

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)

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

УДК 539.186.2

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. Шпеника [14] методом електронної спектроскопії була досліджена структура енергетичних спектрів електронів, розсіяних атомами стронцію. Зокрема, в енергетичній залежності струму пружно розсіяних (на кут 90°) 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 σ_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 α 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 φ_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 φ_j та χ_j^{Γ} у розкладах (1), (2) будуються із одноелектронних атомних орбіталей φ_{α_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 α_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 Шредінгера:

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

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 π . 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 χ_j^{Γ} 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 Ψ_k^Γ :

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

де $\bar{\Phi}_i^\Gamma$ та χ_i^Γ 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^Γ і поверхневі амплітуди w_{ik}^Γ . Діагоналізуємо матрицю $\langle \Psi_k^\Gamma | H_{N+1} + L_{N+1} | \Psi_k^\Gamma \rangle_{\text{int}}$ для кожного набору квантових чисел Γ , можна визначити енергії E_k^Γ і коефіцієнти c_{ijk}^Γ , d_{ik}^Γ у розкладі (9), тобто хвильові функції Ψ_k^Γ 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 χ_i^Γ

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 – фінітні 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 θ_i – асимптотична фаза регулярної кулонівської функції (див., наприклад, [10]), а другий індекс α 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 фінітними властивостями базисних сплайнів з компактними носіями. По-друге, завдяки властивостям фінітності 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 званим 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 $[1s^22s^22p^63s^23p^63d^{10}4s^24p^6]5s^2\ ^1S$ та однократно збудженими станами $4p^65s\ nL$ багатовимірний до гелію, тобто може при певних умовах розглядатися в рамках моделі двох електронів понад Kr-подібним $[1s^22s^22p^63s^23p^63d^{10}4s^24p^6]$ -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 $4p^5\bar{n}\bar{l}\bar{l}'$:

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

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

тут кореляційними функціями χ 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:

$$\begin{aligned} \Phi(4p^65s\ nL, LS) = & \mathcal{A} \sum \left\{ \phi(4p^65s)P(nl) \right\}^{LS} + \\ & + \mathcal{A} \sum \left\{ \phi(4p^65p)P(nl) \right\}^{LS} + \\ & + \mathcal{A} \sum \left\{ \phi(4p^64d)P(nl) \right\}^{LS}, \end{aligned} \quad (15)$$

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 $5s\ nL$, 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]	$E_{\text{теор}}$	ΔE
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:

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

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

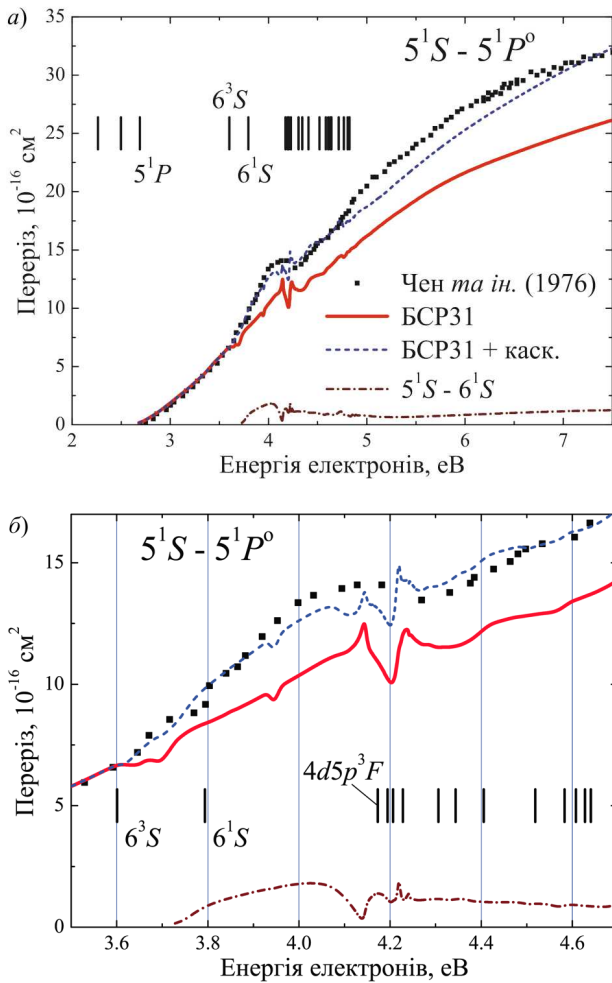


Рис. 1. Енергетичні залежності ІІІ переходу $5^1S \rightarrow 5^1P^o$ при розсіянні e -Sr: *a* – результати BSR31-розрахунку (з урахуванням і без урахування каскадного внеску) порівнюються з експериментом Чена та ін. [13]. Наведено також ІІІ переходу $5^1S \rightarrow 6^1S$ та експериментальні пороги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

