18]:  $\Delta E = E_{\text{експ}} - E_{\text{теор}}$ . Енергії триплетів усереднені по терму**

№	Стан	$E_{\text{експ}}$ [18]	$E_{\text{теор}}$	$\Delta E$
1	$5s^2 \ ^1S$	0,0	0,0	0,0
2	$5s5p \ ^3P^o$	1,823	1,847	-0,024
3	$5s4d \ ^3D$	2,264	2,272	-0,008
4	$5s4d \ ^1D$	2,499	2,480	0,019
5	$5s5p \ ^1P^o$	2,691	2,673	0,018
6	$5s6s \ ^3S$	3,601	3,633	-0,032
7	$5s6s \ ^1S$	3,793	3,714	0,079
8	$4d5p \ ^3F^o$	4,173	4,111	0,062
9	$4d5p \ ^1D^o$	4,195	4,196	-0,001
10	$5s6p \ ^3P^o$	4,207	4,222	-0,015
11	$5s6p \ ^1P^o$	4,228	4,241	-0,013
12	$5s5d \ ^1D$	4,306	4,311	-0,005
13	$5s5d \ ^3D$	4,344	4,361	-0,017
14	$5p^2 \ ^3P$	4,406	4,408	-0,002
15	$4d5p \ ^3D^o$	4,519	4,568	-0,049
16	$5p^2 \ ^1D$	4,583	4,499	0,084
17	$5p^2 \ ^1S$	4,608	4,590	0,018
18	$4d5p \ ^3P^o$	4,628	4,767	-0,139
19	$5s7s \ ^3S$	4,641	4,579	0,062
20	$4d5p \ ^1F^o$	4,713	4,944	-0,231
21	$5s7s \ ^1S$	4,767	4,954	-0,187
22	$5s4f \ ^3F^o$	4,805	4,734	0,071
23	$5s7p \ ^1P^o$	4,825	4,810	0,015
24	$5s7p \ ^3P^o$	4,891	4,885	0,006
25	$5s4f \ ^1F^o$	4,903	4,754	0,149
26	$5s6d \ ^3D$	4,922	4,885	0,037
27	$5s6d \ ^1D$	4,927	4,859	0,068
28	$5s8s \ ^3S$	5,054	5,008	0,046
29	$5s8s \ ^1S$	5,091	5,216	-0,125
30	$5s5f \ ^3F^o$	5,129	5,049	0,080
31	$5s5f \ ^1F^o$	5,148	5,140	0,008

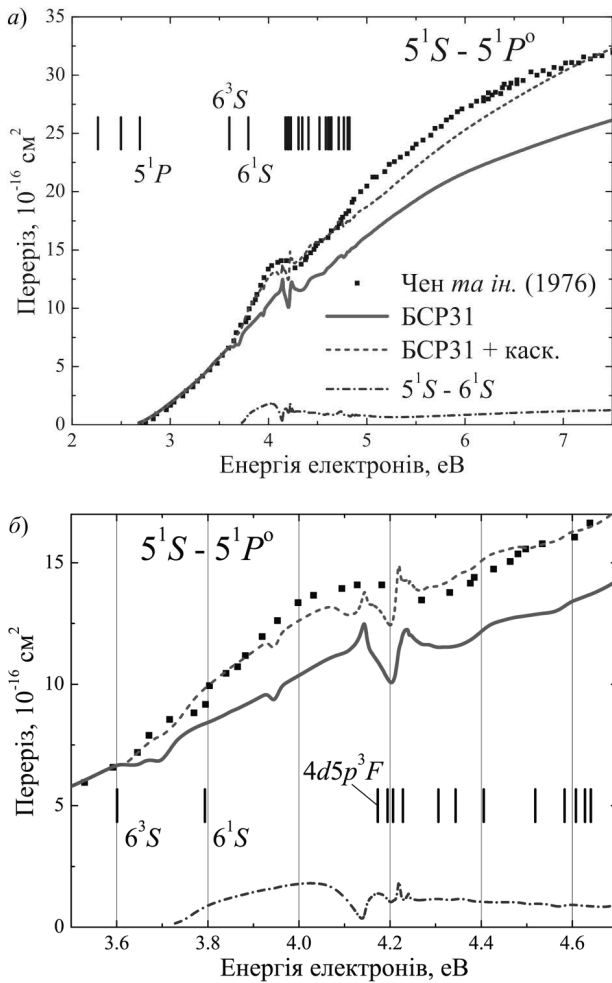
експериментальними даними [18]. Узгодження між експериментом і теорією в цілому є досить добрим з відхиленнями в значеннях енергій, меншими від 0,1–0,2 еВ (а подекуди й 0,01 еВ). Виняток становить лише  $4d5p \ ^1F^o$ -стан, для якого слід більш ретельно враховувати ефекти електронних кореляцій. Точність виконаних нами розрахунків структури атома Sr (енергії рівнів, хвильові функції) є істотно вищою у порівнянні з тими, що використовувалися в попередніх теоретичних дослідженнях розсіяння  $e$ -Sr (див., наприклад, [19–23]). Значимо також, що аналогічні розрахунки зв'язаних атомних станів Ca [1] та Mg [3] були виконані нами не в наближенні MCHF [15, 16], а методом сильного зв'язку з базисними сплайнами, локалізованими в  $R$ -матричному боксі [17]. Проте для атома Sr (заряд ядра  $z = 38$ ) такі розрахунки, як і врахування спіно-орбітальної взаємодії, наразі виходять за межі наших обчислювальних можливостей.

