

Інститут електронної фізики Національної академії наук України

Інститут фізики конденсованих систем Національної академії наук України

Кваліфікаційна наукова праця
на правах рукопису

Тимчик Роман Володимирович

УДК 539.186

ДИСЕРТАЦІЯ

РОЗРАХУНКИ НИЖНІХ АВТОІОНІЗАЦІЙНИХ СТАНІВ

АТОМІВ БЕРИЛІЮ, МАГНІЮ, КАЛЬЦІЮ

01.04.02 – теоретична фізика

(104 – фізика та астрономія)

10 – природничі науки

Подається на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук

Дисертація містить результати власних досліджень. Використання ідей, результатів і текстів інших авторів мають посилання на відповідне джерело.



Р.В. Тимчик

Науковий керівник

Симулик Володимир Михайлович
доктор фізико-математичних наук,
старший науковий співробітник

Львів – 2019

АНОТАЦІЯ

Тимчик Р.В. Розрахунки нижніх автоіонізаційних станів атомів берилію, магнію, кальцію. – Кваліфікаційна наукова праця на правах рукопису.

Дисертація на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук (доктора філософії) за спеціальністю 01.04.02 «Теоретична фізика» (104 – Фізика та астрономія). – Інститут електронної фізики Національної академії наук України, Інститут фізики конденсованих систем Національної академії наук України, Львів, 2019.

Дисертаційна робота присвячена розвитку методу взаємодіючих конфігурацій у зображенні комплексних чисел для отримання енергетичних положень та ширин автоіонізаційних станів, що виникають у процесі іонізації атомів Be, Mg, Ca електронним ударом та внаслідок фотоіонізації вказаних атомів. Мета виконуваних досліджень досягається цілеспрямованим поетапним ускладненням розрахунків енергетичних положень і ширин автоіонізаційних станів, що виникають у процесах іонізації атомних систем, від іонів H^- , Li^+ , Be^{++} до багатоелектронних атомів.

Актуальність даних досліджень має як *фундаментальний*, так і *прикладний* аспекти.

Фундаментальний аспект. Розвиток та вдосконалення методу взаємодіючих конфігурацій у зображенні комплексних чисел для опису іонізації багатоелектронних атомних систем покликані створити новий теоретичний інструмент для дослідження фізичних процесів у оболонках атомів та іонів. Метод дозволяє розраховувати не лише положення, але і ширини автоіонізаційних станів, досліджувати не лише процес розсіювання, але і процес іонізації атомних систем електронами та фотонами. У дисертації метод застосовується саме для досліджень процесу іонізації атомів та іонів електронами, що, на відміну від вивчення процесу розсіювання електронів на атомах, є певною проблемою сучасної теорії. До наших робіт використання саме цього методу

дозволило вперше дослідити квазістаціонарні стани атома гелію в області вище порогу утворення збуджених іонів, тобто автоіонізаційні стани, що збігаються до порогу $n=3$ у неперервному спектрі цього атома. Розширення меж застосування даного методу на багатоелектронні атомні системи, яке вперше виконано у дисертації, зумовлює фундаментальний аспект актуальності виконаних досліджень.

Прикладний аспект актуальності полягає у ролі автоіонізаційних станів як джерела інформації про структуру спектрів атомів та іонів, про ефективні перерізи процесів та імовірності переходів, які відіграють важливу роль у всіх процесах електрон-атомних, електрон-іонних зіткнень, оскільки у більшості випадків перерізи резонансної іонізації, завдяки наявності квазістаціонарних станів, можуть у кілька разів перевищувати перерізи прямої іонізації, що є важливим аспектом у діагностиці низькотемпературної плазми. Збудження та розпад автоіонізаційних станів є яскравим проявом кореляційних ефектів у електронних оболонках атомів і, як наслідок, – одним із найбільш пріоритетних напрямів у сучасній фізиці електрон-атомних зіткнень.

У дисертації отримано наступні ***наукові результати, які виносяться на захист.***

Успішно розвинуто обчислювальні можливості методу взаємодіючих конфігурацій у зображенні комплексних чисел і вперше застосовано цей метод для отримання повних та парціальних характеристик автоіонізаційних станів Be, Mg, Ca. Таким чином, розширено можливості застосування цього методу на опис багатоелектронних атомних систем.

Обґрунтовано вибір хвильової функції основного стану атома для адекватного опису процесів іонізації багатоелектронних атомів. Виконано порівняння та аналіз характеристик квазістаціонарних станів, знайдених на основі різних багатопараметричних хвильових функцій основного стану атома. Завдяки адекватному вибору хвильової функції основного стану суттєво покращено точність розрахунків.

Вперше спостережено ефект особливої зміни парціальних ширин у порівнянні із повними ширинами при застосуванні різних хвильових функцій основного стану.

Енергетичні положення та ширини автоіонізаційних станів іонів H^- , Li^+ , Be^{++} та атомів Be , Mg , Ca розраховано в межах точного квантово-механічного методу, яким є метод взаємодіючих конфігурацій у зображенні комплексних чисел, що добре відомий завдяки прецезійному опису квазістаціонарних станів атома гелію.

Метод взаємодіючих конфігурацій у зображенні комплексних чисел успішно застосовано до більш складної, ніж задача розсіювання електрона на іоні, проблеми, а саме до задачі розрахунку процесу іонізації багатоелектронних атомів.

Уточнено положення та ширини нижніх автоіонізаційних станів атомів Be , Mg , Ca .

Наочно продемонстровано переваги методу взаємодіючих конфігурацій у зображенні комплексних чисел у порівнянні з іншими методами розрахунків багаточастинкових задач атомної фізики. Показано, що переваги полягають в автоматичному отриманні не лише енергетичних положень, але і ширин квазістаціонарних станів, а також у застосовності до опису процесів іонізації багатоелектронних систем.

У вступі наведено постановку задачі, шляхи і методи її вирішення, визначено місце даних досліджень у порівнянні з роботами інших авторів, розкрито актуальність теми, вказано зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами, сформульовано мету виконуваних досліджень, визначено об'єкт та предмет досліджень, сформульовано наукову новизну одержаних результатів, розкрито їх загальнотеоретичне і практичне значення, визначено особистий внесок здобувача, наведено відомості про апробацію роботи, публікації, конференції, структуру та обсяг дисертації.

У розділі 1 представлено огляд експериментальних та теоретичних досліджень, що безпосередньо відносяться до теми дисертації. Дано опис

основних експериментальних досліджень та теоретичних методів, які застосовуються при вивченні автоіонізаційних станів складних атомів у задачах іонізації атомів фотонами та електронами. Обґрунтовано актуальність вивчення фізичних процесів, пов'язаних з переходом електронів у неперервний спектр та створення таких теоретичних моделей, які адекватно описують структуру неперервного спектру атомів з врахуванням квазістаціонарних станів, які є наявними на фоні континууму в області вище порогів іонізації.. Наведено опис експериментальних досліджень автоіонізаційних станів іонів H^- , Li^+ , Be^{++} та атомів Be , Mg , Ca . Вказано основні експериментальні центри світу, де досліджують автоіонізаційні стани атомів та іонів, які проявляються у перерізах у вигляді резонансів під час зіткнення атомів та іонів з фотонами, електронами та іншими частинками. Представлено короткий огляд методики проведення експериментів і основних результатів.

Описано сучасні теоретичні методи досліджень автоіонізаційних станів, а саме: метод Л. Фаддеева, метод Фано, сильного зв'язку каналів, R -матриці, діаголізаційний метод, метод взаємодіючих конфігурацій, метод Шоре, K -гармонік, гіперсферичних координат, мультikonфігураційний Хартрі-Фок, метод хаотичних фаз з обміном, комплексних обертів гамільтоніана, ефективного гамільтоніана валентної оболонки, а також формалізм функціоналу густини. Вказано на певні переваги та недоліки перерахованих методів, обґрунтовано пошук більш прецизійних засобів опису резонансів у задачах атомної фізики. Сформульовано висновки до розділу.

У розділі 2 обґрунтовано вибір хвильових функцій основного стану для обчислення автоіонізаційних станів іонів H^- , Li^+ , Be^{++} і атомів Be , Mg , Ca . На прикладі атома гелію досліджено вплив того чи іншого вибору хвильової функції основного стану на результати обчислень повних та парціальних ширин квазістаціонарних станів відповідного атому. Продемонстровано, що задовільною і зручною для опису автоіонізаційних станів атома гелію та іонів

H^- , Li^+ , Be^{++} є 41-параметрична хвильова функція Твіда. Порівняння результатів використання різних хвильових функцій наведено у таблиці 5. Пояснено вибір 4-, 12- та 20-ти електронних хартрі-фоківських функцій основного стану для опису автоіонізаційних станів атомів Be, Mg, Ca. Зроблено висновок, що, хоча повні ширини автоіонізаційних станів відрізняються одна від одної, коли вони розраховані на основі різних хвильових функцій у рамках одного і того ж методу, однак парціальні ширини при цьому відрізняються поміж себе помітно сильніше.

У розділі 3 виконано постановку задачі іонізації атомів електронами, обрентовано вибір наближення по налітаючому електрону та приведено загальні формули розрахунку узагальнених сил осцилятора переходу у фіксований канал іонізації. Викладено основні положення формалізму методу взаємодіючих конфігурацій у зображенні комплексних чисел, виведено вирази для розрахунку хвильових функцій основного та кінцевого станів, а також розрахункові формули матричних елементів, які входять у вирази для узагальнених сил осциляторів переходів чи перерізів. Описано метод взаємодіючих конфігурацій у зображенні комплексних чисел у цілому та обрентовано можливість його застосування до розрахунків автоіонізаційних станів складних атомів, зокрема атомів берилію, магнію, кальцію. Вказано основні наближення методу. Сформульовано висновки до розділу.

У розділі 4 метод взаємодіючих конфігурацій у зображенні комплексних чисел успішно застосовано для розрахунку процесів іонізації складних атомних систем. Досліджено спектроскопічні характеристики нижніх автоіонізаційних станів іонів H^- , Li^+ , Be^{++} та атомів Be, Mg, Ca у задачі іонізації цих атомних систем електронним ударом. Виконано розрахунки енергетичних положень та ширин нижніх 1S , 1P , 1D , 1F автоіонізаційних станів декількох багатоелектронних атомів, а саме Be, Mg, Ca. Результати досліджень представлено у вісьмох таблицях і зображено на трьох рисунках. Показано, що результати розрахунків узгоджуються з

відомими експериментальними даними та розрахунками на основі інших методів. Сформульовано висновки до розділу.

У висновках підведено підсумки досліджень і зроблено узагальнюючі висновки.

Додаток А містить список публікацій здобувача та відомості про апробацію результатів дисертації

Ключові слова: атом, іон, автоіонізаційні стани, квазістаціонарні стани, резонанси, взаємодіючі конфігурації, хвильова функція, метод взаємодіючих конфігурацій у зображенні комплексних чисел.

Список публікацій здобувача.

1. В.М. Симулик, Т.М. Заяць та Р.В. Тимчик, “Застосування методу взаємодіючих конфігурацій у зображенні комплексних чисел до розрахунків спектроскопічних характеристик автоіонізаційних станів атомів Be, Mg, Ca,” Укр. фіз. журн. **60**, (11), 1094-1101, (2015).
2. В.М. Симулик, Т.М. Заяць та Р.В. Тимчик, “Вибір хвильової функції основного стану He для прецезійних обчислень параметрів квазістаціонарних станів,” Укр. фіз. журн. **61**, (11), 956-961 (2016).
3. Т.М. Заяць, А.І. Опачко, В.М. Симулик, Р.В. Тимчик, “Енергії найнижчих 1S , 1P , 1D , 1F автоіонізаційних станів атома Mg в методі взаємодіючих конфігурацій,” Науковий вісник Ужгородського університету. Серія Фізика **24**, 180–184 (2009).
4. А.І. Опачко, В.М. Симулик, Р.В. Тимчик, Т.М. Заяць, “Енергетичні рівні найнижчих автоіонізаційних станів атому Be в задачі іонізації електронним ударом,” Науковий вісник Ужгородського університету. Серія – Фізика **29**, 201–204 (2011).
5. Т.М. Zajac, V.M. Simulik, R.V. Tymchyk, “The beryllium atom lowest autoionizing states in the method of interacting configurations in the complex number representations,” Int. J. Theor. Math. Phys. **6**, (4), 110–114 (2016).

6. V.M. Simulik, R.V. Tymchyk, T.M. Zajac, “The method of interacting configurations in complex number representations: from helium to the complex atoms,” *Univ. J. Phys. Appl.* **11**, (5), 162–175 (2017).
7. Т.М. Заяц, В.М. Симулик, Р.В. Тимчик, “О выборе волновой функции основного состояния He для прецизионных расчетов параметров автоионизационных состояний выше порога образования возбужденных ионов,” *Журн. тех. физ.* **88**, (7), 970–976 (2018).
8. V.M. Simulik, T.M. Zajac, R.V. Tymchyk, “Calculations for electron-impact ionization of beryllium in the method of interacting configurations in the complex number representations,” arXiv: 1608.04078v1 [physics, atom-ph] (2016).
9. V.M. Simulik, Y-N.Y. Tsmur, R.V. Tymchyk, T.M. Zajac, “Calculations for electron-impact ionization of magnesium and calcium atoms in the method of interacting configurations in the complex number representation,” arXiv: 1706.08874v1 [physics, atom-ph] (2017).
10. Т.М. Заяць, А.І. Опачко, В.М. Симулик, Р.В. Тимчик, “Про задачу точного розрахунку іонізації атома Mg електронним ударом в області енергії вище порогу утворення збуджених іонів,” Програма і тези доповідей Міжнародної конференції молодих учених і аспірантів ІЕФ-2009 (Інститут електронної фізики НАН України, Ужгород, 2009), с. 73.
11. T. Zajac, A. Opachko, V. Simulik, R. Tymchyk, “Ionization of Mg atom by electron impact in the region of autoionizing states excitation,” *Book of abstracts of 41-th EGAS Conference*, edited by: J. Kwela, T.J. Wasowicz, (University of Gdansk, Gdansk, 2009), p. 156.
12. R. Tymchyk, T. Zajac, V. Simulik, A. Opachko, “Calculation of energetic positions of the lowest autoionizing states of Mg atom,” *Abstracts of 10-th European Conference on Atoms Molecules and Photons*, (Salamanca, 2010), Electron collisions, P-055.
13. A.I. Opachko, V.M. Simulik, R.V. Tymchyk, T.M. Zajac, “Energetic positions of the lowest autoionizing states of beryllium in the problem of electron-impact

- ionization of atom,” International Conference of Young Scientists and Post-Graduates, (Institute of Electron Physics, Uzhgorod, 2011), p. 135.
14. A.I. Opachko, V.M. Simulik, R.V. Tymchyk, T.M. Zajac, “Lowest autoionizing states of beryllium in photoionization problem,” Book of abstracts of 43-th EGAS Conference, edited by A. Weis, J.-Cl. Dousse, M. Allan, P. Knowles, (University of Fribourg, Fribourg, 2011), p. 203.
 15. T.M. Zajac, V.M. Simulik, R.V. Tymchyk, “Sampling of the helium atom ground state wave function in the ionization problem,” Programme and abstracts of BGL-8 International Conference on Non-Euclidean Geometry in Modern Physics and Mathematics, (Institute of Electron Physics, Uzhgorod, 2012) p. 62-63.
 16. V.M. Simulik, R.V. Tymchyk, T.M. Zajac, “Autoionizing states of Ca in the problem of ionization of calcium atom by the electrons,” Abstracts of the 44th Conference of the European Group on Atomic Systems (University of Gothenburg, Gothenburg, 2012) p. 197.
 17. Р.В. Тимчик, В.М. Симулик, Т.М. Заяц, “О волновой функции основного состояния многоэлектронных атомов в задаче ионизации электронным ударом,” Збірник тез XV Міжнародної молодіжної науково-практичної конференції «Людина і космос». (Нац. центр аерокосмічної освіти молоді ім. О.М. Макарова, Дніпропетровськ, 2013), с. 73.
 18. R.V. Tymchyk, V.M. Simulik, T.M. Zajac, “Lowest autoionizing states of Ca in the problem of electron impact ionization,” Програма і тези доповідей Міжнародної конференції молодих учених і аспірантів ІЕФ-2013. (Інститут електронної фізики НАН України, Ужгород, 2013), с. 219.
 19. Р.В. Тимчик, Т.М. Заяць, В.М. Симулик, “Залежність парціальних характеристик квазістаціонарних станів від вибору функції основного стану,” Міжнародна конференція молодих учених і аспірантів. Матеріали конференції ІЕФ-2015 (Інститут електронної фізики НАН України, Ужгород, 2015), с. 230-231.

20. V.I. Popovich, R.V. Tymchyk, T.M. Zajac, V.M. Simulik, “Autoionizing states partial characteristics dependence from the microobjects ground state wavefunction choice,” 4-th International Meeting “Clusters and Nanostructured Materials”. Program and materials, (Uzhgorod, 2015), p. 114.
21. V.M. Simulik, R.V. Tymchyk, Y-N.Y. Tsmur, T.M. Zajac, “The method of interacting configurations in the complex number representation: from helium to complex atom,” Міжнародна конференція молодих учених і аспірантів ІЕФ-2015 (Інститут електронної фізики НАН України, Ужгород, 2017), с. 156.

ABSTRACT

Tymchyk R.V. Calculations of the lowest autoionizing states of the beryllium, magnesium and calcium atoms. – Qualification scientific work on the rights of the manuscript.

Thesis for a degree of Candidate of Physical and Mathematical Sciences (Doctor of Philosophy) in speciality 01.04.02 “Theoretical Physics” (104 – Physics and Astronomy). – Institute of Electron Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine, Institute for Condensed Matter Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine, Lviv, 2019.

This thesis is devoted to the development of the method of interacting configurations in the complex numbers representation. The investigation of the energetic positions and widths of autoionizing states, which are formed in the process of ionization of Be, Mg and Ca atoms by electron-impact and as a result of photoionization, is under consideration. The purpose of the research is achieved in step by step complication of calculations of the energetic positions and widths of autoionizing states, which are formed in the process of ionization of atomic systems, from the ions H^- , Li^+ , Be^{++} to the manyelectron atoms.

The *actuality* of investigations has both *fundamental* and *applied* aspects.

Fundamental aspect. The method of interacting configurations in the complex numbers representation is the powerful theoretical formalism for the quasistationary states investigation, which gives the possibility to calculate both the energetic positions and widths of autoionizing states. Moreover, not only the scattering process but the process of atomic systems ionization by electrons and photons as well can be investigated in this method. In thesis we investigate the process of atomic systems ionization by electrons and photons, which, contrary to the scattering process investigation, is some problem of modern theory. Before our work this method gives the possibility to calculate the quasistationary states of helium ion in the region over the excited ions formation. The autoionizing states, converging to the threshold $n=3$ in the continuous spectrum of the atom, have been

investigated for the first time. The extension of the method application for manyelectron atomic systems, which is fulfilled here for the first time, provides a fundamental aspect of actuality.

The *applied aspect of actuality* is ensured by the role of autoionizing states as a source of information on the structure of spectra of atoms and ions, on the effective cross sections of processes and transition probabilities. Indeed, the autoionizing states play the important role in all processes of electron-atomic and electron-ionic collisions due to the fact that usually the resonance ionization cross sections can dominate several times over the direct ionization cross sections. The reason is in quasistationary states existence. This is an important aspect of the low-temperature plasma diagnostics. Moreover, the excitation and decay of autoionizing states is a clear manifestation of correlation effects in the electron shells of atoms. Therefore, these processes are among the main problems in modern physics of electron-atomic collisions.

The *main scientific results for defence* are as follows.

The calculating possibilities of the method of interacting configurations in the complex numbers representation have been developed successfully. The method has been applied for the first time to the calculations of the total and partial characteristics of the Be, Mg, Ca atoms autoionizing states. Hence, the possibilities of the method application have been extended for the description of the manyelectron atomic systems.

The choice of the atom ground state wave function for adequate description of the manyelectron atoms ionization processes has been justified. The comparison and analysis of the quasistationary states characteristics calculated on the basis of different manyparametric wave functions of the atom ground state have been performed. Due to the adequate choice of the ground state wave function, the accuracy of calculations is essentially improved.

The effect of essential changes of partial widths in comparison with the total widths, when the different ground state wave functions were applied, has been observed for the first time.

The energetic positions and widths of the ions H^- , Li^+ , Be^{++} and atoms Be, Mg, Ca autoionizing states are calculated in the framework of the exact quantum-mechanical method of interacting configurations in complex numbers representation. The method is well known due to the precise description of the helium atom quasistationary states.

The method of interacting configurations in complex numbers representation has been applied successfully for more complicated problem as the scattering of electrons by ion. The process of manyelectron atoms ionization has been calculated.

The energies and widths of the lowest autoionizing states of the Be, Mg, Ca atoms have been clarified.

The advantages of the method of interacting configurations in complex numbers representation, in comparison with other methods of calculations of manyelectron atomic systems, have been demonstrated. It is shown that advantages are in automatic receiving both the energies and widths of the quasistationary states, as well as in the possibility to describe the ionization processes of manyelectron systems.

The **Introduction** contains the problem statement, the ways and the methods of its solution, the place of this investigation in comparison with other authors is determined, the actuality of the thesis topic is demonstrated, relationship of work with scientific programs, plans, topics is shown, the purpose of research project is formulated, the object and subject of investigation are determined, the scientific novelty of the obtained results is described, their theoretical and practical importance are shown, the personal contribution of the candidate for a degree in the research results is determined, the information about the approbation of work, about publications, participation in conferences, structure and volume of thesis is given.

In **Chapter 1** the review of the experimental and theoretical investigations, which are near to the topic of dissertation, is presented. The description of the main experimental investigations and theoretical methods, which are applied to study the

autoionizing states of complex atoms in the problems of ionizations of atoms by the electrons and photons, is given. The actuality of physical processes study, which are related to the transition of electrons into continuous spectrum, is justified. The construction of theoretical models, which gives the adequate description of the structure of the continuous spectrum of atoms and takes into account the quasistationary states on the continuum background in the region over the ionization thresholds, is justified as well. The experimental investigations of the autoionizing states of ions H^- , Li^+ , Be^{++} and atoms Be, Mg, Ca have been described. The world main experimental centers are listed, where the autoionizing states of atoms and ions, which are detected as resonances in cross sections in collisions of atoms and ions with photons, electrons and other particles, are studied. A brief review of the experimental methods and main results is presented.

The modern theoretical methods of the autoionizing states investigation are described as well. The L. Faddeev equations, the Fano method, the closed coupled channels approximation, the R -matrix method, the diagonalization approximation, the method of interacting configurations, the Shore method, the method of K-harmonics, the method of hyperspherical coordinates, the multiconfiguration Hartree–Fock method, the random phase approximation with exchange method, the method of complex coordinate rotation, the method of effective valence shell Hamiltonians and the density functional theory are discussed briefly. Some advantages and difficulties of these methods are considered, the necessity in more precise methods of investigations of the resonances in the problems of atomic physics is justified. The conclusions to the chapter are given.

In **Chapter 2** the choice of the atom ground state wave function for the calculation of the autoionizing states of the ions H^- , Li^+ , Be^{++} and atoms Be, Mg, Ca is considered. The influence of such choice of the atom ground state wave function on the calculations of total and partial widths of quasistationary states of some atom is investigated on the test example of the helium atom. The 41-parametric Tweed wave function is found to be the satisfactory and convenient for

the autoionizing states description of helium atom and H^- , Li^+ , Be^{++} ions. The comparison of the different wave functions application is given in the Table 5. For the description of autoionizing states of Be, Mg, Ca atoms the choice of the 4-, 12- and 20-electron Hartree–Fock ground state wave functions is explained. The conclusion is given about essential changes of partial widths in comparison with the total widths, when the different ground state wave functions in the framework of one and the same method were applied.

In **Chapter 3** the problem statement of the ionization of atom by electrons is given, the choice of the approximation in incident electron is justified and the general formulae for the calculation of generalized oscillator transition forces in the fixed ionization channel are presented. The main statements of the method of interacting configurations in the complex numbers representation are given, the formulae for the calculation of the ground and final states wave functions are derived, the calculating formulae of matrix elements, which contribute into the expressions of generalized oscillator transition forces or cross sections, are derived as well. The method of interacting configurations in the complex numbers representation is described generally and the possibility of its application to the calculations of autoionizing states of complex atoms, for example for the beryllium, magnesium and calcium atoms, is justified. The main approximations of the method are presented. The conclusions to the chapter are given.

In **Chapter 4** the method of interacting configurations in the complex numbers representation is applied successfully for the calculations of autoionizing processes of the complex atomic systems. The spectroscopic characteristics of the lowest autoionizing states of H^- , Li^+ , Be^{++} ions and the Be, Mg, Ca atoms in the problem of their electron-impact ionization are studied. The calculation of energies and widths of the lowest 1S , 1P , 1D , 1F autoionizing states of few manyelectron atoms, for example the Be, Mg, Ca atoms, are fulfilled. The results are presented in eight tables and three figures. It is shown that results of calculations coincide with

the known experimental data and with the calculations in other methods. The conclusions to the chapter are given.

The **Conclusions** summarized the research. The general conclusions are given.

Appendix A contains the list of publications of the applicant and approbation of the results.

Keywords: atom, ion, autoionizing states, quasistationary states, resonances, configuration interaction, wave function, the method of interacting configurations in complex number representation.

The list of publications of the applicant.

