

В.Ф. ГЕДЕОН¹, В.Ю. ЛАЗУР, С.В. ГЕДЕОН, О.В. ЄГІАЗАРЯН

Ужгородський Національний Університет

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

РЕЗОНАНСНА СТРУКТУРА
ПЕРЕРІЗІВ РОЗСІЯННЯ ПОВІЛЬНИХ
ЕЛЕКТРОНІВ НА АТОМІ КАЛЬЦІЮ

УДК 539

З використанням розширеної БСР-версії R -матричного методу проведено систематичне дослідження розсіяння електронів на нейтральному атомі кальцію в діапазоні енергій зіткнення до 4,3 еВ. Для точного представлення хвильових функцій мішені використовується метод сильного зв'язку з наборами залежних від терму неортогональних орбіталей та сплайн-представленнями для базисних функцій. Розклад для сильного зв'язку включає 39 зв'язаних станів нейтрального кальцію, що охоплюють усі стани від основного до $4s8s^1S$. Детально досліджено складну резонансну структуру проінтегрованих за кутом повних перерізів пружного $e + Ca$ -розсіяння та збудження станів $4s4p^3P^o$, $3d4s^3D^e$, $3d4s^1D^e$, $4s4p^1P^o$ і $4s5s^3S^e$ атома Ca електронним ударом. Спостережувані структури пов'язано з конкретними автовідривними станами системи налітаючий електрон + атом Ca . Визначено положення і ширини виявлених резонансів та проведено їхню спектроскопічну класифікацію.

Ключові слова: електрон, атом кальцію, розсіяння, збудження, іонізація, метод R -матриці з B -сплайнами, неортогональні орбіталі, резонанси.

1. Вступ

Вивчення елементарних процесів зіткнення електронів з атомами кальцію становить значний інтерес з низки причин. По-перше, відомості про характеристики елементарних процесів взаємодії електронів з атомами Ca вкрай необхідні для успішного розвитку багатьох напрямків сучасної фізики і нової техніки, у тому числі фізики плазми, астрофізики, фізики верхніх шарів атмосфери, термоядерної енергетики. Зокрема, продукований при спалахах наднових кальцій є найбільш використовуваним елементом для кількісного аналізу спектра зірок [1]. Атоми Ca мають привабливі властивості і для їх застосування в оптичних стандартах частоти [2]. Крім цього, після розгоргання робіт з керованого термоядерного синтезу ви-

никла нагальна необхідність у кращому розумінні перебігу основних процесів (пружного розсіяння, збудження та іонізації) при зіткненнях електронів з атомами Ca [3, 4]. Однак для більшості атомів лужно-земельних елементів, включаючи кальцій, інформація про перерізи пружного розсіяння та збудження енергетичних рівнів електронним ударом до цього часу залишається обмеженою.

По-друге, кальцій з його конфігурацією основного стану $[1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6] \times (4s^2)^1S$ і одно- та двократно збудженими станами $[1s^2 \dots 3p^6] \times (4snl, 3dnl, 4pnl)^{3,1}L$ багато в чому подібний до гелію, тобто може при певних умовах розглядатися в рамках моделі двох електронів понад Ag -подібним $[1s^2 \dots 3p^6]$ -кором. Як для основного стану, так і для низькорозташованих збуджених станів Ca важливими є як валентні, так і корвалентні кореляції. Широко використовуваний метод врахування корвалентних кореляцій ґрунтується на

© В.Ф. ГЕДЕОН¹, В.Ю. ЛАЗУР, С.В. ГЕДЕОН,
О.В. ЄГІАЗАРЯН, 2022

застосуванні напівемпіричного корполяризаційного потенціалу [5]. Хоча такий потенціал значно спрощує обчислення і дозволяє з належною точністю визначити енергії збудження та сили осциляторів, завжди залишається питання, наскільки точно модельний потенціал може імітувати корвалентну кореляцію, включаючи нелокальні та недипольні внески. Через це у нашому підході [6–13] (див. розділ 2) кореляційні ефекти враховуються шляхом включення в розклад станів і псевдостанів мішені спеціальних додаткових електронних конфігурацій зі збудженим кором.

По-третє, атоми лужно-земельних елементів характеризуються великими величинами поляризованості. Тому виникає необхідність точного урахування поляризованості атома Са внаслідок її великої величини. В нашій попередній праці [6] було встановлено, що поляризація основного стану атома Са значною мірою визначається сильним дипольним збудженням рівня $4s4p^1P^o$. Адекватний до цього спосіб урахування поляризаційних ефектів буде більш детально розглянуто нами в наступному розділі у зв'язку з питанням про резонансне розсіяння повільних електронів на атомах Са.

І нарешті, по-четверте, в експериментальній [14] і теоретичній [15] праці було встановлено, що стан $4s^24p^2P_{1/2}$ від'ємного іона кальцію Ca^- є стабільним, а не резонансним, як вважалось раніше. Тому до проблеми теоретичного опису резонансних явищ у зіткненнях повільних електронів з атомами Са варто повернутися заново. Це вимагає реалізації нових концепцій та нових методів урахування резонансних ефектів, щоб подолати сучасний незадовільний стан теорії. Необхідні для цього модифікації та уточнення теорії R -матриці і методу сильноного зв'язку каналів приведені в розділі 2 даної праці.

Дослідження резонансної структури перерізів $e + A$ -розсіяння є фундаментальною задачею фізики електрон-атомних зіткнень. Така структура вказує на існування квазістаціонарних автоіонізаційних станів (AIC) (а у випадку нейтральних атомів автовідривних станів (ABC)) системи “мішень + налітаючий електрон”, оже-розпад яких і призводить до складної резонансної структури перерізів розсіяння. Зазвичай зустрічаються два типи резонансів в перерізах розсіяння (див., наприклад, [16, 17]), які одержали назву резонансів

Фешбаха та резонансів форми. Механізм виникнення резонансів Фешбаха полягає у захопленні мішенню налітаючого електрона в AIC в одному із закритих каналів. Однак електрон може бути тимчасово захоплений мішенню і у відкритому каналі. Умовою цього є наявність у певному відкритому каналі потенціалу специфічної форми – за достатньо широкого бар'єром розташована яма достатньої глибини і ширини, в якій електрон, що розсіюється, тимчасово зв'язується в AIC.

Крім важливості ABC (AIC) в процесах електрон-атомного (іонного) розсіяння, вони відіграють суттєву роль в плазмі і твердому тілі. У плазмі в результаті зіткнення електронів з атомами (іонами) відбувається інтенсивне збудження ABC (AIC) системи $e + A$, що впливає на енергетичний баланс плазми, а також є зручним інструментом її діагностики. У твердому тілі можуть реалізуватися випадки, коли електрони провідності взаємодіють з домішковими атомами (іонами) кристалічної ґратки через утворення ABC (AIC), унаслідок чого така взаємодія носить резонансний характер. Експериментальним підґрунтям для з'ясування природи резонансної структури перерізів розсіяння слугують пучкові експерименти, в котрих вимірюються енергетичні та кутові залежності перерізів пружного розсіяння, збудження та іонізації атомів (іонів) електронним ударом. Відповідні експерименти для $e + \text{Ca}$ -розсіяння проведені в працях [18–20], результати яких будуть висвітлені по ходу систематизованого викладу результатів BSR-розрахунків.

Для вивчення резонансних ефектів в зіткненнях повільних електронів з атомами Са в даній праці застосовується розроблена в [6–13, 21–26] нова, так звана BCP-версія (*B-Spline R-matrix* (BSR) method) методу R -матриці. В рамках цієї версії запропоновано новий спосіб урахування резонансних ефектів, який ґрунтується на використанні залежних від терму неортогональних орбіталей та сплайн-представлень для базисних функцій. Запропонований спосіб вільний від багатьох недоліків, притаманних раніше відомим способам урахування резонансних ефектів (див., наприклад [16, 17] і наведені там посилання), пов'язаних з введенням у розклад повної хвильової функції $(N+1)$ -електронної системи “атом + налітаючий електрон” спеціальних додаткових квадратично-інтегровних кореляційних функцій χ_j^Γ , які, як

відомо, часто призводять до появи нефізичної псевдорезонансної структури у перерізах $e + A$ -розсіяння та до значного збільшення числа алгебраїчних чи інтегро-диференціальних рівнянь, які підлягають розв'язанню.

Аналіз резонансів в $e + A$ -розсіянні часто ґрунтується на однорівнівій формулі Брейта–Вігнера для ізольованих резонансів, що не перекриваються. Однак, у випадку двох резонансних станів при близьких енергіях в одній і тій же парціальній хвилі визначення параметрів резонансів стає доволі складною справою і вимагає узагальнення однорівневого формалізму Брейта–Вігнера на багатоканальний випадок. З багатьох інших методів, що широко використовуються в літературі для аналізу та розрахунку параметрів складних резонансних структур в багатоканальних системах, найбільш надійним виявився метод, розроблений в працях Шимамура та ін. [27–30], який ґрунтується на концепції “повного розділення просторів резонансних і нерезонансних каналів” і використовує властивості суми власних фаз та її похідної по енергії. Як новітні розвідки цього методу [31], так і його застосування в різних областях фізики зіткнень (див., наприклад, [32]) засвідчують про важливе значення і актуальність такого підходу. Даний підхід у поєднанні з БСР-версією R -матричного методу і використовується в даній праці для дослідження складної резонансної структури перерізів $e + Ca$ -розсіяння.

Дана праця організована таким чином. Другий розділ присвячено систематичному викладу фізичних основ методу сильного зв'язку каналів (СЗК) та методу R -матриці і їх модифікацій, які базуються на застосуванні неортогональних орбіталей та B -сплайнів як базисних функцій. Після короткого опису обчислювальної схеми БСР-версії методу R -матриці у розділі 3 розглядаються основні прийоми, які використовуються для дослідження резонансів в $e + Ca$ -розсіянні в рамках згаданої вище концепції “просторів резонансних і нерезонансних каналів” [27–31]. У цьому ж розділі проаналізовано резонансну структуру в енергетичних залежностях, проінтегрованих за кутом повних перерізів пружного $e + Ca$ -розсіяння та збудження станів $4s4p \ ^3P^o$, $3d4s \ ^3D^e$, $3d4s \ ^1D^e$, $4s4p \ ^1P^o$ та $4s5s \ ^3S^e$ атома Ca електронним ударом. В заключному розділі підсумовуються одержані результати.

2. Методи розрахунку розсіяння електронів на атомах

Детальний опис методів сильного зв'язку каналів (СЗК) та R -матриці і їх можливостей для дослідження непружних зіткнень повільних електронів з атомами наведено в працях [6–13, 16, 17, 21–26]. У зв'язку з цим у даній праці доцільно обмежитися лише коротким викладом можливих удосконалень цих методів, які ґрунтуються на застосуванні залежних від терму неортогональних орбіталей та B -сплайнів як базисних функцій.

2.1. Метод сильного зв'язку каналів

У цьому розділі в рамках методу СЗК розглядається багатоканальна квантова задача розсіяння повільних електронів на складних атомах. В схемі LS -зв'язку стан системи $e + A$ характеризується набором квантових чисел $\Gamma \equiv (\gamma LSM_L M_S \pi)$, де L , S , M_L , M_S і π – повний орбітальний і спіновий моменти, їх проекції на задану вісь та парність повної $(N + 1)$ -електронної системи відповідно, $\gamma \equiv (L_i S_i M_{L_i} M_{S_i} \pi_i)$ – аналогічний набір квантових чисел мішені A в i -му стані. Хвильова функція $\Psi_\alpha^\Gamma(X, x_{N+1})$, що описує розсіяння електрона на N -електронній мішені A , є розв'язком рівняння Шредінгера (в атомних одиницях: $e = m_e = \hbar = 1$)

$$(H_{N+1} - E)\Psi_\alpha^\Gamma(X, x_{N+1}) = 0,$$

$$H_{N+1} = \sum_{i=1}^{N+1} \left(-\frac{1}{2} \nabla_i^2 - \frac{Z}{r_i} \right) + \sum_{i>j=1}^{N+1} \frac{1}{r_{ij}} \quad (1)$$

з певними граничними умовами задачі $e + A$ -розсіяння. Тут r_{ij} – відстань між електронами i та j , r_i – відстань від i -го електрона до ядра, H_{N+1} – гамільтоніан $(N+1)$ -електронної системи “атом + налітаючий електрон”, N – число електронів в атомі-мішені A , Z – заряд ядра, E – повна енергія системи $e + A$, $x_i \equiv (\mathbf{r}_i, \sigma_i)$ – просторові та спінові координати i -го електрона, $X \equiv (x_1, \dots, x_N)$ позначає сукупність просторових і спінових координат усіх N електронів атома-мішені A . Нижній індекс α у функції $\Psi_\alpha^\Gamma(X, x_{N+1})$, яку часто називають хвильовою функцією зіткнення, характеризує початкові умови і зазвичай позначає вхідний канал розсіяння. Хвильову функцію зіткнення $\Psi_\alpha^\Gamma(X, x_{N+1})$ можна представити у вигляді розкладу за повним набором N -електронних хвильових функцій $\Phi_i(X) \equiv \Phi_i(x_1, \dots, x_N)$ мішені A , які є

власними станами гамільтоніана H_N . Коефіцієнти такого розкладу відіграють роль хвильової функції налітаючого електрона. У практичних розрахунках цей розклад записують в такому вигляді:

$$\Psi_\alpha^\Gamma(X, x_{N+1}) = A \sum_{i=1}^n \bar{\Phi}_i^\Gamma(X; \mathbf{r}_{N+1}, \sigma_{N+1}) \times \frac{F_{i\alpha}^\Gamma(r_{N+1})}{r_{N+1}} + \sum_{j=1}^m c_j \chi_j^\Gamma(X, x_{N+1}). \quad (2)$$

Тут A – оператор антисиметризації, n – число каналів, m – число кореляційних функцій χ_j^Γ , включених у другу суму розкладу (2), $F_{i\alpha}^\Gamma(r)$ – радіальна хвильова функція розсіяного електрона в i -му каналі. Індекс α характеризує початкові умови і зазвичай позначає вхідний канал розсіяння. На практиці, як правило, в розклад (2) включають усі члени, що відповідають відкритим каналам і лише скінченне число членів, які описують енергетично закриті канали.