### 2.3. Розрахунки зіткнення $e$ -Sr

Розрахунки процесів розсіяння електронів на атомі Sr здійснювалися нами в наближенні  $R$ -матриці з  $B$ -сплайнами з використанням програмного коду BSR [9]. Задача  $e$ -Sr-розсіяння у внутрішній  $R$ -матричній області ( $r \leq a$ ) розв'язувалася аналогічно (9) шляхом розкладу хвильової функції зіткнення за дискретним базисом:

$$\begin{aligned} \Psi_k^\Gamma(x_1, \dots, x_{N+1}) = & A \sum_{i,j} \bar{\Phi}_i^\Gamma(x_1, \dots, x_N; \hat{\mathbf{r}}_{N+1}, \sigma_{N+1}) \times \\ & \times r_{N+1}^{-1} B_j(r_{N+1}) c_{ijk}^\Gamma, \end{aligned} \quad (16)$$

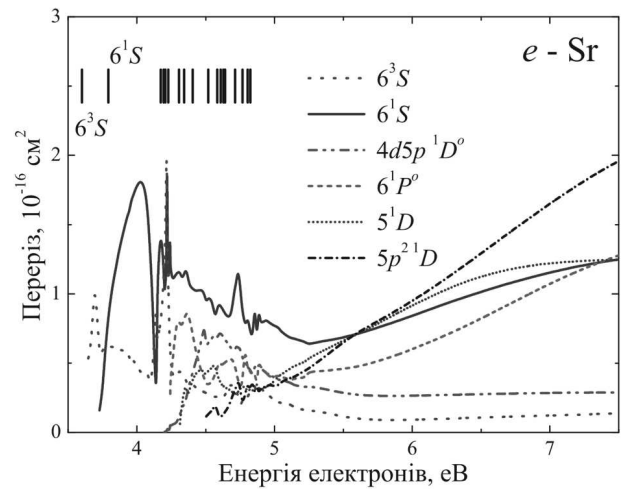
де  $\bar{\Phi}_i^\Gamma$  – каналні хвильові функції. Тут ми розклали радіальні хвильові функції континууму  $F_{i\alpha}^\Gamma$  за скінченною системою базисних сплайнів  $B_j(r)$ , заданих на  $R$ -матричному інтервалі  $0 \leq r \leq a$ . Амплітуди хвильових функцій на межі  $r = a$ , які потрібні для оцінки  $R$ -матриці, задаються коефіцієнтом при останньому  $B$ -сплайні, котрий якраз і є єдиним базисним сплайном з ненульовим значенням на межі внутрішньої області. Кількість  $B$ -сплайнів і  $R$ -матричний радіус у розрахунках розсіяння беруться такими ж, як і при розрахунках зв'язаних станів мішені. Чисельно розраховувалися парціально-хвильові внески аж до  $L = 50$ ; для



**Рис. 1.** Енергетичні залежності ІІІ переходу  $5^1S \rightarrow 5^1P^o$  при розсіянні  $e$ -Sr: *a* – результати BSR31-розрахунку (з урахуванням і без урахування каскадного внеску) порівнюються з експериментом Чена та ін. [13]. Наведено також ІІІ переходу  $5^1S \rightarrow 6^1S$  та експериментальні пороги збуджень нижчих рівнів атома Sr [18]; *b* – збільшений фрагмент рис. 1, *a* в околі енергії  $\sim 4$  eV

оцінки внеску від більш високих значень  $L$  використовувалася (за необхідності) процедура “підсумовування залишків”, що ґрунтується на апроксимації геометричними рядами [9]. Перерізи обчислювалися за стандартною  $R$ -матричною схемою, з використанням для зовнішньої області пакета FARM [24].

Для спрощення обчислень та найбільш послідовного врахування резонансної структури ми використовували в наших розрахунках  $e$ -Sr-розсіяння



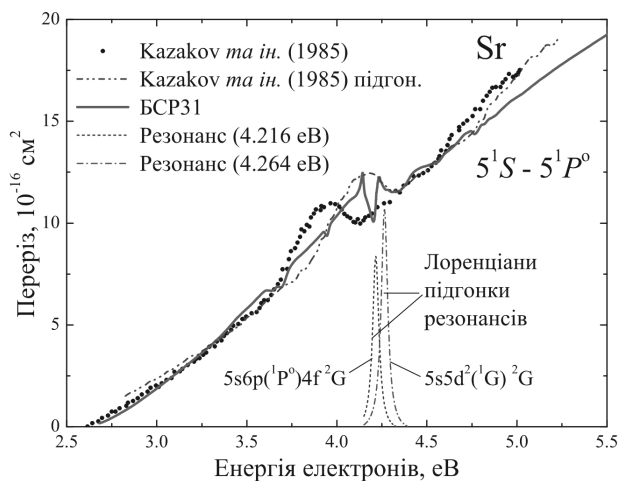
**Рис. 2.** Енергетичні залежності ІІІ збудження з основного стану  $5^1S$  рівнів  $6^3S$ ,  $6^1S$ ,  $4d5p^1D^o$ ,  $6^1P^o$ ,  $5^1D$  та  $5p^2^1D$  при розсіянні  $e$ -Sr. Розрахунки виконані в наближенні BSR31. Показано також пороги збуджень нижчих рівнів атома Sr [18]

не експериментальні енергії збудження мішені [18], а їх значення, розраховані за допомогою програмного коду MCHF [15, 16] з використанням  $B$ -сплайнів, див. табл. 1.