1. V.M. Simulik, T.M. Zajac and R.V. Tymchyk, “Application of the method of interacting configurations in the complex number representation to calculating the spectroscopic characteristics of the autoionizing states of Be, Mg and Ca atoms,” Ukr. J. Phys. **60**, (11), 1094–1101, (2015).
2. V.M. Simulik, T.M. Zajac and R.V. Tymchyk, “Choice of the wavefunction for the helium ground state for precision calculations of quasistationary state parameters,” Ukr. J. Phys. **61**, (11), 950–955, (2016).
3. T.M. Zajac, A.I. Opachko, V.M. Simulik, R.V. Tymchyk, “The energies of the lowest 1S , 1P , 1D , 1F autoionizing states of Mg atom in the method of interacting configurations,” Uzhgorod Univ. Sci. Herald. Ser. Physics, **24**, 180–184 (2009) (in Ukrainian).
4. A.I. Opachko, V.M. Simulik, R.V. Tymchyk, T.M. Zajac, “Energetic levels of the lowest autoionizing states of Be atom in the problem of electron-impact ionization,” Uzhgorod Univ. Sci. Herald. Ser. Physics, **29**, 201–204 (2011) (in Ukrainian).
5. T.M. Zajac, V.M. Simulik and R.V. Tymchyk, “The beryllium atom lowest autoionizing states in the method of interacting configurations in the complex number representation,” Int. J. Theor. Math. Phys. **6**, (4), 110–114 (2016).

6. V.M. Simulik, R.V. Tymchyk and T.M. Zajac, “The method of interacting configurations in complex number representation: from helium to the complex atoms,” *Univ. J. Phys. Appl.* **11**, (5), 162–175 (2017).
7. T.M. Zajac, V.M. Simulik and R.V. Tymchyk, “On the choice of the wavefunction of the ground state of He for precision calculations of autoionization state parameters above the excited ion formation threshold,” *Tech. Phys.* **63**, (7), 970–976 (2018).
8. V.M. Simulik, T.M. Zajac, R.V. Tymchyk, “Calculations for electron-impact ionization of beryllium in the method of interacting configurations in the complex number representations,” arXiv: 1608.04078v1 [physics, atom-ph] (2016).
9. V.M. Simulik, Y-N.Y. Tsmur, R.V. Tymchyk, T.M. Zajac, “Calculations for electron-impact ionization of magnesium and calcium atoms in the method of interacting configurations in the complex number representation,” arXiv: 1706.08874v1 [physics, atom-ph] (2017).
10. T.M. Zajac, A.I. Opachko, V.M. Simulik, R.V. Tymchyk, “On the problem of exact calculation of Mg atom electron-impact ionization in the energy region above the excited ion formation threshold,” Program and abstracts of the International Conference of Young Scientists and Post-Graduates, IEP-2009 (Institute of Electron Physics of NAS of Ukraine, Uzhgorod, 2009), p. 73 (in Ukrainian).
11. T. Zajac, A. Opachko, V. Simulik, R. Tymchyk, “Ionization of Mg atom by electron impact in the region of autoionizing states excitation,” Book of abstracts of 41-th EGAS Conference, edited by: J. Kwela, T.J. Wasowicz, (University of Gdansk, Gdansk, 2009), p. 156.
12. R. Tymchyk, T. Zajac, V. Simulik, A. Opachko, “Calculation of energetic positions of the lowest autoionizing states of Mg atom,” Abstracts of 10-th European Conference on Atoms Molecules and Photons, (Salamanca, Spain, 2010), Electron collisions, P-055.

13. A.I. Opachko, V.M. Simulik, R.V. Tymchyk, T.M. Zajac, “Energetic positions of the lowest autoionizing states of beryllium in the problem of electron-impact ionization of atom,” International Conference of Young Scientists and Post-Graduates, (Institute of Electron Physics of NAS of Ukraine, Uzhgorod, 2011), p. 135.
14. A.I. Opachko, V.M. Simulik, R.V. Tymchyk, T.M. Zajac, “Lowest autoionizing states of beryllium in photoionization problem,” Book of abstracts of 43-th EGAS Conference, edited by A. Weis, J.-Cl. Dousse, M. Allan, P. Knowles, (University of Fribourg, Fribourg, 2011), p. 203.
15. T.M. Zajac, V.M. Simulik, R.V. Tymchyk, “Sampling of the helium atom ground state wave function in the ionization problem,” Programme and abstracts of BGL-8 International Conference on Non-Euclidean Geometry in Modern Physics and Mathematics, (Institute of Electron Physics, Uzhgorod, 2012) p. 62–63.
16. V.M. Simulik, R.V. Tymchyk, T.M. Zajac, “Autoionizing states of Ca in the problem of ionization of calcium atom by the electrons,” Abstracts of the 44-th Conference of the European Group on Atomic Systems (University of Gothenburg, Gothenburg, 2012) p. 197.
17. R.V. Tymchyk, V.M. Simulik, T.M. Zajac, “On the manyelectron atom ground state wave function in the problem of electron-impact ionization,” Abstracts of XV International Youth Scientific and Practical Conference «The Man and the Space ». (O.M. Makarov National Center of Aerospace Youth Education, Dnipropetrovsk, 2013), p. 73 (in Ukrainian).
18. R.V. Tymchyk, V.M. Simulik, T.M. Zajac, “Lowest autoionizing states of Ca in the problem of electron impact ionization,” Program and abstracts of the International Conference of Young Scientists and Post-Graduates, IEP-2013 (Institute of Electron Physics of NAS of Ukraine, Uzhgorod, 2013), p. 219 (in Ukrainian).
19. R.V. Tymchyk, T.M. Zajac, V.M. Simulik, “Quasistationary states partial characteristics dependence from the ground state wave function choice,”

- Program and abstracts of the International Conference of Young Scientists and Post-Graduates, IEP-2015 (Institute of Electron Physics of NAS of Ukraine, Uzhgorod, 2015), p. 230–231 (in Ukrainian).
20. V.I. Popovich, R.V. Tymchyk, T.M. Zajac, V.M. Simulik, “Autoionizing states partial characteristics dependence from the microobjects ground state wavefunction choice,” 4-th International Meeting “Clusters and Nanostructured Materials”. Program and materials, (Uzhgorod, 2015), p. 114.
21. V.M. Simulik, R.V. Tymchyk, Y-N.Y. Tsmur, T.M. Zajac, “The method of interacting configurations in the complex number representation: from helium to complex atom,” Program and abstracts of the International Conference of Young Scientists and Post-Graduates, IEP-2017 (Institute of Electron Physics of NAS of Ukraine, Uzhgorod, 2017), p. 156.

ЗМІСТ

ПЕРЕЛІК УМОВНИХ ПОЗНАЧЕНЬ, СИМВОЛІВ, ОДИНИЦЬ, СКОРОЧЕНЬ І ТЕРМІНІВ	23
ВСТУП	24
РОЗДІЛ 1. ТЕОРІЯ І ЕКСПЕРИМЕНТ У ЗАДАЧІ ІОНІЗАЦІЇ ГЕЛІЄПОДІБНИХ АТОМНИХ СИСТЕМ ЕЛЕКТРОНАМИ	37
1.1. Огляд експериментальних досліджень іонізації іонів H^- , Li^+ , Be^{++} та атомів Be, Mg, Ca	39
1.2. Теоретичні методи дослідження прямого та резонансного процесів іонізації атомних систем	48
1.2.1. Задача трьох тіл та рівняння Фаддеева	49
1.2.2. Метод Фано	50
1.2.3. Метод сильного зв'язку каналів	54
1.2.4. Метод R -матриці	61
1.2.5. Діагоналізаційний метод	63
1.2.6. Методи взаємодіючих конфігурацій	88
1.2.7. Метод Шоре	71
1.2.8. Метод K -гармонік	71
1.2.9. Метод гіперсферичних координат	72
1.2.10. Мультиконфігураційний метод Хартрі-Фока	74
1.2.11. Метод хаотичних фаз з обміном	74
1.2.12. Метод комплексних обертів гамільтоніана	74
1.2.13. Метод ефективного гамільтоніана валентної оболонки	75
1.2.14. Зауваження про формалізм функціонала густини	75
1.3. Висновки до розділу 1	76
РОЗДІЛ 2. ВИБІР ХВИЛЬНОЇ ФУНКЦІЇ ОСНОВНОГО СТАНУ ДЛЯ ГЕЛІЄПОДІБНИХ ІОНІВ ТА АТОМІВ БЕРИЛІЮ, МАГНІЮ, КАЛЬЦІЮ	78
2.1. Вибір хвильової функції основного стану He, H^- , Li^+ , Be^{++}	79

2.2. Розрахунки автоіонізаційних станів на основі різних хвильової функцій та їх порівняння	84
2.3. Вибір хвильової функції основного стану атомів Be, Mg, Ca	87
2.4. Висновки до розділу 2	92
РОЗДІЛ 3. МЕТОД ВЗАЄМОДІЮЧИХ КОНФІГУРАЦІЙ У ЗОБРАЖЕННІ КОМПЛЕКСНИХ ЧИСЕЛ У ЗАДАЧІ ІОНІЗАЦІЇ ГЕЛІЄПОДІБНИХ ІОНІВ ТА АТОМІВ Be, Mg, Ca ЕЛЕКТРОННИМ УДАРОМ	93
3.1. Постановка задачі іонізації атомів електронним ударом	93
3.2. Вивід основних формул методу взаємодіючих конфігурацій у зображенні комплексних чисел	95
3.3. Параметричне зображення диференціальних узагальнених сил осцилятора переходу у фіксований канал іонізації	103
3.4. Чисельна реалізація формалізму методу взаємодіючих конфігурацій у зображенні комплексних чисел	110
3.5. Основні наближення методу взаємодіючих конфігурацій у зображенні комплексних чисел	117
3.6. Висновки до розділу 3	118
РОЗДІЛ 4. ЕНЕРГЕТИЧНІ ПОЛОЖЕННЯ ТА ШИРИНИ АВТОІОНІЗАЦІЙНИХ СТАНІВ ІОНІВ H^- , Li^+ , Be^{++} ТА АТОМІВ Be, Mg, Ca У МЕТОДІ ВЗАЄМОДІЮЧИХ КОНФІГУРАЦІЙ У ЗОБРАЖЕННІ КОМПЛЕКСНИХ ЧИСЕЛ	120
4.1.. Енергетичні положення та ширини автоіонізаційних станів негативного іона H^- та іона Li^+ , що збігаються до порогу $n=3$	120
4.2. Енергетичні положення та ширини автоіонізаційних станів іона Be^{++}	123
4.3. Енергетичні положення та ширини автоіонізаційних станів атома Be	124
4.4. Енергетичні положення та ширини автоіонізаційних станів атома Mg	129
4.5. Енергетичні положення та ширини автоіонізаційних станів атома Ca	135
4.6. Висновки до розділу 4	137

ВИСНОВКИ	139
СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ	141
ДОДАТОК А Список публікацій здобувача за темою дисертації та відомості про апробацію результатів дисертації	162

ПЕРЕЛІК УМОВНИХ ПОЗНАЧЕНЬ, СИМВОЛІВ, ОДИНИЦЬ, СКОРОЧЕНЬ І ТЕРМІНІВ

У дисертації використовується атомна система одиниць $\hbar = m = |e| = 1$.

Введено наступні умовні скорочення:

МВКЗКЧ – метод взаємодіючих конфігурацій у зображенні комплексних чисел;

МВКЗДЧ – метод взаємодіючих конфігурацій у зображенні дійсних чисел;

ДМ – діагоналізаційний метод;

ДН – діагоналізаційне наближення;

ДНЗКЧ – діагоналізаційне наближення у зображенні комплексних чисел;

КС – квазістаціонарний стан;

АІС – автоіонізаційний стан;

МСЗК – метод сильного зв'язку каналів;

МВК – метод взаємодіючих конфігурацій;

УСО – узагальнена сила осцилятора;

МГСК – метод гіперсферичних координат;

МХФО – метод хаотичних фаз з обміном;

ВУФ – вакуумний ультрафіолет.

ВСТУП

Дисертація присвячена отриманню спектрометричних характеристик атомів Be, Mg, Ca методом взаємодіючих конфігурацій у зображенні комплексних чисел (МВЗКЧ). Основним результатом дисертації є розвиток МВЗКЧ для отримання енергетичних положень та ширин автоіонізаційних станів (АІС), що виникають у процесі іонізації атомів Be, Mg, Ca електронним ударом та внаслідок фотоіонізації вказаних атомів. Окрім того, особливий інтерес викликають точні розрахунки ширин низько розташованих АІС досліджуваних атомів. Дисертація опублікована у роботах [1–21].

До початку наших досліджень МВЗКЧ вже успішно застосовувався до опису процесів збудження та розпаду квазістаціонарних станів (КС) в області енергій вище порогу утворення збуджених іонів у задачі іонізації атома He електронами (див., наприклад, [22–30]). Тому розвиток методу від опису атома He до досліджень атомів Be, Mg, Ca відбувався шляхом поетапного застосування через попередню апробацію на таких гелієподібних системах як іони H^- , Li^+ , Be^{++} . Таким чином, положення та ширини найнижчих АІС, що збігаються до порогів $n=3$ іонів H^- , Li^+ , Be^{++} , також представлені як результати дисертації.

Іонізація атомів електронним ударом та дослідження процесів електрон-атомних зіткнень у цілому розвинулись в актуальні напрями сучасної атомної фізики. У цих процесах важливу роль відіграють АІС у системі «електрон, що налітає – мішень», їх Оже-розпад та повні і диференціальні перерізи складної резонансної структури. Фізичні явища, які супроводжуються переходом електронів у неперервний спектр, викликають інтерес завдяки наявності в області енергій вище порогу іонізації АІС (або КС) [31–33], що проявляються в експериментах у вигляді резонансів у перерізах процесів. Вивчення резонансів дає безпосередню інформацію про

структуру атомних систем, є критерієм аналізу достовірності використовуваних теоретичних моделей. Тому всебічне вивчення АІС є важливим елементом як експериментальних, так і теоретичних досліджень процесів, що мають місце в електронних оболонках атомів.

Окрім безпосереднього значення для фізики атома, дослідження елементарних процесів, що відбуваються під час зіткнень електронів з атомами та іонами, є важливими для розвитку цілого ряду напрямів сучасної фізики та нової техніки, знайшли широке застосування у прикладних задачах фізики лазерів та лазерної техніки [34, 35], розділення ізотопів [36, 37], низькотемпературної плазми [38, 39], астрофізики [40, 41], фізики верхніх шарів атмосфери [42], квантової хімії [43], кристалографії та фізики твердого тіла [44], термоядерної енергетики [45], фізики ядерних реакцій з важкими іонами [46, 47], тощо.

Актуальність теми.

На сьогодні одними з найбільш точних експериментів з розсіювання електронів на атомах або іонах є експерименти з пучками електронів та іонів, що перетинаються. Проте визначення перерізів збудження у цих експериментах пов'язані із рядом труднощів. Зокрема, основною причиною, що призводить до найбільших експериментальних незручностей, є наявність об'ємних зарядів електронного та іонного пучків, які взаємодіють між собою. Також має місце проблема з реєстрацією продуктів реакції (зазвичай фотонів) в умовах сильного фону, величина якого зазвичай повністю поглинає корисний сигнал. Під час таких експериментів доводиться отримувати надвисокий вакуум в умовах неперервного постачання у камеру робочої речовини, що особливо складно у випадку високої концентрації газових іонів.

Крім того, при проведенні експериментів з дослідження резонансної структури у перерізах процесів, доводиться вирішувати проблему отримання високоенергетичних пучків. Це необхідно для експериментального дослідження резонансів, адже час життя АІС складає $\approx 10^{-14}$ с, що

еквівалентно автоіонізаційній ширині $\approx 0,1$ еВ. Тобто для можливості детального дослідження резонансних структур, моноенергетичність пучків електронів також повинна бути за величиною порядку $0,1$ еВ. Але експериментально досягнута моноенергетичність електронного пучка в електрон-іонних зіткненнях має значення $0,2-0,3$ еВ. Тому експериментатори можуть виявляти не окремі резонанси, а сумарний внесок цілих серій резонансів. У такій ситуації роль теоретичних досліджень АІС є надзвичайно корисною, оскільки вони надають більш повну інформацію про роль конкретних АІС у процесах зіткнень електронів з атомами чи іонами.

Зацікавленість у фундаментальних дослідженнях АІС в атомній фізиці спричинена ще й тим, що їх збудження і розпад є одним з найбільш яскравих проявів кореляційних ефектів у процесах зіткнень. Окрім того, як відомо у плазмі в результаті зіткнень електронів, іонів і атомів інтенсивне збудження АІС впливає на енергетичний баланс плазми і є зручним інструментом її діагностики. Процеси збудження атомів та іонів електронним ударом використовуються в якості одного зі способів накачки газових лазерів. Інформація про АІС є важливою для моделювання нових лазерів та створення сучасної лазерної техніки, розробки методів розділення ізотопів на атомарному рівні, досліджень верхніх іонізованих шарів атмосфери, кристалографії та фізики твердого тіла, а також у багатьох інших напрямках фізичних досліджень, які сьогодні активно розвиваються.

Труднощі з експериментами, які часто пов'язані, як у випадку берилію, також і з шкідливими і небезпечними хімічними властивостями відповідних речовин, а не лише з технікою експерименту, на що вказано вище, призводять до особливої цінності точних теоретичних розрахунків. Потреба у теоретичних результатах привела до появи і розвитку різноманітних методів теоретичного опису АІС, що виникають у процесах електрон-атомних та електрон-іонних зіткнень.

Сучасний аналіз фізичних явищ в оболонках атомів спирається на цілу низку різних методів теоретичних розрахунків. Найбільш розвиненими є такі

методи як: рівняння Фадеєва та метод Фадеєва-Меркурєва, метод ізольованого резонансу Фано, діагоналізаційне наближення, варіаційні методи, метод Шоре, метод сильного зв'язку каналів, метод R-матриці та його різні сучасні модифікації, метод взаємодіючих конфігурацій, метод К-гармонік, метод гіперсферичних координат, мультиконфігураційний метод Хартрі-Фока, метод хаотичних фаз з обміном, метод комплексних координат та комплексних обертів гамільтоніану, а також деякі інші менш розвинуті методи та модифікації перелічених методів. Деякі наближені характеристики атомних систем можна отримати у порівняно нескладному формалізмі функціоналу густини.

Перераховані методи, як правило, застосовують до опису процесу розсіювання (як пружного, так і непружного) фотонів чи електронів на атомах або іонах. При аналізі складнішого процесу іонізації атомних систем фотонами чи електронами наявні теоретичні методи зустрічаються з суттєвими труднощами і практично не застосовуються. Одним з основних аспектів актуальності виконаних у дисертації досліджень є застосування МВКЗКЧ саме до вивчення процесу іонізації складних атомних систем електронним ударом.

Для більш детального пояснення цього важливого аспекту актуальності коротко розглянемо схему досліджуваного процесу та його відмінність від процесу розсіювання.

Процес розсіювання електрона $e^-(E_0, \vec{k}_0)$ на атомі $A^+(n_0, L_0, S_0)$ у загальному випадку схематично відтворимо як

$$e^-(E_0, \vec{k}_0) + A^+(n_0, L_0, S_0) \rightarrow A^*(n, L, S) \rightarrow A^+(n_1, l_1, S_0) + e^-(E_1, \vec{k}_1),$$

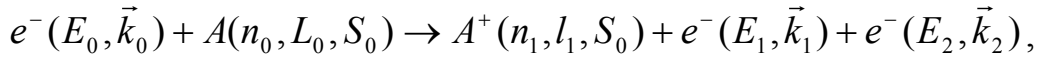
де E_0, \vec{k}_0 – енергія та імпульс налітаючого електрона,

E_1, \vec{k}_1 – енергія та імпульс розсіяного електрона,

$A^*(n, L, S)$ – збуджений атом, компаунд-стан,

в якому іон на короткий час (час життя АІС) затримує розсіяний електрон, а потім АІС розпадається на іон $A^+(n_1, l_1, S_0)$ і розсіяний електрон.

Реакцію іонізації атома електронним ударом схематично зобразимо наступним чином:



де E_2, \vec{k}_2 - енергія та імпульс ежектованого електрона.

Відмітимо, що у задачі розсіювання, зокрема, відсутня потреба у функції основного стану атома. На відміну від цієї задачі, у задачі іонізації атома фотонами або електронами необхідно описати основний стан атома. Вибрана хвильова функція повинна адекватно описувати основний стан і забезпечувати близьке до експериментального значення енергії основного стану, (інакше всі розраховані енергії збуджених станів, у тому числі і енергії АІС будуть "зсунуті" відносно експериментального "правильного" значення енергії основного стану). Як показують обчислювальні експерименти, для малоелектронних систем функція основного стану повинна бути багатопараметричною, варіаційною хвильовою функцією. Лише такі функції забезпечують відповідну точність, у тому числі і близьке до експериментального значення енергії основного стану. Що ж стосується багатоелектронних систем, то достатнім є використання хвильових функцій, отриманих у багатоконфігураційному наближенні Хартрі–Фока, так як починаючи із $Z=10$ (неон) ці функції дають практично точне значення енергії основного стану.

На відміну від задачі розсіювання, у задачі іонізації у кінцевому стані присутні два електрони – розсіяний та ежектований. Аналізуючи спектр розсіяного електрона, ми отримуємо спектри втрат у задачі іонізації атома електронним ударом. Ежектований електрон, як правило, більш повільний і для опису спектрів обидвох електронів аналізують експерименти на співпадання, так звані $(e, 2e)$ -експерименти. Але це вже інша задача, яка не входить у коло питань, які вирішуються у дисертації.

Таким чином, вивчення процесу іонізації складних атомних систем електронним ударом є принциповим (актуальним) питанням, яке суттєво відрізняється від задачі опису процесу розсіювання, а застосовність МВКЗКЧ до такого кола задач вигідно виділяє даний метод серед інших теоретичних методів. Окрім того, низка методів, зокрема, рівняння Фадеева і метод Фадеева-Меркурєва, метод К-гармонік, метод гіперсферичних координат дають взагалі незадовільний опис багаточастинкових систем (коли число частинок більше за три).

МВКЗКЧ є сучасним узагальненням методу взаємодіючих конфігурацій. Завдяки виходу у комплексну площину, цей метод дає можливість розраховувати не лише енергетичні положення, але і ширини АІС. Метод відноситься до так званих точних квантово-механічних методів і може служити для проведення незалежної класифікації АІС і розпізнавання так званих хибних резонансів. Таким чином, МВКЗКЧ має ряд переваг у порівнянні з більшістю перелічених тут методів. Отже подальший розвиток цього методу та його застосування не лише до гелію, але й до опису процесів в атомних оболонках багатоелектронних атомів є важливою та *актуальною задачею*.

Тестовим об'єктом апробації різних експериментальних та теоретичних методів є атом гелію. Як трьохчастинкова система, що складається з ядра та двох електронів, цей атом є «перехідним полігоном» між простою двочастинковою системою, якою є атом водню, та різноманітним складним атомів з багатоелектронними оболонками. Отже побудова працездатних моделей фізики атома, як правило, розпочинається саме з атома гелію. Після апробації на атомі гелію логічним і *актуальним кроком* є застосування розроблених методів до більш складних атомних систем, що обумовлює вибір атомів берилію, магнію та кальцію як об'єктів досліджень даної дисертації.

Дані експериментів, в яких досліджувались АІС між першим та другим порогом іонізації гелію, були пояснені такими теоретичними методами як

теорія ізольованого резонансу Фано [48] та формалізмі діагоналізаційного наближення (ДН) [49]. На відміну від АІС між першим та другим порогами, розпад яких відбувається лише в один відкритий канал, АІС у спектрі атома гелію вище другого порогу іонізації сильно перекриваються між собою, проявляються на фоні кількох неперервних спектрів і розпадаються як на основний, так і на збуджені стани залишкового іона. Побудова теоретичної моделі для такого процесу виявилася значно складнішою задачею. Теоретичний опис таких АІС свого часу був проблемою, яка була вирішена вперше саме у рамках МВКЗКЧ [22–24]. Теоретичні розрахунки та аналіз резонансних структур, розпад яких відбувається на декілька станів залишкового іона, в загальному випадку проводились з врахуванням усіх міжконфігураційних взаємодій і на основі виходу у комплексну площину. Таким чином, були вперше досліджені АІС атома гелію [22–24] в області вище порогу утворення збуджених іонів, тобто АІС, що збігаються до порогу $n=3$ у неперервному спектрі цього атома. Очевидно, що застосування такого успішного методу до атомів Be, Mg, Ca є перспективною та *актуальною задачею*.

Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами.

Дослідження, результати яких включені в дисертаційну роботу, виконані згідно з такими науково-дослідними темами Інституту електронної фізики НАН України:

“Розвиток квантовомеханічних методів опису структури атомних систем та процесів розсіювання”, 0106U008309, з 2006 р. до 2008 р.

“Вплив ефектів, зумовлених кореляційною взаємодією, на параметри збудження атомних, молекулярних систем та процесів розсіювання лептонів на них”, 0109U001501, з 2009 р. до 2013 р.

“Фізичні процеси і явища при взаємодії електронів і фотонів з речовиною в конденсованому і газовому станах” 0112U002079, з 2012 р. до 2016 р.

“Динаміка процесів взаємодії електронів низьких енергій з атомами, іонами та молекулярними системами” 0113U004473, з 2014 до 2018.

“Механізми взаємодії електронів і фотонів низьких та середніх енергій з речовиною в газоподібному і конденсованому станах”, 0117U000651, з 2017 р. до 2021 р.

Мета і задачі дослідження.

Мета роботи полягає у дослідженні нижніх автоіонізаційних станів іонів H^- , Li^+ , Be^{++} та атомів Be , Mg , Ca , що виникають у процесі їх іонізації електронним ударом.

Для досягнення мети розв’язуються наступні задачі:

1. Розвиток методу взаємодіючих конфігурацій у зображенні комплексних чисел для отримання повних та парціальних характеристик АІС, що виникають при іонізації атомів Be , Mg , Ca електронним ударом.

2. Цілеспрямоване поетапне ускладнення розрахунків енергетичних положень та ширин АІС, що виникають у процесах іонізації атомних систем, від іонів H^- , Li^+ , Be^{++} до багатоелектронних атомів.