Позначимо через $k_i l_i m_i m_{s_i}$ квантові числа налітаючого електрона. Хвильові функції каналів $\bar{\Phi}_i^\Gamma$ містять у собі атомні хвильові функції $\Phi_i(x_1, \dots, x_N)$ та спінову $\chi_{\frac{1}{2}m_{s_i}}$ й кутову $Y_{l_i m_i}$ частини хвильової функції налітаючого електрона, які зв'язані між собою згідно з правилами векторного додавання моментів. У випадку нерелятивістського гамільтоніана H_{N+1} цей зв'язок відповідає фіксованим значенням повного орбітального моменту L та повного спіну S (кожен з яких комутує із гамільтоніаном H_{N+1}). При цьому розклад функції каналів $\bar{\Phi}_i^\Gamma$ за станами мішені Φ_i має вигляд

$$\begin{aligned} & \bar{\Phi}_i^\Gamma(x_1, \dots, x_N; \hat{\mathbf{r}}_{N+1}, \sigma_{N+1}) = \\ & = \sum_{M_{L_i} m_{L_i}} \sum_{M_{S_i} m_{S_i}} (L_i M_{L_i}, l_i m_{L_i} | L M_L) \times \\ & \times (S_i M_{S_i}, \frac{1}{2} m_{S_i} | S M_S) \Phi_i(x_1, \dots, x_N) \times \\ & \times Y_{l_i m_i}(\hat{\mathbf{r}}_{N+1}) \chi_{\frac{1}{2}m_{S_i}}(\sigma_{N+1}), \end{aligned} \quad (3)$$

де використано стандартні позначення для коефіцієнтів Клебша–Гордана.

Хвильова функція континууму $F_{i\alpha}^\Gamma(r)$, що описує радіальний рух розсіяного електрона в i -му каналі, визначається таким чином:

$$F_{i\alpha}^\Gamma(r) \equiv F_{k_i l_i \alpha}^\Gamma(r), \quad F_{i\alpha}^\Gamma(0) = 0, \quad \varepsilon_i = k_i^2/2. \quad (4)$$

Повна енергія $(N+1)$ -електронної системи $E = E_i(Z, N) + \varepsilon_i$, причому $E_i(Z, N)$ – енергія атомного стану, що відповідає каналу i , а $\varepsilon_i = k_i^2/2$ – кінетична енергія налітаючого електрона (в атомних одиницях). Якщо величина $(E - E_i)$ додатна, що відповідає відкритому каналу, то функція континууму $F_{i\alpha}^\Gamma(r)$ на нескінченності містить розбіжну хвилю, в протилежному випадку $((E - E_i) < 0)$ функція $F_{i\alpha}^\Gamma(r)$ квадратично інтегровна.

Розклад повної хвильової функції (2) $(N+1)$ -електронної системи здійснюється за набором станів і псевдостанів мішені, хвильові функції яких $\Phi_i(X)$ будуються у вигляді лінійної комбінації:

$$\Phi_i(X) = \sum_j c_{ij} \varphi_j(x_1, \dots, x_N), \quad (5)$$

де φ_j – заданий набір антисиметризованих одноконфігураційних функцій, що відповідають певному стану $L_i S_i \pi_i$ мішені. Енергетичний спектр $E_i(Z, N)$ мішені A і коефіцієнти розкладу c_{ij} можна визначити із умови діагоналізації N -електронного гамільтоніана H_N на функціях вигляду (5):

$$\langle \Phi_i | H_N | \Phi_j \rangle = E_i(Z, N) \delta_{ij}. \quad (6)$$

У рамках багатоконфігураційного методу Гартрі–Фока (БКГФ) функції конфігураційних станів (ФКС) $\varphi_j(x_1, \dots, x_N)$ можна представити у вигляді антисиметризованого добутку одноелектронних хвильових функцій $\varphi_{\alpha_j}(x_j)$. Якщо спин-орбітальна взаємодія несуттєва, то хвильову функцію окремого електрона в центральному полі можна подати у вигляді добутку просторової та спінової функцій:

$$\begin{aligned} \varphi_{\alpha_j}(x) & = \varphi_{n_j l_j m_j}(\mathbf{r}) \chi(m_s | \sigma) = \\ & = \frac{1}{r} P_{n_j l_j}(r) Y_{l_j m_j}(\hat{\mathbf{r}}) \chi(m_s | \sigma), \end{aligned} \quad (7)$$

де n_j, l_j і m_j – відповідно головне, азимутальне і магнітне квантові числа, m_s – проекція спіну, а α_j – скорочене позначення набору квантових чисел n_j, l_j, m_j і m_s . Принциповим питанням є вибір типу радіальних одноелектронних хвильових функцій $P_{n_j l_j}(r)$ (аналітичних орбіталей слетерівського типу, гартрі-фоківських у самоузгодженому полі чи радіальних орбіталей $P_{n_j l_j}(r)$ в простих статичних модельних потенціалах) і конфігурацій,

включених в розклад (5) станів і псевдостанів мішені. Програмні коди, які дозволяють обчислити ці орбіталі і атомні стани ретельно описані в наших попередніх працях [6, 9, 11, 13, 21], а тут лише зазначимо, що розв'язки матричного рівняння (6) визначають власні значення енергії атома-мішені.

Друга сума в правій частині розкладу (2) містить квадратично інтегровані кореляційні функції $\chi_j^\Gamma(X, x_{N+1})$, які описують зв'язані стани $(N+1)$ -електронної системи і мають ту ж кутову симетрію, що і $\Psi_\alpha^\Gamma(X, x_{N+1})$. Ці функції служать для покращення опису станів системи на малих відстанях від ядра і часто приводять до більш швидкої збіжності розкладу (2). За допомогою функцій χ_j^Γ також можна врахувати вплив деяких автовідривних станів (АВС) від'ємного іона A^- , які проявляються в розсіянні електронів на нейтральних атомах A . У практичних розрахунках кореляційні функції χ_j^Γ найчастіше використовують для усунення обмежень, які накладаються на хвильову функцію зіткнення Ψ_α^Γ умовою ортогональності функції $F_{i\alpha}^\Gamma$ усім радіальним орбіталям мішені $P_{n_j l_j}$ тієї самої симетрії [16, 17]:

$$\langle P_{n_j l_j} | F_{i\alpha}^\Gamma \rangle = \int_0^\infty P_{n_j l_j}(r) F_{i\alpha}^\Gamma(r) dr = 0, \text{ при } l_i = l_j. \quad (8)$$

Умова ортогональності (8) є, безумовно, суто “технічним” припущенням, оскільки радіальні орбіталі $P_{n_j l_j}$ і $F_{i\alpha}^\Gamma$ обчислюються в різних потенціалах. Вона не впливає із основних вимог квантової механіки і була впроваджена в методі СЗК, виходячи з міркувань зручності обчислень. Унаслідок обмежень, що накладаються на функцію зіткнення Ψ_α^Γ умовою ортогональності (8), налітаючий електрон не може бути віртуально захоплений в одну із незаповнених підоболонь, врахованих у розкладі (5) станів і псевдостанів мішені. У рамках стандартного методу СЗК можливість такого захоплення, як зазначалося вище, враховується шляхом включення в розклад (2) спеціальних додаткових кореляційних функцій χ_j^Γ . Однак такий спосіб урахування резонансних ефектів не є найбільш економним і часто призводить до появи нефізичної псевдорезонансної структури в перерізах розсіяння та до необхідності розв'язання громіздкої системи зв'язаних інтегро-диференціальних рівнянь для $F_{i\alpha}^\Gamma$. Щоб уникнути цих утруднень, збільшити

точність теорії і розширити область її застосування, ми повинні відмовитися від умови “вимушеної” ортогональності (8) функцій континууму $F_{i\alpha}^\Gamma$ до радіальних орбіталей мішені $P_{n_j l_j}$. При цьому окремо вводити в другу суму розкладу (2) спеціальний набір кореляційних функцій χ_j^Γ , який враховує вплив деяких автоіонізаційних станів, немає потреби, оскільки тепер перша сума в розкладі (2) містить хвильові функції таких станів.

Підставляючи в рівняння Шредінгера (1) функцію зіткнення Ψ_α^Γ у вигляді (2) і проєкціюючи це рівняння по чергово на хвильові функції мішені Φ_i та кореляційні функції χ_j^Γ , можна дістати систему зв'язаних інтегро-диференціальних рівнянь для радіальних функцій $F_i \equiv F_{i\alpha}^\Gamma(r)$:

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l_i(l_i + 1)}{r^2} + \frac{2Z}{r} + k_i^2 \right) F_i(r) = 2 \sum_j (V_{ij} + W_{ij} + X_{ij}) F_j(r). \quad (9)$$

Тут $k_i^2 = 2[E - E_i(Z, N)]$, V_{ij} – прямий локальний потенціал, а інтегральні оператори нелокального обмінного W_{ij} та нелокального кореляційного X_{ij} потенціалів визначаються таким чином:

$$W_{ij} F_j = \int_0^\infty W_{ij}(r, r') F_j(r') dr',$$

$$X_{ij} F_j = \int_0^\infty X_{ij}(r, r') F_j(r') dr'. \quad (10)$$

Загальні вирази для операторів V_{ij} , W_{ij} та X_{ij} вельми громіздкі і в явному вигляді були записані лише для розсіяння електрона на простих атомах. Проте для складних атомів та іонів їх можна сконструювати за допомогою програмного коду [32].

2.2. Метод R -матриці та його модифікації

Роз'яснимо основи стандартного методу R -матриці, в якому задача діагоналізації гамільтоніана на просторі як відкритих, так і закритих каналів зводиться по суті до розв'язування системи алгебраїчних рівнянь. Відмітна особливість методу R -матриці полягає в тому, що увесь конфігураційний простір $(N + 1)$ -електронної системи “атом + налітаючий електрон” розбивається на дві

області: внутрішню $r \leq a$, де усі частинки системи (електрони та ядро) попарно близькі одна до одної і сильно взаємодіють між собою, і зовнішню $r > a$, в якій розсіяний електрон “чутливий” лише до локального потенціалу взаємодії з атомом. Радіус внутрішньої області a вибирається мінімальним, але таким, щоб усі радіальні хвильові функції $P_{n_j l_j}$ атомних електронів із заданою точністю обертали ся в нуль при $r > a$. В даному методі обчислюється R -матриця, яка визначається із рівняння

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

шляхом розв’язання задачі про $e+A$ -зіткнення у внутрішній області $r \leq a$. Тут F_j і dF_j/dr_{N+1} – розв’язки системи рівнянь (9) на межі $r = a$, причому вибір параметрів b_j може бути довільним. Розв’яжемо задачу про $e+A$ -зіткнення у внутрішній області. Для цього представимо повну хвильову функцію $(N+1)$ -електронної системи при заданій енергії E у вигляді розкладу

$$\Psi_E^\Gamma = \sum_k A_{Ek}^\Gamma \Psi_k^\Gamma. \quad (12)$$

Подібно до (2), сконструюємо для кожного набору квантових чисел $LS\pi$ незалежний від енергії дискретний базис $(N+1)$ -електронних функцій

$$\begin{aligned} \Psi_k^\Gamma(X, x_{N+1}) &= \\ &= A \sum_{i,j} \bar{\Phi}_i^\Gamma(X, \hat{r}_{N+1}, \sigma_{N+1}) \frac{u_j(r_{N+1})}{r_{N+1}} c_{ijk}^\Gamma + \\ &+ \sum_i \chi_i^\Gamma(X, x_{N+1}) d_{ik}^\Gamma, \end{aligned} \quad (13)$$

де функції $\bar{\Phi}_i^\Gamma$ і χ_i^Γ мають такий самий зміст, як і в розкладі (2). Зазначимо тепер, що в першій сумі правої частини рівності (13) ми розклали радіальні орбіталі розсіяного електрона $F_{i\alpha}^\Gamma$ за базисними функціями u_j , які задані на скінченному інтервалі $0 \leq r \leq a$ і задовольняють такі граничні умови:

$$u_j(0) = 0, \quad a \frac{du_j}{dr} \Big|_{r=a} = b u_j(a), \quad (14)$$

де b – довільна дійсна стала. Для базисних функцій u_j , що задовольняють граничні умови (14),

гамільтоніан H_{N+1} у внутрішній області не є ермітовим унаслідок того, що поверхневі члени не обертаються в нуль при $r = a$. Однак ці члени можна вилучити за допомогою оператора Блоха [33]:

$$L_{N+1} \equiv \sum_{i=1}^{N+1} \frac{1}{2} \delta(r_i - a) \left(\frac{d}{dr_i} - \frac{b-1}{r_i} \right). \quad (15)$$

Тепер рівняння Шредінгера (1) доцільно переписати у такому вигляді:

$$(H_{N+1} + L_{N+1} - E)\Psi = L_{N+1}\Psi. \quad (16)$$

Використовуючи розклад функції Гріна $(H_{N+1} + L_{N+1} - E)^{-1}$ оператора лівої частини рівняння (16) за дискретним базисом Ψ_k^Γ , формальний розв’язок рівняння Шредінгера (1) можна подати у вигляді

$$|\Psi^\Gamma\rangle = \sum_k |\Psi_k^\Gamma\rangle \frac{1}{E_k^\Gamma - E} \langle \Psi_k^\Gamma | L_{N+1} | \Psi^\Gamma \rangle_{\text{int}}. \quad (17)$$

Коефіцієнти c_{ijk}^Γ і d_{ik}^Γ розкладу (13) визначаються водночас із власними значеннями енергії E_k^Γ при числовій діагоналізації матриці модифікованого гамільтоніана $H_{N+1} + L_{N+1}$ на дискретному базисі Ψ_k^Γ (13):

$$\langle \Psi_k^\Gamma | H_{N+1} + L_{N+1} | \Psi_{k'}^\Gamma \rangle_{\text{int}} = E_k^\Gamma \langle \Psi_k^\Gamma | \Psi_{k'}^\Gamma \rangle_{\text{int}}. \quad (18)$$

Тут інтегрування по радіальних змінних обмежується внутрішньою R -матричною областю. Оскільки на базисні функції u_j накладені граничні умови (14), то спектр E_k^Γ є дискретним. Обчислені власні значення E_k^Γ ермітової матриці $\langle \Psi_k^\Gamma | H_{N+1} + L_{N+1} | \Psi_{k'}^\Gamma \rangle$ є дійсними і утворюють дискретизований континуум.