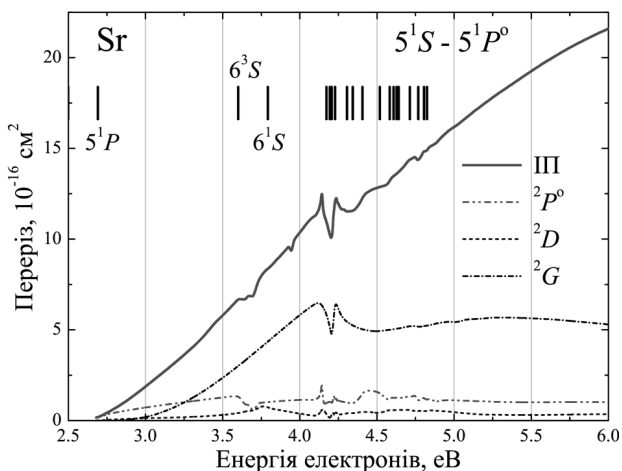
### 3. Результати та їх обговорення

Порівняємо розраховані нами інтегральні перерізи (ІІІ) збудження резонансного переходу в атомі Sr з експериментальними даними Чена та ін. [13]. На рис. 1, *a*, *b* наведені ІІІ переходу  $5^1S \rightarrow 5^1P^o$  при розсіянні  $e$ -Sr. Поряд з експериментальними ФЗ [13], на рисунках зображені ІІІ, розраховані нами в наближенні BSR31 як з урахуванням, так і без урахування каскадів з вищих рівнів. Для оцінки максимально можливого внеску каскадів, на рис. 2 наведені енергетичні залежності ІІІ збудження електронним ударом кількох вищерозташованих станів ( $6^3S$ ,  $6^1S$ ,  $4d5p^1D^o$ ,  $6^1P^o$ ,  $5^1D$  та  $5p^2^1D$ ) атома Sr. При цікавих для порівняння з експериментом енергіях зіткнення в околі 4 eV радіаційний розпад цих станів на рівень  $5^1P^o$ , як і слід було очікувати, приводить до помітного каскадного внеску у ФЗ, спостережуваного в експерименті [13]. З іншого боку, порівняння ІІІ, наведених на рис. 1 та 2, показує, що в діапазоні енергій від 3,6 до 4,2 eV згаданий каскадний внесок у переріз переходу  $5^1S \rightarrow 5^1P^o$  можуть спричинити ли-



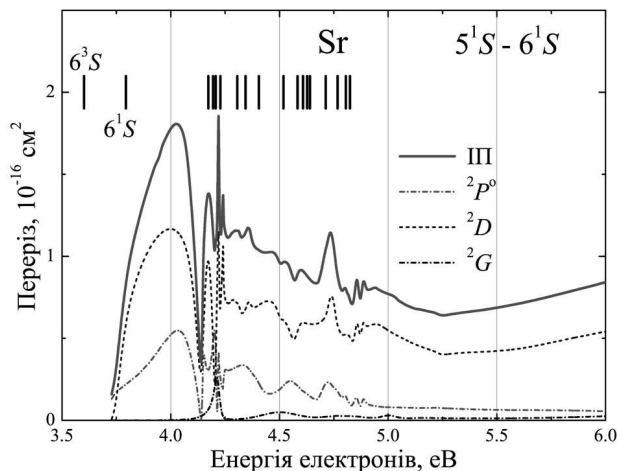


**Рис. 3.** Енергетичні залежності ІІІ переходу  $5^1S \rightarrow 5^1P^o$  при розсіянні  $e$ -Sr. Результати розрахунку BSR31 порівняні з експериментом Казаков *та ін.* [14]. Окрім експериментальних ФЗ [14] показані ці самі функції, калібровані нами зі зсувом вправо на 0,21 еВ та підігнані множителем 1.2. Наведені також лоренціани підгонки резонансів  $5s6p(1P^o)4f^2G$  та  $5s5d^2(1G)^2G$  при енергіях 4,216 та 4,264 еВ, відповідно



**Рис. 4.** Енергетичні залежності інтегрального та парціальних  $^2P^o$ ,  $^2D$  та  $^2G$ -перерізів для переходу  $5^1S \rightarrow 5^1P^o$  при зіткненні  $e$ -Sr (наближення BSR31). Показані також пороги збуджень нижчих рівнів атома Sr [18]

ше переходи з розташованих вище збуджених станів  $6^3S$  та  $6^1S$  зі значним превалюванням внеску  $6^1S \rightarrow 5^1P^o$ . З рис. 1 видно практично повне узгодження теоретичних (BSR31 з урахуванням каскадів) та експериментальних [13] результатів у діапазоні енергій від порога збудження (2,69 еВ) до