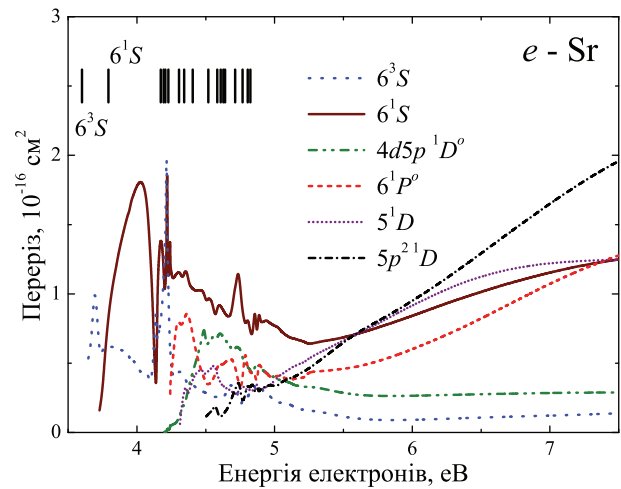


Рис. 2. Енергетичні залежності ІІІ збудження з основного стану 5^1S рівнів 6^3S , 6^1S , $4d5p^1D^o$, 6^1P^o , 5^1D та $5p^2^1D$ при розсіянні e -Sr. Розрахунки виконані в наближенні BSR31. Показано також пороги збуджень нижчих рівнів атома Sr [18]

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 вищезгаданих 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-

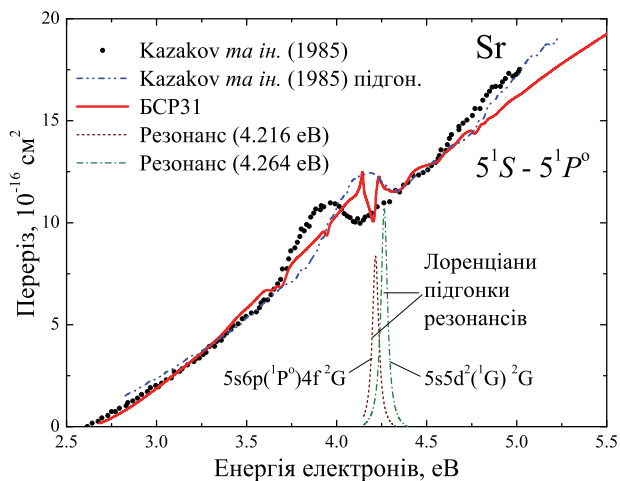


Рис. 3. Енергетичні залежності ІІІ переходу $5^1S \rightarrow 5^1P^0$ при розсіянні e -Sr. Результати розрахунку BSR31 порівняні з експериментом Казаков *та ін.* [14]. Окрім експериментальних ФЗ [14] показані ці самі функції, калібровані нами зі зсувом вправо на 0,21 еВ та підігнані множителем 1.2. Наведені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

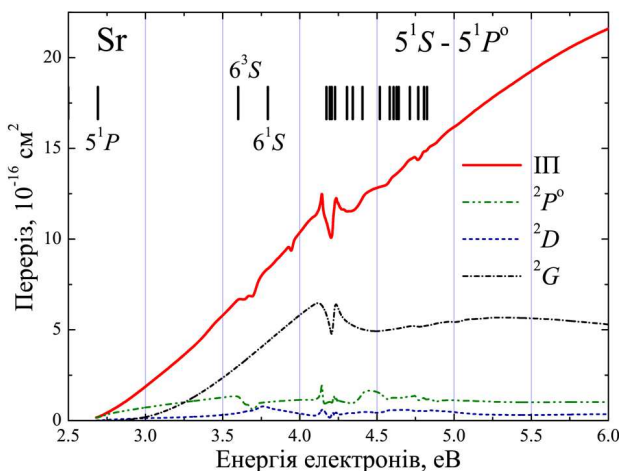


Рис. 4. Енергетичні залежності інтегрального та парціальних $^2P^o$, 2D та 2G -перерізів для переходу $5^1S \rightarrow 5^1P^o$ при зіткненні e -Sr (наближення BSR31). Показані також пороги збуджень нижчих рівнів атома Sr [18]