3. Обґрунтування вибору хвильової функції основного стану атома для адекватного опису процесів іонізації багатоелектронних атомів. Аналіз та порівняння повних і парціальних ширин КС, розрахованих на основі різних багатопараметричних хвильових функцій основного стану атома.

4. Розрахунок енергетичних положень та ширин АІС, що виникають у процесах фотоіонізації та іонізації електронним ударом атомів Be , Mg , Ca .

Об’єкти дослідження.

Автоіонізаційні стани іонів H^- , Li^+ , Be^{++} та атомів Be , Mg , Ca ; хвильові функції основного стану атомних систем.

Предмет дослідження.

Процеси іонізації атомних систем електронним ударом. Енергетичні положення та ширини нижніх АІС іонів H^- , Li^+ , Be^{++} та атомів Be , Mg , Ca .

Методи дослідження.

Метод взаємодіючих конфігурацій у зображеннях дійсних та комплексних чисел.

Обґрунтованість і достовірність.

Результати отриманих розрахунків успішно порівняно з даними інших авторів, які виконували дослідження не лише на основі інших теоретичних методів, але і на основі різноманітних експериментів з вимірювання енергетичних положень та ширин АІС досліджуваних у дисертації атомних систем. Проводилось також порівняння даних отриманих для різних процесів у електронних оболонках атомних систем, а саме, результати розрахунків АІС у процесі іонізації атома порівнювались з даними розрахунків АІС у задачі розсіювання електронів на відповідному іоні. Крім того, метод взаємодіючих конфігурацій застосовувався поетапно від простих наближень до вдосконалення методики розрахунків. Спочатку використовувались діагоналізаційні наближення у зображеннях дійсних та комплексних чисел, а кінцево – застосовувався повний формалізм методу взаємодіючих конфігурацій у зображенні комплексних чисел. При цьому спостерігалось як узгодження з простішими розрахунками, так і поступове уточнення розрахункових даних. Використання різних хвильових функцій основного стану атомної системи також продемонструвало узгодження і уточнення отримуваних результатів.

Наукова новизна одержаних результатів.

Метод ВКЗКЧ, відомий першим успішним дослідженням АІС, що розташовані вище порогу іонізації атома гелію, розвинуто та апробовано для опису багатоелектронних атомних систем.

Вперше застосовано вказаний метод для опису процесів іонізації атомів Be, Mg, Ca електронним ударом.

Обґрунтовано вибір хвильової функції основного стану атома для розрахунків повних та парціальних характеристик АІС. Завдяки адекватному вибору хвильової функції основного стану суттєво покращено точність розрахунків.

Методом ВКЗКЧ розраховано енергетичні положення та ширини нижніх автоіонізаційних станів $H^- Li^+ Be^{++}$, що збігаються до порогу $n=3$.

Вперше виявлено, що при застосуванні різних хвильових функцій основного стану парціальні ширини АІС змінюються сильніше, ніж повні ширини.

На основі використання методу ВКЗКЧ до дослідження процесу іонізації атомних систем у термах 1S , 1P , 1D , 1F розраховано енергетичні положення та ширини нижніх АІС атомів Be, Mg, а також 1P КС атома Ca.

Практичне значення одержаних результатів.

Не дивлячись на загальнотеоретичний у цілому характер одержаних результатів, деяка їх частина має практичне значення.

Розроблені методи можуть бути використані, наприклад, для дослідження резонансної структури неперервного спектру багатоелектронних атомних систем у задачах фотоіонізації атомів та задачах іонізації атомів електронним ударом. МВКЗКЧ може застосовуватись для розрахунків спектроскопічних характеристик АІС, що формуються на фоні неперервного спектру атомів в області енергій вище порогу утворення збуджених іонів та для аналізу впливу різних міжконфігураційних взаємодій на спектроскопічні параметри резонансів. Список атомів, для яких може використовуватись МВКЗКЧ, може бути суттєво розширений. Результати роботи можуть бути корисні для досліджень інших, більш складних оболонок атомів. Перспективними задачами є аналіз високоточних експериментальних даних при взаємодії електронів з одним локалізованим атомом, прецизійні дослідження так званих малочастинкових систем, у які входить ядро та кілька електронів. Екситонні системи і фулерени у фізиці твердого тіла також є перспективними об'єктами для застосувань МВКЗКЧ. Розроблені у дисертації методи можуть бути використані не лише у атомній фізиці, але і у інших областях фізики, зокрема для розрахунків ядерно-фізичних процесів у рамках оболонкової моделі атомного ядра, для аналізу астрофізичних даних, у фізиці взаємодії верхніх шарів атмосфери з іонізуючим космічним

випромінюванням, квантовій електроніці, фізиці низькотемпературної плазми, і т. д.

Метод досліджень сформульований у дисертації без конкретизації вигляду міжчастинкової взаємодії, а тому може використовуватись також при проведенні розрахунків резонансного розсіювання у задачах електрон-молекулярних зіткнень, для опису мезонних та кваркових систем у фізиці елементарних частинок, у фізиці атомного ядра, і т.д.

Формалізм, що розроблений у дисертації, є потужним і ефективним засобом розрахунку та аналізу повних і парціальних перерізів резонансної іонізації атомів електронним ударом. Цей підхід дозволяє на основі результатів розрахунків оцінити внесок кожного резонансного стану в переріз процесу, а у випадку застосовності резонансного наближення ввести набір характеристик, що визначають положення і ширини КС, а також контури резонансної лінії у перерізах іонізації. Підхід дозволяє досліджувати застосовність наближених методів оцінки перерізів у конкретних задачах і може бути корисним для визначення меж застосування наближених методів.

Особистий внесок здобувача.

У всіх роботах, які виконані зі співавторами, особистий внесок здобувача полягає в уточненні постановки задач, тестуванні програмного забезпечення, виконанні розрахунків, аналізі отриманих результатів, формулюванні висновків. Ці роботи виконані на рівних засадах, внесок кожного автора у таку роботу є рівноцінним, а результати, що виносяться на захист, отримані автором дисертації самостійно.

Апробація результатів дисертації.

Результати роботи були представлені на таких конференціях.

Міжнародна конференція молодих учених і аспірантів ІЕФ-2009, Інститут електронної фізики НАН України, Ужгород, Україна, 2009 р. с. 73 (доповідь).

41-th EGAS Conference (European group of atomic systems), University of Gdansk, Gdansk, Poland, 2009, p. 156 (доповідь).

10-th ECAMP (European Conference on Atoms Molecules and Photons), Salamanca, Spain, 2010) Sec. Electron collisions, P-055 (доповідь).

International Conference of Young Scientists and Post-Graduates, Institute of Electron Physics of NAS of Ukraine, Uzhgorod, Ukraine, 2011, p. 135 (доповідь).

43-th EGAS Conference, University of Fribourg, Fribourg, Switzerland, 2011, p. 203 (доповідь).

BGL-8, International Conference on Non-Euclidean Geometry in Modern Physics and Mathematics, Institute of Electron Physics of NAS of Ukraine, Uzhgorod, Ukraine, 2012, p. 62-63 (доповідь).

44-th Conference of the European Group on Atomic Systems, University of Gothenburg, Gothenburg, Sweden, 2012, p. 197 (доповідь).

XV Міжнародна молодіжна науково-практична конференція «Людина і космос», Нац. центр аерокосмічної освіти молоді ім. О.М. Макарова, Дніпропетровськ, Україна, 2013 р., с. 73 (доповідь).

Міжнародна конференція молодих учених і аспірантів ІЕФ-2013, Інститут електронної фізики НАН України, Ужгород, Україна, 2013 р., с. 219 (доповідь).

Міжнародна конференція молодих учених і аспірантів ІЕФ-2015, Інститут електронної фізики НАН України, Ужгород, Україна, 2015 р., с. 230-231 (доповідь).

4-th International Meeting “Clusters and Nanostructured Materials”, Uzhgorod, 2015, p. 114 (доповідь).

Міжнародна конференція молодих учених і аспірантів ІЕФ-2017, Інститут електронної фізики НАН України, Ужгород, Україна, 2017 р., с. 156 (доповідь).

Публікації.

Результати виконаних у дисертації досліджень опубліковані у 21-й роботі [1–21], у тому числі у 7 статтях у наукових журналах [1–7] і у 2-х

електронних препринтах arXiv [physics, atom-ph] [8, 9]. Інші роботи – тези та матеріали конференцій [10–21].

Структура та обсяг дисертації.

Дисертація складається зі вступу, чотирьох оригінальних розділів, які містять 20 підрозділів, висновків, списку використаних джерел, додатка. Робота викладена на 166 сторінках та проілюстрована в тексті 13 таблицями і 3 рисунками. Бібліографія містить 234 найменування на 21 сторінках.

РОЗДІЛ 1

ТЕОРІЯ І ЕКСПЕРИМЕНТ У ЗАДАЧІ ІОНІЗАЦІЇ ГЕЛІЄПОДІБНИХ АТОМНИХ СИСТЕМ ЕЛЕКТРОНАМИ

У підрозділі 1.1 даного розділу наведено короткий опис типів експериментів для досліджень АІС у задачах фотон-атомних та електрон-атомних зіткнень. Відмічено особливості цих досліджень. В підрозділі 1.2 дано короткий опис теоретичних методів досліджень процесів іонізації атомів фотонами та електронами, вказано на різноманітність і особливості наведених методів.

Теорія резонансної іонізації атомів сьогодні представлена різноманітним так званих “точних” методів квантової теорії кількох тіл. Поряд з описом резонансних структур у перерізах, ці методи дають оцінку спектроскопічних параметрів досліджуваних КС, забезпечують розрахунки положень, ширин, профільних індексів та інших параметрів АІС.

Теоретичні методи, які застосовуються сьогодні для досліджень АІС, умовно можна розбити на три групи.

До першої групи належать методи, які описують проблему з точки зору теорії розсіювання (див., наприклад, монографії [50–53]). Параметри АІС у цьому випадку знаходять із енергетичних залежностей фазового зсуву, див., наприклад, [54, 55]. Найбільш широко застосовним методом першої групи для довільної n -електронної системи є наближення сильного зв'язку каналів [56–60] і його модифікації, розвинуті у роботах Берка, Сміта і Сітона [61–63]. Цей метод по суті може повністю повторити експеримент з розсіювання електрона на атомі, чи іоні а фазовий зсув розраховується як функція енергії. Різка зміна фазового зсуву на π вказує на точку резонансу. Для знаходження характеристик резонансів використовують рівняння, що зв'язують їх із фазовим зсувом. Цей метод багатосторонній і дає багато інформації про АІС і їх вплив на процеси. Він строгий і його можливості обмежуються тільки технічними причинами.

До другої групи можна віднести методи, за допомогою яких знаходять енергії та ширини АІС шляхом прямого розв'язування рівняння Шредінгера, у тому числі з комплексними власними значеннями. Методи другої групи, в яких розв'язують рівняння Шредінгера, були застосовані головним чином до дослідження малоелектронних систем. Їх точність обмежена вибором виду хвильової функції, яку, як правило, вибирають в аналітичному виді. Для атомів з числом електронів більше трьох, такі методи не дуже підходять. Типовими методами, які належать до цієї групи, є метод K -гармонік, метод гіперсферичних координат, варіаційні методи, див, наприклад [64–66] щодо методу гіперсферичних координат.

До третьої групи віднесемо методи, в яких АІС розглядаються, як звичайні звязані стани. Енергії тут отримуються як середні значення гамільтоніана відносно хвильових функцій, а ширини визначають через імовірності переходів, де кінцевий стан описується континуальною хвильовою функцією. Найбільш використовуваним методом цієї групи можна вважати наближення Хартрі-Фока і різноманітні його модифікації типу мультikonфігураційний метод Хартрі-Фока, див., наприклад, [67, 68] для атомів Mg та Ca. Основні припущення, що кожний електрон рухається в деякому ефективному самоузгодженому полі, яке створюється ядром і всіма іншими електронами. При цьому хвильова функція атома розглядається як антисиметричний добуток одночастинкових орбіталей. Метод Хартрі-Фока добре розроблений і реалізований в програмах з обчислювальної точки зору, а тому для початкових оціночних розрахунків починають, як правило, з нього (див. програми Шарлотти Фрьозе-Фішер, Олега Зацарінного, Хартрі-Фок-Дірак, тощо).

Короткий перелік найбільш поширених методів, які застосовуються до опису електрон-атомних та фотон-атомних зіткнень, включає метод сильного зв'язку каналів (МСЗК) або ССА (close coupling approximation), R -матричний метод, метод Фано та діагоналізаційне наближення (ДН); метод взаємодіючих конфігурацій (МВК), розроблюваний тут МВКЗКЧ. Менш

поширеними, але добре відомими, є такі методи як метод Шоре, метод K -гармонік і близький до нього метод гіперсферичних координат (ці методи застосовують в основному до малочастинкових систем), метод комплексних функцій та комплексних обертів гамільтоніана, метод хаотичних фаз з обміном (МХФО), останній ще відомий як метод RPAE (random phase approximation with exchange).

Огляд теоретичних методів дослідження процесів іонізації атомних систем опубліковано у [6] і представлено нижче у підрозділі 1.2.

1.1. Огляд експериментальних досліджень іонізації іонів H^- , Li^+ , Be^{++} та атомів Be , Mg , Ca

Особлива увага до фізичних процесів у електронних оболонках атомів бере свій початок з далекого 1925 року, коли П'єр Віктор Оже, фотографуючи треки фотоелектронів у камері Вільсона, що виникають при опроміненні атомів важких інертних газів рентгенівськими фотонами, виявив на фотопластинах додаткові треки електронів. Фізик зрозумів, що процес релаксації електронної оболонки іона після вибивання електрона із внутрішньої підоболонки, проходить через утворення і заповнення вакансії. Енергія, яка виділяється при переході на нижче лежачий рівень, може бути передана другому електрону, який вимушено покидає атом. Була відкрита автоіонізація збудженого атома, а такі електрони отримали назву оже-електронів.

Об'єктом подальших досліджень став атом гелію. Перші експерименти, які вказували на наявність АІС у атома гелію, були виконані у 1928 році Комптоном і Бойсом [69], а також у 1930 році Крюгером [70]. У таких експериментах у вакуумній ультрафіолетовій (ВУФ) області спектра, спостерігалися емісійні лінії, які були пояснені переходами між двічі збудженими станами і звичайними збудженими станами атома гелію. Саме тоді Вадігтон та Прістлі [71] провели свій перший експеримент по збудженню АІС атома гелію електронами. У цій роботі досліджувались два

стани атома гелію з енергіями 59,25 еВ та 62,27 еВ, які були інтерпретовані як конфігурації $2s2p\ ^1P^0$ та $2s3p\ ^1P^0$. У цей же період при вивченні ВУФ спектрів атомів Ве та Mg Пашен та Крюгер [72] виявили декілька станів Ве та Mg, що лежать вище відповідних порогів іонізації. Імовірно, що це і були перші дослідження АІС атомів Ве, Mg. Проте через труднощі отримання випарів металів високої густини, а також відсутності потужних джерел випромінювання неперервного спектру у ВУФ області, ці роботи не отримали подальшого розвитку. До 80-х років минулого століття дослідження стосувались області енергій збудження нижче другого порогу іонізації атома гелію.

Детальні систематичні експерименти по дослідженню АІС атомів було відновлені тільки на початку 60-х років, так як на цей час роздільна здатність електростатичних аналізаторів досягла рівня декількох мілівольт при струмах до 10^{-7} А, а також з'явилася можливість використовувати синхротронне випромінювання прискорювачів як джерело неперервного спектру з високою інтенсивністю в області дальнього ультрафіолету.

У 1963-1965 роках Мадденг і Кодлінг [73-75] (Вашингтон, США), використовуючи випромінювання (180 МеВ) електронного синхротрона, досліджували спектр фотопоглинання гелію в області 165-200 ангстрем і виявили чотири серії резонансів, дві з яких сходилися до порогу $n=2\ He^+$, а дві інші – до порогів $n=3$ та $n=4\ He^+$, відповідно, Такі АІС спостерігались вперше. Досліджувався не лише гелій, але й інертні гази Ne, Ar, Xe. В даних експериментах використовувався спектрограф з роздільною здатністю 0,06 ангстрем, що дозволило точно визначити положення резонансів та детально дослідити їх форму, а також визначити для He імовірність автоіонізації найбільш широких із них ($2s2p\ ^1P^0$ та $2s3p\ ^1P^0$).

Майже одночасно з цими дослідженнями, Сімпсон та його співробітники [76, 77] (Вашингтон, США), а також Сільверман та Лассетр [78] (Колумбус, США), провели експерименти, у яких вивчались спектри втрат електронів у процесі непружного розсіювання на атомах гелію. Ці

експерименти були логічним продовженням піонерської роботи Відінгтона і Прістлі [71]. У своїх експериментах Сімпсон та співробітники [76, 77] вимірювали інтенсивність потоку непружно розсіяних вперед електронів. Енергія падаючого пучка мінялася від 60 еВ до 400 еВ, роздільна здатність спектрометра 0,1 еВ. Досліджувався гелій та інші інертні гази. Окрім структури пов'язаної зі збудженням оптичних $^1P^0$ АІС He, у спектрах була виявлена структура, яка виникла внаслідок збудження 1S , $^3P^0$ та 1D АІС, переходи в які є оптично забороненими. В експериментах Сільвермана та Лассетра [78] при енергії електронного пучка 500 еВ вивчалася зміна профілю $2s2p$ $^1P^0$ резонансу в залежності від кута розсіювання падаючого пучка електронів. Перед теоретиками постала задача пояснення виникнення зареєстрованих АІС.

В експериментах Радда [79, 80] при вивченні АІС He використовувались пучки атомних H^+ та молекулярних H_2^+ іонів з енергією 75 KeV. У цьому експерименті, на відміну від [76–78], досліджувались спектри вибитих з атома He електронів під кутом 160° до напрямку падаючого іонного пучка. Окрім енергій добре досліджених оптичних АІС He, були також визначені енергії $2sns$ 1S , $n=2-5$; $2snp$ $^3P^0$, $n=2-5$; $2pnp$ 1D , $n=2,3$ АІС He.

Спектри інжекції знову зацікавили вчених у 1966 році. Науковець із Мюнстера (Німеччина) – Мельхорн [81], за допомогою падаючого пучка електронів з енергією 4 KeV при куті спостереження 54° виміряв енергію та профільний індекс $2s2p$ $^1P^0$ АІС. Дослідники токійського технологічного інституту поставили багато експериментів [82–84], де досліджувались спектри інжекції гелію при енергіях налітаючого пучка від порога збудження АІС до 1 KeV. В експериментах застосовувався електронний аналізатор електронів з кутом спостереження від 0° до 145° , що дозволило дослідити АІС гелію у різних кінематичних умовах. Були отримані енергії, а також ширини і профільні індекси деяких нижніх АІС.

АІС гелію досліджувалися також і у Брестантському університеті (Брест, Франція) [85–87]. Тут вивчався кутовий розподіл електронів при розпаді $2s^{21}S$, $2s2p\ ^3P^o$, $2p^{21}D$, $2s2p\ ^1P^o$, $2p^{21}S$ АІС гелію. Було отримано енергії, ширини, визначені параметри Шоре [88], що несуть інформацію про профіль резонансної кривої спектра.

Спектри розсіяних на атомах гелію та неону електронів були отримані Комером та Рідом [89] (Манчестер, Британія), вони отримали енергії та ширини 1S , $^3P^o$, 1D АІС атома гелію.

У працях Беррі [90–92] (Тулуза, Франція) досліджувалися радіаційні переходи між двічі збудженими станами гелію. Було визначено профілі ліній збудження АІС. Також на основі результатів, що були отримані теоретичними методами була проведена класифікація спостережуваних ліній та отримані енергії і ширини $^{1,3}P^o$, $^{1,3}D$ АІС гелію, які розпадаються шляхом автоіонізації.

Очевидно, що основним об'єктом при дослідженні АІС був атом гелію. Коротко підсумовуючи вище згадані дослідження можна сказати, що під час дослідження спектрів фотопоглинання вибитих та розсіяних електронів, було виявлено та класифіковано нові АІС, отримано їх енергії і ширини. Проте у всіх експериментах досліджувалися тільки АІС, що збігаються до $n=2$ порогу He^+ . АІС які сходяться до вищих порогів, у електронних спектрах не спостерігалися. Це пояснюється тим, що вище лежачі АІС збуджуються у експериментах із зіткненнями значно менше, ніж низько розташовані. До того ж, високо розташовані АІС розпадаються переважно не в основний стан, а у збуджений стан He^+ . Саме тому високо розташовані АІС спостерігалися спочатку лише при дослідженні спектрів фотопоглинання [73–75, 93, 94].

У якості прикладу експериментального дослідження АІС негативного іону водню вкажемо на роботу американських вчених [95], виконану в лабораторії Лос Аламос. В експерименті спостерігались дві ями у графіку перерізу фоторозщеплення іону H^- при енергіях фотонів 12.650 ± 0.004 і 12.837 ± 0.004 еВ якраз під порогом $n=3$ водню. Відповідні енергії були

досягнуті при перетині ультрафіолетового лазерного пучка з пучком релятивістських іонів H^- . Ями інтерпретувались як два перші члени 1P ряду резонансів Фешбаха "+" типу, що сходиться до порогу $n=3$.

Резонанси у спектрі позитивного іону літію досліджувались у багатьох експериментах, зокрема, Бруч. Дайхл [96, 97].

Механізм взаємодії пучок-фольга використовувався для заселення високо збуджених станів літію завдяки проходженню пучка 300-KeV Li^+ іонів через тонку вуглецеву фольгу [96]. Енергії збудження $LiI (1s2s^2)^2S^e$ і $LiII (2s2p)^{1,3}P^0$ термів визначались з точністю до 0,5%.

В експерименті [97] досліджувались результати реакції $h\nu + Li \rightarrow Li^{+**} + e^-$. Реєстрація власних для Li^+ ліній розпаду Аугера надала інформацію про енергетичні положення та ширини ряду двічі іонізованих рівнів іону, що включають найнижче розташовані ($3l, 3l'$) стани.

Після наведеного розгляду загальної ситуації, перейдемо безпосередньо до експериментальних досліджень АІС, що стосуються атомів берилію та магнію.

АІС у спектрах атомів Be та Mg вперше досліджували у 1931 р. Пашен та Крюгер, див. [72], про що вже згадувалось вище.

У 1961–1962 роках АІС берилію вивчав Юхансон, див., наприклад, [98] і посилання там, вчений дослідив спектр зв'язаних станів нейтрального атому берилію в діапазоні 18200–2050 ангстремів. Описано терми нижче порогу іонізації, а саме, що належать до $2snl$ та конфігурації $2p^2$. У роботах також описано дві лінії із ВУФ області пов'язані з переходами із $2p3s \ ^3P^0$ та $2p3d \ ^3P^0$ АІС берилію.

Найнижчі АІС берилію та магнію були досліджені французькими науковцями. Вимірювання були виконані у 1969–1972 роках [99, 100]. У роботі [100] досліджувались також АІС у спектрах атомів B, C, N, Al та Si. Спектр поглинання берилію досліджувався у діапазоні 2000-500 ангстрем, включаючи серію $2pns \ ^1P^0$, $n=3-11$ та серію $2pnd \ ^1P^0$, $n=3-6$, що збігаються до $2p \ ^2P^0$ рівня Be^+ . Робота [100] чи не єдина, в якій КС атому берилію отримані

у експериментах із фотоабсорбції. Такі ж дослідження були проведені для отримання спектра поглинання випарів магнію у діапазоні 1450–1000 ангстрем. Було виявлено чітку резонансну структуру перерізу, котра зумовлена $3pns \ ^1P^0$, $n=4-9$ та $3pnd \ ^1P^0$ АІС магнію. Також в області першого порогу іонізації Mg^+ спостерігались лінії, які були ідентифіковані як $4snp \ ^1P^0$, $n=4-6$ АІС Mg , що збігаються до $4s \ ^2S$ рівня Mg^+ . Під час розшифрування спектрів було отримано енергії вище згаданих станів, проте ширин отримано не було.

Після 1972 експериментальне дослідження атома берилію дещо призупинилося. Можливо це пояснюється значними експериментальними труднощами при роботі із сильно активним та надзвичайно токсичним для людського організму хімічним елементом, а також інтенсивним розвитком теоретичних методів.

Тим не менше, група вчених із США [101] виконала спостереження АІС атома берилію на основі багатофотонної резонанс-іонізаційної мас-спектрометрії. Спостерігались $2p^2 \ ^1S$ стани Be та високо-розташовані рідбергівські серії $2pnd \ ^1P_0$ ($n \leq 16$).

Монохроматизоване синхротронне випромінювання використовувалось [102] вченими Центру синхротронного випромінювання Університету Вінскозін (США) для визначення резонансних параметрів $2pnl$ АІС атома Be .

У 1978 році у Бонні (Німеччина) було проведено детальне дослідження спектру фотопоглинання магнію [103] в області 2000-700 ангстрем. Як джерело неперервного спектру в області дальнього ультрафіолету був використаний синхрофазотрон Боннського університету. Більш сучасна техніка дала змогу дослідити резонанси більш інформативно. Резонанси $3s^2 \ ^1S \rightarrow 3pns \ ^3P^0$ спостерігались при $n=3-12$, а резонанси $3s^2 \ ^1S \rightarrow 4snp \ ^1P^0$ навіть при $n=18$. Було ідентифіковано 10 резонансів, що виникають внаслідок переходів у високолежачі АІС.

У період із 1977 до 1980 року Росс та його колеги [104, 105] із Саутгемпського університету (Англія) експериментально досліджували АІС магнію. Заселення АІС проводилось електронним ударом а їх реєстрація – спеціальним спектрометром. Внаслідок аналізу отриманих спектрів було ідентифіковано 46 ліній [104] двічі збуджених станів магнію та отримано енергії цих станів. У роботі [105] дослідники провели експеримент в області вищих енергій і виявили іще 16 нових ліній, 11 з яких були ототожені із $4snp\ ^{1,3}P^0$ АІС магнію.