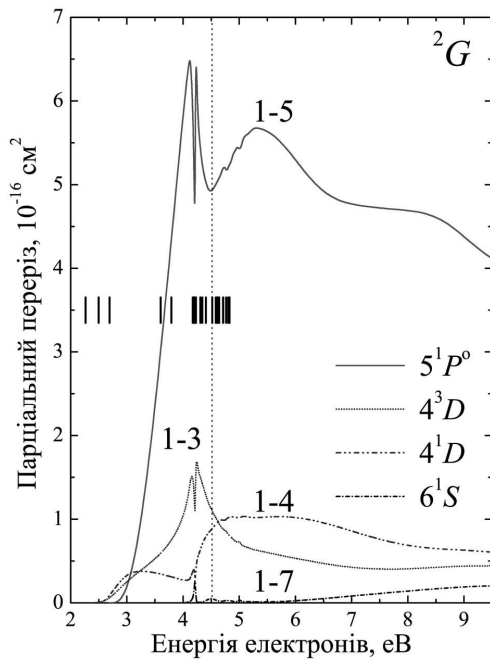
**Рис. 5.** Енергетичні залежності інтегрального та парціальних  $^2P^o$ ,  $^2D$  та  $^2G$ -перерізів для переходу  $5^1S \rightarrow 6^1S$  при зіткненні  $e$ -Sr (наближення BSR31). Показані також пороги збуджень нижчих рівнів атома Sr [18]

4,8 еВ, а також вище 6,8 еВ. При цьому опукла структура в енергетичній залежності ІІІ переходу  $5^1S \rightarrow 5^1P^o$  при  $\sim 4$  еВ зумовлена як резонансними особливостями ІІІ прямого збудження  $5^1P^o$ -рівня, так і радіаційним розпадом розташованого вище збудженого стану  $6^1S$ .

На рис. 3 порівнюються BSR31-перерізи прямого переходу  $5^1S \rightarrow 5^1P^o$  в атомі Sr з експериментальними даними [14]. Крім вихідних ФЗ [14], на рисунку наведені ці самі ФЗ, калібровані шляхом їх зсуву вправо на 0,21 еВ та підігнані множителем 1.2. З рис. 3 видно чудове узгодження підігнаної експериментальної ФЗ [14] з розрахованими нами ІІІ резонансного переходу в діапазоні енергій від порогу збудження і до 4,8 еВ.

Для дослідження резонансної структури ІІІ збудження дипольного  $5^1S \rightarrow 5^1P^o$ -переходу, на рис. 4 наведено внески в ІІІ парціальних хвиль  $^2P^o$ ,  $^2D$  та  $^2G$ . Аналогічні парціально-хвильові внески в ІІІ збудження переходу  $5^1S \rightarrow 6^1S$  наведено на рис. 5. Внесок ще двох парціальних хвиль ( $^2S$  і  $^2F^o$ ) у резонансну структуру ІІІ згаданих переходів є незначним і на рис. 4 та 5 не відображений.

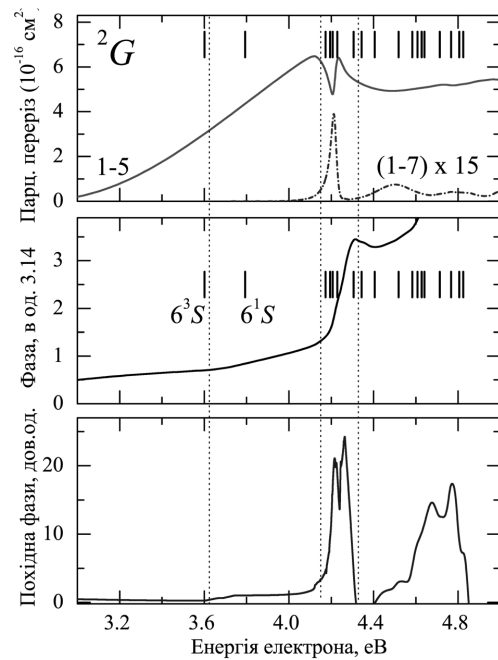
З рис. 4 чітко видно, що опукла резонансна структура на теоретичних ІІІ переходу  $5^1S \rightarrow 5^1P^o$  в області  $\sim 3,6$ – $4,3$  еВ у значній мірі визначається поведінкою парціальної  $^2G$ -хвилі. На рис. 6 наведено парціальні  $^2G$ -перерізи збудження станів  $4^3D$ ,



**Рис. 6.** Енергетичні залежності парціальних  ${}^2G$ -перерізів для переходів з основного стану  $5^1S$  у стани  $5^1P^o$ ,  $4^3D$ ,  $4^1D$ , та  $6^1S$  при зіткненні  $e$ -Sr (наближення BSR31). Показані також пороги збуджень нижчих рівнів атома Sr [18]. Вертикальна пунктирна лінія наведена для полегшення порівняння резонансних структур у перерізах різних переходів. Номери станів у позначеннях переходів з початкового стану в кінцевий наведені згідно з табл. 1

$4^1D$ ,  $5^1P^o$  та  $6^1S$  з основного стану  $5^1S$  атома Sr. Як видно з рис. 4 і 6, домінуючою резонансною структурою у парціальних перерізах  $5^1P^o$ - і  $4^3D$ -збудження для  ${}^2G$ -хвилі є широкий пік в околі енергії  $\sim 4$  еВ. Помітним є також роздвоєння згаданої опуклої структури в області енергій 4,1–4,2 еВ, яке зумовлене накладанням на резонанс форми двох вузьких резонансів фешбахівського типу (див. рис. 3). Деяка інша картина спостерігається (див. рис. 5) для III переходу  $5^1S \rightarrow 6^1S$ : тут поведінка III визначається характером енергетичних залежностей парціальних перерізів для  ${}^2D$ -хвилі і, в деякій мірі,  ${}^2P^o$ -хвилі.