Суть пропонованого в наших працях [6–13, 21–26] методу дискретизації континууму $(N+1)$ -електронної системи “атом + налітаючий електрон” полягає в представленні як зв’язаних орбіталей мішені $P_{n_j l_j}(r)$, так і орбіталей розсіяного електрона $F_{i\alpha}^\Gamma(r)$ у вигляді розкладу за повним скінченим набором $\{B_i\}_{i=1}^n$ базисних сплайнів B_i і подальшій одноразовій діагоналізації матриці самоспряженого гамільтоніана системи $H_{N+1} + L_{N+1}$ на дискретному базисі (13). Основна зручність такого методу дискретизації континууму полягає в тому, що матриця повного гамільтоніана $H_{N+1} +$

+ L_{N+1} має в B -сплайновому базисі сильно розріджену, а саме стрічкову структуру, що суттєво спрощує розв'язання відповідної системи алгебраїчних рівнянь. Разом з тим B -сплайни найкращим чином підходять для створення обчислювальних методів теорії розсіяння. Обчислення матриці гамільтоніана $H_{N+1} + L_{N+1}$ в дискретному базисі (13) і її діагоналізацію можна провести за допомогою програмного коду [32, 34] для кожного фіксованого набору квантових чисел $LS\pi$.

Проекціюючи рівняння (17) на функції каналів $\bar{\Phi}_i^\Gamma$ і виконуючи обчислення в точці $r = a$, приходимо до формули (11), в якій елементи R -матриці визначаються виразом

$$R_{ij}^\Gamma(E) = \frac{1}{2a} \sum_k \frac{w_{ik}^\Gamma(a) w_{jk}^\Gamma(a)}{E_k^\Gamma - E}. \quad (19)$$

Для скорочення запису у формулах (11) і (19) введено позначення для приведених радіальних хвильових функцій F_i^Γ та поверхневих амплітуд w_{ik}^Γ :

$$\begin{aligned} F_i^\Gamma(r_{N+1}) &= r_{N+1} \langle \bar{\Phi}_i^\Gamma | \Psi_k^\Gamma \rangle', \\ w_{ik}^\Gamma &= a \langle \bar{\Phi}_i^\Gamma | \Psi_k^\Gamma \rangle'_{r_{N+1}=a}. \end{aligned} \quad (20)$$

Штрихи у виразах (20) вказують на те, що інтегрування в матричних компонентах $\langle \bar{\Phi}_i^\Gamma | \Psi_k^\Gamma \rangle$ функцій $\bar{\Phi}_i^\Gamma$ слід проводити за просторовими і спіновими координатами усіх електронів, крім радіальної координати r_{N+1} розсіяного електрона.

Одержані співвідношення для R -матриці (19) та орбіталей неперервного спектра (11) описують процес розсіяння електронів на атомах чи іонах у внутрішній R -матричній області. Разом з виразом для коефіцієнтів $A_{E_k}^\Gamma$ розкладу (12),

$$\begin{aligned} A_{E_k}^\Gamma &= \frac{1}{2a} (E_k^\Gamma - E)^{-1} \sum_i w_{ik}(a) \left(a \frac{dF_i^\Gamma}{dr} - b F_i^\Gamma \right)_{r=a} = \\ &= \frac{1}{2a} (E_k^\Gamma - E)^{-1} \mathbf{w}^T \mathbf{R}^{-1} \mathbf{F}^\Gamma, \end{aligned} \quad (21)$$

вони дозволяють обчислити хвильову функцію зіткнення Ψ_E^Γ у внутрішній області для будь-якого значення повної енергії системи E . Використовуючи співвідношення (11), (19)–(21), можна коректно визначити K - та S -матриці за допомогою процедури зшивання розв'язків у внутрішній області з асимптотичними розв'язками у зовнішній області:

$$F_{i\alpha}(r) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} k_i^{-1/2} [\delta_{i\alpha} \sin \xi_i(r) + K_{i\alpha} \cos \xi_i(r)]. \quad (22)$$

Тут $K_{i\alpha}$ – елементи K -матриці, а

$$\xi_i(r) = k_i r - l_i \pi / 2 + \eta_i \ln(2k_i r) + \arg \Gamma(l_i + 1 - i\eta_i) \quad (23)$$

– асимптотична фаза регулярної кулонівської функції з $\eta_i = -(Z - N)/k_i$; $\arg \Gamma(l_i + 1 - i\eta_i)$ – фаза Γ -функції комплексного аргументу. Деталі процедури зшивання розв'язків ретельно описано в наших працях [6, 32, 34]. Матрицю розсіяння $S_{i\alpha}$ і матрицю переходу $T_{i\alpha}$ з розмірностями $n \times n$ можна визначити за допомогою відомих матричних співвідношень

$$\mathbf{S} = \mathbf{1} + \mathbf{T} = \frac{\mathbf{1} + i\mathbf{K}}{\mathbf{1} - i\mathbf{K}}. \quad (24)$$

Ці матриці в подальшому використовуються для розрахунку перерізів розсіяння та всіх інших спостережуваних величин.

Тут варто зауважити, що для процесів $e + A$ -розсіяння за участю квазістаціонарних автоіонізаційних станів (АІС) досі немає стандартних рецептів побудови фізично прийнятної базису Ψ_k^Γ , за яким розкладають хвильову функцію зіткнення Ψ_E^Γ . Оскільки в першій сумі по i в розкладі (13) не враховано ряд каналів, результати R -матричних розрахунків процесів розсіяння електронів на атомах чи іонах можна вважати справедливими тільки там, де ці канали закриті і вплив відповідних АІС малий. Очевидно, що з цієї причини область енергії зіткнення, в котрій можна користуватися розкладами (12) та (13), буде обмежена. Альтернативний підхід, запропонований в наших працях [6, 9, 11, 13, 21], ґрунтується на доповненні дискретного базису Ψ_E^Γ хвильовими функціями псевдостанів, які імітують невраховану в першій сумі розкладу (13) частину дискретного та неперервного спектрів. Такий підхід дозволяє доволі точно врахувати поляризацію мішені в полі налітаючого електрона, що особливо важливо при малих енергіях зіткнення.

При конкретних розрахунках процесів $e + A$ -розсіяння найбільша частина машинного часу витрачається на обчислення матричних елементів у рівнянні (18) та діагоналізацію самоспряженого гамільтоніана $H_{N+1} + L_{N+1}$ у дискретному базисі Ψ_k^Γ (13). Однак цю трудомістку процедуру необхідно виконати лише один раз, після чого R -матрицю можна визначити за формулою (19) у всьому діапазоні енергій. Енергетична залежність

R -матриці визначається тільки енергетичним знаменником у формулі (19). Це дозволяє проводити детальні розрахунки в широкому енергетичному інтервалі з дрібним кроком по енергії, практично здійснити вихід в комплексну площину енергій для розрахунку полюсів R -матриці і т.д.

Вибір того чи іншого представлення (12), (13) для хвильової функції зіткнення Ψ_E^Γ пов'язаний, як правило, зі збіжністю, стійкістю і точністю обчислень. При цьому точність результатів значною мірою залежить від вибору базисних функцій u_j . Проведений в наших працях [6–13] аналіз основних рівнянь теорії R -матриці показує, що основні труднощі цього методу (зокрема, слабка збіжність розкладу (12)) можна обійти, якщо замість базису чисельних функцій u_j використовувати базисні сплайни B_i з компактними носіями у внутрішній області $r \leq a$. В практичних розрахунках використання B -сплайнів як базисних функцій u_j значно прискорює обчислювальний процес, забезпечуючи при цьому необхідну точність сплайн-апроксимації хвильових функцій. Таким чином можна уникнути необхідності введення в діагональні матричні елементи (19) так званих поправок Баттла [35].

Базисні сплайни B_i володіють властивостями, немовби спеціально призначеними для вирішення обчислювальних проблем R -матричного методу. Ідея застосування базисних сплайнів B_i в теорії R -матриці пов'язана з кількома важливими моментами. По-перше, математичну основу можливості використання B -сплайнів як базисних функцій u_j становлять їх фінітні властивості. А саме, кожен B -сплайн має асоційований з R -матричним відрізком $[0, a]$ однозначно визначений мінімальний компактний носій, що вельми важливо для коректної постановки задачі розсіяння у внутрішній області $0 \leq r \leq a$. По-друге, використання B -сплайнів як базисних функцій u_j аналогічне розв'язанню задачі $e + A$ -розсіяння на R -матричному відрізку $[0, a]$, поза яким базисні сплайни B_i дорівнюють нулю. При цьому усі потенціали взаємодії, включаючи прямий V_{ij} , обмінний W_{ij} та кореляційний X_{ij} , проєкціюються на повний B -сплайновий базис і тим самим природним чином ефективно обрізаються при $r > a$. І нарешті, по-третє, скінчений набір B -сплайнів утворює на відрізку $[0, a]$ повний базис. Ця властивість базисних сплайнів B_i дозволяє будувати оптимальні компактні розклади для радіальних орбіталей розсіяного електро-

на $F_{i\alpha}^\Gamma$ у вигляді скінчених сум. А це, своєю чергою, означає, що сплайн-представлення для різних квантово-механічних операторів будуть мати сильно розріджену стрічкову структуру, що істотно спрощує обчислювальну схему методу R -матриці.

Отже, сутність описаної вище БСР-версії методу R -матриці полягає в тому, що в ній: 1) радіальні функції континууму $F_{i\alpha}^\Gamma(r)$ не ортогоналізуються з орбіталями мішені $P_{n_j l_j}(r)$; 2) використовуються залежні від терму неортогональні орбіталі та сплайн-представлення для базисних функцій; 3) резонансні ефекти враховуються без залучення кореляційних функцій χ_i^Γ . Таким чином, в пропонованій БСР-версії методу R -матриці можна обійтись без будь-яких кореляційних функцій χ_i^Γ або ж використовувати мінімально необхідний набір таких функцій для забезпечення повноти R -матричного розкладу (13). Такий підхід ґрунтується на коректних розрахунках радіальних функцій континууму $F_{i\alpha}^\Gamma(r)$ у внутрішній області $r \leq a$. Використання неортогональних (щодо зв'язаних орбіталей мішені $P_{n_j l_j}(r)$) хвильових функцій континууму $F_{i\alpha}^\Gamma$ позбавляє нас необхідності вводити в другу суму розкладу (13) додатковий набір кореляційних функцій, які, як зазначалося вище, часто приводять до різних штучних ефектів і, наприклад, до псевдорезонансів, які спостерігаються в результатах розрахунків перерізів розсіяння. На відміну від стандартного методу R -матриці [16, 17], в пропонованій в наших працях [6–13, 21–26] БСР-версії цього методу радіальні орбіталі мішені $P_{n_j l_j}$ оптимізуються для кожного терму незалежно. Використання залежних від терму неортогональних орбіталей забезпечує більш точний опис станів мішені і дає змогу найбільш повно врахувати такі важливі фізичні ефекти, як валентні і корвалентні кореляції в атомах з незаповненими оболонками та релаксацію квантової орбіти збудженого електрона. Розробка концепції неортогональних орбіталей і встановлення їх ролі в розрахунках атомних структур та процесів розсіяння в значній мірі були зроблені в праці [6], яка слугувала основою при створенні пакету прикладних програм [32].

3. Резонанси в розсіянні електронів на атомі кальцію

Розрахунки структури мішені і процесів зіткнення в даній роботі виконані аналогічно нашим

попереднім розрахункам розсіяння електронів на нейтральному атомі кальцію при низьких енергіях зіткнення [6, 8, 36]. Розклад повної хвильової функції $\Psi_{\alpha}^{\Gamma}(X, x_{N+1})$ ($N + 1$)-електронної системи “атом + налітаючий електрон” для кожної комбінації $\Gamma \equiv (\gamma LSM_L M_S \pi)$ здійснюється за набором із 39 найнижчих спектроскопічних станів атома Ca аж до $4s8s^1S$. Точні представлення хвильових функцій мішені були отримані нами завдяки використанню в *ab initio* розрахунках структури атома Ca багатоконфігураційного методу Гартрі–Фока (БКГФ) з неортогональними орбіталями та сплайн-представленнями для базисних функцій [37]. При цьому валентні і корвалентні кореляції враховувалися шляхом включення у розклад станів і псевдостанів мішені (5) спеціальних додаткових електронних конфігурацій зі збудженим кором. Для з’ясування точності визначення хвильових функцій мішені, в нашій попередній праці [6] були розраховані енергії зв’язку для 39 найнижчих спектроскопічних станів Ca та сили осциляторів для найважливіших переходів в атомі кальцію. Точність розрахованих енергій зв’язку виявилася близькою до точності, досягнутої в обширних БКГФ-обчисленнях [38], і даний опис структури мішені є істотно кращим у порівнянні з тими, що використовувалися в попередніх розрахунках стандартним методом R -матриці [39–41]. Відхилення обчислених енергетичних рівнів від рекомендованих значень NIST [42] загалом менше, ніж 0,1 еВ. Результати розрахунків сил осциляторів також добре узгоджуються з даними, рекомендованими NIST [43].

Для розрахунку розсіяння в даній праці використовувався пакет прикладних програм BSR [32]. Особливості застосування цього пакету до $e + Ca$ -розсіяння описані у працях [6, 7], а тут лише відзначимо, що ми використовуємо залежні від терму неортогональні орбіталі, які оптимізуються індивідуально для різних станів, що становлять інтерес. При цьому як зв’язані орбіталі мішені, так і орбіталі розсіяного електрона представляються у вигляді розкладу за базисними сплайнами B_j , заданими на скінченному R -матричному інтервалі $0 \leq r \leq a$. У розрахунках $e + Ca$ -розсіяння, як і при обчисленні зв’язаних станів мішені, ми використовували 118 базисних сплайнів 8-го порядку. R -матричний радіус був рівним $a = 80a_0$, де $a_0 = 0,529 \cdot 10^{-10}$ м позначає радіус Бора.

Перейдемо безпосередньо до вивчення резонансних явищ у зіткненні повільних електронів з атомами Ca. При зіткненні електронів з нейтральними атомами ефекти віртуального захоплення налітаючого електрона в незаповнені підоболонки мішені приводять до характерних особливостей в перерізах пружного розсіяння і збудження поблизу порогів нових енергетично закритих каналів. Це пояснюється такою обставиною. Поряд з прямим потенціальним збудженням існує резонансне збудження, пов’язане з утворенням і розпадом квазістаціонарних станів системи “атом + налітаючий електрон”. Автоіонізаційний розпад таких станів від’ємного іона A^- дає додатковий внесок у переріз збудження атома чи пружного розсіяння.