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

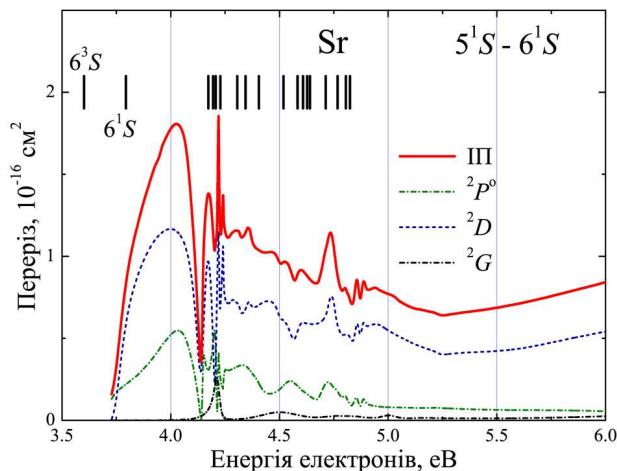


Рис. 5. Енергетичні залежності інтегрального та парціальних $^2P^o$, 2D та 2G -перерізів для переходу $5^1S \rightarrow 6^1S$ при зіткненні e -Sr (наближення BSR31). Показані також пороги збуджень нижчих рівнів атома Sr [18]

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 ~ 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 ,

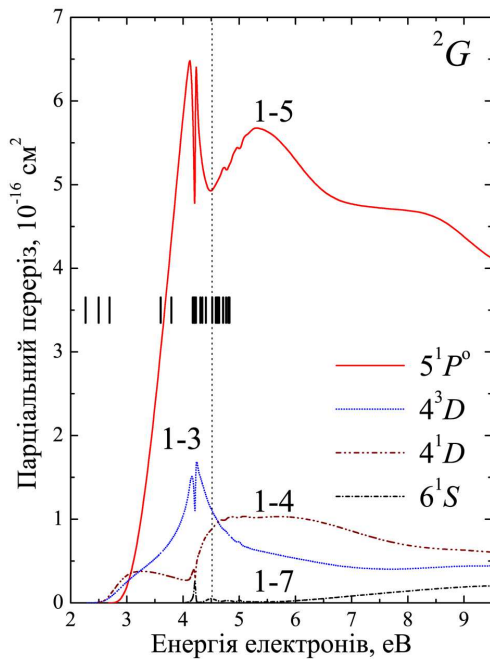


Рис. 6. Енергетичні залежності парціальних 2G -перерізів для переходів з основного стану 5^1S у стани 5^1P^o , 4^3D , 4^1D , та 6^1S при зіткненні e -Sr (наближення BSR31). Показані також пороги збуджень нижчих рівнів атома Sr [18]. Вертикальна пунктирна лінія наведена для полегшення порівняння резонансних 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 ~ 4 eV. Помітним є також роздвоєння згаданої опуклої структури в області енергій 4,1–4,2 eV, 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

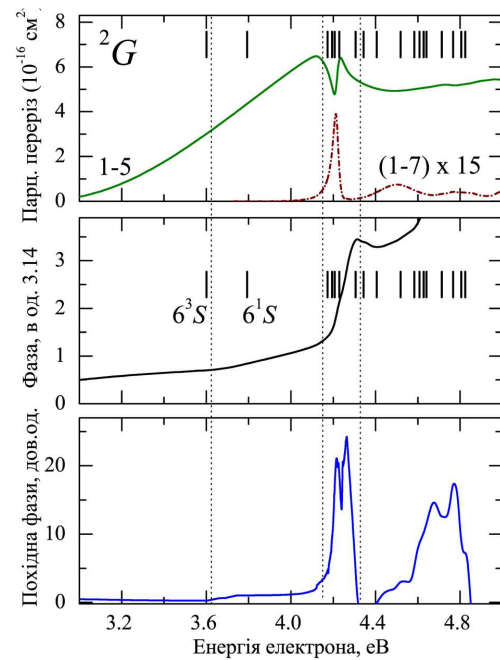


Рис. 7. Приклад парціально-фазового аналізу, використаного для встановлення і класифікації резонансних особливостей у 2G -хвилі. Перерізи і фази були отримані за допомогою наближення BSR31. Вертикальні пунктирні лінії наведені для полегшення порівняння резонансних структур у різних графічних вікнах.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