Уільямс та Треймар [106] із Каліфорнійського університету (Пасадена, США) досліджували спектр розсіяних на атомах магнію електронів. Частинки реєструвалися під кутами від 10° до 130° при енергіях 10, 20 та 40 еВ. Значна резонансна структура спостерігалась у спектрах розсіяних електронів у діапазоні енергій 8–12 еВ. Це пов'язано із збудженням $3pnl$ АІС магнію, що збігаються до порогу $3p\ ^2P^0\ Mg^+$. На основі теоретичних даних було ідентифіковано деякі з цих резонансів, але чисельних даних експериментаторами отримано не було.

Бредлі та його колеги [107–109] із Белфастського університету (Ірландія) досліджували АІС магнію методом селективного збудження лазером проміжкового $3s3p\ ^1P^0$ стану та його фотоіонізацію. Було встановлено, що $3p^2S, ^1P$ АІС призводять до утворення значної резонансної структури перерізу фотоіонізації магнію із $3s3p\ ^1P^0$ рівня. Було також отримано енергії і ширини деяких досліджуваних станів.

В університеті міста Фрайбург (Німеччина) процеси іонізації та збудження у L-оболонці випарів Mg викликались [110] електронним ударом (енергії між 1 та 30 KeV). Спектр вилітаючих електронів з енергіями між 18 та 52 еВ досліджувався аналізатором електростатичної енергії з роздільною здатністю 0.3%.

Окасака та Фукуда [111] (Кіото, Японія) спектроскопічно дослідили плазму магнію, яка утворювалася в ударній трубці. Така методика дозволяє проводити більш детальне дослідження низьколежачих станів, що досить

проблематично при електронній спектроскопії [104]. Проте при дослідженні плазми металів важко спостерігати високолежачі стани, тому ці два методи чудово доповнюють одне одного. В експериментальних спектрах Осаки та Фукуди [111] було отримано нові лінії, частина з яких пов'язана з переходами з АІС. Після чого було виявлено, що у роботі [104] неправильно класифіковані деякі серії резонансів. Колишнім резонансам $3pnd\ ^1D^0$, $3pnd\ ^1F^0$, $3pnp\ ^3P$ було присвоєно $3pnp\ ^1P$, $3pnd\ ^1D^0$, $3pnd\ ^3D^0$ конфігурації відповідно.

У роботі [112] представлені результати експериментальних спектроскопічних досліджень $3pnp\ ^1S^e$ ($n=3-6$) і $3p4f\ ^1D^e$ АІС Mg заселених на основі двохфотонної абсорбції. Дані порівняні з різними нещодавніми (на той час) теоретичними розрахунками. Результати включають спектри збудження і кутовий розподіл електронів, одержані з розпаду АІС.

Вчені з реактивної лабораторії м. Пасадена (США) для вимірювань перерізів атомів металів використали технічний метод перетинаючихся пучків [113]. Відносні значення перерізів одинарної, двійної та потрійної іонізації магнію були успішно виміряні у інтервалі 0–700 еВ з точністю 11%, 19% та 25%, відповідно.

Дослідження вчених з Університету Меріленд (США) [114] представляють диференціальні по кутам випущених електронів перерізи подвійної іонізації електронним ударом атома магнію виміряні при переданих енергіях 422 і 1052 еВ.

У експериментальній частині експериментально-теоретичної роботи [115], виконаної в Університеті Чикаго, відносні перерізи двохфотонної надпорогової іонізації з $3\ ^1P$ стану Mg були виміряні за допомогою двоколірної іонізації у фокусі спектрометра магнітної пляшки.

Огляд експериментів та експериментальних методів завершуємо на прикладі детектування та вимірювання АІС атома кальцію.

Сьогодні у літературі легше знайти експериментальні роботи, де вивчається фотоіонізація і фотопоглинання атома кальцію. Число робіт, у

яких вимірюються перерізи іонізації електронним ударом, є значно меншим. Для таких експериментів, починаючи з 70 років минулого сторіччя, застосовується метод пучків, що перетинаються. Зокрема, виконуються вимірювання енергетичних залежностей парціальних перерізів N-кратної іонізації атома кальцію.

Вимірювання повних перерізів іонізації електронним ударом атомів кальцію, стронцію, барію і талію були виконані у [116]. Результати непогано узгоджувались з наявними на той час іншими експериментальними даними (краще ніж на коефіцієнт 2). Абсолютні повні перерізи іонізації були виміряні в області енергій від порогу іонізації до 500 еВ.

У роботі [117] досліджено криві енергетичної ефективності атомів кальцію, стронцію, барію у процесі іонізації атомів електронним ударом в області енергій від іонізаційних потенціалів до 1000 еВ. Використовувався мас-спектрометр із джерелом перетинаючихся іонних пучків.

У роботі [118] повні перерізи іонізації кальцію, стронцію, барію виміряні методом електронного та атомного пучків, що перетинаються, в області енергій від порогу іонізації до 1000 еВ.

Одинарна іонізація кальцію електронним ударом в області енергій налітаючих електронів 12–1100 еВ досліджувалась у лабораторіях Університету Манчестеру (Англія). Відносні перерізи одинарної іонізації Ca [119] вимірювались в області енергій від порогу іонізації до 100.7 еВ за допомогою час-пролітного методу детектування іонів. Одночасова реєстрація іонів з іонізації молекул води використовувалась для моніторингу і видалення енерго-залежних ефектів. Одержані перерізи нормувались на 40 еВ на основі попередніх експериментальних даних. Виконувалось порівняння з існуючими парціальними перерізами для Ca^+ , так само, як і з повними перерізами іонізації, для демонстрації важливої різниці, що існує між формою та величиною енергії максимуму перерізу.

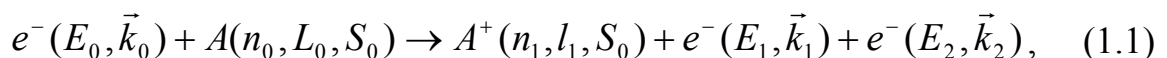
Слід відмітити прецизійні дослідження АІС атома кальцію виконані в Ужгороді в ІЕФ НАН України [120]. Досліджувалась іонізація атома кальцію

електронним ударом у припороговій області енергій (від 6.11 до 16 eВ). Експерименти виконувались методом перетинаючихся електронного і атомного пучків із реєстрацією позитивних іонів кальцію, що утворювались. Для формування електронного пучка ($E_{1/2} = 0.15$ eВ) використовувався гіпоциклоїдальний електронний монохроматор. Аналіз особливостей перерізу іонізації показав наявність внеску від збудження та розпаду нижніх АІС атома, що збігаються до порогів збудження 3d-, 4p-, 5s-рівнів іона, а також резонансів (короткоживучих станів негативних іонів). Ідентифікація особливостей перерізу була виконана з залученням експериментальних і теоретичних даних фотоіонізації (фотопоглинання).

1.2. Теоретичні методи дослідження прямого та резонансного процесів іонізації атомних систем

Дослідження трьохчастинкових систем привертають особливий інтерес теоретиків у зв'язку з тим, що, хоча трьохчастинкові системи з одного боку є достатньо складними і, отже, цікавими об'єктами досліджень, з іншого боку, такі системи допускають точний розв'язок для ряду конкретних фізичних задач.

Нагадаємо, що реакція іонізації схематично може бути зображена наступним чином:



де E_0, \vec{k}_0 – енергія та імпульс налітаючого електрона,

E_1, \vec{k}_1 – енергія та імпульс розсіяного електрона і

E_2, \vec{k}_2 – енергія та імпульс ежектованого електрона.

Згідно (1.1) продуктами реакції є: розсіяний електрон, вибитий електрон, залишковий іон (в основному або збудженому стані).

Інтерес до вивчення фізичних процесів у електронних оболонках атомів, широке застосування отриманих результатів у різноманітних

прикладних задачах науки і техніки привів до побудови і розвитку значної кількості теоретичних методів розрахунків кола задач, пов'язаних з вказаною проблематикою.

1.2.1. Задача трьох тіл та рівняння Фаддєєва. Оскільки у (1.1), у принципі, мова йде про задачу трьох тіл, огляд методів розрахунків варто розпочати зі строгого математичного формалізму, яким є підхід [121], розроблений Людвигом Фаддєєвим. Рівняння Фаддєєва – це лінійне інтегральне рівняння квантової механіки, яке описує процес розсіювання трьох частинок. Рівняння описує усі можливі взаємодії у системі трьох частинок у повному квантово-механічному формулюванні. Рівняння можуть бути розв'язані ітераційним способом. Нагадаємо, що розсіювання трьох частинок принципово відрізняється від розсіювання двох частинок, оскільки існує можливість утворення зв'язаних станів частинок.

Однак рівняння та формалізм Фаддєєва рідко використовуються для розрахунків задач теорії атома. Причина у властивості далекодії кулонівської взаємодії і, як наслідок, у слабкій збіжності відповідних рядів. Таким чином, як правило, цей метод застосовується до найпростіших атомних систем [122–124]. Зокрема, метод застосовувався у роботі [122] до (e, H) системи, у якій зв'язаний стан негативного іону водню і найнижчі положення резонансів були розраховані при $J=0$ як для синглету, так і для триплету. Далі, у [123] були розраховані АІС атома He. Використовувалась резонансна іонізація швидкими протонами. У цьому випадку використання формалізму Фаддєєва виправдане завдяки властивості короткодії ядерного потенціала. У роботі [124], зокрема, досліджувалось розсіювання електронів та позитронів на атомі водню нижче порогу $n=2$. Як бачимо, рівняння Фаддєєва не застосовуються до розрахунків АІС складних атомів. Для розрахунків процесів у атомних оболонках більш привабливими, можливо, будуть інтегральні рівняння Фаддєєва–Меркурєва [125].

З іншого боку, як формалізм Фаддєєва, так і МВКЗКЧ, базуються на рівняннях типу Ліпмана–Швінгера. Дійсно, підхід Фаддєєва розпочинається

із встановлення відсутності єдиності розв'язків Ліпмана–Швінгера. Цей факт вказує на деяку подібність методів. Однак, різниця з'являється в аналізі T -оператора. Крім того, ми не апелюємо до трьохчастинкового потенціала. Деякі інші деталі стосовно проблеми трьох частинок у випадку короткодіючої взаємодії, а також, щодо застосування рівнянь Фаддеева для практичних задач, легко знайти у [126].

Оскільки для подальших задач цей метод не використовується, ми не будемо приділяти йому значної уваги.

1.2.2. Метод Фано. Теоретичні розрахунки резонансних перерізів у задачах фотоіонізації беруть початок з класичної роботи Фано [48]. Аналіз резонансних профілів розпочинається з роботи [48] також. Було сформульовано постановку задачі створення теорії, яка би враховувала зв'язок каналів і містила спектроскопічні характеристики взаємодіючих КС в якості параметрів методу. У роботі [127] була запропонована класифікація двохелектронних рівнів збудження гелію. Фано показав у [128, 129], що у випадку кількох взаємодіючих АІС, які розпадаються в один відкритий канал, переріз фотоіонізації може бути виражений з явним виділенням членів, що відповідають резонансному процесу.

Теорія ізольованого КС, що спостерігається у перерізах у вигляді резонанса, була сформульована Фано у роботі [130]. Цей метод детально описаний у літературі, (див. [48, 126–131]), тому тільки коротко розглянемо необхідні для подальших викладок результати.

Фано розглянув модельну систему, в якій можна побудувати набір станів дискретного спектру $|m\rangle$ і станів неперервного спектру $|\lambda E\rangle$, які би задовольняли умовам

$$\langle m|\hat{H}|n'\rangle = E_n \delta_{nm}, \quad \langle \lambda E|\hat{H}|\lambda' E'\rangle = E \delta_{\lambda\lambda'} \delta(E - E'), \quad (1.2)$$

де \hat{H} – гамільтоніан системи взаємодіючих електронів у полі ядра з зарядом Z .

З метою зручності введемо наступну термінологію: набір функцій $|m\rangle$, який дає діагоналізований підпростір дискретного спектра, будемо називати підпростором Q_p . Відповідно, функції $|\lambda E\rangle$, які утворюють підпростір станів неперервного спектра, – підпростором P_p . У роботах Фано [128, 129] показано, що об'єднання цих підпросторів визначає повну ортонормовану систему функцій.

Хвильова функція $\Psi_{i\lambda}^{E(-)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N)$, яка задовільняє рівняння Шредінгера з гамільтоніаном \hat{H} і умовами нормування, може бути зображена розкладом по цій системі хвильових функцій

$$\Psi_{i\lambda}^E(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = \sum_m a_{im}^E |m\rangle + \sum_{\lambda} \int b_{i\lambda}^E(E) |\lambda E'\rangle dE' \quad (1.3)$$

У роботі [48] Фано показав, що у випадку одного дискретного рівня на фоні неперервного спектра, тобто, коли в (1.3) у дискретній частині тільки один доданок, задача знаходження коефіцієнтів a_{im}^E та $b_{i\lambda}^E(E)$ може бути розв'язана аналітично. Переріз іонізації атома, у цьому випадку, може бути записаний у вигляді

$$\sigma^\gamma(E) = \sigma^{dir}(E) + \sigma^A(E) + \sigma^A(E) \frac{[\varepsilon(E) + q(E)]^2}{\varepsilon^2(E) + 1}, \quad (1.4)$$

де $\sigma^{dir}(E)$ – повний переріз прямого вибивання електрона фотоном, а функції $\sigma^A(E)$, $q(E)$, $\varepsilon(E)$ обчислюються у відповідності до формул:

$$q(E) = \frac{\langle \hat{O}^E | \hat{d} | 0 \rangle}{\pi \langle \varphi(E) | \hat{H} | jE' \rangle \langle jE' | \hat{d} | 0 \rangle},$$

$$\sigma^A(E) = \frac{\left[\sum_j \langle \hat{O}^E | \hat{H} | jE' \rangle \langle jE' | \hat{d} | 0 \rangle \right]^2}{\sum_j |\langle \varphi | \hat{H} | jE \rangle|^2}, \quad (1.5)$$

$$\varepsilon(E) = \frac{2(E - E_\varphi - F(E))}{\Gamma(E)},$$

$$\text{де } \Gamma(E) = 2\pi \sum_j \left| \langle jE | \hat{H} | \Psi \rangle \right|^2, \quad F(E) = \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty \frac{\Gamma(E')}{E - E'} dE',$$

\hat{d} – оператор дипольного переходу,

$|0\rangle$ – функція основного стану атома,

$|\varphi(E)\rangle$ і $|jE\rangle$ – функції, відповідно, із підпросторів Q_p та P_p ,

$$E_\varphi = \langle \varphi | \hat{H} | \varphi \rangle \text{ і функція } |\Phi^E\rangle = |\varphi\rangle + \sum_j \int_0^\infty \frac{\langle \varphi | \hat{H} | jE' \rangle \langle jE' |}{E - E'} dE'.$$

Таким чином, Фано показав, що переріз фотоіонізації із збудженням ізолюваного АІС може бути записаний формулою, в якій скінченне число параметрів, і які у свою чергу є функціями тільки повної енергії. Якщо припустити справедливість так званого “резонансного наближення”, яке означає, що функції від енергії можуть бути замінені їхніми значеннями у точці резонанса, то вираз

$$\psi_{EJM}^{(-)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = \sum_{nlm} F_{nlm}(\vec{r}_N) \varphi_{nlm}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_{N-1}) + \sum_{lm} \int_0^\infty F_{elm}(\vec{r}_N) \varphi_{elm}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_{N-1}) d\varepsilon, \quad (1.6)$$

де $\varphi_{nlm}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_{N-1})$ – власна функція дискретного спектра іона, і

$\varphi_{elm}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_{N-1})$ – власна функція неперервного спектра іона,

може бути параметризований і використаний як засіб обробки та порівняння результатів отриманих експериментально. При цьому вираз Фано, як правило, записують у вигляді

$$\sigma^\gamma(E) = \sigma^0(E) \left[1 - \rho^2 + \frac{\rho^2(q + \varepsilon)^2}{\varepsilon + 1} \right]. \quad (1.7)$$

Таким чином, спектроскопія ізолюваного резонанса, яка базується на використанні формули (1.7), передбачає знаходження з експеримента, або з

теоретичних розрахунків, наступного набору параметрів: положення резонанса $E_r = E_\varphi + F(E_r)$; його ширини – Γ , яка входить у вираз $\varepsilon = 2(E - E_r)/\Gamma$; профільного індекса $q = q(E_r)$ і кореляційного параметра $\rho^2 = \sigma^A(E_r)/\sigma^0(E_r)$. Параметри q та ρ^2 отримали назву “параметрів Фано”.

Стосовно задач з кількома неперервними спектрами, Фано пропонує використати метод “власних каналів” [128, 129]. Суть його полягає у переході до такої лінійної комбінації неперервних спектрів, в якій розпад резонансів відбувається в один нефізичний канал. Переріз фотоіонізації в інших сформованих каналах характеризує фон прямих переходів. Існування такої лінійної комбінації Фано довів у роботах [129, 131]. Мейес у [132] узагальнив положення Фано для опису розпаду довільного числа взаємодіючих резонансів, вказавши спосіб побудови унітарних перетворень, які зводять багатоканальну задачу розрахунку перерізів резонансної іонізації до одноканальної. Закінчене формулювання цей метод отримав у роботах Стейреса [133, 134]. У цих роботах на основі публікацій Фано і Мейеса та формалізму квантової теорії багатоканального розсіювання у зображенні дійсних чисел було показано, що система “власних каналів” Фано відповідає системі власних каналів K -матриці розсіювання, знайденої у зображенні функцій підпростору P_p . Згідно Стейресу, повний переріз резонансного фотоефекта з врахуванням збудження довільного числа АІС, що розпадаються по багатьом відкритим каналам може бути записаний у зображенні “власних каналів” у вигляді:

$$\sigma^{\gamma}(E) = \frac{4}{3} \pi^2 \alpha \sum_{\lambda} \left| \langle \psi_{\lambda}(E) | \hat{d} | 0 \rangle \right|^2 \cos^2(\Delta_{\nu}^{\lambda}(E)) \left| 1 - \sum_{\nu} q_{\nu}^{\lambda}(E) \operatorname{tg}(\Delta_{\nu}^{\nu}(E)) \right|^2, \quad (1.8)$$

де
$$q_{\nu}^{\lambda}(E) = \frac{\langle \hat{O}_{\lambda}(E) | \hat{d} | 0 \rangle}{\pi \langle \bar{\psi}_{\nu}(E) | \hat{d} | 0 \rangle V_{\nu}^{\lambda}(E)},$$

$$V_{\nu}^{\lambda}(E) = \langle \phi_{\nu}^{\lambda}(E) | \hat{H} | \bar{\psi}_{\lambda}(E) \rangle,$$

$$\Phi_\nu(E) = \varphi_\nu(E) + \sum_\lambda \int_0^\infty \bar{\psi}_\lambda(E') \frac{V_\nu^\lambda(E)}{E - E'} dE',$$

$$\text{tg}(\Delta_\lambda(E)) = - \sum_\nu \frac{\pi V_\nu^\lambda(E) V_\nu^\lambda(E)}{E - E_\nu(E)} = \sum_\nu \text{tg}(\Delta_\nu^\lambda(E)),$$

$$\varphi_\nu(E) = \sum_k B_\nu^k(E) |k\rangle; \sum_\nu B_\nu^k(E) M_m^\nu(E) = E_k(E) B_m^k(E); \alpha = 1/137.$$

Хвильові функції $\bar{\psi}_\lambda(E)$ описують власні канали K -матриці розсіювання:

$$\bar{\psi}_\lambda(E) = \frac{1}{\sqrt{1 + \pi^2 \eta_\lambda^2(E)}} \sum_j \bar{V}_j^\lambda |jE\rangle, \quad (1.9)$$

де $\eta_\lambda(E)$ та $\bar{V}_j^\lambda(E)$ – власні вектори та власні значення дійсної симетричної матриці:

$$\bar{K}_i^\lambda(E, E') = \langle iE | \hat{H} \sum_\nu \frac{|\varphi_\nu(E)\rangle \langle \varphi_\nu(E)|}{E - E_\nu(E)} \hat{H} | \lambda E' \rangle. \quad (1.10)$$

Результатом роботи Стейреса було проведення розрахунків [133, 134], у яких знайдено повний переріз резонансного фотоефекту в атомі лантана зі збудженням двох АІС, які розпадаються в один відкритий канал. Тим не менше, технічні труднощі, пов'язані з приготуванням базиса за методом Фано, до цих пір є серйозною перепорою на шляху його чисельної реалізації у випадку врахування більшої кількості каналів та АІС. У зв'язку з цим, більше поширення отримали методи наближених розрахунків параметрів ізольованих АІС, які входять у вирази Фано для перерізів. Одним з таких методів є діагоналізаційний метод, див. пункт 1.2.5 нижче.

1.2.3. Метод сильного зв'язку каналів. При описі механізму іонізації атомів справедлива теорія збурень, і переріз іонізації у загальному випадку може бути описаний виразом:

$$\sigma_{L_f}(\vec{k}_f, \vec{Q}, E) = C(E) \sum_{M_f} \left| \left\langle \Psi_{L_f \vec{k}_f M_f}^{(-)}(E) \left| \hat{t}(\vec{Q}) \right| 0 \right\rangle \right|^2, \quad (1.11)$$

де $C(E)$ – кінематичний множник, узгоджений з вигдом оператора,

\vec{k}_f – імпульс вибитого електрона,

\vec{Q} – переданий імпульс,

$\Psi_{L_f \vec{k}_f M_f}^{(-)}(E)$ – хвильова функція атома у кінцевому стані, а

$|0\rangle$ – хвильова функція атома у початковому стані.

Метод сильного зв'язку каналів (МСЗК) вперше до задач фотоіонізації та задач розсіювання електронів на іонах був застосований групою Берка [135] і у подальшому знайшов широке застосування у задачах зіткнень атомів та іонів з фотонами та електронами. Детальний опис цього методу наведено у монографії [58] та в огляді [59].

МСЗК використовується для визначення хвильової функції атома у кінцевому стані: $\Psi_{L_f \vec{k}_f M_f}^{(-)}(E)$. Процедура розв'язку, яка використовується при розв'язанні цієї задачі аналогічна відповідному алгоритму розв'язку задачі розсіювання електрона на іоні [135].

Шукану хвильову функцію $\Psi_{L_f \vec{k}_f M_f}^{(-)}(E)$ розкладають у ряд по функціям $\psi_{EJM}^{(-)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N)$ у представленні повного моменту системи J і його проекції M . Функції $\psi_{EJM}^{(-)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N)$, у свою чергу, розкладаються за повним набором власних функцій іона: $\varphi_{nlm}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_{N-1})$. Тут n – сукупність квантових чисел, що відповідають дискретним рівням, а α - відповідає функціям неперервного спектра, тобто

$$\psi_{EJM}^{(-)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = \left[\sum_n + \int d\alpha \right] u_\alpha^n(\vec{r}_N) \varphi_\alpha^n(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_{N-1}). \quad (1.12)$$

Під функцією $u_{\alpha}^n(\vec{r}_N)$ слід розуміти функцію $F_{nlm}(\vec{r}_N)$, (див. формулу (1.6)), якщо ця функція описує стан дискретного спектра, і функцію $F_{elm}(\vec{r}_N)$, якщо ця функція описує електрон у неперервному спектрі.

Аналогічно: $\varphi_{\alpha}^n(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_{N-1}) \rightarrow \begin{cases} \varphi_{nlm}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_{N-1}) \\ \varphi_{elm}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_{N-1}) \end{cases}$, де n – номерує дискретні рівні,

ε – неперервний спектр. А саме, функція $\psi_{EJM}^{(-)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N)$ може бути записана у вигляді(1.6).

З врахуванням обміну вираз (1.6) має бути антисиметризований. Сумування та інтегрування здійснюється по всім станам дискретного та неперервного спектра іона. У подальших викладках опустимо кутові та спінові змінні у хвильових функціях і перерізах, вважаючи, що всюди проведено відповідне інтегрування по кутам і сумування по проекціям.

До тих пір поки у формулі (1.6) вказані нескінченні межі, ця рівність є точною. У практичних розрахунках може бути врахована тільки скінченна кількість членів розкладу. Відбір членів розкладу, як правило, здійснюється, виходячи з фізичних міркувань і з врахуванням антисиметризації хвильової функції кінцевого стану. Для визначення хвильових функцій $F_{nlm}(\vec{r}_N)$ та $F_{elm}(\vec{r}_N)$ розклад (1.6) підставляємо в рівняння Шредінгера, яке у зображенні даного розкладу зводиться до системи інтегродиференціальних рівнянь:

$$\left(-\nabla_j^2 + \frac{Z}{r_j} + k_j^2 \right) R_j^i(E, \vec{r}_j) + \sum_{\mu} \hat{V}_{j\mu} R_{\mu}^i(E, \vec{r}_j) = 0. \quad (1.13)$$

У формулі (1.13) Z – заряд ядра атома; ∇_j^2 - радіальна частина оператора Лапласа; k_j^2 – енергія електрона у каналі реакції $k_j^2 = (E - E_j^+)$; E_j^+ – енергія j -го стану іона; $R_j^i(E, \vec{r}_j)$ – радіальні частини функцій $F_{nlm}(\vec{r}_N)$ та $F_{elm}(\vec{r}_N)$; $\hat{V}_{j\mu}$ – матриця нелокальних операторів потенціала, які описують взаємодію електрона з іоном.