Як відомо, більшість реально існуючих резонансів проявляється у багатоканальних системах електрон-атомних взаємодій. Втім, багато які істотні риси явища резонансу виявляються і в більш простій, одноканальній ситуації. Саме з цієї причини ми розпочинаємо обговорення резонансів з одноканального випадку.

Розглянемо спочатку ті властивості резонансної парціальної амплітуди, на яких базуються тести, що часто застосовуються для виявлення нестабільних квазістаціонарних станів (резонансів) у випадку чисто пружного $e + A$ -розсіяння і відсутності нерезонансного фону. Якщо мова йде про $e + A$ -зіткнення при енергіях, близьких до резонансних, то парціальні нерезонансні хвилі порівняно малі і основний внесок у повний переріз розсіяння спричиняє тільки резонансна парціальна хвиля. В експериментально вимірюваному перерізі буде спостерігатися різко виражений і приблизно симетричний максимум. Наявність його, взагалі кажучи, є вказівкою на можливість існування деякого резонансу.

У практичному фазовому аналізі для виявлення резонансів знаходять фазові зсуви δ_l або дійсну і уявну частини парціальної амплітуди при різних значеннях енергії. Для резонансної амплітуди фазовий зсув δ_{l_r} , що відповідає кутовому моменту l_r , дається виразом [44]

$$\delta_{l_r} = \arctg \left[\frac{\Gamma}{2(E_r - E)} \right]. \quad (25)$$

Унаслідок такої залежності від енергії E фазовий зсув δ_{l_r} при резонансі ($E = E_r$) проходить че-

рез значення $\pi/2$ і парціальна амплітуда стає чисто уявною, а переріз розсіювання досягає свого максимального значення. Як показують наведені нижче конкретні приклади розрахунку параметрів резонансів, фазовий зсув δ_{l_r} швидко зростає на ціле число π поблизу значення енергії $E = E_r$.

На практиці зазвичай застосовується спосіб виявлення резонансів по швидкості зміни парціальних фазових зсувів [44]. У випадку чисто пружного розсіювання без урахування внеску нерезонансного фону швидкість зміни фазового зсуву (25) можна знайти, обчисливши його похідну по енергії E :

$$\frac{d\delta_{l_r}}{dE} = \frac{\Gamma/2}{(E - E_r)^2 + (\Gamma/2)^2}. \quad (26)$$

Таким чином, швидкість зміни фазового зсуву максимальна при $E = E_r$, що вказує на необхідність пошуку резонансу. Згідно з формулою (26), ширина резонансу Γ пов'язана з максимальним значенням похідної $\frac{d\delta_{l_r}}{dE}$ співвідношенням

$$\Gamma = 2 \left(\frac{d\delta_{l_r}}{dE} \Big|_{E=E_r} \right)^{-1}. \quad (27)$$

Отже, щоб зробити висновок про існування чи відсутності резонансних станів з кутовим моментом l_r , необхідно використовувати тести, вказані вище. Правда, ці тести легко і однозначно визначають параметри резонансного стану тільки в дуже рідкісному випадку чисто пружних резонансів і відсутності нерезонансного фону. В загальному ж випадку резонансів, що виникають в непружній області взаємодії і накладаються на нерезонансний фон, вони не дозволяють однозначно визначити положення і ширину резонансу. Таким чином, тести, базовані на властивостях парціальних амплітуд типу Брейта-Вігнера, можуть дати лише першу, хоча й важливу, вказівку на необхідність проведення більш детального аналізу енергетичної залежності парціальних перерізів для виявлення резонансної поведінки.

В реальному випадку резонансна взаємодія супроводжується нерезонансним фоном, який можна врахувати, додавши до резонансної частини фазового зсуву δ_{l_r} (25) деяку постійну фазу δ_0 :

$$\delta(E) = \delta_0 + \delta_{l_r} = \delta_0 + \arctg \left[\frac{\Gamma}{2(E_r - E)} \right]. \quad (28)$$

Величина δ_0 називається фоновим фазовим зсувом. В припущенні енергетичної незалежності фону, ширину ізольованого резонансу Γ можна визначити із співвідношення (27).

Таким чином, поблизу резонансної енергії E_r повний фазовий зсув $\delta(E) = \delta_0 + \delta_{l_r}$ різко зростає від значення δ_0 до значення $\delta_0 + \pi$. Ми прийємо це швидке збільшення на π функції $\delta(E)$ як визначення резонансу з кутовим моментом l_r .

Перш ніж перейти до загального багатоканального випадку зауважимо, що визначення за формулами (27), (28) положення E_r і ширини Γ резонансу зазвичай не становить проблеми, поки резонанс настільки вузький, що фоновий фазовий зсув δ_0 можна вважати сталим в межах ширини резонансного рівня в околі енергії E_r . Однак для більш широкого резонансу з малим часом життя однозначне визначення його параметрів може стати складною задачею. Справа в тому, що в дійсності фоновий фазовий зсув δ_0 не є сталим, а змінюється (повільно) зі зміною енергії E . Тому точне знаходження параметрів широкого резонансу потребує знання поведінки функції $\delta_0(E)$ в енергетичному в інтервалі порядку Γ біля точки E_r : $E_r - \Gamma/2 \leq E \leq E_r + \Gamma/2$.

Зазначимо також, що в розглянутій вище простій резонансній моделі не враховуються, очевидно, непружні процеси (при яких мішень переходить в збуджений стан або іонізується). В той самий час, більшість резонансів негативних іонів A^- виникають в областях, де відкрито більше одного каналу. Крім того, вони часто перекриваються один з одним і розташовані поблизу порогів, які накладають свої власні обмеження на допустиму поведінку фазових зсувів. З часом стало зрозуміло, що для інтерпретації більш широкого кола резонансних явищ необхідна багатоканальна теорія, яка застосовна, наприклад, для аналізу $e + A$ -систем з тісно розташованими (що перекриваються) резонансами.

Інформацію про резонанси в багатоканальному випадку можна одержати із дослідження аналітичних властивостей S -матриці в комплексній площині енергії. Такий метод в принципі простий, але вимагає великого об'єму обчислень, коли розглядається багатоканальна система з великим числом резонансів, що перекриваються. Альтернативна можливість дослідження резонансів ґрунтується на багатоканальному узагальненні

виразу [45]

$$\Delta t = 2\hbar \frac{d\delta}{dE} \quad (29)$$

для часової затримки Δt в одноканальному розсіянні порівняно з часом, що витрачається на вільне проходження падаючих частинок. Відомо [44, 45], що час затримки Δt прямо пов'язаний з S -матрицею:

$$\Delta t = -i\hbar \frac{d}{dE} \ln S. \quad (30)$$

Дане співвідношення узагальнюється на багатоканальний випадок введенням матриці часу життя [27–30]

$$Q = i\hbar S \frac{dS^\dagger}{dE} = -i\hbar \frac{dS}{dE} S^\dagger = Q^\dagger(E), \quad (31)$$

де хрестик “†” позначає ермітове спряження. Легко помітити, що у випадку пружного розсіяння, коли $S = \exp(2i\delta)$, співвідношення (30) еквівалентне співвідношенню (29). Для багатоканального розсіяння діагональні елементи Q_{ii} Q -матриці є дійсними і мають фізичний зміст часової затримки, усередненої за всіма можливими вихідними каналами, включаючи і вихідний канал i .

Матриця Q вперше була введена Смітом [46], в літературі її найчастіше називають матрицею часової затримки. Із означення Q -матриці (31) видно, що вона ермітова, і тому її власні значення q_i дійсні. Їх сума, що дорівнює сліду $\text{Tr} Q$ матриці Q , пов'язана із сумою власних фаз $\delta(E)$ співвідношенням

$$2\hbar \frac{d\delta}{dE} = \text{Tr} Q(E) \equiv \sum_i Q_{ii}(E) = \sum_i q_i(E). \quad (32)$$

Канали, що визначаються власними векторами Q -матриці, будемо називати далі власними каналами по відношенню до Q -матриці, або, коротко, Q -власними каналами. Відмітною особливістю матриці часової затримки Q є те, що для ізольованого резонансу з фоновою S -матрицею, незалежною від енергії E , лише ненульове власне значення має лоренцівську форму $L(E)$ [28]. Іншими словами, тільки Q -власний канал, що відповідає цьому лоренцівському власному значенню, асоціюється з резонансом, а всі інші Q -власні канали незалежні від резонансу асимптотично.

Цей результат був поширений в [29] на резонанси, що перекриваються. Коли енергетичні діапазони двох резонансів перекриваються один з одним і фонова S -матриця не залежить від E , два власних значення $\{q_i(E), i = 1, 2\}$ Q -матриці мають два лоренцівські профілі, які уникають один одного лише поблизу їх точок перетину. Їх сума є просто сумою двох лоренціанів. Всі інші власні значення дорівнюють нулю. Це означає, що тільки два Q -власні канали асоціюються з резонансами, а всі інші Q -власні канали не пов'язані з резонансами асимптотично.

Нарешті, доведена в [30, 31] теорема узагальнює цей (останній) результат на випадок N резонансів, що перекриваються: тільки N власних значень Q -матриці є відмінними від нуля і проявляють N лоренцівських профілів, які уникають один одного поблизу їх точок перетину, доводячи таким чином, що фонова S -матриця є незалежною від енергії E . Будь-який з резонансів, що перекриваються, може розпадатися тільки в N Q -власних каналів, які відповідають цим власним значенням, і в жодний інший з Q -власних каналів. Таким чином, набір Q -власних каналів можна розділити на “простір резонансних каналів”, тобто підмножину з N Q -власних каналів, асоційованих з резонансами, і його асимптотичне доповнення, яке не пов'язане з резонансами і являє собою нерезонансний фон.

Відповідно до сформульованої вище теореми одноканальні формули Брейта–Вігнера (26) та (28) слід замінити (в разі більше одного резонансу, що можуть перекриватися) на відповідні багатоканальні формули для суми власних фаз $\delta(E)$ і сліду $\text{Tr} Q$ Q -матриці:

$$\delta(E) = \sum_{\nu=1}^N \arctg \frac{\Gamma_\nu/2}{E_\nu - E} + \delta_b(E), \quad (33)$$

$$\begin{aligned} \text{Tr} Q(E) &= \sum_{\nu=1}^N L_\nu(E) + 2\hbar \frac{d\delta_b(E)}{dE} \equiv \\ &\equiv \sum_{\nu=1}^N \frac{\hbar\Gamma_\nu}{(E - E_\nu)^2 + (\Gamma_\nu/2)^2} + 2\hbar \frac{d\delta_b(E)}{dE}. \end{aligned} \quad (34)$$

Тут E_ν позначає положення ν -го резонансу, а Γ_ν – його ширину. Внеску резонансів, що перекриваються, відповідає тепер сума N доданків, кожен з яких має типову резонансну форму (див. формули

(25) та (26)); водночас доданок $\delta_b(E)$ включає суму фонових власних фаз. При цьому слід $\text{Tr } Q(E)$ Q -матриці є простою суперпозицією лоренцівських

Таблиця 1. Перелік можливих термів непарних станів іона Ca^- в області енергій до $\sim 4,3$ еВ

Конфігурація	Можливі терми	Кількість	
		a	b
$4s4p[{}^3P]3d$	$4,2P, 4,2D, 4,2F^o$	6	6
$4s3d[{}^3D]4p$	$4,2P, 4,2D, 4,2F^o$	6	4
$4s3d[{}^1D]4p$	$2P, 2D, 2F^o$	3	2
$4s4p[{}^1P]3d$	$2P, 2D, 2F^o$	3	3
$4s4p[{}^1P]4d$	$2P, 2D, 2F^o$	3	1
$4s5s[{}^3S]5p$	$4,2P^o$	2	2
$4s5s[{}^3S]6p$	$4,2P^o$	2	2
$4s5s[{}^3S]4f$	$4,2F^o$	2	2
$4s5s[{}^1S]5p$	$2P^o$	1	1
$4s5s[{}^1S]4f$	$2F^o$	1	1
Всього		29	24

a – кількість можливих термів даної конфігурації.
b – кількість ідентифікованих термів даної конфігурації.

Таблиця 2. Перелік можливих термів парних станів іона Ca^- в області енергій до $\sim 4,3$ еВ

Конфігурація	Можливі терми	Кількість	
		a	b
$4s^23d$	$2D$	1	1
$4s4p^2[{}^3P]$	$4,2P, 2D, 2S$	4	4
$4s4p[{}^3P]4f$	$4,2D, 4,2F, 4,2G$	6	5
$4s3d[{}^3D]5s$	$4,2D$	2	2
$4s3d^2$	$2S, 4,2P, 2D, 4,2F, 2G$	7	4
$4s4p[{}^1P]4f$	$2D, 2F, 2G$	3	3
$4s3d[{}^3D]4d$	$4,2S, 4,2P, 4,2D, 4,2F, 4,2G$	10	4
$4s3d[{}^1D]4d$	$2S, 2P, 2D, 2F, 2G$	5	4
$4s5s^2[{}^1S]$	$2S$	1	1
$4s5s[{}^3S]4d$	$4,2D$	2	2
$4s5s[{}^1S]6s$	$2S$	1	1
$4s5s[{}^1S]4d$	$2D$	1	1
Всього		43	32

a – кількість можливих термів даної конфігурації.
b – кількість ідентифікованих термів даної конфігурації.

кривих $L_\nu(E)$ за винятком зазвичай малого нерезонансного фону. Припускаючи, що при енергіях в околі величини $E_\nu = E_r$ важлива лише одна власна фаза, тобто резонанс є ізольованим, можна знехтувати підсумовуванням в співвідношенні (33) і одержати формулу (28) для одноканального розсіяння.

При практичному застосуванні описаної вище концепції “простору резонансних каналів” до процесів $e + \text{Ca}$ -зіткнення чітко виділяється ряд етапів:

1. Резонансні стани можуть розпадатися в будь-який відкритий канал спільної симетрії. Вони також можуть розпадатися в будь-які власні канали, що визначаються шляхом діагоналізації S -матриці. Однак відомо, що ізольований резонанс може розпадатися лише в один (окремий) із власних каналів, який визначається шляхом діагоналізації матриці часової затримки (31). Цьому виділеному Q -власному каналу відповідає власне значення, залежність якого від енергії E має форму лоренціана $L_\nu(E)$.