сума власних фаз δ зростає на π , були перераховані з малим енергетичним кроком аж до 10^{-4} eV, 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 eV при аналізі

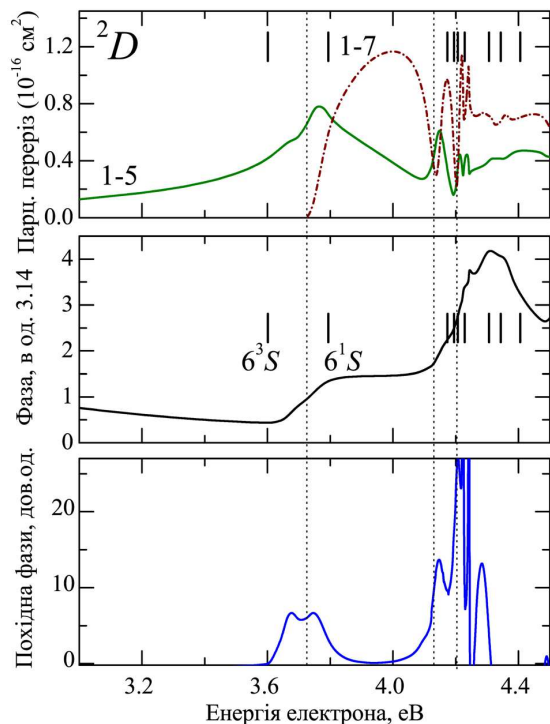


Рис. 8. Те саме, що і на рис. 7, але для 2D -хвилі

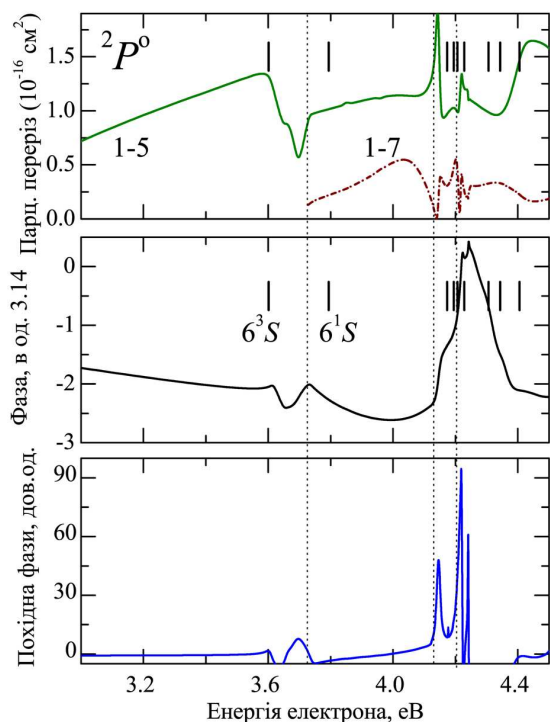


Рис. 9. Те саме, що і на рис. 7, але для ${}^2P^o$ -хвилі

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 π); 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. π). 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

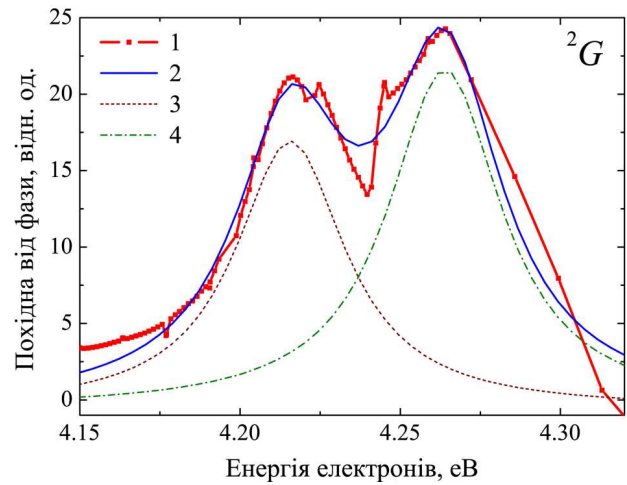


Рис. 10. Лоренц-підгонка похідної за енергією від суми фаз для парціальної хвилі 2G в області енергій 4,15–4,32 еВ: 1 – розрахована в наближенні BSR31 похідна від суми фаз для 2G -хвилі; 2 – результуюча крива підгонки; 3, 4 – лоренціани підгонки резонансів з піками при енергіях 4,216 та 4,264 еВ, відповідно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