Розрахунок хвильової функції кінцевого стану атома полягає у розв'язанні рівнянь (1.13) чисельними методами з граничними умовами, які забезпечують потрібну поведінку електрона на нескінченності у кожному з каналів реакції. Заміна нескінченного ряду (1.6) скінченним є єдиним фізичним наближенням методу – після цього рівняння Шредінгера розв'язується точно. У рамках цього підходу не виникає обмежень на тип розглядуваних КС. Єдиною вимогою є наявність одного електрона у неперервному спектрі атома у кінцевому стані [136]. Універсальність МСЗК є його сильною стороною, але широке його застосування обмежено складністю чисельних процедур розв'язку систем інтегро-диференціальних рівнянь в околі резонансних станів. Найбільше технічних труднощів МСЗК пов'язано з технікою отримання розв'язків у закритих каналах реакції, де $k_j^2 < 0$ [61]. Вивчення процесів резонансної іонізації вимагає включення у розрахунок великої кількості таких каналів. Так, наприклад, у задачі розрахунку перерізів резонансної фотоіонізації атома He в області нижче другого порогу іонізації слід врахувати три закриті та один відкритий канали реакції [137, 138]. А розрахунок параметрів АІС, які сходяться до порогу $N=3$, вимагає врахування чотирьох відкритих і 5 закритих каналів [139].

Берк П. в роботах [61, 139] розвинув положення координатного представлення МСЗК доповнивши його, так званими, кореляційними функціями. Технічно новий підхід зводиться до включення у розклад (1.6) функцій, які не описують реальні стани атома. Вид розкладу для такої функції наступний:

$$\Psi^\Gamma(X_{N+1}) = \hat{A} \sum_{i=1}^n \overline{\Phi}_i^\Gamma(x_1 \dots x_N \hat{r}_{N+1} \sigma_{N+1}) r_N^{-1} F_i^\Gamma(r_{N+1}) + \sum_{i=1}^m \chi_i^\Gamma(x_1 \dots x_{N+1}) a_i^\Gamma, \quad (1.14)$$

де χ_i – якраз і є кореляційні функції.

Ці додаткові члени розкладу імітують вклад неврахованих каналів реакції. В сучасних розрахунках цим способом враховують до декількох

десятків кореляційних функцій, які містять певну кількість вільних параметрів. Параметри, у свою чергу, вибираються на основі варіаційних принципів [140]. Включення у розрахунок кореляційних функцій приводить у ряді випадків до появи не фізичних розв'язків, які проявляються у вигляді так званих “хибних резонансів” у перерізах реакції [141].

Далі все залежить від того в який спосіб розв'язувати рівняння Шредінгера. До чисельних методів розв'язування інтегро-диференціальних рівнянь можна віднести метод Берка і Ситона [141], де рівняння записують у вигляді

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l_i(l_i+1)}{r^2} + \frac{2z}{r} + k_i^2 \right] F_i(r) = 2 \sum_{j=1}^n \left[-V_{ij}(r) F_j(r) + \int_0^{\infty} W_{ij}(r, r') F_j(r') dr' \right] + \sum_{nl} \lambda_{nl} P_{nl}(r) \delta_{li} \quad (1.15)$$

$$i = 1, \dots, n,$$

і мета полягає в одержанні K -матриці, однак для багатьох додатків потрібні і хвильові функції $F_{ij}(r)$ для всіх r , що лежать всередині радіуса мішені.

Розв'язувати ці рівняння можна ітераційними методами [141]. Зокрема, ітераційну процедуру розв'язку (1.15) на основі борнівського ряду розсіяння електронів на атомах ввели Сміт, Мак-Ігран і Фрейзер [62]. Основна проблема ітераційного підходу полягає у збіжності, яка або дуже повільна, або зовсім відсутня, особливо поблизу резонансів, що відіграють важливу роль у розсіюванні електронів з малою енергією. В енергетичному околі резонанса K -матриця має полюс, так що ітерації можуть суттєво відрізнятись, що значно утруднює дослідження збіжності.

Інтегро-диференціальні рівняння можна звести до системи зв'язаних диференціальних рівнянь. Цей метод вперше був запропонований Маріоттом [142], який базується на спеціальній формі, прийнятій для нелокального обмінного оператора. Як показано у [142], система диференціальних рівнянь матиме вигляд

$$\frac{d^2 Y_\lambda(r)}{dr^2} = \frac{\lambda}{r^2} (\lambda + 1) Y_\lambda(r) - (2\lambda + 1) P(r) \frac{F(r)}{r} \quad (1.16)$$

з граничними умовами $Y_\lambda(r) \underset{r \rightarrow 0}{\sim} ar^{\lambda+1}$, $Y_\lambda(r) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} br^{-\lambda}$, де сталі a і b визначаються

$$\text{інтегралами } a = \int_0^\infty P(r)F(r)r^{-\lambda-1} dr, \quad b = \int_0^\infty P(r)F(r)r^\lambda dr.$$

Головна трудність даного підходу полягає у дуже великому числі додаткових диференціальних рівнянь, які необхідно залишити для реалістичних розрахунків складних атомів та іонів. Для типових розрахунків, що проводяться тепер і включають, наприклад, 10–20 каналів, де кожен стан мішені містить від 5 до 10 конфігурацій, n_l може становити декілька тисяч. При цьому затрати машинного часу дуже великі. Однак для легких атомів з врахуванням малого числа каналів і для одноканальних розрахунків складних атомів даний метод і досі застосовний.

Спосіб зведення до системи лінійних алгебраїчних рівнянь, введений у розрахунки електрон-атомних зіткнень Сітоном [63], є основою пакету програмного комплексу ІМРАСТ [143]. Метод не ітераційний, його ефективність дуже слабо залежить від числа обмінних членів, тому труднощі тут подолані. Зв'язані інтегро-диференціальні рівняння (1.15) у рамках даного методу зводяться до системи лінійних алгебраїчних рівнянь для значень функції $F_i(r), i = 1, \dots, n$, які табулюються в області, де важливі обмінні і кореляційні ефекти.

Уся область інтегрування розділена на частини. У внутрішній області $r \leq a$ важливі обмінні і кореляційні ефекти, а у зовнішній області $r > a$ потенціали взаємодії виходять на асимптотичні значення, і інтегро-диференціальні рівняння стають просто диференціальними. Метод, про який іде мова, відноситься до знаходження розв'язку у внутрішній області. Перш за все, вводиться сукупність N опорних точок, що покривають цю область причому: $r_i = 0, r_{i-1} < r_i, i = 1, \dots, N, r_N = a$. Крім цього, за нею використовуються

дві точки r_{N+1} і r_{N+2} щоб зшити розв'язки у внутрішній і асимптотичній областях. Загальне число точок, на яких табулюється кожна радіальна функція, рівна $N+2$.

Щоб алгебраїчних рівнянь, які необхідно розв'язати, було якнайменше, слід вибрати і опорні точки, і чисельні методи представлення диференціальних і інтегральних операторів у рівняннях (1.15). $F_i(r)$ у даному випадку вибирають у вигляді

$$F_i(r) = r^{l_i+1} \left\{ \left[1 - \frac{z_r}{(l_i+1)} \right] A_i + r^2 g_i(r) \right\}, \quad (1.17)$$

де невідомі функції $g_i(r)$ скінченні у нулі і задаються значеннями в опорних точках r_1, r_2, \dots, r_c . Число c цих точок може у даній області дорівнювати 3, 4 або 5.

Представлення n функцій $F_i(r)$ призводить до $n(N+2)$ невідомих. У нас є m невідомих, що відповідають множникам a_i при кореляційних функціях у розкладі (1.6). Слід також задовільнити умову ортогональності, що дає ще n_λ множників Лагранжа. Таким чином, повне число лінійних алгебраїчних рівнянь дорівнює: $n_{tot} = n(N+2) + m + n_\lambda$.

У початковому підході лінійні алгебраїчні рівняння задавалися у матричній формі

$$C \cdot G = X \cdot A, \quad (1.18)$$

де C має розмірність $(n_{tot} \times n_{tot})$,

G і X – розмірність $(n_{tot} \times n_a)$,

а матриця A з елементами a_{ij} – розмірність $(n_a \times n_a)$.

При певному виборі A , взятої у вигляді одиничної матриці, рівняння можна розв'язати і одержати невідому матрицю G . Виявилось, що такий

вибір A не завжди призводить до хорошої лінійної незалежності розв'язків. У зв'язку з цим рівняння (1.18) перетворено до вигляду

$$(C - X) \cdot \begin{pmatrix} G \\ A \end{pmatrix} = 0, \quad (1.19)$$

а рядки і стовпці перебудовані таким чином, щоб найменш сингулярна частина розмірністю $(n_{tot} \times n_{tot})$, яка входить у матрицю $(C - X)$ могла бути виключена методом Гауса.

Цей метод з великим успіхом застосовується до електрон-молекулярного розсіювання, див., наприклад, [60].

1.2.4. Метод R -матриці. Крок вперед у розвитку техніки проведення розрахунків в рамках координатного зображення МСЗК відбувся завдяки залученню методу R -матриці, коли в якості апарату для розв'язку систем інтегро-диференціальних рівнянь застосовувався побудований на основі такої матриці формалізм. Запропонований і розвинутий у роботі Вігнера і Айзенвуда [144], для розв'язку задач ядерної фізики, метод R -матриці був модифікований в роботах Берка, Тейлора, Хібберта та Роба (Королівський університет у Белфасті) [56, 145], і вперше застосований до розрахунку перерізів резонансної фотоіонізації атомів [57, 145].

Задача теж зводиться до розв'язування стаціонарного рівняння Шредінгера. Весь конфігураційний простір ділиться на внутрішню і зовнішню області. R -матриця обчислюється з рівняння:

$$F_i(a) = \sum_{j=1}^n R_{ij}(E) \left(a \frac{dF_j}{dr} - b_j F_j \right)_{r=a}, \quad (1.20)$$

$i = 1, \dots, n$, через розв'язок задачі про зіткнення у внутрішній області. Тут F_i і $\frac{dF_j}{dr}$ – розв'язки рівняння (1.15). Розв'язують задачу про зіткнення у внутрішній області, розкладаючи аналогічно (1.14) повну хвильову функцію за дискретним базисом для кожного набору $LS\pi$ (див. [57]),

$$\Psi_k = \hat{A} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^p \bar{\Phi}_i r_{N+1}^{-1} v_j(r_{N+1}) a_{ijk} + \sum_{i=1}^m \chi_i b_{ik}, \quad (1.21)$$

де $\bar{\Phi}_i$ і χ_i визначаються так само як і в (1.14). Тут ми розклали радіальні функції F_i за базисними функціями v_j , які задані на скінченному інтервалі $0 \leq r \leq a$. Коефіцієнти a_{ijk} і b_{ik} обчислюються при діагоналізації $(H_{N+1} + L_b)$ (див. [57]), що дає

$$\langle \Psi_k | \hat{H}_{N+1} + \hat{L}_b | \Psi_{k'} \rangle = E_k \delta_{kk'}, \quad (1.22)$$

де інтеграл береться по внутрішній області.

Далі метод полягає у знаходженні R -матриці, де R -матриця визначена як

$$R_{ij}(E) = \frac{1}{2a} \sum_k \frac{w_{ik}(a) w_{jk}(a)}{E_k - E} \quad (1.23)$$

і введені поверхневі амплітуди

$$w_{ik} = \sum_j v_j(a) a_{ijk} \quad (1.24)$$

(детально див. [56, 57, 145]).

Велика частина машинного часу витрачається на розрахунок матричних елементів і виконання діагоналізації. Однак це потрібно зробити лише один раз, щоб визначити R -матрицю у всьому діапазоні малих енергій. Якщо відомі асимптотичні розв'язки, то можна визначити асимптотичні коефіцієнти a_j і b_j , і відповідно K - і S -матриці.

Якщо порівняти R -матричний метод з МСЗК, методом лінійних алгебраїчних рівнянь, то одним з критеріїв є число функцій $v_i(r)$, необхідних

для зображення F_i , у відповідності з числом табличних точок N . При заданій енергії це відношення приблизно рівне 1:2. Другою перевагою R -матричного методу є можливість виконання діагоналізації тільки один раз для всіх енергій, тоді як рівняння (1.19) повинно розв'язуватися при кожному значенні енергії. Слід, однак, вказати, що значна частина операцій у (1.19) не залежить від енергії і тому також виконується лише один раз. Відмітимо, що розрахунок на основі (1.19) зводиться до розв'язання системи алгебраїчних рівнянь, у той час як діагоналізація (1.22) вимагає значно більшого машинного часу. Для атомів першого ряду краще використовувати метод лінійних алгебраїчних рівнянь, якщо при цьому потрібний розрахунок лише при декількох значеннях енергії. З розширенням діапазону енергій краще використовувати метод R -матриці. У випадку більш важких атомів і іонів швидко зростає число каналів, що приводить до необхідності збільшення об'єму пам'яті, потрібного для розв'язання алгебраїчних рівнянь (1.19). У R -матричному методі, навпаки, ці труднощі не виникають.

Станом на сьогодні R -матричний підхід є найбільш поширеним методом теоретичних досліджень АІС у атомних оболонках складних атомів [146–149]. У такій якості цей формалізм застосовується, зокрема, і до розрахунків процесів збудження та іонізації електронним ударом атомів берилію і кальцію, див., наприклад, [146, 147]. Кроком вперед є розробка та застосування методу R -матриці у поєднанні з формалізмом B -сплайнів [149]. Таким чином, зараз цей метод широко використовується у задачах розсіювання фотонів і електронів на складних атомах як у звичайному вигляді [148], так і з застосуванням формалізму B -сплайнів [149].

1.2.5. Діагоналізаційний метод. Варіант методу Фано та МСЗК, який суттєво полегшив процедуру розрахунків, завдяки своїй суті отримав назву діагоналізаційного наближення (ДН). Спрощення методу Фано було запропоновано Балашовим зі співробітниками. Основні рівняння ДН отримані в роботах [49, 150–152], див. також огляд у книзі [153]. Зауважимо, що як і у випадку з методом R -матриці, цей підхід спочатку

використовувався для задач ядерної фізики [154, 155]. Рівняння та формалізм ДН методу виписані із аналізу рівнянь Фешбаха [156], які описують багатоканальну задачу розсіювання.

Метод діагоналізації, або діагоналізаційний підхід, чи ДН, у порівнянні з методом Фано допускає ряд спрощень, а саме:

а) вважається, що хвильові функції неперервного спектру, отримані у рамках моделі незалежних частинок, задовільняють умові (1.2);

б) нехтується ефектами непрямого зв'язку резонансних станів через підпростір відкритих каналів;

в) використовується резонансне наближення на етапі введення параметрів.

Спочатку ДН було сформульоване для опису процесу розпаду ізольованих АІС в один відкритий канал [49, 150, 157–159]. У наступних роботах групи Балашова метод був узагальнений на випадок довільної кількості відкритих каналів [152, 160–162]. Застосування ДН дозволяє у значній мірі скоротити об'єм обчислень і у ряді випадків [49, 150, 163] забезпечує точність, близьку до точності розрахунків методом Фано та МСЗК. Зупинимось коротко на основних положеннях ДН, не відхиляючись від роботи [160].

Допускаємо, що умови (1.2) виконуються, і розклад функції $\Psi_{i\lambda}^E(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N)$ запишемо в дещо іншому виді, а саме

$$\Psi_{i\lambda}^E(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = \sum_k a_k(E) |\varphi_k\rangle + \hat{A} \sum_i F_i(\vec{r}_1, \dots, r_{N-1}) |u_i(\vec{r}_N)\rangle, \quad (1.25)$$

де $F_i(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_{N-1})$ – хвильова функція зв'язаного стану іона, а

$u_i(\vec{r}_N)$ – невідома функція, яка описує електрон у неперервному спектрі.

Всі закриті канали, що відповідають іншим станам іона, враховані у першій сумі. Очевидно, що на цьому етапі ми знехтували інтегральною частиною спектра іона, тобто, не враховуємо процес його віртуального розпаду. Повний гамільтоніан вважатимемо сумою

$$\hat{H} = \hat{H}_i + \hat{h} + \hat{V}, \quad (1.26)$$

де \hat{H}_i та \hat{h} - гамільтоніани іона та вилітаючого електрона, а

\hat{V} - описує їхню взаємодію.

Підставляючи розклад функції $\Psi_{i\alpha}^E(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N)$ (1.25) у рівняння Шредінгера, отримаємо:

$$(E - E_k)a_k(E) = \langle \varphi_k(E) | \hat{V} | A(F_i u_i(E)) \rangle, \quad (1.27)$$

$$[\hat{h}_i - \varepsilon_i - E]u_i(E) + \langle F_i | \hat{V} | \hat{A}(F_i u_i(E)) \rangle = -\sum_k a_k(E) \langle F_i | \hat{V} | \varphi_k \rangle, \quad (1.28)$$

де F_i та u_i - це функції з (1.25), залежність від координат \vec{r}_i опущена для спрощення. Тут також прийнято, що $\langle \varphi_m | F_i \rangle = 0$. Формальний розв'язок (1.28) можна записати у вигляді

$$u_j(E) = v_j(E) + \sum_k a_k(E) \frac{\langle F_j | \hat{V} | \varphi_k \rangle}{E - (\hat{h}_j + \varepsilon_j) - i\eta}, \quad (1.29)$$

де \hat{h}_j - нелокальний оператор, який заданий лівою частиною (1.28), а

$v_j(E)$ - розв'язок однорідного рівняння

$$[\hat{h}_j - (E - \varepsilon_j)]v_j(E) = 0. \quad (1.30)$$

Нескінченно мала величина $i\eta$ забезпечує потрібну для задач розсіювання асимптотику розв'язку. Підстановка (1.29) у (1.27) дає

$$(E - E_k)a_k(E) - \sum_{k'} a_{k'}(E) \langle \varphi_k(E) | \hat{V} F_j \frac{1}{E - i\eta - \hat{h}_j - \varepsilon_j} F_j \hat{V} | \varphi_{k'}(E) \rangle = \langle \varphi_k(E) | \hat{V} | \hat{A}(F_j v_j(E)) \rangle \quad (1.31)$$

Основним наближенням ДН є нехтування недіагональними матричними елементами

$$W_{kk'} = \langle \varphi_k | \hat{V} F_j \frac{1}{E - i\eta - h_j - \varepsilon_j} F_j \hat{V} | \varphi_{k'} \rangle, \quad (k \neq k'). \quad (1.32)$$

Після цього коефіцієнти a_k можна вважати знайденими

$$a_k(E) = \frac{\langle \varphi_k | \hat{V} | \psi_E \rangle}{E - E_k - W_{kk}}, \quad (1.33)$$

де введено позначення $\psi_E \equiv \hat{A}(F_j \nu_j(E))$. Перетворюючи матричний елемент у знаменнику (1.33), отримаємо

$$a_k(E) = \frac{\langle \varphi_k | \hat{V} | \psi_E \rangle}{E - E_k - \Delta_k + i\tilde{A}_k/2}, \quad (1.34)$$

де ширина Γ_k та зсув Δ_k резонансного рівня визначаються формулами:

$$\Gamma_k(E) = 2\pi \langle \psi_E | \hat{V} | \varphi_k \rangle^2, \quad (1.35)$$

$$\Delta_k(E) = \text{P} \int_0^\infty \frac{\langle \psi_{E'} | \hat{V} | \varphi_k \rangle^2}{E - E'} dE' + \Delta'_k(E), \quad (1.36)$$

де $\Delta'_k(E)$ - зсув за рахунок зв'язаних станів, які відповідають дискретним рівням збудження. Підстановка (1.34) і (1.29) у (1.27) дає можливість знайти функцію $\Psi_{i\alpha}^E(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) \equiv \Psi_E^{(-)}$, а отже і амплітуду іонізації

$$\begin{aligned} \langle \Psi_E^{(-)} | \hat{T} | \Psi_0 \rangle &= \sum_k \frac{\langle \psi_E | \hat{V} | \varphi_k \rangle}{E - E_k - \Delta_k + i\tilde{A}_k/2} \times \\ &\times \left\{ \langle \varphi_k | \hat{V} F_j \frac{1}{E - \varepsilon_j - i\eta - h_j} F_j \hat{T} | \Psi_0 \rangle + \langle \varphi_k | \hat{T} | \Psi_0 \rangle \right\} + \langle \psi_E | \hat{T} | \Psi_0 \rangle \end{aligned} \quad (1.37)$$

де $|\Psi_0\rangle \equiv |0\rangle$ - функція основного стану атома.

Введемо модифіковану за рахунок взаємодії з континуумом функцію k -го рівня

$$\varphi_k \rightarrow \varphi_k(E) = \varphi_k + i\pi \langle \psi_E | \hat{V} | \varphi_k \rangle \psi_E + \text{P} \int_0^\infty \frac{\langle \psi_{E'} | \hat{V} | \varphi_k \rangle \psi_{E'}}{E - E'} dE' + \Delta\varphi_k, \quad (1.38)$$

де $\Delta\varphi_k$ – доданок, що символізує вклад від дискретного спектра збудження. Нехтуючи у (1.38) останніми двома членами, отримуємо

$$\begin{aligned} \langle \Psi_E^{(-)} | \hat{T} | \Psi_0 \rangle &= \langle \psi_E | \hat{T} | \Psi_0 \rangle + \sum_k \frac{\langle \psi_E | \hat{V} | \varphi_k \rangle}{E - E_k - \Delta_k + i\tilde{A}_k/2} \times \\ &\times \left\{ -i\pi \langle \psi_E | \hat{V} | \varphi_k \rangle^* \langle \psi_E | \hat{T} | \Psi_0 \rangle + \langle \varphi_k | \hat{T} | \Psi_0 \rangle \right\} \end{aligned} \quad (1.39)$$

Звідси, зокрема, в околі k -го КС маємо формулу Фано, де при обчисленні q -індекса слід використовувати хвильові функції, отримані у ДН. Область застосовності ДН вужча, ніж методу Фано, і визначається правомірністю припущення про малість матричних елементів W_{kk} . Близьким до ДН можна вважати метод параметризації перерізів Шоре [88], про це у підрозділі 1.2.7 нижче.

На базі ДН була сформульована теорія збудження АІС і іонізації атомів швидкими зарядженими частинками і проведений ряд розрахунків характеристик КС збуджених при зіткненнях атомів з фотонами і електронами, див., наприклад, [153], де також розглянуто можливість застосування методу до інших типів експериментів. Зокрема, резонанси форми були описані цим методом у роботі [152]. Важливо, що на базі ДМ ще у роботах [49, 150, 163] були визначені АІС, які знаходяться між першим та другим порогами іонізації, адже на той час для багатьох атомних систем це було актуальною задачею.

Питання застосовності ДН були попередньо досліджені у [49, 150, 163]. Порівняння результатів, отриманих методами Фано, МСЗК і ДН показало, що останній має достатню точність, але значно простіший у реалізації. Сьогодні використовують варіанти ДН, в яких зв'язок відкритих каналів враховується у першому порядку теорії збурень.

Нагадаємо також, що ДН виявилось надзвичайно корисним у проведенні теоретичних досліджень процесів розсіювання фотонів і електронів на іонах складних атомів, див., зокрема, низку результатів, отриманих ужгородськими теоретиками [33, 164].

1.2.6. Методи взаємодіючих конфігурацій. При дослідженні механізмів збудження АІС електронами та фотонами часто буває необхідним прослідкувати роль різних міжконфігураційних взаємодій при формуванні резонансних профілів. У рамках координатного зображення МСЗК це зробити важко, так як, у каналі реакції неможливо виділити окрему конфігурацію, яка відповідає збудженню конкретного КС, (АІС, що відрізняються тільки головним квантовим числом, належать до одного й того самого каналу). Аналіз таких задач зручно проводити на базі методів, які впливають з оболонкової моделі атома.

Метод конфігураційної взаємодії, або метод взаємодіючих конфігурацій МВК, або (CI – configuration interaction) [165] вперше був використаний в задачах із змішуванням конфігурацій дискретного спектра багаточастинкових систем в ядрах. Безпосереднє узагальнення цього методу для станів з неперервним спектром було зроблено у роботах Фешбаха [156, 166], Фано [48, 126–129], та Блоха [167, 168]. Методи побудови хвильових функцій неперервного спектру в області резонансів Фано розглянуто у попередніх параграфах. Тому тут коротко зупинимось на результатах робіт, виконаних у рамках методів прямого розв'язку загальних рівнянь МВК і близьких до нього підходів.

Питання використання рівнянь МВК в якості основи для проведення прямих розрахунків розподілу сил осциляторів переходів у неперервний спектр, обговорювались у роботах Фано [129, 131]. Але Фано обмежився формулюванням чисельних методів розв'язку інтегральних рівнянь для розрахунку прямого процесу фотоіонізації. Включення у розрахунок АІС, згідно Фано, повинно здійснюватися на основі методу [48]. Узагальнення рівнянь Фано [129] для проведення розрахунків резонансних структур у перерізах нуклонів на ядрах було зроблено Блохом [168]. В якості зображення для хвильової функції розсіювання використовувався розклад типу (1.6), записаний у базисі власних функцій гамільтоніана незалежних частинок \hat{H}_0 . Тоді рівняння Шредінгера з гамільтоніаном $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}^r$ у

зображенні гамільтоніана \hat{H}_0 , перетворюється до системи інтегро-алгебраїчних рівнянь відносно коефіцієнтів розкладу хвильової функції

$$\begin{cases} (E_n - E)a_n^i(E) + \sum_m \langle \xi_m | \hat{V}^r | \xi_n \rangle a_m^i(E) + \sum_{\lambda} \int_0^{\infty} b_{\lambda}^i(\varepsilon) \langle \xi_n | \hat{V}^r | \xi_{\lambda\varepsilon} \rangle d\varepsilon = 0, \\ \sum_m a_m^i(E) \langle \xi_m | \hat{V}^r | \xi_{\lambda\varepsilon} \rangle + (\varepsilon - \varepsilon_{\lambda}) b_{\lambda}^i(\varepsilon) + \sum_{\mu} \int_0^{\infty} b_{\mu}^i(\varepsilon') \langle \xi_{\mu\varepsilon} | \hat{V}^r | \xi_{\lambda\varepsilon'} \rangle d\varepsilon' = 0. \end{cases} \quad (1.40)$$

Визначення хвильових функцій ξ_{α} та величин ε_{λ} , а також операторів \hat{V}^r , \hat{H}_0 , тут робиться аналогічно до (1.2), а саме: $H_n^m = \langle \xi_n | \hat{H} | \xi_m \rangle$ та $H_{iE}^{jE'} = \langle \xi_{iE} | \hat{H} | \xi_{jE'} \rangle$, де $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}^r$.