2. Оскільки налітаючий електрон може при зміні енергії захопитися мішенню в будь-який можливий автовідривний стан (АВС) негативного іона Ca^- , то резонанси в перерізах $e + \text{Ca}$ -розсіяння розташовуються групами в області енергій перед відкриттям наступного непружного каналу. Це дозволяє висловити деякі загальні міркування з приводу розпаду можливих автовідривних станів, що відповідають певній конфігурації від’ємного іона Ca^- і збігаються до порога збудження одного з близько розташованих станів атома Ca . Кожний автовідривний стан від’ємного іона Ca^- володіє, поряд з іншими своїми характеристиками, певною парністю. Розпад таких станів може здійснюватися по тому чи іншому каналу зі збереженням парності. Тому в табл. 1 та 2 систематизовані у відповідності з парностями можливі автовідривні стани від’ємного іона Ca^- , які будуть об’єктами нашого подальшого дослідження.

3. Визначені в цьому розділі власні фази δ_α являють собою по суті фази діагональних елементів S -матриці (див. [31]), яка пов’язана з K -матрицею (матриця реактанса) співвідношенням (24). Цей зв’язок дозволяє проводити обчислення фаз δ_α в рамках описаної в розділі 1 БСР-версії методу R -матриці, використовуючи пакет прикладних програм RESFIT [47]. При аналізі структу-

ри резонансів ця програма дозволяє відтворити на кількісно коректному рівні лоренцівський профіль похідної в області резонансних енергій. При цьому K -матриця підганяється до аналітичної форми, яка містить інформацію про положення і ширину резонансу, а також фонову K -матрицю. Результати таких розрахунків суми власних фаз δ_α і її похідної по енергії $d\delta(E)/dE$, положень та ширин резонансів в $\text{III } e + \text{Ca}$ -розсіяння наведено на рис. 1 та в табл. 3, 4 і 5 відповідно. Три зірочки *** в передостанніх стовпцях табл. 3 і 4 приписуються найімовірнішим (тобто достовірно встановленим у наших розрахунках) резонансам (див. табл. 5), для яких величина стрибка фазового зсу-

Таблиця 3. Положення E_r і ширини Γ можливих резонансів непарних станів в інтегральних перерізах $e + \text{Ca}$ -розсіяння в області енергій до $\sim 4,3$ eV

E_r , eV	Γ , MeV	Ступінь достовірності виявлених резонансних станів Ca^-	Ймовірна класифікація
1,893	0,2	**	$4s4p[{}^3P]3d[{}^2P^\circ]$
1,922	40	*	$4s4p[{}^3P]3d[{}^2D^\circ]$
1,93	39	*	$4s4p[{}^3P]3d[{}^2F^\circ]$
2,121	59	***	$4s4p[{}^3P]3d[{}^4F^\circ]$
2,251	140	***	$4s3d[{}^3D]4p[{}^2D^\circ]$
2,48	128	**	$4s4p[{}^3P]3d[{}^4P^\circ]$
2,523	13	***	$4s4p[{}^3P]3d[{}^4D^\circ]$
2,532	14	**	$4s3d[{}^1D]4p[{}^2D^\circ]$
2,533	16	*	$4s3d[{}^3D]4p[{}^2F^\circ]$
2,533	18	*	$4s3d[{}^3D]4p[{}^4F^\circ]$
2,534	24	*	$4s3d[{}^3D]4p[{}^4P^\circ]$
2,719	16	**	$4s4p[{}^1P]3d[{}^2D^\circ]$
2,723	18	**	$4s3d[{}^1D]4p[{}^2F^\circ]$
2,797	116	**	$4s4p[{}^1P]3d[{}^2F^\circ]$
2,93	1	*	$4s4p[{}^1P]3d[{}^2P^\circ]$
2,967	45	*	$4s4p[{}^1P]4d[{}^2F^\circ]$
3,826	16	***	$4s5s[{}^3S]5p[{}^4P^\circ]$
3,877	7	***	$4s5s[{}^3S]5p[{}^2P^\circ]$
3,914	5	**	$4s5s[{}^3S]6p[{}^4P^\circ]$
3,967	40	**	$4s5s[{}^3S]4f[{}^2F^\circ]$
3,977	97	*	$4s5s[{}^3S]4f[{}^4F^\circ]$
4,059	42	*	$4s5s[{}^3S]6p[{}^2P^\circ]$
4,132	4	*	$4s5s[{}^1S]5p[{}^2P^\circ]$
4,201	56	**	$4s5s[{}^1S]4f[{}^2F^\circ]$

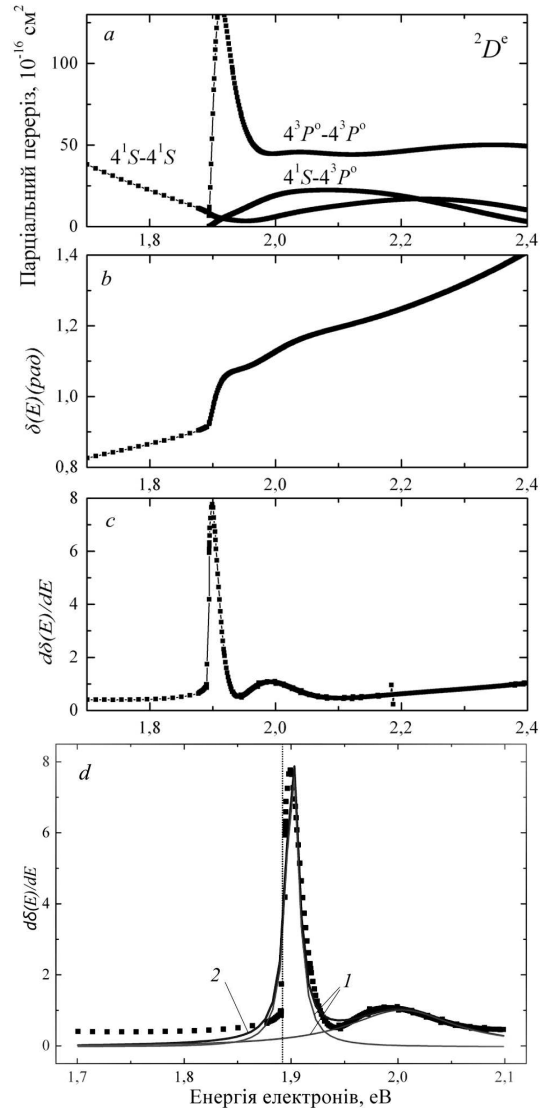


Рис. 1. Приклад резонансів, що перекриваються в $e + \text{Ca}$ -розсіянні. Парціальні внески ${}^2D^e$ -хвилі в інтегральні перерізи пружного $e + \text{Ca}$ -розсіяння в $4s^2 {}^1S$ - і $4s4p^3P^\circ$ -станах Ca та збудження переходу $4s^2 {}^1S - 4s4p^3P^\circ$ (a). Енергетична залежність суми власних фаз $\delta(E)$ для парціальної ${}^2D^e$ -хвилі (b). Енергетична залежність похідної $d\delta(E)/dE$ від суми власних фаз $\delta(E)$ в області перекриття резонансів $4s4p[{}^3P]4f {}^2D$ та $4s4p^2 {}^2D$ (c). Лоренцівські профілі похідних від власних фаз (лінії 1) та їх суми (лінія 2) у випадку двох резонансів $4s4p[{}^3P]4f {}^2D$ та $4s4p^2 {}^2D$, що перекриваються (d)

у при проходженні через резонанс ($E = E_r$) приймає значення із інтервалу $0,65\pi \leq \delta_\alpha \leq \pi$. Якщо ж значення величини стрибка фазового зсуву при

проходженні через резонанс лежить в інтервалі $\pi/2 < \delta_\alpha < 0,65\pi$, то можливим (досить ймовірним) резонансним станам Ca^- ми призначаємо дві зірочки **. Очевидно, що в цьому разі існування резонансних станів Ca^- не можна встановити без залучення додаткової інформації, наприклад, ін-

Таблиця 4. Положення E_r і ширини Γ можливих резонансів парних станів в інтегральних перерізах $e + \text{Ca}$ -розсіяння в області енергій до $\sim 4,3$ еВ

E_r , еВ	Γ , МеВ	Ступінь достовірності виявлених резонансних станів Ca^-	Ймовірна класифікація
1,193	700	***	$4s^2 3d [^2D]$
1,899	12	**	$4s 4p^2 [^3P] [^4P]$
1,899	12	**	$4s 4p^2 [^3P] [^2P]$
1,901	14	**	$4s 4p [^3P] 4f [^2D]$
1,903	17	**	$4s 4p [^3P] 4f [^4D]$
1,957	97	*	$4s 4p [^3P] 4f [^4F]$
1,966	113	*	$4s 4p [^3P] 4f [^2F]$
1,975	65	*	$4s 4p [^3P] 4f [^2G]$
2,004	122	**	$4s 4p^2 [^2D]$
2,075	246	**	$4s 4p^2 [^2S]$
2,524	1	*	$4s 3d [^3D] 5s [^2D]$
2,524	0,3	*	$4s 3d [^3D] 5s [^4D]$
2,556	39	*	$4s 3d^2 [^3F] [^4F]$
2,558	53	*	$4s 3d^2 [^3F] [^2F]$
2,559	40	*	$4s 3d^2 [^3P] [^2P]$
2,56	44	*	$4s 3d^2 [^1G] [^2G]$
2,718	126	*	$4s 4p [^1P] 4f [^2D]$
2,743	33	*	$4s 4p [^1P] 4f [^2F]$
2,75	45	*	$4s 4p [^1P] 4f [^2G]$
2,833	256	*	$4s 3d [^3D] 4d [^2P]$
2,938	12	**	$4s 3d [^1D] 4d [^2P]$
3,018	141	*	$4s 3d [^3D] 4d [^2G]$
3,019	102	**	$4s 3d [^3D] 4d [^2F]$
3,208	1029	*	$4s 3d [^3D] 4d [^4F]$
3,386	369	**	$4s 3d [^1D] 4d [^2G]$
3,414	1462	**	$4s 3d [^1D] 4d [^2F]$
3,659	101	***	$4s 3d^2 [^1S] [^2S]$
3,875	3	***	$4s 5s^2 [^1S] [^2S]$
3,917	4	***	$4s 5s [^3S] 4d [^2D]$
3,928	15	**	$4s 5s [^3S] 4d [^4D]$
4,099	3	***	$4s 5s [^1S] 6s [^2S]$
4,143	11	***	$4s 5s [^1S] 4d [^2D]$

формації про резонансну поведінку перерізу розсіяння поблизу енергії $E = E_r$. Якщо ж значення величини стрибка фазового зсуву лежить в інтервалі $0 < \delta_\alpha < \pi/2$, то можливим станам Ca^- ми призначаємо позначку *. У цьому останньому випадку існують такі стани від'ємного іона Ca^- , які не призводять до будь-якого спостережуваного резонансного (фізичного) ефекту. Порівнюючи дані табл. 3-5, можна зробити висновок про те, що в енергетичному інтервалі від порога реакції і до 4,3 еВ із 29 можливих (для вибраних конфігурацій) непарних станів іона Ca^- знайшли підтвердження у наших розрахунках 24 стани (83%), а із 43 можливих парних станів – 32 стани (74%). Саме множинність виявлених резонансів і призводить до їх помітного внеску в переріз $e + \text{Ca}$ -розсіяння, тоді як ширина більшості резонансів (див. табл. 3-5) доволі мала.

4. Для багатоелектронних систем типу Ca суттєву роль в $e + \text{Ca}$ -розсіянні відіграють нецентральні взаємодії між зовнішніми (зв'язаними) електронами Ca , а також їх взаємодії з налітаючим електроном. В таких системах спостерігаються серії резонансів з однаковими повним кутовим моментом і парністю, що збігаються до порога збудження одного з близько розташованих станів атома Ca . Це продемонстровано в табл. 3 та 4, де представлено параметри (положення E_r і ширини Γ) резонансів в $\text{III } e + \text{Ca}$ -розсіяння, окремо для парних і непарних автовідривних станів від'ємного іо-

Таблиця 5. Положення E_r і ширини Γ достовірно встановлених резонансів в інтегральних перерізах $e + \text{Ca}$ -розсіяння в області енергій до $\sim 4,3$ еВ

Енергія E_r , еВ	Ширина Γ , меВ	Зсув фази, π	Класифікація
1,193	700	0,83	$4s^2 3d \ ^2D$
2,121	59	0,83	$4s 4p [^3P] 3d \ ^4F^o$
2,251	140	0,84	$4s 3d [^3D] 4p \ ^2D^o$
2,523	13	0,85	$4s 4p [^3P] 3d \ ^4D^o$
3,659	101	0,72	$4s 3d [^1D] 4d \ ^2S$
3,826	16	0,9	$4s 5s [^3S] 5p \ ^4P^o$
3,875	3	0,98	$4s 5s^2 \ ^2S$
3,877	7	0,96	$4s 5s [^3S] 5p \ ^2P^o$
3,917	4	0,77	$4s 5s [^3S] 4d \ ^2D$
4,099	3	0,86	$4s 5s [^1S] 6s \ ^2S$
4,143	11	0,67	$4s 5s [^1S] 4d \ ^2D$

на Ca^- . В останньому стовпці табл. 3–5 наведена наглядна схема запропонованої нами класифікації виявлених резонансів у діапазоні енергій налітаючого електрона 1,893–4,3 еВ. Із табл. 3–5 видно, що у вказаному енергетичному інтервалі резонанси розташовані дуже близько один до одного і більшість з них доволі вузькі.