Для виявлення і класифікації резонансної структури інтегральних перерізів розсіяння  $e$ -Sr, ми провели їх парціально-хвильовий аналіз, який ґрунтується на обчисленні суми власних фаз для кожної парціальної хвилі. Ілюстративні приклади такого роду для хвиль  ${}^2G$ ,  ${}^2D$  та  ${}^2P^o$  наведено на рис. 7, 8 та 9 відповідно. Енергетичні області, де



**Рис. 7.** Приклад парціально-фазового аналізу, використаного для встановлення і класифікації резонансних особливостей у  ${}^2G$ -хвилі. Перерізи і фази були отримані за допомогою наближення BSR31. Вертикальні пунктирні лінії наведені для полегшення порівняння резонансних структур у різних графічних вікнах. Номери станів у позначеннях переходів з початкового стану в кінцевий (верхнє графічне вікно) наведені згідно з табл. 1

сума власних фаз  $\delta$  зростає на  $\pi$ , були перераховані з малим енергетичним кроком аж до  $10^{-4}$  еВ, щоб визначити з більш високою точністю похідну по енергії від суми власних фаз. В резонансній області ця похідна приймає форму лоренціану, максимум якого визначає положення резонансу, в той час як ширина резонансу у місці його знаходження рівна  $2/(d\delta/dE)$ .

На жаль, метод  $R$ -матриці не надає безпосереднього “рецепту” для виявлення та класифікації резонансів у III розсіяння в заданому діапазоні енергій. Він не вказує і на спектроскопічну “ідентичність” (належність) проміжного квазістаціонарного стану від’ємного іона, який (стан) спричиняє дану резонансну особливість в III розсіяння. Таким чином, виявлення резонансу і визначення його характеристик вимагає значних додаткових зусиль.

У табл. 2 наведені характеристики резонансів, виявлених нами в околі енергії 4 еВ при аналізі

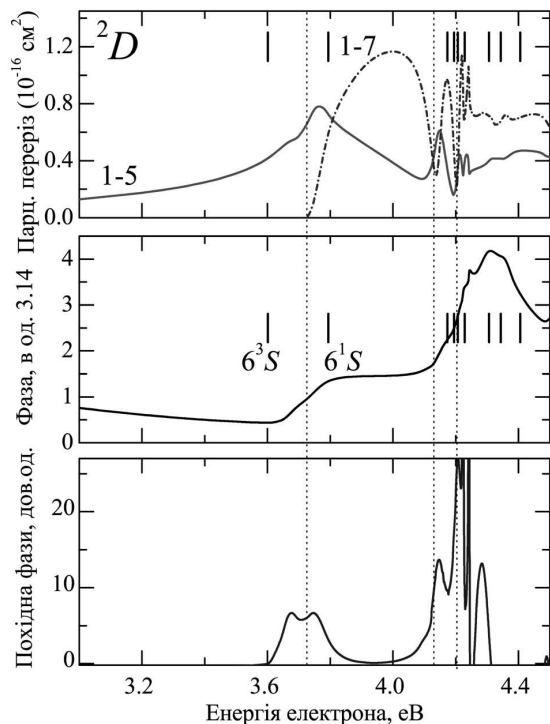


Рис. 8. Те саме, що і на рис. 7, але для  ${}^2D$ -хвилі

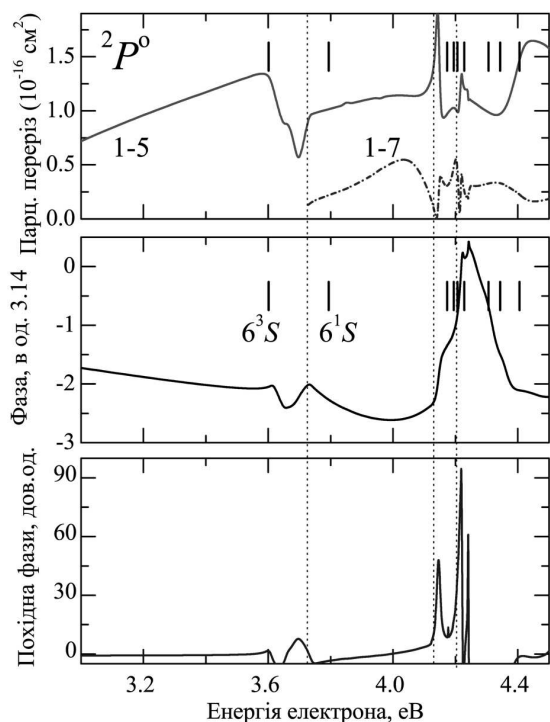


Рис. 9. Те саме, що і на рис. 7, але для  ${}^2P^o$ -хвилі

результатів BSR31-розрахунків. На рис. 7, 8 та 9 відображено основні етапи такого аналізу для парціальних хвиль  ${}^2G$ ,  ${}^2D$  та  ${}^2P^o$ , про що вже йшлося вище. Кожний рисунок містить три графічні вікна: у верхньому наведено фрагменти енергетичних залежностей парціальних перерізів для переходів  $5^1S \rightarrow 5^1P^o$  та  $5^1S \rightarrow 6^1S$ ; у середньому вікні показана енергетична залежність суми власних фаз для даної парціальної хвилі (в одиницях  $\pi$ ); у нижньому вікні зображена така сама залежність для похідної по енергії від суми фаз. Нагадаємо, що деяка резонансна структура в енергетичній залежності парціального перерізу трактується як “повноцінний” резонанс за наявності двох супутніх факторів: 1) скачка фази на величину  $\sim\pi$  у діапазоні енергій, де проявляється особливість у парціальному перерізі; 2) похідна фази має форму лоренціана при вказаних енергіях. Як зазначалося вище, положення максимуму лоренціана на шкалі енергій вважається енергією резонансу з шириною  $2/(d\delta/dE)$ . Ця “ідеальна” картина може порушуватися: а) при відкритті нових каналів розсіяння, тобто поблизу порогів збудження станів атома-мішені; б) за наявності в перерізах розсіяння широких резонансів форми (так званих шейп-резонансів), для яких рідко коли скачок фази сягає величини  $\sim\pi$ .