Як видно з другого рівняння системи (1.40), коефіцієнти $b_{\lambda}^i(\varepsilon)$ мають сингулярності у точках $\varepsilon = \varepsilon_{\lambda}$. Із загальних положень квантової теорії розсіювання відомо, що спосіб обходу полюса визначає асимптотичну поведінку повної хвильової функції $\Psi_{i\lambda}^{E(-)}$, яка задається розкладом (1.3). загальний вираз для визначення полюсних особливостей рівнянь (1.40) має вигляд

$$b_{\lambda}^i(\varepsilon) = p \frac{G_{i\lambda}(\varepsilon, \varepsilon_{\lambda})}{\varepsilon - \varepsilon_{\lambda}} + A_{i\lambda} \delta(\varepsilon - \varepsilon_{\lambda}). \quad (1.41)$$

Вибір матриці $A_{i\lambda}$ визначає спосіб обходу полюсів у виразі (1.41). Блох показав, що у випадку $A_{i\lambda} = \delta_{i\lambda}$ функції $G_{i\lambda}(\varepsilon, \varepsilon_{\lambda})$ на енергетичній поверхні $\varepsilon = \varepsilon_{\lambda}$ співпадають з K -матрицею розсіювання у представленні гамільтоніана \hat{H}_0 . Хвильові функції $\xi_{\lambda\varepsilon}$ при цьому повинні бути дійсними і нормованими на δ -функцію по енергії. Аналогічне зображення багатоканальної задачі було використано у роботах Фано [129], Майеса [132], Стейреса [133, 134, 169] та Рамакера [165]. Рівняння (1.40) для функції $G_{i\lambda}(\varepsilon, \varepsilon_{\lambda})$ визначають K -матрицю розсіювання [167, 168]. Виконавши підстановку (1.41) у (1.40) і, переходячи до базиса функцій, які діагоналізують підпростір дискретних станів

гамільтоніана H_0 , отримуємо систему інтегральних рівнянь з сингулярними ядрами

$$K_{i\lambda}(\varepsilon, \varepsilon_\lambda) = -\sum_{\mu} \int_0^{\infty} K_{\mu\lambda}(\varepsilon', \varepsilon_\lambda) \frac{V_{i\mu}^{ef}(\varepsilon, \varepsilon')}{\varepsilon' - \varepsilon_\mu} d\varepsilon' - V_{i\lambda}^{ef}(\varepsilon, \varepsilon_\lambda), \quad (1.42)$$

де $K_{i\lambda}(\varepsilon, \varepsilon_\lambda) = G_{i\lambda}(\varepsilon, \varepsilon_\lambda)$, а оператор \hat{V}^{ef} , який визначає взаємодію у підпросторі станів неперервного спектра, з врахуванням збудження дискретних станів, має вид

$$\hat{V}^{ef} = \hat{V}^r - \hat{V}^r \sum_m \frac{|\xi_m\rangle\langle\xi_m|}{E - H} \hat{V}^r. \quad (1.43)$$

У випадку, якщо у (1.41) покласти $A_{i\lambda} = 0$, а у знаменник першого доданка додати уявну величину типу $(\varepsilon - \varepsilon_\lambda \pm i\delta)$, то рівняння (1.42) перетворяться до вигляду, характерного для системи рівнянь Липпмана – Швінгера (див. наприклад, [170]) відносно деякої неермітової комплексної матриці, яка на енергетичній поверхні співпадає з T -матрицею розсіювання.

Вперше рівняння МВК використав Алтік [171] до задачі розрахунку резонансних параметрів фотозбудження АІС серій атома Не, що збігаються до другого порогу іонізації. Подальшого розвитку метод набув у роботах Страхової зі співавторами [172–174], де було вивчено вплив різних міжконфігураційних взаємодій на формування профілів найнижчих резонансів типу “частинка-дірка” та ”дві частинки-дві дірки” в атомі неона, аргона та неоноподібних, а також аргоноподібних іонах.

МВКЗКЧ, який є основним методом теоретичних досліджень даної дисертації, також належить до варіантів МВК. Він є найбільш потужним варіантом МВК. Цей метод був розроблений у роботах [22–24] і успішно застосований до розрахунків АІС атома гелію, що збігаються до порогу $n=3$ у неперервному спектрі цього атома.

Недивлячись на наявність МВКЗКЧ, звичайний МВК також залишається корисним методом сучасних теоретичних досліджень атомних систем, див., наприклад, [175].

1.2.7. Метод Шоре. Серед інших, добре розвинутих, але не дуже широко застосованих методів, відмітимо близький до ДН метод Шоре [88]. Цей метод у основних ідеях та принципах, які покладені у його основу, подібний до ДМ.

В рамках методу показано, що у випадку невзаємодіючих резонансів повний переріз іонізації зі збудженням кількох АІС може бути отримано у вигляді нескладного виразу

$$\sigma^{\gamma}(E) = C(E) + \sum_m \frac{A_m / \Gamma_m + \varepsilon_m(E) B_m / \Gamma_m}{\varepsilon_m^2(E) + 1}, \quad (1.44)$$

де $C(E)$ – відповідає $\sigma^{dir}(E)$ у виразах Фано, $\varepsilon_m = \frac{2(E - E_m)}{\Gamma_m}$ – це саме, що і ε_m

у (1.5), $E_m; \Gamma_m$ – відповідно положення та ширина m -го резонанса,

A_m, B_m – параметри, що характеризують профіль m -го КС.

Як видно, вигляд параметрів подібний до явного вигляду формул Фано, див., наприклад, [86]. Тим не менше, автор монографії [176] не визначає явних виразів для параметрів A_m, B_m , вони визначаються через розв'язок системи інтегральних рівнянь з сингулярними ядрами типу (1.42). Система лінійних параметрів (A_m, B_m) у наближенні ізольованого резонансу еквівалентна системі параметрів Фано і у даний час широко використовується при обробці і порівнянні резонансних кривих, отриманих у різних типах експериментів.

1.2.8. Метод К-гармонік. Цей метод детально описаний Петеркопом в [177]. Як і в інших подібних методах, за основу береться розклад хвильової функції у ряд по деякій системі функцій типу (1.6). Далі робиться твердження, що частина розкладу, яка відповідає функціям неперервного спектру в (1.6), а саме – $\sum_{lm} \int_0^{\infty} F_{elm}(\vec{r}_N) \varphi_{elm}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_{N-1}) d\varepsilon$, приводить до інтегро-

диференційних рівнянь, які, як було показано вище, слід розв'язувати іншими методами. Щоб спростити спосіб розв'язку, частину розкладу, яка відповідає неперервному спектру зображають у вигляді ряду по так званім

K -гармонікам, або гіперсферичним функціям. K -гармоніками, або гіперсферичними функціями, називають власні функції оператора Лапласа на одиничній гіперсфері у багатовимірному просторі. У 6-вимірному просторі K -гармоніки задовольняють рівнянню

$$[\Delta^* + K(K + 4)]Y_{K\gamma}(\Omega) = 0, \quad (1.45)$$

де $K=0, 1, 2, \dots$, а оператор Δ^* має вид

$$\Delta^* = \frac{1}{\sin^2 2\alpha} \left[\frac{\partial}{\partial \alpha} \left(\sin^2 2\alpha \frac{\partial}{\partial \alpha} \right) + \frac{4}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \right]. \quad (1.46)$$

K -гармоніки утворюють повний набір функцій у просторі Ω . Їх можна вибрати дійсними та ортонормованими: $\int Y_{K\gamma} Y_{K\gamma'} d\Omega = \delta_{KK'} \delta_{\gamma\gamma'}$. Тоді розклад функції $\psi_{EJM}^{(-)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N)$ записують у вигляді

$$\psi_{EJM}^{(-)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = \sum_{nlm} F_{nlm}(\vec{r}_N) \varphi_{nlm}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_{N-1}) + r^{-5/2} \sum_{K\gamma} F_{K\gamma}(r) Y_{K\gamma}(\Omega), \quad (1.47)$$

а елемент кута $d\Omega = 8\pi^2 \sin^2 \alpha \cos^2 \alpha \sin \theta d\alpha d\theta$. Множник $r^{-5/2}$ введений для спрощення радіальних рівнянь. Розв'язок більш загального випадку описаний у монографії Морса–Фешбаха [178], де приведені гіперсферичні функції у координатах $r_{12}, \alpha, \theta_1, \varphi_1, \theta_2, \varphi_2$, які визначають співвідношення відстаней і напрямків двох частинок. Використовуючи результати [178], у даному випадку для явного виду функцій Y_{Kl} можемо записати

$$Y_{Kl} = \frac{2^l l! \sqrt{(2l+1)(K/2+1)(K/2-1)!}}{\sqrt{\pi^3 (K/2+l+1)!}} (\sin 2\alpha)^l C_{K/2-l}^l(\cos \alpha) P_l(\cos \alpha), \quad (1.48)$$

де $K=0, 2, 4, \dots$; $l=0, 1, \dots, K/2$, C_m^n – поліноми Гегенбауера, а P_l – поліноми Лежандра.

Важливі подальші застосування методу легко знайти у [179–181]. Певна частина точних розв'язків для методу K -гармонік може бути знайдена у [182].

1.2.9. Метод гіперсферичних координат. Загальний опис методу легко знайти, наприклад, у книгах [183, 184]. Цей метод має багато спільного

з методом K -гармонік, див., наприклад, [64–66], а також спільні риси з підходом Фаддеева. У рамках МГСК можна отримати положення АІС з достатньо високою точністю, але розрахунок ширин КС є досить проблематичним. Очевидними є певні успіхи методу у описі негативного іона водню та атома гелію [62–64]. Однак, МГСК виявився придатним лише для малочастинкових систем (також, як правило, для кулонівської взаємодії) і не застосовується до досліджень АІС складних атомів.

Слідуючи [65], наведемо основні рівняння МГСК для двохелектронного атома. Рівняння Шредінгера, з якого стартуємо, має вигляд:

$$\left\{ \sum_{i=1}^2 \left[-\frac{\Delta_i}{2} - \frac{Z}{r_i} \right] + \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} - E \right\} \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = 0, \quad (1.49)$$

де Δ_i це лапласіан i -го електрона. У гіперсферичних координатах r_1 і r_2 замінюються на гіперрадіус ρ і гіперкут α , які визначаються наступним чином:

$$\rho = \sqrt{r_1^2 + r_2^2}, \quad \alpha = \tan^{-1}\left(\frac{r_2}{r_1}\right). \quad (1.50)$$

У цих координатах рівняння Шредінгера для «гіперсферичної» хвильової функції $\Psi(\rho, \Omega) \equiv \left(\rho^{5/2} \sin \alpha \cos \alpha \right) \psi$ має вигляд

$$\left[-\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} - \frac{1}{4\rho^2} + \hat{h}(\rho) - 2E \right] \Psi(\rho, \Omega) = 0, \quad (1.51)$$

де

$$\hat{h}(\rho) = \frac{1}{\rho^2} \hat{\Lambda}^2(\Omega) + \frac{1}{\rho} V(\alpha, \theta_{12}), \quad (1.52)$$

$$\hat{\Lambda}^2(\Omega) = -\frac{\partial^2}{\partial \alpha^2} + \frac{\ell_1^2}{\cos^2 \alpha} + \frac{\ell_2^2}{\sin^2 \alpha}, \quad (1.53)$$

$$V(\alpha, \theta_{12}) = -\frac{2Z}{\cos \alpha} - \frac{2Z}{\cos \alpha} + \frac{2}{\sqrt{1 - \sin 2\alpha \cos \theta_{12}}}. \quad (1.54)$$

Тут Ω представляє собою 5 кутів $\alpha, \hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2, \ell_i$ – це орбітальний момент імпульсу i -го електрона, а $\theta_{12} = \cos^{-1} \left[\frac{(\mathbf{r}_1 \cdot \mathbf{r}_2)}{r_1 r_2} \right]$.

1.2.10. Мультиконфігураційний метод Хартрі–Фока. Чисельне знаходження розв’язків нерелятивістських рівнянь Хартрі–Фока у мультиконфігураційному наближенні для атомів у зв’язаному стані було реалізовано у вигляді серії зручних комп’ютерних програм для розрахунків АІС багатоелектронних атомів. Основні алгоритми та програми були розроблені Шарлотою Фрозі-Фішер [185–188].

1.2.11. Метод хаотичних фаз з обміном. МХФО у англomовній літературі відомий як метод RPAE (random phase approximation with exchange). МХФО базується на кількох фізично виправданих припущеннях. Перше з них полягає у тому, що електрони в атомі можна розглядати як деякий густий газ. Друге допускає малість залишкової взаємодії електронів у порівнянні з їх кінетичною енергією. Метод описаний детально у монографії [189]. У цьому наближенні Амусья зі співробітниками отримали, зокрема, залежності q -індексів від переданого імпульса для деяких станів неона [189] та аргона [190]. В останньому випадку враховувались збудження станів “дві частинки – дві дірки”. Застосування МХФО до атома Ве легко знайти у [191].

1.2.12. Метод комплексних обертів гамільтоніана. Метод комплексних функцій, або метод комплексних обертів гамільтоніана, був запропонований у роботах У. Хо [192,195]. Метод актуальний до сьогодні [196]. Суть його зводиться до узагальнення варіаційного принципу Рітца для проведення розрахунків з комплексними пробними функціями. Результатом мінімізації власних значень гамільтоніана на множині параметрів пробної функції є вектор комплексних енергій досліджуваних резонансів. Цей метод був актуальним при дослідженні положень та ширин резонансних станів атома гелію та гелієподібних іонів [192], що збігаються до порогу $n=3$. Основний формалізм методу представлено у [193]. Метод успішно використовувався також для розрахунків гіпотетичних АІС атома гелію

[194], що знаходяться у неперервному спектрі між порогами $n=4$ та $n=6$ (для негативного іона водню, див. [196]). Але метод комплексних обертів, як і всі інші методи, що базуються на використанні варіаційного принципу Рітца, сформульований лише для розрахунків хвильових функцій, які описують зв'язані стани у двоелектронних системах. Всі спроби реалізації даного методу для станів, що існують на фоні неперервного спектру атома і врахування взаємодії цих станів з неперервним спектром, як правило, не увінчалися успіхом. У [195] для розрахунків параметрів резонансів у внутріоболонкових станах (коли два електрони займають одну й ту саму оболонку) використовувались хвильові функції типу Гілерааса, а для розрахунків міжоболонкових станів (коли два електрони займають різні оболонки) використовувались продукти орбіталей Слетера! У роботі [196] використовувався базис взаємодіючих конфігурацій.

1.2.13. Метод ефективного гамільтоніана валентної оболонки. Цей метод є багатостановим формалізмом теорії збурень для врахування електронних кореляцій. Метод базується на квазівиродженій багаточастинковій теорії збурень і містить у собі розрахунки з першооснов, які використовують ефективний Гамільтоніан H^v валентної оболонки у якості проміжкового кроку перед обчисленням енергій валентних станів. Метод був розроблений вченим із Чикаго Карлом Фрідом та його послідовниками, див., наприклад, [197]. Такий H^v підхід застосовувався до великого числа атомних та молекулярних систем, причому розрахунки демонстрували точний опис електронної структури. Метод та його застосування представлені, зокрема, у [197–199], у тому числі і в актуальних для наших цілей розрахунках АІС атома кальцію [199].

1.2.14. Зауваження про формалізм функціонала густини. Багатогранність задач та конкретні труднощі у теоретичному описі АІС привели до появи методів, які суттєво залежать від взятих з експеримента параметрів (або одного параметра) і, отже, не відносяться до чистої теорії. Таким чином, подібні підходи не є незалежними методами. Популярним

підходом такого типу є формалізм функціонала густини, див., наприклад, огляд у [200]. Отже, формалізм функціонала густини, на превеликий жаль, не належить до так званих точних квантово-механічних методів. Окрім того, єдиного підходу під назвою формалізм функціонала густини не існує. Насправді, це велика низка різних підходів, що мають певні спільні риси. Часто навіть один і той самий автор (іноді у рамках однієї окремої статті) використовує різні підходи до формалізму функціонала густини, див., наприклад, [201–204]. Однак, до честі американця ужгородського походження Юліуса Єлінека, то він відверто відмічає [201–204] плюси і мінуси підходів функціонала густини. Особливо слід відмітити суттєві труднощі усіх таких підходів при намаганнях опису АІС складних атомів. Незалежна експертиза та інтерпретація АІС є неможливими у рамках таких підходів. Отже, одержані результати не мають вирішального характеру.

Щодо плюсів таких підходів, то вони легко освоюються. Крім того, існує велика кількість легкодоступних пакетів програмного забезпечення для проведення відповідних розрахунків. Отже, наприклад, у рамках *експериментальних інститутів закритого типу* формалізм функціонала густини може мати певне значення у проведенні початкової (первинної) експертизи та місцевої інтерпретації отриманих результатів. На жаль, на цьому плюси даного підходу закінчуються.

Відповідні переваги (плюси) мають описані вище методи.

1.3. Висновки до розділу 1

1. Дано короткий опис експериментальних досліджень та теоретичних методів, які застосовуються при дослідженні АІС складних атомів у задачах іонізації атомів фотонами та електронами.

2. Обгрунтовано актуальність вивчення фізичних процесів, пов'язаних з переходом електронів у неперервний спектр та створення таких теоретичних моделей, які адекватно описують структуру неперервного спектра атомів з врахуванням КС, які є наявними на фоні континууму в області вище порогів іонізації.

3. Дано опис експериментальних досліджень АІС іонів H^- , Li^+ , Be^{++} та атомів Be , Mg , Ca . Вказано основні експериментальні центри світу, де досліджують АІС атомів та іонів, які проявляються у перерізах у вигляді резонансів під час зіткнення атомів та іонів з фотонами, електронами та іншими частинками. Наведено короткий огляд методів проведення експериментів і основних результатів.

4. Описано сучасні теоретичні методи дослідження АІС, а саме: метод Л. Фаддеева, метод Фано, сильного зв'язку каналів, R -матриці, діаголізаційний метод, метод взаємодіючих конфігурацій, метод Шоре, K -гармонік, гіперсферичних координат, мультikonфігураційний метод Хартрі–Фока, метод хаотичних фаз з обміном, комплексних обертів гамільтоніана, ефективного гамільтоніана валентної оболонки, а також формалізм функціонала густини. Вказано на певні переваги та недоліки перерахованих методів, обгрунтовано пошук більш прецезійних засобів опису резонансів у задачах атомної фізики.

РОЗДІЛ 2

ВИБІР ХВИЛЬНОЇ ФУНКЦІЇ ОСНОВНОГО СТАНУ ДЛЯ ГЕЛІЄПОДІБНИХ ІОНІВ ТА АТОМІВ БЕРИЛІЮ, МАГНІЮ, КАЛЬЦІЮ

Як слідує із аналізу, виконаного у попередньому розділі, перспективи розвитку точних методів виявляються зв'язаними зі створенням підходів, які дозволяли би зберігати максимальну послідовність і точність у розрахунках перерізів резонансних процесів і одночасно забезпечувати можливість введення у формалізм фізичних характеристик КС.

Вибір хвильової функції основного стану атома – це перший крок у теоретичному описі процесів іонізації атомів. Критерієм вибору тієї чи іншої хвильової функції основного стану є значення енергії основного стану атома, яке отримується у розрахунках на основі використання тієї або іншої хвильової функції. Розраховане значення енергії основного стану не завжди співпадає з експериментальним значенням енергії. А у випадку прецизійних розрахунків параметрів АІС цей факт має принципове значення. Тому для таких розрахунків вибирають хвильову функцію, яка точно відтворює експериментальне значення енергії основного стану.

Нагадаємо, що навіть при наявності всього двох електронів на єдиній в атомі оболонці важливими є кореляції в основному стані. Тому навіть для опису основного стану атома гелію і іонів H^- , Li^+ , Be^{++} вибирають багатопараметричну хвильову функцію. Щодо атомів Be , Mg , Ca вибір багатопараметричних хвильових функцій є очевидним. Виявилось, що для таких груп об'єктів як He , H^- , Li^+ , Be^{++} та Be , Mg , Ca слід вибирати різні хвильові функції основного стану. Важливим є також, що опис АІС He , H^- , Li^+ , Be^{++} може бути проведений однією і тією ж самою хвильовою функцією. Нижче наведемо вибір такої хвильової функції на конкретному прикладі атома гелію.

Результати розділу опубліковані у роботах [2, 7, 15, 17, 19, 20].

2.1. Вибір хвильової функції основного стану He, H⁻, Li⁺, Be⁺⁺

У цьому параграфі необхідність вибору багатопараметричних хвильових функцій для опису основного стану таких атомних систем як He, H⁻, Li⁺, Be⁺⁺ у задачах їх іонізації фотонами і електронами обосновано на прикладі атома He. Проведено порівняльний аналіз застосування різних хвильових функцій основного стану цього атома. Обчислені енергії, ширини і парціальні ширини нижнього ¹P АІС He, що знаходяться вище порогу утворення збуджених іонів. Показано, що, на відміну від повних ширин КС, які міняються для різних хвильових функцій основного стану мінімально, парціальні ширини при цьому суттєво відрізняються одна від іншої.

У сучасних розрахунках перерізів іонізації атомів фотонами, електронами або іншими частинками хвильова функція початкового стану, як правило, вибирається у тому ж наближенні, що і хвильова функція кінцевого стану. це показано, зокрема, у роботах Берка [135], Берка, Беррінгтона, Сукумара [205] і Люка [206].

Фано у роботі [48] і Фано, Купер у [131] аргументовано довели, що при аналізі процесів збудження двохчастинкових станів у більшості атомів хімічних елементів у основному стані у першу чергу необхідно враховувати багатоелектронні кореляції типу $(n\ell)^2$. Це пов'язано з тим фактом, що при наявності всього двох електронів на єдиній у атомі оболонці важливими є кореляції в основному стані.

У випадку розрахунків перерізів іонізації двоелектронних систем, зокрема, атома гелію вище порогу утворення збуджених іонів, а саме, He⁺(N=2), це питання має принципове значення, оскільки поряд із одночастинковим каналом $1s\epsilon L$ у цій задачі слід враховувати зв'язок із двократно збудженими каналами $2s\epsilon L$, $2p\epsilon(L-1)$, $2p\epsilon(L+1)$. Амплітуда збудження цих каналів зумовлена як зв'язком із каналом $1s\epsilon\ell$ у кінцевому стані, так і з багатоелектронними кореляціями в основному стані.

Задача розрахунку хвильової функції основного стану модельної системи, що тут розглядається і описується проекцією гамільтоніана на підпростір $1s, 2s, 2p$ станів іона He^+ , відповідає розв'язку задачі на зв'язок трьох закритих каналів. Система рівнянь координатного представлення методу сильного зв'язку каналів, у цьому випадку перетворюється у рівняння Хартрі–Фока у багатоконфігураційному підході [185–188].

Розв'язок цієї системи рівнянь у МВК відповідає проблемі знаходження власних значень матриці дійсного симетричного оператора нескінченного рангу. Стосовно двохелектронних систем це відповідає розв'язку багатоконфігураційної задачі з врахуванням $(nl)^2$ конфігурацій відповідного атома.

Найбільш відомим класом функцій основного стану гелієподібних систем є клас хвильових функцій, представлених у роботах Гіллерааса [207–209]:

$$(\Psi_0 = \sum_{n,\ell,m} C_{n\ell m} \psi_{n\ell m}, \ell = 0, 2, 4, \dots), \quad (2.1)$$

де $\psi_{n\ell m} = s^n t^\ell u^m \exp(-s/2) / (n + \ell + m + 2)!$. Тут $s = r_1 + r_2, t = r_2 - r_1, u = r_{12}$ – незалежні змінні, що визначають варіаційну задачу, а r_1, r_2, r_{12} – це стандартні позначення взаємних відстаней обох електронів і ядра, n, ℓ, m – квантові числа (головне, орбітальне і магнітне, відповідно), $C_{n\ell m}$ – відповідні коефіцієнти розкладів по власним функціям $\psi_{n\ell m}$ (див. також, наприклад, формули (10), (10a) у [209] і коментарі до них).

Ці функції добре описують енергію основного стану $\text{He}, \text{H}^-, \text{Li}^+, \text{Be}^{++}$, однак, їх застосування до задач іонізації у великій мірі ускладнюється методикою розрахунку амплітуд, складність розрахунку яких, зумовлена, в основному, знаходженням інтегралів, у які входить множник вигляду $|r_1 - r_2|^m$. У випадку використання методів сильного зв'язку каналів у координатному представленні розрахунок амплітуд виконується один раз у кожній точці по енергії.

Детальний аналіз розрахунку параметрів по методиці Гіллерааса представлено у роботі [210] з врахуванням модифікації Фока [211]. У статті [210] показано, що вже у шостому наближенні

$$\Psi^{(6)} = \Psi^{(4)} + [c_5 u^5 r^{-2} + c_6 (5s + t^2 / s) r^3] \exp(-zS), \quad (2.2)$$

де $\Psi^{(4)} = \exp(-zS) \{1 + u/2 + (1 + u/2) R_1 [c_1 r^{-1} + c_2 + c_3 r] + c_4 u^2 R_1 r^{-3}\}$. Така функція основного стану дає значення енергії близьке до експериментального, а саме: $E=2, 903557$ а.е. У розрахунках використовуються, як правило, багатопараметричні хвильові функції Гіллерааса (6-ти, 8-ми, або, навіть, 56-ти параметричні функції).