5. Детальні розрахунки власних значень Q -матриці визначають число N лоренцівських профілів $L_\nu(E)$, які необхідно включити в формулу (34) для точного обчислення сліду $\text{Tr} Q(E)$ Q -матриці. При наявності ізольованого вузького резонансу з великим часом життя сума всіх власних фаз $\delta(E)$ добре описується однорівневою формулою Брейта–Вігнера (28) і різко збільшується майже на π радіан в малому околі резонансної енергії $E = E_r$. Останнім часом часто застосовується спосіб виявлення резонансів по швидкості зміни парціальних фазових зсувів [31]. При цьому було виявлено, що похідна $d\delta(E)/dE$ від суми власних фаз $\delta(E)$ по енергії E є більш інформативною характеристикою для аналізу резонансних особливостей, ніж сама сума власних фаз $\delta(E)$. Це має як практичні, так і фізичні аспекти. З одного боку, в похідній $d\delta(E)/dE$ резонанси більш чітко виокремлюються, ніж в самій сумі власних фаз $\delta(E)$. З іншого боку, похідна $d\delta(E)/dE$ безпосередньо пов'язана з часом життя резонансного стану, що допускає прозору фізичну інтерпретацію. Крім того, слід Q -матриці, як і похідна $d\delta(E)/dE$ від суми власних фаз $\delta(E)$, мають лоренцівський профіль в області резонансних енергій, який можна відтворити на кількісному рівні засобами OriginPro 7,0. Графічна ілюстрація до сказаного представлена також на рис. 1, де наведені основні кроки аналізу структури резонансних особливостей в III $e + \text{Ca}$ -розсіянні при енергіях 1,901 та 2,004 еВ для $^2D^e$ -хвилі. Параметри резонансів (положення E_ν і ширини Γ_ν), добуті із аналізу енергетичної залежності похідної $d\delta(E)/dE$ поблизу порогів збудження атомних рівнів, наведені в табл. 3 для непарних станів і в табл. 4 для парних станів.

Практичний висновок із сказаного вище такий: перші вказівки на існування резонансів слід шукати в енергетичних залежностях не тільки перерізів розсіяння, а й суми власних фаз $\delta(E)$ в околі резонансної енергії E_r . В загальному випадку багатоканального розсіяння більш повну інформа-

цію стосовно параметрів резонансів (E_ν , Γ_ν) можна одержати із аналізу похідної $d\delta(E)/dE$ від суми власних фаз $\delta(E)$ по енергії E (при аналізі таких резонансів “одноканальні” формули Брейта–Вігнера (26) і (28) замінюються на відповідні “багатоканальні” формули (33) і (34)).

Для ілюстрації загальних положень, сформульованих вище, на рис. 1 ми наводимо також приклад двох можливих резонансів, що перекриваються, при енергіях 1,901 та 2,004 еВ. Зокрема, на рис. 1, b зображена енергетична залежність суми власних фаз (в одиницях π радіан) в $^2D^e$ -хвилі пружного $e + \text{Ca}$ -розсіяння в станах $4s^2 \ ^1S$ і $4s4p^3P^o$ та збудження переходу $4s^2 \ ^1S - 4s4p^3P^o$. В процесі зіткнення налітаючий електрон і атом Ca можуть утворити при енергіях 1,901 та 2,004 еВ квазізв'язану систему Ca^- в станах $4s4p[^3P]4f \ ^2D$ та $4s4p^2 \ ^2D$ відповідно.

Лоренцівські профілі, які відповідають резонансам $4s4p[^3P]4f \ ^2D$ та $4s4p^2 \ ^2D$ і показані на рис. 1, d лініями 1, одержані шляхом лоренц-підгонки похідних від власних фаз у $^2D^e$ -парціальній хвилі. Резонансні піки на цих кривих при енергіях 1,901 та 2,004 еВ (див. рис. 1, d) рознесені помітно один від одного. Результуюча крива процедури лоренц-підгонки енергетичної залежності похідної $d\delta(E)/dE$ від суми власних фаз $\delta(E)$ для двох вказаних резонансів зображена на рис. 1, d лінією 2. Положення і ширини лоренціанів підгонки відповідають положенням та ширинам відповідних резонансів в III $e + \text{Ca}$ -розсіяння, обчислених в наближенні BSR39 і позначених на рис. 1, $a-d$ квадратами (■).

Для розрахунку власних фаз δ_α використовувався пакет прикладних програм RESFIT [47], а енергії власних станів $4s4p[^3P]4f \ ^2D$ та $4s4p^2 \ ^2D$ обчислювалися шляхом діагоналізації гамільтоніана системи $e + \text{Ca}$. В діапазоні енергій зіткнення 1,892–2,075 еВ сума власних фаз різко зростає, як це показано на рис. 1, b . При цьому 2D -парціальні перерізи пружного розсіяння електрона на атомі Ca в метастабільному стані $4s4p \ ^3P^o$ та збудження переходу $4s^2 \ ^1S - 4s4p \ ^3P^o$ досягають своїх максимальних значень (див. рис. 1, a) при енергіях 1,901 та 2,004 еВ відповідно. Зазначимо також, що в області резонансу власна фаза стану $4s4p[^3P]4f \ ^2D$ проходить точку $\delta = \pi/2$ з більшою похідною по енергії $d\delta(E)/dE$, ніж власна фаза стану $4s4p^2 \ ^2D$, що чітко видно із рис. 1, c , d .

4. Парціальні та інтегральні перерізи розсіяння електронів на атомі кальцію в області енергій до 4,3 еВ

В принципі результати трьох останніх розділів дають все необхідне для детального аналізу процесів (пружного й непружного) розсіяння повіль-

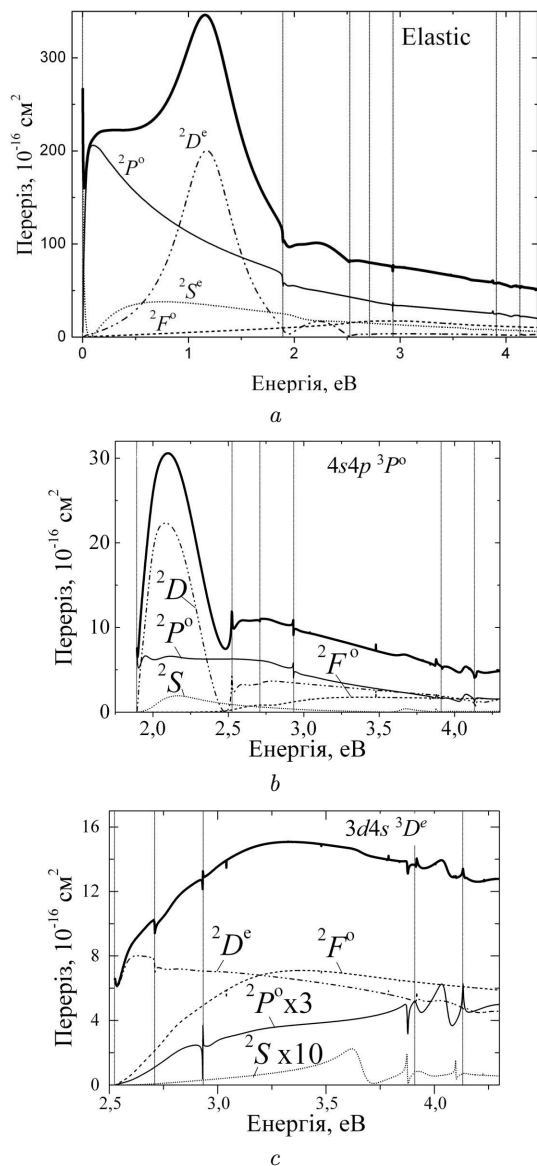


Рис. 2. Інтегральні перерізи пружного е + Са-розсіяння і збудження станів $4s4p\ ^3P^o$ та $3d4s\ ^3D^e$ атома Са (жирна суцільна лінія). Внески в ІП е + Са-розсіяння від парціальних хвиль: $^2S^e$ (.....), $^2P^o$ (-), $^2D^e$ (-.-) та $^2F^o$ (- - -). Вертикальні тонкі лінії вказують на пороги збудження станів атома Са

них електронів на атомі Са. Отримані в БСР-наближенні результати розрахунку інтегральних перерізів пружного е + Са-розсіяння і збудження станів $4s4p\ ^3P^o$, $3d4s\ ^3D^e$, $3d4s\ ^1D^e$, $4s4p\ ^1P^o$ та $4s5s\ ^3S^e$ атома Са електронним ударом в діапазоні енергій зіткнення до 4,3 еВ показані на рис. 2 і 3. У відповідних вікнах цих рисунків наведено також внески в ІП згаданих процесів від $^2S^e$ -, $^2P^o$ -, $^2D^e$ - та $^2F^o$ -парціальних хвиль. Вертикальні тонкі лінії на цих рисунках вказують на пороги збудження станів атома Са. Із рисунків видно, що поблизу цих порогів спостерігаються особливості типу точки загострення.

Як видно з рис. 2, *b*, *c* та рис. 3, *a*, *b*, *c*, збудження стану $4s4p\ ^3P^o$ дає основний непружний внесок у повний переріз е + Са-розсіяння при енергіях 2–2,4 еВ. При енергіях вище 2,5 еВ, домінуючий внесок в ІП спричинений збудженням стану $3d4s\ ^3D^e$, у той час як внески від збудження рівнів $3d4s\ ^1D^e$ та $4s5s\ ^3S^e$ порівняно малі. Нарешті, при більш високих енергіях ($E > 4,3$ еВ), не показаних на рис. 2 і 3, основний непружний внесок у повний переріз забезпечує сильне дипольне збудження рівня $4s4p\ ^1P^o$.

Наведені на рис. 2, *a* $^2S^e$ -, $^2P^o$ -, $^2D^e$ - та $^2F^o$ -парціальні перерізи дозволяють визначити характерних структур у перерізі пружного е + Са-розсіяння. Плавні максимуми в $^2S^e$ - та $^2P^o$ -симетриях не можна ототожнювати з резонансами, а натомість зумовлені швидкими змінами фазових зсувів в *s*- і *p*-хвилях при низьких енергіях. Сумісна дія короткодіючого обмінного відштовхування і далекодіючого притягання (пропорційного r^{-4}), зумовленого поляризацією атома Са в полі налітаючого електрона, породжує ефект Рамзауера–Таунсенда, який здавна становить інтерес для низки спектроскопічних застосувань [34, 48] і призводить до сильно немонотонної (тобто нерегулярної) залежності перерізу е + Са-розсіяння від енергії зіткнення *E*. При цьому фазовий зсув для *s*-хвилі проходить через нуль при $E = 0,07$ еВ, де 2S -парціальний переріз якраз і спричиняє мінімум Рамзауера–Таунсенда в перерізі пружного е + Са-розсіяння. Однак, домінуючий пік при 1,193 еВ вочевидь зумовлений резонансом в 2D -парціальному перерізі, який однозначно можна ідентифікувати як резонанс форми $4s^23d\ ^2D$. Фазовий зсув в цьому енергетичному діапазоні дійсно змінюється майже на $0,83\pi$. На рис. 2, *a* видно також невеликий пік

при більш високих енергіях між порогами збудження $4s4p\ ^3P^o$ та $3d4s\ ^3D$. Юань і Лін [40] в рамках стандартного R -матричного методу ідентифікували цей пік як $4s4p^2\ ^2D$ -резонанс. З іншого боку, наші результати не вказують на чіткий зв'язок цього піка з резонансом. Фазовий зсув у d -хвилі в цій області справді розпочинає зростати як і для реального резонансу, але на порозі $3d4s\ ^3D$ d -фаза починає швидко спадати, даючи загальний приріст тільки $\pi/4$ в області максимуму. Схоже, що цей можливий (гіпотетичний) резонанс руйнується внаслідок відкриття нових каналів розпаду. Це заставляє припустити існування іншого резонансу в s -хвилі з конфігурацією $4s4p^2\ ^2S$ і параметрами: $E_r = 2,075$ еВ, $\Gamma = 246$ меВ (див. табл. 4).

Казаков і Христофоров [49] виміряли диференціальні перерізи пружного розсіяння і функції збудження станів $4s4p\ ^3P^o$ і $4s3d\ ^3D$ атома Са при куті 90° в діапазоні енергій 0–7 еВ. Вони спостерігали широкий резонанс (максимум) в пружному розсіянні біля 1,25 еВ, який приписують 2D -резонансу форми. Низькорозташований більш вузький p -хвильовий резонанс лежить при дуже малих енергіях і для кута спостереження 90° має вигляд мінімуму з центром $E_o = 0,1$ еВ. Крім вказаних вище резонансних особливостей вони також виявили відносно різку особливість на порозі $4s4p\ ^3P^o$, яка проявляється як в пружному перерізі, так і в функції збудження рівня $4s4p\ ^3P^o$, і припустили, що це може бути зумовлено наявністю резонансу. Їх дані демонструють широку особливість біля 3 еВ, яка може бути пов'язана з резонансом $4s4p^2\ ^2D$. Автори [49] коментують також наявність іншої структури в перерізі поблизу $4s5s\ ^3S^e$ та $4s5p\ ^3P^o$ -порогів, але дані, приведені в їх статті [49], не піддаються докладному аналізу.

При більш високих енергіях ($E > 3$ еВ) проводилася також серія вимірювань функцій оптичного збудження станів атома кальцію електронним ударом. Елерс і Галлахер [50] виміряли абсолютні перерізи збудження для емісії $4p\ ^1P^o$ на довжині хвилі 422,7 нм з енергетичною роздільністю близько 0,3 еВ. Спостережувана ними структура як в перерізі збудження, так і в фракції лінійної поляризації, що прилягає до порогової області для більш високих збуджених станів, приписувалася каскадним переходам з деяких з цих станів. Не можна скидати з рахунків і можливість того, що части-

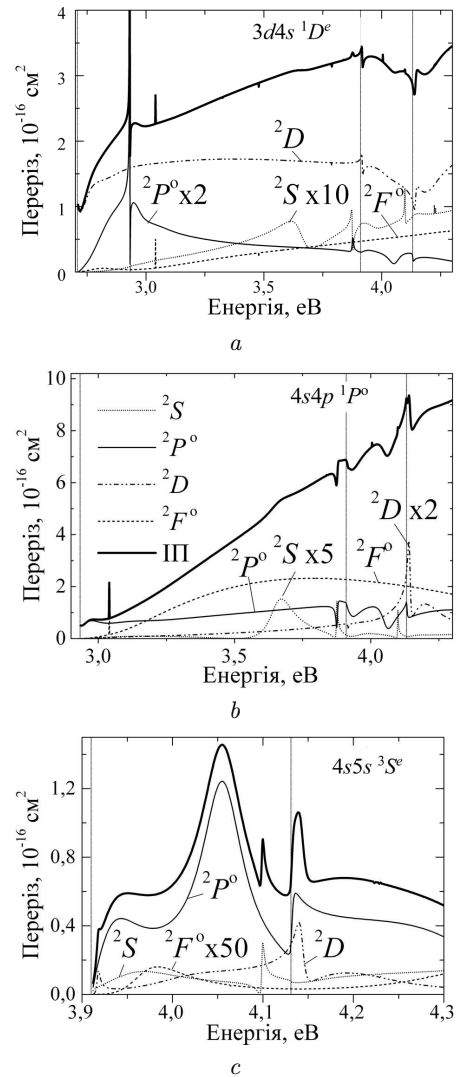


Рис. 3. Інтегральні перерізи збудження станів $3d4s\ ^1D^e$, $4s4p\ ^1P^o$ та $4s5s\ ^3S^e$ атома Са. Позначення як на рис. 2

на цієї структури викликана резонансами. Гарга та ін. [51] виміряли функції оптичного збудження для більш ніж 25 збуджених станів кальцію з енергетичною роздільністю 1,0–1,2 еВ. Вони спостерігали велику кількість структур і відзначили можливість того, що частина з них може бути пов'язана з розпадом автовідривних станів негативного іона Са⁻. З огляду на роздільну здатність цих експериментів і відсутність детальної інформації про спостережувані структури, нам недоцільно коментувати їх далі.