На рис. 7 наведена також енергетична залежність суми фаз для парціальної  ${}^2G$ -хвилі у припороговій області енергій. Поведінка цієї залежності відповідає типовому випадку (див., наприклад, [1, 6]), коли широкий резонанс форми [у нашому випадку  $5s5p({}^1P^o)4f {}^2G$ ] подавляється че-

Таблиця 2. Параметри резонансів для зіткнень  $e$ -Sr в околі енергії 4 еВ.

№	Конфігурація	Терм	Енергія, еВ	Ширина, меВ
1	$5s6s({}^3S)5d$	${}^2D$	3,719	162
2	$5s5p({}^1P)4f$	${}^2G$	4,087	559
3	$4d^2({}^1D)5p$	${}^2P^o$	4,146	17
4	$4d5p^2({}^1D)$	${}^2D$	4,147	50
5	$5s6p^2({}^1D)$	${}^2D$	4,207	27
6	$5s6p({}^1P^o)4f$	${}^2G$	4,216	33
7	$5s6p({}^1P^o)5d$	${}^2P^o$	4,216	16
8	$5s6p({}^1P^o)4f$	${}^2D$	4,222	3,4
9	$5s5d^2({}^1D)$	${}^2D$	4,242	1,3
10	$5s5d^2({}^1G)$	${}^2G$	4,263	46

рез відкриття нових каналів зіткнення при 4,17–4,22 еВ. При цьому  ${}^2G$ -фаза, починаючи з 3,6 еВ, зростає майже на 0,7 (в од.  $\pi$ ). Фазовий аналіз, проведений у цій області енергій, дозволив також виявити в енергетичній похідній від суми фаз для  ${}^2G$ -хвилі двопікову структуру, яка доволі точно апроксимується парою лоренціанів, див. рис. 10. Тут варто наголосити, що потужний резонанс  $5s5p({}^1P^o)4f {}^2G$  при 4,087 еВ лежить вище “батьківського” стану  $5s5p({}^1P^o)$  і може розглядатися як резонанс форми. У той самий час, два інші стани  $5s6p({}^1P^o)4f {}^2G$  та  $5s5d^2 ({}^1G) {}^2G$  при енергіях 4,216 еВ та 4,264 еВ відповідно, лежать нижче порогів збудження “батьківських” станів  $5s6p({}^1P^o)$  та  $5s5d({}^1D)$  і класифікуються як резонанси Фешбаха.

Таким чином, наші дослідження резонансної структури III збудження переходу  $5^1S \rightarrow 5^1P^o$  в околі енергії 4 еВ підтверджують в загальному висновки праці Казакова та ін. [14], в якій стверджується, що збудження рівнів над порогом  $6^3S$ -стану відбувається через утворення короткоживучого від’ємного іона  $Sr^-$ . Автори [14] вважали, що в спостережувану поблизу 4 еВ структуру крім каскадних переходів може давати внесок квазістаціонарний стан від’ємного іона  $Sr^-$  з конфігурацією  $5s5p6s$  ( $E_0 = 3,92 \pm 0,03$  еВ). Проте, як було показано вище, “відповідальним” за обговорювану структуру є надпороговий резонанс форми в  ${}^2G$ -хвилі, який не може з’явитися за рахунок внеску станів конфігурації  $5s5p6s$ , а скоріше за все, є результатом утворення квазістаціонарного стану  $Sr^-$  з конфігурацією  $5s5p({}^1P^o)4f$ .

Ще одним важливим фактором, який впливає на формування опуклої особливості на кривій енергетичної залежності III  $5^1P^o$ -збудження в області енергій 3,8–4,2 еВ, є каскадні переходи з  $6^1S$ -рівня. З рис. 5 видно, що: 1) в інтегральному перерізі збудження переходу  $5^1S \rightarrow 6^1S$  преважує внесок парціальної  ${}^2D$ -хвилі, яка повністю визначає його форму при вказаних енергіях; 2) спостережувана в енергетичній залежності  ${}^2D$ -парціального перерізу опукла структура має типовий вигляд резонансу форми (шейп-резонанс) (див., наприклад, [25]), зумовлену утворенням квазістаціонарного стану  $5s6s({}^1S)5d {}^2D$  від’ємного іона  $Sr^-$ . Проте відсутність скачка  ${}^2D$ -фази при енергіях 3,8–4,2 еВ (рис. 8) не дозволяє вважати дану особливість “повноцінним” резонансом. На