На відміну від такого типу варіаційних функцій, хвильові функції, отримані у багатоконфігураційному наближенні Хартрі–Фока, не дають значення енергії основного стану гелію близькі до експериментального, див., наприклад, [185–188]. Найбільш точним аналізом багатопараметричних варіаційних хвильових функцій для атома гелію вважаємо наведений у роботах Пекеріса [212, 213]. Однак, використання функцій Пекеріса у серійних розрахунках є складним і громіздким.

Розв'язок рівняння Шредінгера для основного стану He зручніше шукати у класі функцій зі змінними, що відокремлюються. Найбільш відомими функціями основного стану He у класі таких функцій є аналітична форма хвильової функції Хартрі–Фока в одноконфігураційному наближенні

$$\chi(r) = N_r (\exp(-\xi r) + 0,6 \exp(-\zeta r)), \quad (2.3)$$

і кореляційна функція Еккарта

$$\chi(\alpha r) = N_\alpha (\exp(-\alpha r)), \quad \alpha = 2/a_0, \quad (2.4)$$

де a_0 – радіус Бора; а буквами ξ и ζ у (2.4) позначені числові параметри, які пояснені, зокрема, у [214, 215]. Коефіцієнти N_r і N_α у цих функціях вибираються з умови нормування хвильової функції $\Psi_0(r_1, r_2)$ на одиницю. Однак, такого виду функції використовуються лише для грубих оцінок.

Згідно [216] хвильова функція основного стану записується наступним чином

$$\Psi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \sum_{\ell} B_{\ell} Y_{\ell}^{00}(\mathbf{r}_{12}) F_{\ell}(r_1, r_2), \quad (2.5)$$

де Y_{ℓ}^{00} може бути представлена у вигляді $Y_{\ell}^{00} = \sum_{\mu} Y_{\ell\mu}(\theta_1, \varphi_1) C_{\ell\mu\ell-\mu}^{00} Y_{\ell\mu}(\theta_2, \varphi_2)$, B_{ℓ} – коефіцієнт розкладу, \mathbf{r}_i – радіус-вектор i -го електрона, r_i – відповідний модуль, $C_{\ell\mu\ell-\mu}^{LM} \equiv \langle \ell\mu\ell-\mu | LM \rangle$ – коефіцієнти векторного підсумування, $F_{\ell}(r_1, r_2)$ – радіальні функції, що описують внесок $(n\ell)^2$ конфігурацій у основний стан. Вибір пробних функцій $F_{\ell}(r_1, r_2)$ у загальному випадку довільний. Вимагається лише лінійна незалежність набору і забезпечення правильної асимптотики розв'язку. У такому випадку функції $F_{\ell}(r_1, r_2)$ можуть бути записані наступним чином:

$$F_{\ell}(r_1, r_2) = \sum_{mn} A_{mn}^{\ell} [\chi_m^{\alpha}(r_1) \chi_n^{\beta}(r_2) + \chi_n^{\alpha}(r_2) \chi_m^{\beta}(r_1)], \quad (2.6)$$

де χ_n^{α} – довільні набори неперервних функцій однієї змінної; α, β – параметри, що вибираються з варіаційного принципу.

Взагалі кажучи, варіаційний принцип при розрахунках функцій $F_{\ell}(r_1, r_2)$ можна і не залучати, а функції χ_n^{α} вибирати у вигляді кулонівського базису. Однак, у цьому випадку розклад типу (2.5), (2.6) сходиться повільно і для досягнення потрібної точності слід враховувати дуже велику кількість членів розкладу. А застосування варіаційного принципу для вибору параметрів α, β суттєво прискорює збіжність розкладу (2.6). Твід у [216] навів формулювання однопараметричної варіаційної задачі для розглядуваних розкладів. Було запропоновано шукати функції $\chi_n^{\alpha}(r)$ у наступному вигляді

$$\chi_n^{\alpha}(r) = r^n \exp(-\frac{\alpha}{2} r); \quad \alpha = \beta, \quad (2.7)$$

де α визначається з умови мінімуму енергії основного стану. Коефіцієнти A_{nm}^{ℓ} обчислюються за допомогою діагоналізації матриці відповідного гамільтоніана. У залежності від числа, враховуваних у розкладі (2.6) мультиплетів, у клас хвильових функцій Твіда входять 21-, 31- і 41-параметричні функції, що містять, відповідно, $(np)^2$, $(nd)^2$ і $(nf)^2$ конфігурації. Для процедури обчислень використовуємо наступну функцію Твіда:

$$F_\ell(r_1, r_2) = \sum_{m,n} A_{\ell mn} (r_1^n r_2^m + r_1^m r_2^n) \exp\{-\frac{1}{2}k(r_1 + r_2)\}. \quad (2.8)$$

Для завершення короткого огляду відмітимо, що у суттєво іншому підході аналіз хвильових функцій основного стану двохелектронних систем проводять за допомогою методу Монте-Карло. У статті [217] це робиться, зокрема, для функції виду:

$$\Psi_{49} = (1 + P_{12}) \exp\left(\frac{\sum_{k=0} a_k r_1^n r_2^\ell r_{12}^m}{\sum_{k=0} b_k r_1^n r_2^\ell r_{12}^m} + c(r_1^2 + r_2^2 - r_{12}^2) \ln[r_1^2 + r_2^2] - \alpha r_1 - \beta r_2\right). \quad (2.9)$$

У цьому наближенні отримано найближче до експериментального значення енергії основного стану гелію.

Нижче для розрахунків АІС у He, H⁻, Li⁺, Be⁺⁺ використовуємо хвильову функцію (2.8). Метод розрахунку детально представлено у наступному розділі. Тут метою нашого розгляду є порівняння застосування різних хвильових функцій.

Стани гелію у області неперервного спектра, де знаходяться АІС, що збіжні до третього порогу, описувалися хвильовою функцією [23], яка враховує усі міжконфігураційні взаємодії скінченного числа базисних конфігурацій, що відповідають двохелектронним збудженням у області між другим і третім порогом (закриті канали), і електрона з позитивним значенням енергії над основним і першим збудженим станом іону He⁺ (відкриті канали). У розрахунках враховувались стани з повним моментом атома гелію $L \leq 3$.

Для кожного моменту L підпростір закритих каналів заповнювався двадцятьма конфігураціями, а у якості базисних функцій для їх опису використовувались кулонівські хвильові функції із зарядом $z = 2$. Далі, підпростір цих станів попередньо діагоналізувався. Підпростір відкритих каналів включав три конфігурації для $L = 0$ і чотири – для інших моментів L . Це відповідає включенню у розрахунки каналів, що відповідні основному і першому збудженому стану іона He⁺ $1s\epsilon L, 2s\epsilon L, 2p\epsilon(L-1), 2p\epsilon(L+1)$.

2.2. Розрахунки автоіонізаційних станів на основі різних хвильових функцій та їх порівняння

Для опису основного стану атома He у роботах [22, 23] використовувалась 41-параметрична хвильова функція (2.8) Твіда [216]. На цій основі були одержані точні значення параметрів АІС атома гелію, що знаходяться у області вище порогу утворення збуджених іонів. Аналіз впливу вибору функції основного стану на парціальні характеристики АІС був зроблений у [2, 7]. Результати порівнювались із відповідними результатами інших авторів. Розрахунок парціальних ширин АІС у задачі фотоіонізації гелію виконано у роботі [218] на основі застосування 6-ти параметричної функції Гіллерааса у діагоналізаційному наближенні. У роботах [23, 24] поряд з ДН використовувався МВКЗКЧ, а результати приводились у всіх наближеннях, що з нього слідують, однак у всіх варіантах розрахунків у якості функції основного стану атома гелію застосовувалась 41-параметрична функція Твіда. Зауважимо, що фізичний зміст поняттю парціальних ширин можна придати лише у ДН, тому ми у роботах [2, 7] і нижче у таблицях 1–5 наводимо розрахунки у ДН. Зокрема, у таблицях 1–4. приведені отримані парціальні ширини нижніх АІС атома гелію. Аналіз застосування різних хвильових функцій виконано у [2, 7] (див. таблицю 5) на прикладі нижнього 1P стану, описаного на основі хвильової функції (2.8) у таблиці 2.

Таблиця 1

Парціальні ширини нижніх 5-ти 1S резонансів, отриманих у діагоналізаційному наближенні у зображенні дійсних чисел

N п/п	E, eV	Γ, eV	$1s\epsilon s, eV$	$2s\epsilon s, eV$	$2p\epsilon p, eV$
1	69.39400	0.08235	0.00264	0.07904	0.00067
2	70.48503	0.17282	0.00659	0.04469	0.12154
3	71.40519	0.04091	0.00269	0.03755	0.00067
4	71.91078	0.04045	0.00226	0.01187	0.02632
5	72.07814	0.01973	0.00155	0.01767	0.00053

Таблиця 2

Парціальні ширини нижніх 5-ти 1P резонансів, отриманих у діагоналізаційному наближенні у зображенні дійсних чисел

N п/п	E, eV	Γ, eV	$1s\epsilon p, eV$	$2s\epsilon p, eV$	$2p\epsilon s, eV$	$2p\epsilon d, eV$
1	69.91937	0.16584	0.00033	0.03206	0.09450	0.03899
2	71.24768	0.00101	0.00001	0.00063	0.00027	0.00011
3	71.47437	0.06436	0.00011	0.00240	0.00368	0.05817
4	71.66483	0.06522	0.00033	0.01596	0.04076	0.00818
5	71.78036	0.00066	0.00001	0.00007	0.00003	0.00057

Таблиця 3.

Парціальні ширини нижніх 5-ти 1D резонансів, отриманих у діагоналізаційному наближенні у зображенні дійсних чисел

N п/п	E, eV	Γ, eV	$1s\epsilon d, eV$	$2s\epsilon d, eV$	$2p\epsilon p, eV$	$2p\epsilon f, eV$
1	69.66939	0.15198	0.00001	0.00342	0.14499	0.00356
2	70.50481	0.12298	0.00076	0.00837	0.11141	0.00244
3	71.22368	0.01108	0.00227	0.00306	0.00332	0.00244
4	71.54640	0.21438	0.00571	0.00076	0.20598	0.00193
5	71.56122	0.03308	0.00018	0.00776	0.02507	0.00008

Таблиця 4

Парціальні ширини нижніх 5-ти 1F резонансів, отриманих у діагоналізаційному наближенні у зображенні дійсних чисел

N п/п	E, eV	Γ, eV	$1s\epsilon f, eV$	$2s\epsilon f, eV$	$2p\epsilon d, eV$	$2p\epsilon g, eV$
1	70.88120	0.08686	0.00006	0.03679	0.02921	0.02079
2	71.48071	0.00495	0.0000001	0.00185	0.00244	0.00065
3	71.99411	0.02403	0.00002	0.00749	0.01043	0.00608
4	72.13817	0.00074	0.0000004	0.00054	0.00016	0.00004
5	72.13959	0.00347	0.000002	0.00160	0.00128	0.00058

У таблиці 5 приведені параметри нижнього 1P стану у задачі фотоіонізації атома гелію вище порогу утворення збуджених іонів. Розрахунки виконані для різних хвильових функцій основного стану. Аналіз демонструє, що параметри КС залежать від вибору хвильової функції основного стану.

Таблиця 5

Параметри нижнього 1P автоіонізаційного стану атома He в області енергій вище порогу утворення збуджених іонів; застосування різних хвильових функцій основного стану

	E , eV	Γ , eV	1_{ses} , eV	2_{sep} , eV	2_{per} , eV	2_{ped} , eV
Робота [218], 6-ти параметр. ф-я Гіллерааса	69,89	0,150	0,893(-3)	0,918(-1)	0,313(-1)	0,257(-1)
41-параметр. Ф-я Твіда	69,92	0,165	0,312(-3)	0,945(-1)	0,320(-1)	0,389(-1)
6-ти параметр. ф-я Гіллерааса	69,90	0,154	0,871(-3)	0,814(-1)	0,315(-1)	0,407(-1)
8-ми параметр. ф-я Гіллерааса	69,81	0,158	0,852(-3)	0,836(-1)	0,310(-1)	0,425(-1)
Ф-я Монте- Карло [217]	69,91	0,159	0,476(-3)	0,991(-1)	0,235(-1)	0,359(-1)

Короткі висновки наступні.

Задовільною і зручною для опису АІС атома гелію та іонів H^- , Li^+ , Be^{++} є 41-параметрична хвильова функція Твіда [216], вписана вище у формулі (2.8). Порівняння результатів використання різних хвильових функцій наведене у таблиці 5.

Аналіз результатів показаних у таблиці 5, зокрема, свідчить про те, що повні ширини АІС відрізняються одна від іншої, коли вони розраховані на основі різних хвильових функцій у рамках одного і того ж методу, однак парціальні ширини при цьому відрізняються поміж себе сильніше. Це можна намагатися пояснювати не лише відмінністю однієї від іншої хвильових

функції основного стану. Проте, для детального пояснення причин встановленого факту потрібні подальші дослідження.

Розрахунки резонансних перерізів у задачах фотоіонізації і аналіз резонансних профілів являються джерелом відомостей про структуру атомних систем. Результати таких досліджень дозволяють більш адекватно відібрати теоретичні моделі, а вибір хвильової функції основного стану впливає на одержувані значення відповідних параметрів резонансів.

Дослідження у області енергій збудження вище другого порогу іонізації, або вище порогу утворення збуджених іонів He^+ , у багатьох аспектах схожі на більш ранні дослідження, які проводились у області енергій між першим і другим порогами іонізації, але тепер відкриваються ширші можливості. Більш багатим виявляється спектр отриманих характеристик. Це визначається можливістю заселення у процесах прямої, а також резонансної іонізації фотонами і електронами, як основного, так і збудженого станів залишкових іонів, що потім переходять у основний стан шляхом випромінювання фотона. Таким чином, відкривається можливість дослідження профілів резонансів, які збігаються до порогу $N=3$ атома (і до вищих порогів) He як у повних, так і у парціальних перерізах іонізації, а врахування зв'язку каналів у таких процесах є обов'язковим. Вибір хвильової функції основного стану прямо впливає на значення відповідних матричних елементів, що входять у перерізи іонізації.

2.3. Вибір хвильової функції основного стану атомів Be, Mg, Ca

Було би надзвичайно дивно, якщо б для атомів Be, Mg, Ca згодилася та сама 41-параметрична функція Твіда [216], що і для атома гелію та іонів H^- , Li^+ , Be^{++} . Дійсно, виконані нами у [1, 3–6, 8, 9] дослідження і розрахунки показали, що вже для атома Be розрахунки на основі функції Твіда залишають бажати кращого. Для знаходження нижніх АІС атомів Be, Mg, Ca ми використовували відповідні мультikonфігураційні хартрі-фоківські функції [185–188] основних станів.

Перехід від найпростіших задач, які мають сферичну симетрію, таку як в атомі водню, до багатоелектронного, чи N -електронного атома здійснюється шляхом певних наближень. Якщо задатись питанням: а як з допомогою варіаційного принципу знайти хвильові функції і рівні енергії нерухомого N -електронного атома, щоб максимально наблизитись до точних хвильових функцій, то слід розпочати з принципів класичної механіки багатьох частинок. Як і у випадку класичної механіки, енергії багатоелектронного атома можна представити у вигляді суми кінетичної і потенціальної складових. Остання містить доданки, що відповідають потенціальній енергії притягання кожного електрона до ядра атома і доданки, що описують відштовхування між кожною парою електронів.

На жаль, способу розв'язати напряду таке рівняння Шредінгера, враховуючи одночасно миттєві положення всіх електронів, не існує. Тому найпростішим наближенням буде просте нехтування взаємодією електронів одного з одним. Тоді складне рівняння Шредінгера для N -електронної системи розпадається на систему із N простих одноелектронних рівнянь, коли кожна хвильова функція залежить від координат тільки одного електрона. У прийнятому наближенні поведінка кожного електрона навіть в багатоелектронному атомі не залежить від поведінки інших електронів і описується деякою хвильовою функцією: $\psi_i(\vec{r}_i)$, де \vec{r} – радіус-вектор i -го електрона. У цьому і полягає суть наближення незалежних частинок, яке носить загальний характер і використовується у різних квантово-механічних задачах, у тому числі і у задачах розсіювання та іонізації. Стосовно багатоелектронних атомів це наближення відоме як одноелектронна модель. Розв'язки одноелектронних рівнянь $\psi_i(\vec{r}_i)$ носять назву одноелектронних хвильових функцій або атомних орбіталей. А повна хвильова функція атома у цьому наближенні матиме вигляд $\Psi = \psi_1(\vec{r}_1) \cdot \psi_2(\vec{r}_2) \cdots \psi_n(\vec{r}_n)$. Такий підхід ще іноді називають орбітальним наближенням.

Достатньо близькі до точних розв'язки рівняння Шредінгера можна отримати за допомогою методу самоузгодженого поля, запропонованого Хартрі

і доповненого Фоком (як правило цей підхід називають методом Хартрі–Фока). У такому наближенні міжелектронним відштовхуванням не нехтують, але дію всіх інших електронів на даний електрон замінюють середнім полем, яке наближено відтворює їх сумарну дію. Це поле залежить лише від координат розглядуваного електрона, що дає можливість відокремити змінні у рівнянні Шредінгера у сферичній системі координат, або в інших системах координат такого типу. З формальної точки зору це досягається наступним чином. Замість того, щоб явно враховувати миттєві взаємодії між електронами, у рівняння Шредінгера входять вирази, які описують відштовхування між електронами i та j , усереднене по всім положенням електрона j і, отже, залежне тільки від координат електрона i . Сума цих виразів, таким чином, описує середню взаємодію електрона i з іншими $(N-1)$ -ими електронами. Наслідки цього наближення полягають у наступному. Складне рівняння Шредінгера (яке можна написати для багатоелектронної системи так само як у випадку незалежних частинок) розпадається на ряд одноелектронних рівнянь, розв'язуючи які отримуємо орбітальні енергії. Але зміст енергії E_i при цьому змінюється: Тепер ця енергія є сумою кінетичної енергії i -го електрону, потенціальної енергії його притягання до ядра і середньої потенціальної енергії його відштовхування від інших $(N-1)$ електронів. Оскільки при такому підході відштовхування між i та j електронами враховується двічі (один раз при розгляді електрона i і другий раз при розгляді електрона j), то повна енергія системи буде відрізнятися від простої суми орбітальних енергій на величину, що характеризує потенціальну енергію міжелектронного відштовхування. Таким чином задача розв'язку рівняння Шредінгера для N електронного атома зведена до розв'язку системи N рівнянь, що включають усереднену міжелектронну взаємодію – системи рівнянь Хартрі. Знаходження розв'язків цієї системи розпочинають із задання базисних хвильових функцій (задають набір одноелектронних хвильових функцій максимально близьких до точних). У сучасних розрахунках за методом Хартрі–Фока використовують програмний комплекс мультikonфігураційний Хартрі–Фок (MCHF), який був розроблений

професором Шарлотою Фрозі-Фішер із університету Пенсільванії (США) і реалізований у вигляді зручних чисельних алгоритмів і програм [185–188].

Для більш точних розрахунків хвильових функцій важких атомів, де слід враховувати релятивізм, цей метод узагальнюється і носить назву методу Хартрі–Фока–Дірака. Відповідні програмні реалізації також відомі.

Такі наближення і метод самоузгодженого поля на перший погляд здаються доволі грубими, але це не так. Справа в тому, що електрон, який швидко рухається підлягає впливу, швидше за все, середнього ефективного поля інших частинок, аніж реагує на миттєві зміни їх положень. Принципово важливо, що самоузгоджені розв'язки задовольняють варіаційному принципу, тобто, приводять до середніх значень енергії станів, які є оцінками зверху для точних енергій. Можливо саме тому для атомів, починаючи із заряду ядра $Z=10$ і більше наближення Хартрі–Фока дає близьке до експериментального значення енергії основного стану атома.

Гамільтоніан багатоелектронного атома у відповідному рівнянні Шредінгера має вигляд:

$$H = -\frac{\hbar}{2m_e} \sum_{i=1}^Z \Delta_i - Ze^2 \sum_{i=1}^Z \frac{1}{r_i} + e^2 \sum_{i=1}^Z \sum_{i'=1, i' \neq i}^Z \frac{1}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_{i'}|}, \quad i' > i. \quad (2.10)$$

Перший доданок – це оператор кінетичної енергії, а Δ_i – лапласіан i -го електрона, друга сума – це оператор потенціальної енергії кулонівської взаємодії всіх електронів з ядром атома. Третя сума – оператор міжелектронної кулонівської взаємодії. Нагадаємо, що такий гамільтоніан не враховує спін-орбітальну взаємодію, спін-спінову взаємодію електронів, взаємодію спіна електрона зі спіном ядра, і т. д.

При врахуванні таких взаємодій гамільтоніан багатоелектронного атома сильно ускладнюється і відповідне рівняння Шредінгера для стаціонарних станів можливо розв'язати лише чисельними методами.

Усереднений потенціал, створений електронами багатоелектронного атома, тільки у деяких частинних випадках є сферично-симетричним, тобто не залежить від кутів θ, φ у сферичній системі координат. Прикладами таких

систем є атоми інертних газів з повністю заповненими оболонками. Метод самоузгодженого поля якраз і базується на тому, що кор (остов) – це заповнені оболонки, як, наприклад, для атомів магнію та кальцію і т. д. Атомні орбіталі у такому випадку: $\chi(\mathbf{r}) = R_{n\ell}(r)Y_{\ell m}(\theta, \varphi)$, де $R_{n\ell}(r)$ – радіальна частина хвильової функції, вигляд якої визначається, $Y_{\ell m}(\theta, \varphi)$ – кутова частина, n, ℓ, m – квантові числа.

Наближена багатоелектронна хвильова функція, побудована із N ортонормованих орбіталей окремих електронів, називається детермінантом Слеттера

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \chi_1(\vec{x}_1) & \chi_1(\vec{x}_2) & \dots & \chi_1(\vec{x}_N) \\ \chi_2(\vec{x}_1) & \chi_2(\vec{x}_2) & \dots & \chi_2(\vec{x}_N) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \chi_N(\vec{x}_1) & \chi_N(\vec{x}_2) & \dots & \chi_N(\vec{x}_N) \end{vmatrix}. \quad (2.11)$$

Множник $\frac{1}{\sqrt{N!}}$ забезпечує умову нормування. Детермінант Слеттера є єдиною формою хвильової функції, що забезпечує антисиметричність хвильової функції, записаної через орбіталі. Таким чином, вираз (2.11) забезпечує єдність (однозначність) розв'язків відповідних одноелектронних рівнянь.

Щодо явного виду одноелектронних хвильових функцій, які входять у детермінант Слеттера, найбільш вживаною є система функцій Слеттера:

$$\psi_{n\ell m} = N_n \left(\frac{r}{a_0} \right)^{n^*-1} \exp\left(-k_s \frac{r}{a_0}\right) Y_{\ell m}(\theta, \varphi), \quad (2.12)$$

де r, θ, φ – полярні координати електрона, a_0 – радіус Бора, n^* носить назву ефективного квантового числа (метод його обчислення легко додати). Коефіцієнт

$$N_n = (2k_s)^{n+1/2} (2n)^{-1/2} \quad (2.13)$$

забезпечує нормування функції; $k_s = \frac{Z - S_e}{n^*}$ залежить від порядкового номера хімічного елемента Z , постійної екранування S_e та ефективного квантового числа n^* .

Для апроксимації одноелектронних хвильових функцій також використовують вирази $\psi_{nlm} = N_n(\alpha) r^{n-1} \exp(-\alpha r^2) Y_{lm}(\theta, \varphi)$, що містять гаусівський множник, де α – підгоночний параметр.

Наведений тут формалізм самоузгодженого поля послужив основою для вибору відповідних 4-, 12- та 20-ти електронних хвильових функцій основного стану атомів Be, Mg, Ca.

2.4. Висновки до розділу 2

Обґрунтовано вибір хвильових функцій основного стану для обчислення АІС іонів H^- , Li^+ , Be^{++} і атомів Be, Mg, Ca.

На прикладі атома гелію досліджено вплив того чи іншого вибору хвильової функції основного стану на результати обчислень повних та парціальних ширин КС відповідного атома.

Продемонстровано, що задовільною і зручною для опису АІС атома гелію та іонів H^- , Li^+ , Be^{++} є 41-параметрична хвильова функція Твіда [216], приведена тут у формулі (2.8). Порівняння результатів використання різних хвильових функцій наведено у таблиці 5. Пояснено вибір 4-, 12- та 20-ти електронних хартрі-фоківських функцій основного стану для опису АІС атомів Be, Mg, Ca.

Аналіз результатів показаних у таблиці 5, зокрема, свідчить про те, що, хоча повні ширини АІС відрізняються одна від одної, коли вони розраховані на основі різних хвильових функцій у рамках одного і того ж методу, однак парціальні ширини при цьому відрізняються поміж себе помітно сильніше. Це можна намагатися пояснювати не лише відмінністю однієї від іншої хвильових функцій основного стану. Проте, для детального пояснення причин встановленого факту потрібні подальші дослідження.

РОЗДІЛ 3

МЕТОД ВЗАЄМОДІЮЧИХ КОНФІГУРАЦІЙ У ЗОБРАЖЕННІ КОМПЛЕКСНИХ ЧИСЕЛ У ЗАДАЧІ ІОНІЗАЦІЇ ГЕЛІЄПОДІБНИХ ІОНІВ ТА АТОМІВ Be, Mg, Ca ЕЛЕКТРОННИМ УДАРОМ

У даному розділі розглядається постановка задачі теоретичного опису іонізації гелієподібних іонів та атомів берилію, магнію, кальцію електронами на основі формалізму МВКЗКЧ. Для опису налітаючого електрона використовується наближення Борна. Значна частина методу, яка стосується вибору хвильової функції основного стану атомної системи розглянута у попередньому розділі. Основна увага приділена формалізму МВКЗКЧ. На основі положень формалізму комплексних енергій Зігерта [219] будуються хвильові функції резонансного розсіювання електронів на атомах, які враховують збудження довільної кількості взаємодіючих КС системи "електрон + іон", причому останні можуть розпадатись у довільну кількість відкритих зв'язаних каналів.