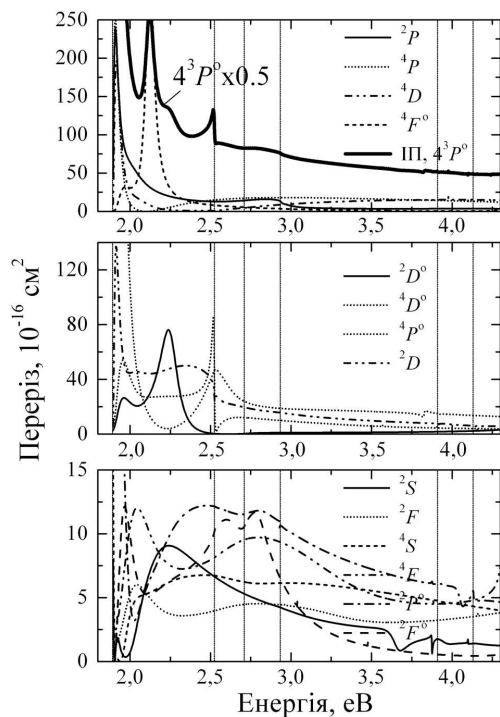


Рис. 4. Інтегральний переріз пружного розсіяння електронів на атомі кальцію у метастабільному стані $4s4p\ ^3P^0$ (жирна суцільна лінія). Внески окремих парціальних хвиль в ПП пружного e^+Ca -розсіяння наведені в графічних вікнах. Вертикальні тонкі лінії вказують на пороги збудження станів атома Ca

На рис. 4 зображена енергетична залежність ПП пружного розсіяння електронів на атомі Ca у метастабільному стані $4s4p\ ^3P^0$. На цьому ж рисунку наведено внески в ПП від $4,2S^e$ -, $4,2P^e$ -, $4,2D^e$ -, $4,2F^e$ -, $4,2D^o$ -, $4,2F^o$ -парціальних хвиль. Вище порога збудження рівня $4s4p\ ^3P^0$ основний внесок в даний ПП дають $4,2P^e$ - та $4D^e$ -парціальні хвилі. Як видно з рис. 4, в енергетичній залежності ПП помітні явно виражені структури, які могли б трактуватися як резонанси. Так, різкий максимум в $4F^o$ -симетрії зумовлений резонансом форми $4s4p[3P]3d\ ^4F^o$ (див. табл. 3 і 5), що буде підтверджено в розд. 4 при аналізі енергетичної залежності суми власних фаз.

Домінуючим процесом при $E < 1,892$ eV є пружне розсіяння електронів на атомі Ca в основному стані. Як видно з рис. 5 (ліве вікно (a)), на енергетичних залежностях парціальних $2D^e$ -перерізів пружного розсіяння електронів на атомі Ca в основному $4s^2\ ^1S$ - і метастабільному $4s4p\ ^3P^o$ -

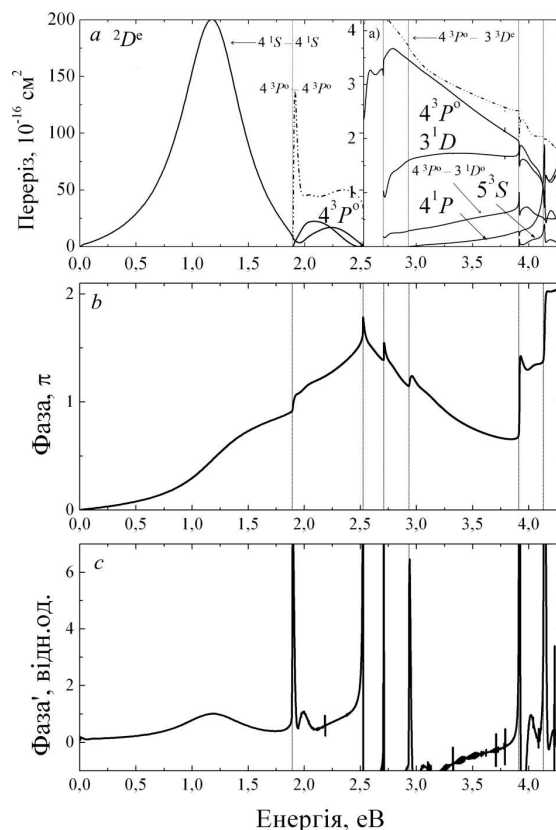


Рис. 5. Ліве вікно: внески парціальної $2D^e$ -хвилі в перерізі пружного розсіяння електронів на атомі Ca в основному $4s^2\ ^1S$ - і метастабільному $4s4p\ ^3P^o$ -станах та збудження переходів: ліве вікно – $4s^2\ ^1S - 4s4p\ ^3P^o$; праве вікно – $4s^2\ ^1S - 4s4p\ ^3P^o$, $4s^2\ ^1S - 3d4s\ ^1D^e$, $4s^2\ ^1S - 4s4p\ ^1P^o$, $4s^2\ ^1S - 4s5s\ ^3S^e$, $4s4p\ ^3P^o - 3d4s\ ^3D^e$ та $4s4p\ ^3P^o - 3d4s\ ^1D^e$ (a). Енергетична залежність суми парціальних $2D^e$ -фаз в одиницях π радіан (b). Енергетична залежність похідної по енергії від суми парціальних $2D^e$ -фаз (c)

станах та збудження переходу $4s^2\ ^1S - 4s4p\ ^3P^o$ чітко виділяються три резонансно-подібні структури в околі енергій 1,15 eV, 1,9 eV та 2,004 eV відповідно. Відстані між резонансними піками (з однаковими $L = D$) на цих енергетичних залежностях доволі малі і приблизно рівні 0,1 eV та 0,75 eV. Поведінка енергетичних залежностей суми парціальних $2D^e$ -фаз (середнє вікно (b)) та її похідної по енергії (нижнє вікно (c)) також демонструє, що у вузькому енергетичному інтервалі 1,1–2,0 eV має місце накладання трьох резонансних особливостей $4s^2\ 3d\ ^2D$, $4s4p[3P]4f\ ^2D$, $4s4p^2\ ^2D$, що є причиною чисто деструктивної картини інтерференції в околі цих резонансів.

Непружне розсіяння електронів на атомах Са стає помітним при енергіях, що перевищують 1,892 еВ. На рис. 5, *a* (праве вікно) наведені результати BSR39-розрахунків парціальних ${}^2D^e$ -перерізів збудження переходів $4s^2\ {}^1S - 4s4p\ {}^3P^o$, $4s^2\ {}^1S - 3d4s\ {}^1D^e$, $4s^2\ {}^1S - 4s4p\ {}^1P$, $4s^2\ {}^1S - 4s5s\ {}^3S^e$, $4s4p\ {}^3P^o - 3d4s\ {}^3D^e$ та $4s4p\ {}^3P^o - 3d4s\ {}^1D^e$. Як видно з цього рисунка, neprужний внесок парціальної 2D -хвилі в перерізи збудження енергетичних рівнів атома Са є істотним лише для переходів $4s4p\ {}^3P^o - 3d4s\ {}^3D^e$, $4s^2\ {}^1S - 4s4p\ {}^3P^o$ та $4s^2\ {}^1S - 3d4s\ {}^1D^e$, тоді як для решти (преставлених на рис. 5, *a*) переходів цей внесок відносно малий.

При низьких енергіях зіткнення лише кілька парціальних фаз суттєво відмінні від нуля і їх можна обчислити чисельним інтегруванням системи інтегро-диференціальних рівнянь (9) по r від початку координат до відстані $r > a$ і прирівнюванням одержаного розв'язку асимптотичному виразу (22). Визначені таким чином (з використанням пакету прикладних програм [32]) парціальні фази е + Са-розсіяння наведені на рис. 6 як для парних (верхнє вікно), так і для непарних (нижнє вікно) термів. Поведінка цих парціальних фаз в околі відповідних резонансних значень енергії підтверджує наведені в табл. 3, 4 і 5 відомості про резонансну структуру парціальних та інтегральних перерізів е + Са-розсіяння.

Порівняння енергетичних залежностей похідної від повних перерізів, виміряних безпосередньо в експерименті [18, 19] та розрахованих нами в наближенні BSR, проведено на рис. 7. Як видно з цього рисунка, структурованість резонансних особливостей в енергетичній залежності похідної $d\sigma(E)/dE$ прослідковується більш чітко, ніж в енергетичній залежності самого перерізу $\sigma(E)$. Наявні в цих енергетичних залежностях нерегулярності (різкі стрибки та пологі максимуми і мінімуми) зумовлені існуванням резонансів в деяких парціальних хвилях, а також пороговими особливостями самого перерізу. Зокрема, в поведінці енергетичних залежностей похідної $d\sigma(E)/dE$ прослідковується наявність трьох чітко виражених особливостей у вигляді широких потужних структур в околі енергій 1,15 еВ, 1,9 еВ та 2,004 еВ, що могли би трактуватися як надпорогові резонанси форми. При цьому на два пологі виступи при 1,9 еВ та 2,6 еВ накладаються характерні вузькі піки резонансів Фешбаха. При ще вищих енергі-

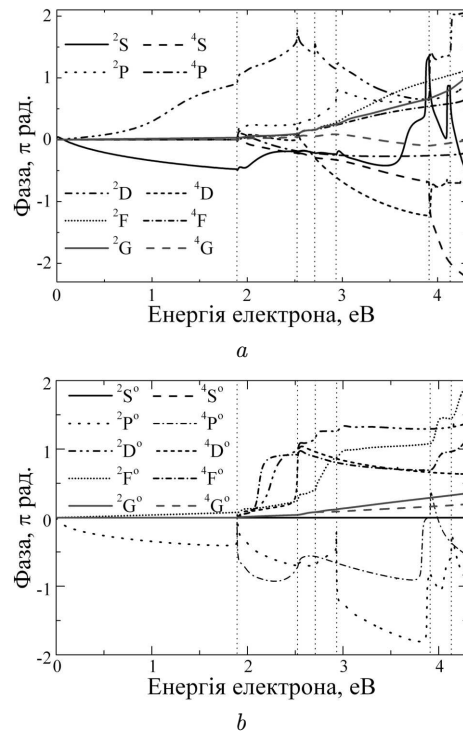


Рис. 6. Парціальні фази розсіяння електрона на атомі кальцію для парних (*a*) та непарних (*b*) термів

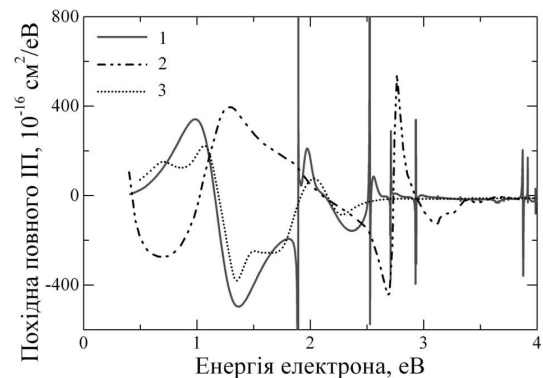


Рис. 7. Похідні повних перерізів розсіяння електрона на атомі кальцію. Експеримент: (— · — · — · —) — Johnson *et al.* [18]; (---) — Romaniuk *et al.* [19], похідні від перерізів [19] розраховані нами; (суцільна жирна лінія) — BSR39, даний розрахунок

ях ($E > 2,6$ еВ) прослідковується виникнення значної кількості вузьких резонансних піків, які поки що неможливо ідентифікувати на експерименті. Зазначимо також, що енергетичні положення особливостей на енергетичних залежностях похідної

$d\sigma(E)/dE$ від перерізу, одержаного в експерименті [19] та розрахованого нами в наближенні BSR39, добре корелюють між собою при зсуві вправо експериментальної кривої $d\sigma(E)/dE$ [19] на 0,35 еВ. В той самий час, експериментальні результати праці [18], на нашу думку, не є надійними, оскільки вимірюваний сигнал пропорційний похідній від трансмісійного струму лише при малих тисках, що не було дотримано в експерименті [18]. Тому при з'ясуванні резонансної структури $\text{III e} + \text{Ca}$ -розсіяння більш прийнятним є використання відкоригованих в [6] результатів роботи [19], а не експериментальних даних [18].

5. Висновки

Із проведеного дослідження можна зробити висновок про те, що розроблена в наших працях [6–13, 21–26] БСР-версія методу R -матриці є вельми універсальним та ефективним методом дослідження елементарних процесів взаємодії повільних електронів зі складними багатоелектронними атомами та іонами. У порівнянні зі стандартним R -матричним методом [16, 17] пропонується БСР-версія має три незаперечні переваги: 1) застосування залежних від терму неортогональних орбіталей є найекономічнішим способом урахування резонансних ефектів без залучення будь-яких кореляційних функцій та без збільшення системи інтегро-диференціальних рівнянь сильного зв'язку (9); 2) квантово-механічні оператори після їх дискретизації у B -сплайновому базисі представляються сильно розрідженими стрічковими матрицями скінченного рангу, що суттєво спрощує розв'язання відповідних систем алгебраїчних та інтегро-диференціальних рівнянь; 3) локальні властивості та повнота скінченної системи базисних сплайнів забезпечують гарантовану збіжність R -матричного розкладу, що позбавляє нас від необхідності вводити поправки Баттла в діагональні елементи R -матриці [35].