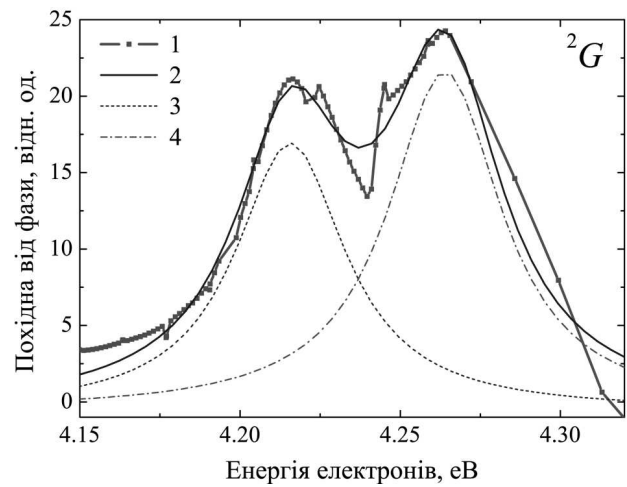


Рис. 10. Лоренц-підгонка похідної за енергією від суми фаз для парціальної хвилі  ${}^2G$  в області енергій 4,15–4,32 еВ: 1 – розрахована в наближенні BSR31 похідна від суми фаз для  ${}^2G$ -хвилі; 2 – результуюча крива підгонки; 3, 4 – лоренціани підгонки резонансів з піками при енергіях 4,216 та 4,264 еВ, відповідно (табл. 2)

нашу думку, причиною подібної поведінки фази є збіг кількох факторів: а) відносно значна неточність у визначенні взаємного розміщення рівнів енергій станів  $6^3S$  та  $6^1S$ , яка у даному випадку досягає 0,12 еВ; б) високий ступінь корельованості резонансних процесів, чутливих до найменших обчислювальних неузгоджень; в) наявність на порозі збудження не проявленого шейп-резонансу  $5s6s({}^1S)5d {}^2D$  ще одного  ${}^2D$ -резонансу форми  $[5s6s({}^3S)5d {}^2D]$  шириною 162 меВ при енергії 3,719 еВ (див. табл. 2). У даному випадку напрошується висновок про необхідність уточнюючого розрахунку структури мішені із залученням пакета BSR [9].

#### 4. Висновки

Енергетична залежність експериментального перерізу збудження  $5^1S \rightarrow 5^1P^o$  атома Sr електронним ударом [13, 14] містить помітну структуру в області енергій  $\sim 4$  еВ, яка до останнього часу не отримала належної теоретичної інтерпретації. Оскільки відхилення від плавного ходу кривої інтегрального перерізу [13] збудження рівня  $5^1P^o$  починається з  $\sim 3,79$  еВ, то в згаданій роботі припускалося, що причиною цієї особливості є каскадний внесок з рівня  $6^1S$  і відкрит-

тя нових каналів збудження (див. рис. 1). Проте в експерименті [14] відхилення від рівномірного зростання функції збудження проявлялося уже при енергії  $\sim 3,66$  еВ, яка близька до потенціалу збудження  $6^3S$ -рівня (3,59 еВ). Там же стверджувалося, що помітна в III структура крім внеску каскадних переходів зумовлена внеском станів від'ємного іона  $Sr^-$  з конфігурацією  $5s5p6s$  (при  $\sim 3,92$  еВ).

У даній роботі в наближенні BSR31 досліджено III збудження  $5^1P^o$ -рівня атома Sr електронним ударом у припороговій області енергій і показано, що: 1) опукла особливість в експериментальних ФЗ переходу  $5^1S - 5^1P^o$  в околі енергії 4 еВ [13, 14] зумовлена, насамперед, внеском  $^2G$ -резонансів у перерізі прямого  $5^1P^o$ -збудження, а також внеском каскадів з рівня  $6^1S$ ; 2) основний внесок в обговорювану структуру в III прямого  $5^1P^o$ -збудження в околі 4 еВ дає резонанс форми  $5s5p(^1P^o)4f\ ^2G$  з максимумом при  $\sim 4,1$  еВ, на який накладаються два вузькі резонанси Фешбаха  $5s6p(^1P^o)4f\ ^2G$  та  $5s5d(^1G)\ ^2G$  при 4,216 і 4,264 еВ відповідно; 3) превалюючий внесок в III збудження рівня  $6^1S$  дає непроявлений резонанс форми  $5s6s(^1S)5d\ ^2D$ , який руйнується кількома супутніми резонансними утвореннями у цій же  $^2D$ -парціальній хвилі. Інакше кажучи, виявлена в енергетичних залежностях перерізів  $5^1P^o$ -збудження атома Sr електронним ударом [13, 14] опукла особливість в околі 4 еВ має резонансний характер і в значній мірі визначається складними для теоретичного опису висококорельованими процесами утворення і розпаду квазістаціонарних станів від'ємного іона  $Sr^-$ .

Автори висловлюють подяку проф. О. Зацаринному та проф. К. Бартшату з університету Дрейка (м. Де-Мойн, Айова, США) за допомогу в проведенні розрахунків та плідні обговорення.

1. O. Zatsarinny, K. Bartschat, S. Gedeon, V. Gedeon, V. Lazur. Low-energy electron scattering from Ca atoms and photodetachment of  $Ca^-$ . *Phys. Rev. A* **74**, 052708 (2006).
2. O. Zatsarinny, K. Bartschat, L. Bandurina, S. Gedeon. Electron-impact excitation of calcium. *J. Phys. B* **40**, 4023 (2007).
3. O. Zatsarinny, K. Bartschat, S. Gedeon, V. Gedeon, V. Lazur, E. Nagy. Cross sections for electron scattering from magnesium. *Phys. Rev. A* **79**, 052709 (2009).