Отримано велику кількість докладних результатів БСР-розрахунку, проінтегрованих за кутом повних та парціальних перерізів пружного розсіяння електронів на атомі Ca в основному $4s^2 \ ^1S$ і метастабільному $4s4p \ ^3P^o$ станах та збудження переходів $4s^2 \ ^1S - 4s4p \ ^3P^o$, $4s^2 \ ^1S - 3d4s \ ^3D$, $4s^2 \ ^1S - 3d4s \ ^1D$, $4s^2 \ ^1S - 4s4p \ ^1P^o$ та $4s^2 \ ^1S - 4s5s \ ^3S$. Це дало можливість ретельно проаналізувати вплив

різних фізичних факторів — багатоелектронних кореляцій, резонансних ефектів, взаємодії дискретних станів з неперервним спектром та явища релаксації квантової орбіти збудженого електрона — на характеристики процесів взаємодії електронів з атомами Ca . Обчислено внески в проінтегровані за кутом повні перерізи пружного розсіяння та збудження найважливіших електронних переходів в атомі Ca від $^2S^e$ -, $^2P^o$ -, $^2D^e$ - та $^2F^o$ - парціальних хвиль. Це дозволило однозначно ідентифікувати походження характерних структур в енергетичних залежностях перерізів пружного розсіяння та збудження п'яти нижніх рівнів атома Ca .

Для виявлення і класифікації резонансів докладно проаналізовано енергетичні залежності перерізів $\sigma(E)$ $e + \text{Ca}$ -розсіяння та їх похідних по енергії $d\sigma(E)/dE$ при кожному фіксованому L і фіксованій парності. Встановлено, що в похідних від перерізу $d\sigma(E)/dE$ резонанси виявляються більш виразно, ніж у самому перерізі. Це пов'язано з тим, що велика кількість резонансів різної симетрії перекриваються по енергії і сильно інтерферують в повному перерізі.

Досліджена роль автовідривних станів від'ємного іона Ca^- в розсіянні електронів на атомі Ca і показано, що кількісно внесок резонансних процесів у перерізи пружного $e + \text{Ca}$ -розсіяння та збудження Ca доволі суттєвий. Для однозначної ідентифікації та одержання інформації про резонанси в $e + \text{Ca}$ -розсіянні ми використовуємо метод “повного розділення просторів резонансних і нерезонансних каналів” [31]. Застосування цього методу до $e + \text{Ca}$ -розсіяння дозволило виявити та ідентифікувати 56 можливих резонансних станів від'ємного іона Ca^- , кожному з яких приписано певну конфігурацію (табл. 3–5). Визначено положення і ширини виявлених резонансів та проведено їх спектроскопічну класифікацію. Існування 11 резонансів, для яких стрибок фази в околі резонансного значення енергії є близьким до π радіан (див. табл. 5), підтверджено також в експериментах [18–20] і в теоретичних працях [39–41] інших авторів.

Що стосується положень достовірно встановлених резонансів (див. табл. 5), то резонанс $4s^2 3d \ ^2D$ розташований під порогом збудження рівня $^3P^o$, резонанси $4s4p[^3P]3d \ ^4F^o$, $4s3d[^3D]4p \ ^2D^o$ та $4s4p[^3P]3d \ ^4D^o$ — між порогом $^3P^o$ і 3D , $4s3d[^1D]4d \ ^2S$, $4s5s[^3S]5p \ ^2P^o$,

$4s5s^2\ ^2S$ та $4s5s[3S]5p\ ^2P^o$ – між порогами $1P^o$ і $3S$, $4s5s[3S]4d\ ^2D$ та $4s5s[1S]6s\ ^2S$ – між порогами $3S$ і $1S$, а резонанс $4s5s[1S]4d\ ^2D$ – над порогом $1S$.

Як видно з табл. 3–5, у випадку $e + Ca$ -розсіяння резонанси розташовані дуже близько один до одного і більшість з них доволі вузькі. Тому для їх експериментального підтвердження необхідно мати високороздільну апаратуру. Також вельми цінними були би результати, отримані в експериментах з моноенергетичними пучками електронів і атомів Ca в резонансній області енергій.

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

- O. Zatsarinny, H. Parker, K. Bartschat. Electron-impact excitation and ionization of atomic calcium at intermediate energies. *Phys. Rev. A* **99**, 012706 (2019).
- J.L. Hall. Nobel Lecture: Defining and measuring optical frequencies. *Rev. Mod. Phys.* **78**, 1279 (2006).
- V.E. Fortov, B.Y. Sharkov, H. Stocker. European Facility for Antiproton and Ion Research (FAIR): The new international center for fundamental physics and its research program. *Phys.-Usp.* **55**, 582 (2012).
- К. Барнетт, М. Харрисон. *Прикладная физика атомных столкновений*. (Энергоатомиздат, 1987).
- Е.Ю. Ремета, О.Б. Шпенник, Ю.Ю. Билак. Упругое рассеяние медленных электронов атомами кальция в интервал углов, зависящий от энергии столкновения. *ЖТФ* **71**, 13 (2001).
- 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).
- S. Gedeon, V. Gedeon, V. Lazur, L. Bandurina. Partially integrated differential cross-sections of $e + Ca$ scattering. In: *9th European Conference on Atomic and Molecular Physics (ECAMP) 6–11 May 2007* (Crete, Greece, 2007).
- S. Gedeon, V. Lazur. Low-energy electron scattering from calcium. In: *40th EGAS (Annual conference of the European group for atomic systems) 2–5 July 2008* (Graz, Austria, 2008).
- 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).
- O. Zatsarinny, K. Bartschat, S. Gedeon, V. Gedeon, V. Lazur, E. Nagy. Cross sections for electron scattering from magnesium. *J. Phys: Conf. Ser.* **194**, 042029 (2009).
- V. Gedeon, S. Gedeon, V. Lazur, E. Nagy, O. Zatsarinny, K. Bartschat. Electron scattering from silicon. *Phys. Rev. A* **85**, 022711 (2012).
- O. Zatsarinny, K. Bartschat, V. Gedeon, S. Gedeon, V. Lazur, E. Nagy O. Electron scattering from silicon. In: *43rd Annual Meeting of the APS Division of Atomic, Molecular and Optical Physics (DAMOP12) 4–8 June 2012* (Orange County, California, 2012).
- 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).
- D.J. Pegg, J.S. Thompson, R.N. Compton, G.D. Alton. Evidence for a stable negative ion of calcium. *Phys. Rev. Lett.* **59**, 2267 (1987).
- C.F. Fischer, J.B. Lagowski, S.H. Vosko. Ground states of Ca^- and Sc^- from two theoretical points of view. *Phys. Rev. Lett.* **59**, 2263 (1987).
- P.G. Burke, W.D. Robb. The R-matrix theory of atomic processes. *Adv. At. Mol. Phys.* **11**, 143 (1976).
- P.G. Burke. *R-matrix Theory of Atomic Collisions* (Springer, 2011).
- A.R. Johnston, G.A. Gallup, P.D. Burrow. Low-lying negative-ion states of calcium. *Phys. Rev. A* **40**, 4770 (1989).
- N.I. Romanyuk, O.B. Shpenik, I.P. Zapesochyi. Cross sections and characteristics of electron scattering by calcium, strontium, and barium atoms. *JETP Lett.* **32**, 452 (1980).
- N.I. Romanyuk, O.B. Shpenik, F.F. Papp, I.V. Chernysheva, I.A. Mandi, V.A. Kelemen, E.P. Sabad, E.Yu. Remeta. Study of low-energy scattering of electrons by Mg and Ca atoms using an optimized trochoidal spectrometer. *Ukr. Fiz. Zh. (Russ. Ed.)* **37**, 1639 (1992).
- 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).
- O. Zatsarinny, K. Bartschat, E. Nagy, S. Gedeon, V. Gedeon, V. Lazur. Electron scattering from aluminum: B-spline R-matrix calculations. *J Phys: Conf Ser.* **635**, 052012 (2015).
- O. Zatsarinny, K. Bartschat, E. Nagy, V. Gedeon, V. Lazur. Low-energy outer-shell photodetachment of the negative ion of aluminum. *J. Phys. Conf. Ser.* **875**, 022003 (2017).
- V. Gedeon, S. Gedeon, V. Lazur, O. Zatsarinny, K. Bartschat. Low-energy outer-shell photo-detachment of the negative ion of aluminum. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **51**, 035004 (2018).
- 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. *Ukr. J. Phys.* **63**, 11, (2018).
- N.Yu. Kondor, O.V. Yegiazarian, V.Yu. Lazur. Calculations of the energy structure of P, S atoms by the R-matrix method with B-splines. *Nauk. Visn. Uzhgorod. Nats. Univ. Ser. Fiz.* **48**, 67 (2020) (in Ukrainian).
- A. Igarashi, N. Toshima, T. Shirai. Muon transfer and elastic scattering in $t + d\mu$ collisions at low energies. *Phys. Rev. A* **50**, 4951 (1994).

28. A. Igarashi, I. Shimamura. Time-delay matrix analysis of resonances: Application to the positronium negative ion. *J. Phys. B* **37**, 4221 (2004).
29. I. Shimamura, J.F. McCann, A. Igarashi. Eigenvalues of the time-delay matrix in overlapping resonances. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **39**, 1847 (2006).
30. K. Aiba, A. Igarashi, I. Shimamura. Time-delay matrix analysis of several overlapping resonances: applications to the helium atom and the positronium negative ion. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **40**, F9 (2007).
31. I. Shimamura. Complete separation of resonance and nonresonance channel spaces. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **44**, 201002 (2011).
32. O. Zatsarinny. BSR: *B*-spline atomic *R*-matrix codes. *Comput. Phys. Comm.* **174**, 273 (2006).
33. C. Bloch. Une formulation unifiée de la théorie des réactions nucléaires. *Nucl. Phys.* **4**, 503 (1957).
34. O. Zatsarinny, K. Bartschat. The *B*-spline *R*-matrix method for atomic processes: application to atomic structure, electron collisions and photoionization. *J. Phys. B* **46**, 112001 (2013).
35. P.J.A. Buttle. Solution of coupled equations by *R*-matrix techniques. *Phys. Rev.* **160**, 719 (1967).
36. S. Gedeon, V. Lazur. The calculations of cross sections of electron scattering on Calcium atom. *Nauk. Visn. Uzhgorod. Nats. Univ. Ser. Fiz.* **25**, 130 (2009).
37. O. Zatsarinny, C. Fischer. Atomic structure calculations using MCHF and BSR. *Comput. Phys. Commun.* **180**, 2041 (2009).
38. C. Froese Fischer, T. Tachiev. Allowed and spin-forbidden electric dipole transitions in Ca I. *Phys. Rev. A* **68**, 012507 (2003).
39. J. Yuan, L. Fritsche. Electron scattering by Ca atoms and photodetachment of Ca^- ions: An *R*-matrix study. *Phys. Rev. A* **55**, 1020 (1997).
40. J. Yuan, C.D. Lin. Effect of core-valence electron correlation in low-energy electron scattering with Ca atoms. *Phys. Rev. A* **58**, 2824 (1998).
41. J. Yuan. Core-valence electron correlation effects in photodetachment of Ca^- ions. *Phys. Rev. A* **61**, 012704 (1999).
42. NIST Atomic Spectra Database.
43. W.L. Wiese, J.R. Fuhr, T.M. Deters. Atomic transition probabilities of carbon, nitrogen, and oxygen: A critical data compilation. *J. Phys. Chem. Ref. Data Monogr.* **7**, 522 (1996).
44. J.R. Taylor. *Scattering Theory: the quantum theory on nonrelativistic collisions* (John Wiley and Sons, Inc., 1972).
45. Ф. Никитиу. *Фазовый анализ в физике ядерных взаимодействий* (Мир, 1983).
46. F.T. Smith. Lifetime matrix in collision theory. *Phys. Rev.* **118**, 349 (1960).
47. K. Bartschat, P.G. Burke. Resfit-A multichannel resonance fitting program. *Comput. Phys. Commun.* **41**, 75 (1986).
48. K. Bartschat, M.J. Kushner. Electron collisions with atoms, ions, molecules, and surfaces: fundamental science empowering advances in technology. *Proc. Natl. Acad. Sci.* **113**, 7026 (2016).
49. С.М. Казаков, О.В. Христофоров. Резонансное рассеяние электронов малых энергий атомами кальция. *ЖТФ* **55**, 795 (1985).
50. V.J. Ehlers, A. Gallagher. Electron excitation of the calcium 4227-Å resonance line. *Phys. Rev. A* **7**, 1573 (1973).
51. I.I. Garga, I.S. Aleksakhin, V.P. Starodub, I.P. Zapesochnyi. Excitation of alkaline-earth atoms by the electron impact. *Opt. Spektrosk.* **37**, 843 (1974).

Одержано 25.02.22

V.F. Gedeon, V.Yu. Lazur,
S.V. Gedeon, O.V. Yehiazarian

RESONANCE STRUCTURE OF CROSS-SECTIONS OF SLOW-ELECTRON SCATTERING BY CALCIUM ATOM

The extended BSR-version of the *R*-matrix method has been applied to systematically analyze the electron scattering by neutral calcium atoms at collision energies up to 4.3 eV. The strong coupling method with the sets of term-dependent nonorthogonal orbitals and the spline representation of the basis functions are used to accurately represent the target wave functions. The strong-coupling expansion included 39 bound states of the neutral calcium atom, which cover all its states from the ground one to $4s8s\ ^1S$. The complex resonance structure of the angle-integrated total cross-sections of the elastic $e + \text{Ca}$ scattering and the electron-impact excitation of the $4s4p\ ^3P^o$, $3d4s\ ^3D^e$, $3d4s\ ^1D^e$, $4s4p\ ^1P^o$, and $4s5s\ ^3S^e$ states of a Ca atom are studied in detail. The observed structures are associated with particular autodetachment states of the “incident electron + Ca atom” system. The positions and widths of detected resonances are determined, and their spectroscopic classification is carried out.

Keywords: electron, calcium atom, scattering, excitation, ionization, *R*-matrix with *B*-splines method, nonorthogonal orbitals, resonances.