4. Є.А. Нодь. Перерізи розсіяння електронів на атомі Sr. *Наук. вісник Уж-НУ. Серія "Фізика"* **25**, 148 (2009).
5. V. Gedeon, S. Gedeon, V. Lazur, E. Nagy, O. Zatsarinny, K. Bartschat. Electron scattering from silicon. *Phys. Rev. A* **85**, 022711 (2012).
6. V. Gedeon, S. Gedeon, V. Lazur, E. Nagy, O. Zatsarinny, K. Bartschat. B-spline R-matrix-with-pseudostates calculations for electron-impact excitation and ionization of fluorine. *Phys. Rev. A* **89**, 052713 (2014).
7. V. Gedeon, S. Gedeon, V. Lazur, E. Nagy, O. Zatsarinny, K. Bartschat. B-spline R-matrix-with-pseudostates calculations for electron collisions with aluminum. *Phys. Rev. A* **92**, 052701 (2015).
8. L.O. Bandurina, S.V. Gedeon. Investigation of the concentration of electrons of plasma of glow – discharge above surface of aqueous solution of sulfate of aluminium. *Uzhhorod Univ. Scient. Herald. Series. Phys.* **37**, 49 (2015).
9. O. Zatsarinny. BSR: B-spline atomic R-matrix codes. *Comput. Phys. Commun.* **174**, 273 (2006).
10. P.G. Burke, W.D. Robb. The R-matrix theory of atomic processes. *Adv. At. Mol. Opt. Phys.* **11**, 143 (1976).
11. V.P. Starodub, I.S. Aleksakhin, I.I. Garga, I.P. Zapesochnyi. *Opt. Spectrosc.* **35**, 1037 (1973).
12. I.S. Aleksakhin, I.I. Garga, I.P. Zapesochnyi, V.P. Starodub. *Opt. Spectrosc.* **37**, 20 (1974).
13. S.T. Chen, D. Leep, A. Gallagher. Excitation of the Sr and  $Sr^+$  resonance lines by electron impact on Sr atoms. *Phys. Rev. A* **13**, 947 (1976).
14. S.M. Kazakov, N.I. Romanyuk, O.V. Khristoforov, O.B. Shpenik. Resonance effects observed under the interaction between slow-electrons and strontium atoms. *Opt. Spectrosc.* **59**, 22 (1985).
15. C. Froese Fischer. The MCHF atomic-structure package. *Comput. Phys. Commun.* **64**, 369 (1991).
16. C. Froese Fischer, T. Brage, O. Jonsson. *Computational Atomic Structure. An MCHF Approach* (Institute of Physics Publishing, 1997).
17. O. Zatsarinny, C. Froese Fischer. Oscillator strengths for transitions to high-lying excited states of carbon. *J. Phys. B* **35**, 4669 (2002).
18. C.E. Moore. *Atomic Energy Levels as Derived from the Analysis of Optical Spectra*. In: Natl. Stand. Ref. Data 35, V. III (Reprint of NBS Circ. 467, V. III, 1958) (Nat. Bur. Stand., 1971).
19. V. Gedeon, V. Lengyel, O. Zatsarinny, C.A. Kocher. Calculation of electron-impact excitation from metastable states of the Sr atom. *Phys. Rev. A* **56**, 3753 (1997).
20. И.И. Фабрикант. Столкновение медленных электронов с атомами щелочноземельных элементов. В сб. *Атомные процессы*, под ред. Р.К. Петеркопа (Зинатне, 1975), с. 80.

21. R. Szmytkowski, J.E. Sienkiewicz. Elastic scattering of electrons by strontium and barium atoms. *Phys. Rev. A* **50**, 4007 (1994).
22. J. Yuan. The resonance structures of electron interaction with Sr and Ba atoms: low-energy electron scattering and photodetachment of the negative ions. *J. Phys. B.* **36**, 2053 (2003).
23. M. Adibzadeh, C.E. Theodosiou. Elastic electron scattering from Ba and Sr. *Phys. Rev. A* **70**, 052704 (2004).
24. V.M. Burke, C.J. Noble. Farm – A flexible asymptotic R-matrix package. *Comput. Phys. Commun.* **85**, 471 (1995).
25. O.I. Zatsarinnyi, L.A. Bandurina, V.F. Gedeon. Resonances in electron-impact integral excitation cross sections of the magnesium atom. *Opt. Spectrosc.* **95**, 167 (2003).

Одержано 23.08.17

*E.A. Nagy, V.F. Gedeon, S.V. Gedeon, V. Yu. Lazur*ELECTRON-IMPACT EXCITATION OF  $5^1S - 5^1P^o$   
RESONANCE TRANSITION IN Sr ATOM

## S u m m a r y

Main aspects of a new version of the *B*-spline *R*-matrix (BSR) method, in which nonorthogonal orbitals are applied, have been described. The BSR approximation is used to calculate the resonance structure of integral cross-sections of the  $5^1S \rightarrow 5^1P^o$  transition at the electron scattering by a strontium atom in the energy interval up to 10 eV. The multiconfiguration Hartree–Fock method with a nonorthogonal set of orbitals is employed to accurately represent the target wave functions. The close-coupling expansion included 31 bound states of a neutral strontium atom ranging from the ground state to the  $5s5f\ ^1F^o$  one. The calculated cross-sections are in good agreement with available experimental data and can be exhaustively interpreted. The structure of a resonance feature in the *e*-Sr scattering cross-sections at about 4 eV is discussed.