Основи МВКЗКЧ відомі з робіт [22–25, 30], а результати розділу опубліковано у [1, 3–6, 8, 9].

3.1. Постановка задачі іонізації атомних систем електронним ударом

По своїй природі резонансна іонізація є процесом багаточастинковим. Для її послідовного теоретичного опису необхідно враховувати змішування конфігурацій дискретного та неперервного спектра. Тому навіть у відносно простих випадках фотоіонізації, відповідний математичний апарат є досить громіздким. Причому, якщо розрахунків резонансної фотоіонізації проведено досить багато, роботи, що описують іонізацію атомних систем електронами, зустрічаються відносно рідко. Мета цього параграфа – опис постановки задачі іонізації атома електронним ударом у борнівському наближенні за налітаючим електроном.

Розглянемо іонізацію атома швидкими електронами з імпульсом \vec{k}_0 , які розсіюються на кут χ з імпульсом \vec{k} . Нехай атом у початковому стані характеризується квантовими числами повного орбітального моменту і спіну та

їх проекціями L_0, S_0, M_0, M_{s_0} . Стан системи після реакції визначається квантовими числами залишкового іона L_f, S_f, M_f, M_{sf} та вибитого електрона, що має імпульс \vec{k} та проекцію спіна m_s . Реакція іонізації схематично зображена у формулі (1.1). Нижче всюди застосовується атомна система одиниць.

У борнівському наближенні амплітуда іонізації задається виразом

$$T_{o \rightarrow f}^{L_f M_f S_f M_{sf} m_s}(\vec{k}, \vec{Q}) = \langle L_f M_f S_f M_{sf}; \vec{k} m_s | \sum_{j=1}^Z \hat{t}_j^b(\vec{Q}, \vec{r}_j) | L_0 M_0 S_0 M_{s_0} \rangle, \quad (3.1)$$

де

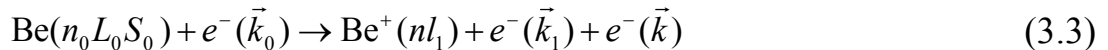
$$\hat{t}_j^B(\vec{Q}, \vec{r}_j) = -\frac{2a_0}{Q^2} \exp(i\vec{Q}\vec{r}_j), \quad (3.2)$$

а \vec{Q} – переданий імпульс: $\vec{Q} = \vec{k}_0 - \vec{k}$,

a_0 – борівський радіус (сумування проводиться по всім електронам атома).

Питання полягає в тому, яку функцію ми візьмемо в якості функції $\langle L_f M_f S_f M_{sf}; \vec{k} m_s |$ кінцевого стану, та функції $|L_0, M_0 S_0, M_{s_0}\rangle$ основного стану. Ці питання вирішуються у наступних параграфах даного розділу.

Позначимо схему розглядуваної реакції як



де $\vec{k}_0, \vec{k}_1, \vec{k}$ – імпульси налітаючого, вибитого та розсіяного електронів відповідно. У борнівському наближенні УСО (узагальнена сила осцилятора переходу) буде мати вигляд [220]

$$\frac{\partial f_{n l_1}}{\partial E}(Q) = \frac{E}{Q^2} \sum_{lL} \left| \langle n l_1 E l | \sum_{j=1}^Z \exp(i\vec{Q}\vec{r}_j) | n_0 L_0 S_0 \rangle \right|^2. \quad (3.4)$$

У цій формулі $E = k_0^2 - k^2$ – енергія втрат; $\vec{Q} = \vec{k}_0 - \vec{k}$ – переданий імпульс; $|n l_1 E l : L S_0\rangle$ – хвильова функція, наприклад, атома берилію з повним моментом L та спіном S_0 , при цьому електрон з моментом l та енергією E знаходиться у полі іона Be^+ , електрон якого має квантові числа $|n l\rangle$. Функція основного стану атома берилію $|n_0 L S_0\rangle$. Розрахункові формули УСО переходу у неперервний спектр приведені у роботі [220]. В якості функції основного стану для

гелієподібних іонів було взято 41-параметричну хвильову функцію Твіда [216], а для атомів берилію, магнію, кальцію відповідні хартрі-фоківські хвильові функції.

3.2. Вивід основних формул методу взаємодіючих конфігурацій у зображенні комплексних чисел

Задача опису та інтерпретації структури перерізів резонансних процесів зводиться до визначення кривих відповідних перерізів та характеристик резонансних станів. Оцінка вкладу кожного КС у формування кривої є основною проблемою у розшифровці спектрів атомів в області вище порогу іонізації. У спектрах багатьох атомів та іонів виявлено цілі комплекси резонансів, що перекриваються. І хоча резонансна структура, що спостерігається в експериментах, складається з окремих асиметричних піків, ототожнення таких піків з ізольованими резонансами не завжди є достатньо обгрунтованим. Параметри, що характеризують розраховану резонансну структуру, отримані шляхом "фітування" за FUMILI, не завжди відповідають реальним станам даної системи.

Зупинимося на описі формалізму МВКЗКЧ у задачі іонізації атомів електронним ударом.

Будемо вважати, що стан системи з N електронів у полі ядра, яке має заряд Z , описується набором хвильових функцій, котрі, у свою чергу, задовольняють стаціонарне рівняння Шредінгера

$$\hat{H}\Psi_{jE}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_n) = E\Psi_{jE}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_n). \quad (3.5)$$

У формулі (3.5) \hat{H} – гамільтоніан системи, конкретний вигляд якого визначається постановкою фізичної задачі; \vec{r}_i – набір координат i -го електрона; E – повна енергія системи.

У даному параграфі знайдено такі розв'язки рівняння (3.5), які відповідають станам атома з одним електроном у неперервному спектрі. Представимо оператор Гамільтона \hat{H} системи у вигляді суми двох операторів \hat{H}_0 та \hat{V}^r . Нехай \hat{H}_0 – модельний гамільтоніан системи. Набір власних функцій

оператора \hat{H}_0 можна подати у вигляді об'єднання двох підпросторів, які визначають множини станів дискретного та неперервного спектрів відповідно. Позначимо ці підпростори відповідно D і C . Матриця гамільтоніана \hat{H} у зображенні оператора \hat{H}_0 може бути записана наступним чином

$$\|\hat{H}\| = \left\| \begin{array}{c} \|\hat{H}^{DD}\| \\ \|\hat{V}^{CD}\| \end{array} \left\| \begin{array}{c} \|\hat{V}^{DC}\| \\ \|\hat{H}^{CC}\| \end{array} \right. \right\|, \quad (3.6)$$

де оператори \hat{H}^{DD} і \hat{H}^{CC} є проєкціями гамільтоніана \hat{H} на підпростори D та C . Матриці операторів \hat{V}^{DC} і \hat{V}^{CD} характеризують взаємодію між підпросторами дискретних та неперервних станів.

Позначимо далі набори хвильових функцій дискретного спектра як $|n\rangle$, а неперервного спектра – $|\lambda E\rangle$. Нехай ці функції задовольняють наступні умови

$$\langle m|\hat{H}^{DD}|n\rangle = E_n \delta_{nm}, \quad \langle \lambda'E'|\hat{H}^{CC}|\lambda E\rangle = E \delta_{\lambda\lambda'} \delta(E - E'). \quad (3.7)$$

Використовуючи техніку проєкційних операторів Фешбаха [156, 166], можна показати, що розв'язки рівняння (3.7) мають наступні властивості:

$$\langle n|\lambda E\rangle = 0, \quad \hat{H}^{CC}|n\rangle = 0, \quad \hat{H}^{DD}|\lambda E\rangle = 0, \quad \langle n|m\rangle = \delta_{nm}, \quad \langle \lambda E|\lambda'E'\rangle = \lambda_{\lambda\lambda'} \delta(E - E'). \quad (3.8)$$

Звідки випливає, що набір хвильових функцій $|n\rangle \cup |\lambda E\rangle$ є повною ортонормованою системою і задовольняє вимогам Фано [127–131]. У зображенні цього базиса матрицю гамільтоніана \hat{H} запишемо у наступному вигляді

$$\|\hat{H}\| = \left\| \begin{array}{c} E_n \delta_{nm} \\ \|\hat{V}^{CD}\| \end{array} \left\| \begin{array}{c} \|\hat{V}^{DC}\| \\ E \delta_{\lambda\lambda'} \delta(E - E') \end{array} \right. \right\|. \quad (3.9)$$

Якщо порівняємо цю формулу з (3.6) то можемо розділити взаємодію у вигляді суми модельного гамільтоніана \hat{H}_0^M та, так званої, залишкової взаємодії \hat{V}_M^r . Тоді,

$$\left\| \hat{H}_0^M \right\| = \left\| \begin{array}{cc} \left\| \hat{H}^{DD} \right\| & 0 \\ 0 & \left\| \hat{H}^{CC} \right\| \end{array} \right\|; \quad \left\| \hat{V}_M^r \right\| = \left\| \begin{array}{cc} 0 & \left\| \hat{V}^{DC} \right\| \\ \left\| \hat{V}^{CD} \right\| & 0 \end{array} \right\|. \quad (3.10)$$

Рівняння Шредінгера з гамільтоніаном \hat{H} у представленні (3.10) перетворюється у систему інтегро-алгебраїчних рівнянь

$$\left\{ \begin{array}{l} (E_n - E)a_{\lambda n}^{iE} + \sum_{\lambda'} \int_0^\infty b_{\lambda\lambda'}^{iE}(E') \cdot V_{n\lambda'}(E') dE' = 0 \\ \sum_m a_{\lambda m}^{iE} V_{m\lambda'}^*(E') + (E' - E)b_{\lambda\lambda'}^{iE}(E') = 0 \end{array} \right\}, \quad (3.11)$$

де i – індекс лінійно-незалежного розв'язку системи рівнянь (3.11); надалі цей індекс опустимо. Індекс λ нумерує канал реакції розсіювання і визначає асимптотику функції та квантові числа системи іон + електрон у неперервному спектрі; $a_{\lambda m}^E$ і $b_{\lambda\lambda'}^E(E')$ – коефіцієнти розкладу функції $\Psi_\lambda^E(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ за базисом станів дискретного $|n\rangle$ та неперервного спектрів $|\lambda E\rangle$. $V_{n\lambda}$ – матричний елемент оператора \hat{V}^{CD} ; $V_{n\lambda}(E) = V_{n\lambda}^*(E)$.

Нагадаємо, що згідно Фано [48, 127]

$$\Psi_\lambda^E(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \sum_m a_{\lambda m}^E |m\rangle + \sum_{\lambda'} \int_0^\infty b_{\lambda\lambda'}^E(E') |\lambda' E'\rangle dE'. \quad (3.12)$$

У класичній роботі Фано [48] також показано, що, якщо у розкладі (3.12) обмежитись одним членом, то задача знаходження коефіцієнтів $a_{\lambda m}^E$ і $b_{\lambda\lambda'}^E(E')$ розв'язується аналітично.

Для розрахунку характеристик КС, які зв'язані з повною системою (3.12), слід вимагати виконання умови нормування функції $\Psi_\lambda^E(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ на δ -функцію за енергією. Задача опису парціальних сил осцилятора переходу (чи перерізів іонізації), окрім цього, вимагає врахування відповідних асимптотичних граничних умов, які дозволяють покласти у відповідність індексу лінійно-незалежного розв'язку системи (3.11) також і набір квантових чисел, який характеризує досліджуваний канал. Згідно роботи Берка [205], у зображенні повного моменту, задачі іонізації відповідає система хвильових функцій, які мають наступну асимптотику:

$$\begin{aligned}
\Psi_{jL_f\lambda:LM}^E(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) &= \sum_{\vec{r}_N \rightarrow \infty} \sum_{j'L_f\lambda'\mu'M'_f} \langle L_f M_f \lambda' \mu' | LM \rangle_{\text{X}} \\
\Psi_{jL_f M'_f}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_{N-1}) &\frac{1}{r_N} Y_{\lambda\mu'}(\theta_N, \varphi_N) \left\{ \delta_{\lambda\lambda'} \delta_{jj'} \delta_{L_f L'_f} \exp(i\theta_{jL'_f}(\vec{r}_N)) - \right. \\
&\left. \left[S_{jL_f\lambda:LM}^{j'L_f M'_f:LM} \right]^\dagger \exp(-i\theta_{jL'_f}(\vec{r}_N)) \right\}, \tag{3.13}
\end{aligned}$$

де j, L_f, M_f – квантові числа, що характеризують іон,

λ, μ – квантові числа вибитого електрона,

$\Psi_{jL_f M_f}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_{N-1})$ – хвильова функція іона,

$S_{jL_f\lambda:LM}^{j'L_f M'_f:LM}$ – S -матриця розсіювання,

$$\theta_{jL_f}(\vec{r}_N) = k_{jL_f} \vec{r}_N + \frac{z'}{k_{jL_f}} \ln(k_{jL_f} \vec{r}_N),$$

z' – заряд іона на нескінченності.

Для побудови набору хвильових функцій $\Psi_\lambda^E(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ з асимптотичною поведінкою (2.20) слід визначити асимптотичні властивості функцій базиса $|\lambda E\rangle$ і вибрати відповідний спосіб обходу полюсів розв'язків системи (3.11). З квантової теорії розсіювання відомо (див, наприклад, монографію Мотт–Мессі [51]), що набору хвильових функцій з асимптотикою (3.13) відповідає спосіб обходу полюса знизу.

Використовуючи формулу для обчислення контурного інтеграла типу Коші, можемо подати формальний розв'язок системи рівнянь (3.12) у наступному вигляді:

$$b_{\lambda\lambda'}^E(E') = P \frac{\sum_m a_{\lambda m}^E V_{m\lambda}(E)}{E - E'} + \left[A_{\lambda\lambda'} \pm i\pi \sum_m a_{\lambda m}^E V_{m\lambda'}(E) \right] \delta(E - E'). \tag{3.14}$$

Вибір знака у квадратних дужках ($\pm i\pi$) визначає спосіб обходу полюса "зверху", або "знизу". Матриця $A_{\lambda\lambda'}$ залежить від асимптотичних властивостей функцій базиса $|\lambda E\rangle$. Різниця з методом Фано тут полягає у тому, що на місці квадратних дужок у Фано ставиться дійсна величина.

Підстановка виразу (3.14) у систему рівнянь (3.11) призводить до системи неоднорідних алгебраїчних рівнянь з комплексною матрицею коефіцієнтів:

$$(E_n - E)a_{\lambda n}^E + \sum_m [F_{nm}(E) - i\gamma_{nm}(E)]a_{\lambda m}^E = -\sum_{\lambda'} A_{\lambda\lambda'} V_{\lambda'n}(E);$$

$$\gamma_{nm}(E) = \pi \sum_{\lambda} V_{n\lambda}(E) \cdot V_{\lambda m}(E); F_{nm}(E) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{\gamma_{nm}(E')}{E - E'} dE'. \quad (3.15)$$

Розв'язок системи (3.15) проведемо наступним чином. Спочатку визначимо власні вектори та власні значення симетричної комплексної матриці, яка входить у ліву частину системи рівнянь (3.15). Позначимо цю матрицю $W_{nm}(E)$:

$$W_{nm}(E) = E_n \delta_{nm} + F_{nm}(E) - i\gamma_{nm}(E) \quad (3.16)$$

Так як елементи матриці $W_{nm}(E)$ є функціями повної енергії E , то її власні значення та власні вектори також будуть залежати від E . Нехай вирази $B_{nm}(E)$ і $\eta_n(E)$ є матрицею власних векторів і вектором власних значень матриці $W_{nm}(E)$, відповідно. Матриця (3.16) не ермітова, отже $B_{nm}(E)$ та $\eta_n(E)$ - комплексні величини. Позначимо

$$\eta_n(E) = E_n(E) + i\tilde{\gamma}_n(E); \text{ де } \tilde{\gamma}_n = \frac{\Gamma_n(E)}{2}. \quad (3.17)$$

У теорії матриць, див., наприклад, [221], показано, що для власних векторів симетричної комплексної матриці вірним є наступне співвідношення

$$\sum_k B_{ik}(E) \cdot B_{jk}(E) = \delta_{ij} \beta_j(E), \quad (3.18)$$

де $\beta_j(E)$ – комплексний вектор, який залежить від умови нормування власних векторів. Надалі будемо вважати, що $B_{ik}(E)$ нормовані таким чином, що $\beta_j(E) = 1$.

Наступним етапом, після визначення власних векторів та власних значень матриці $W_{nm}(E)$, є знаходження коефіцієнтів розкладу $a_{\lambda m}^E$. Розв'язок системи рівнянь (3.15) будемо шукати у вигляді лінійної комбінації власних векторів матриці $B_{nm}(E)$, тобто

$$a_{\lambda m}^E = \sum_{m'} B_{m'm}(E) \cdot \tilde{M}_{\lambda m'}(E). \quad (3.19)$$

Підстановка (3.19) у систему (3.15) з врахуванням того, що $B_{nm}(E)$ є матрицею власних векторів матриці $W_{nm}(E)$, визначає систему лінійних рівнянь відносно коефіцієнтів лінійної комбінації (3.19). Тобто,

$$\sum_{m'} B_{m'm}(E) \cdot \tilde{M}_{\lambda m'} [E - E_{m'}(E) + i\Gamma_{m'}(E)/2] = \sum_{\lambda'} A_{\lambda\lambda'} V_{\lambda m}(E). \quad (3.20)$$

Домноживши ліву та праву частину системи (3.20) на матрицю $B_{nm}(E)$ і враховуючи властивість (3.18), знайдемо вираз для $\tilde{M}_{\lambda m}(E)$:

$$\tilde{M}_{\lambda m}(E) = \frac{\sum_{k\lambda'} B_{nk}(E) V_{k\lambda'}(E) A_{\lambda\lambda'}}{E - E_m(E) + i\Gamma_m(E)/2} = \frac{\sum_{\lambda'} \tilde{V}_{m\lambda'} A_{\lambda\lambda'}}{E - E_m(E) + i\Gamma_m(E)/2}, \quad (3.21)$$

де $\tilde{V}_{m\lambda'}(E) = \sum_{m'} B_{mm'}(E) \cdot V_{m'\lambda'}(E)$.

Розв'язок (3.21) визначає коефіцієнти розкладу з точністю до матриці $A_{\lambda\lambda'}$. Властивості матриці $A_{\lambda\lambda'}$, у свою чергу, залежать від асимптотичних властивостей функцій базиса $|\lambda E\rangle$. Вирази для коефіцієнтів розкладу матимуть наступний вигляд:

$$a_{\lambda m}^E = \sum_{m'} B_{m'm}(E) \frac{\sum_{\lambda'} A_{\lambda\lambda'} \tilde{V}_{\lambda'm'}(E)}{E - E_{m'}(E) + i\Gamma_{m'}(E)/2} \quad (3.22)$$

$$b_{\lambda\lambda}^E(E) = \sum_{\mu} A_{\mu\lambda} \left[\delta_{\lambda\mu} \delta(E - E') + \sum_m \frac{\tilde{V}_{m\mu}(E) \tilde{V}_{\lambda m}(E')}{E - E_m(E) + i\Gamma_m(E)/2} \right] \times \left(\frac{P}{E - E'} - i\pi\delta(E - E') \right), \quad (3.23)$$

а, з врахуванням (3.21), – $a_{\lambda m}^E = \sum_{m'} \tilde{M}_{\lambda m'}(E) \cdot B_{m'm}(E)$.

Зручно також ввести матрицю $M_{\lambda m}(E)$, яка зв'язана з матрицею $\tilde{M}_{\lambda m}(E)$ співвідношенням $M_{\lambda m}(E) = \tilde{M}_{\lambda m}(E) [E - E_m(E) + i\Gamma_m(E)/2]$. Тоді зв'язок між матрицею $M_{\lambda m}(E)$ та матрицями $A_{\lambda\lambda'}$, $B_{nm}(E)$ та $V_{n\lambda}(E)$ буде виражений

формулою $M_{n\lambda}(E) = \sum_k \sum_{\lambda'} B_{nk}(E) \cdot V_{k\lambda'} \cdot A_{\lambda\lambda}$, причому $[M_{n\lambda}(E)]^* = M_{\lambda n}(E)$, чого не можна стверджувати про матрицю $\tilde{M}_{\lambda m}(E)$.

Визначимо матрицю $A_{\lambda\lambda}$. Для цього виконаємо підстановку (3.21) і (3.22) у розклад (3.12). Результат виразимо через $M_{\lambda m}(E)$. Вид розв'язку рівняння Шредінгера у даному випадку буде наступний:

$$\Psi_{\lambda}^{E(-)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \sum_{\lambda'} A_{\lambda\lambda'} |\lambda'E\rangle + \sum_m \frac{M_{\lambda m}(E)}{E - E_m(E) + i\Gamma_m(E)/2} \times$$

$$\times \left[\sum_n B_{mn}(E) |n\rangle + \sum_{\lambda'} \left(\int_0^{\infty} \frac{\tilde{M}_{\lambda m}(E')}{E - E'} \right) \sum_{\lambda} A_{\lambda\lambda'} |\lambda'E'\rangle dE' - i\pi \tilde{M}_{\lambda m} \sum_{\lambda'} A_{\lambda'\lambda} |\lambda'E\rangle \right]. \quad (3.24)$$

Якщо зараз ввести у розгляд більш зручний базис хвильових функцій, а саме

$$\varphi_{\lambda}^E(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \sum_{\lambda'} A_{\lambda\lambda'} |\lambda'E\rangle \quad \text{та} \quad \tilde{\varphi}_m^E(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \sum_n B_{mn}(E) \cdot |n\rangle, \quad (3.25)$$

то попередня формула (3.24) матиме вигляд

$$\Psi_{\lambda}^{E(-)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \varphi_{\lambda}^E(\vec{r}_1, \vec{r}_2) + \sum_m \frac{M_{\lambda m}(E)}{E - E_m(E) + i\Gamma_m(E)/2} \times$$

$$\times \left[\tilde{\varphi}_{\lambda}^E(\vec{r}_1, \vec{r}_2) + \sum_{\lambda'} \left(\int_0^{\infty} \frac{M_{\lambda m}(E')}{E - E'} \tilde{\varphi}_{\lambda'}^{E'}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) dE' - i\pi M_{\lambda m}(E) \varphi_{\lambda'}^E(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \right) \right]. \quad (3.26)$$

Згідно роботи [205] хвильові функції $|\lambda E\rangle$, а отже і $\varphi_{\lambda}^E(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \sum_{\lambda'} A_{\lambda\lambda'} |\lambda'E\rangle$,

є функціями багатоканальними і вираз для асимптотики таких функцій може бути записаний у вигляді

$$|\lambda E\rangle_{r_n \rightarrow \infty} \rightarrow \sum_j \frac{\Psi_j(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_{n-1})}{\vec{r}_n} [\tilde{b}_{\lambda j} \cos(\theta_j(\vec{r}_n) + \xi_j) + \tilde{a}_{\lambda j} \sin(\theta_j(\vec{r}_n) + \xi_j)]. \quad (3.27)$$

Матриці $\|\tilde{a}\|$ і $\|\tilde{b}\|$ визначаються з умови нормування функції $|\lambda E\rangle$ на δ -функцію відносно енергії. Стосовно цих матриць умова нормування матиме наступний вигляд:

$$\|\tilde{a}\|^2 + \|\tilde{b}\|^2 = 1. \quad (3.28)$$

Підстановка (3.27) у вираз для хвильової функції (3.26) визначатиме асимптотичні властивості розв'язків Ψ_{λ}^E у зображенні дійсного базиса $|\lambda E\rangle$, який задовольняє граничним умовам (3.27). З врахуванням вищезгаданого матимемо

$$\Psi_i^E(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_n) =_{\vec{r}_n \rightarrow \infty} \sum_{j=1}^{n-1} \frac{\psi_j(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_{n-1})}{2ir_n} [(\tilde{a}_{\lambda_j} + i\tilde{b}_{\lambda_j}) \exp(i\theta_j(\vec{r}_n)) - (\tilde{a}_{\lambda_j} - i\tilde{b}_{\lambda_j}) \exp(i\theta_j(\vec{r}_n)) + i\pi \sum_{\mu} Z_{\lambda\mu}(E, E'') (\tilde{a}_{\mu_j} - i\tilde{b}_{\mu_j}) \exp(i\theta_j(\vec{r}_n))]. \quad (3.29)$$

З цієї рівності видно, що, для забезпечення виконання граничних умов (3.13) для функції $\Psi_{jL_j\lambda:LM}^E(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_n)$, матрицю $A_{\lambda\lambda'}$ потрібно вибирати у наступному вигляді

$$\|A\| = \|\tilde{a} + i\tilde{b}\|^{-1}. \quad (3.30)$$

Порівняння (3.29) і (3.26) показує, що вираз (3.27) визначає лінійне перетворення, яке приводить хвильові функції базиса $|\lambda E\rangle$ до асимптотики, що відповідає задачі іонізації. Звідси випливає, що, якщо хвильові функції базиса задовольняють граничним умовам (3.13), то матриця $A_{\lambda\lambda'} = \delta_{\lambda\lambda'}$. На основі виразу (3.29), завдяки врахуванню умови нормування (3.28) і (3.30), можна записати зв'язок матриць $\|\tilde{a}\|$ і $\|\tilde{b}\|$ з S -матрицею розсіювання:

$$S_{\lambda\mu}(E) = S_{\lambda\mu}^{(0)}(E) + \tilde{Z}_{\lambda\mu}^*(E), \quad (3.31)$$

де $\tilde{Z}_{\lambda\mu}(E) = i\pi[A_{\lambda\lambda'} Z_{\lambda'\nu} A_{\nu\mu}]$. Вираз (3.31) складається з двох доданків. Перший доданок визначається наступним чином:

$$\|S^{(0)}\| = \frac{\|\tilde{a}\| + i\|b\|}{2(\|\tilde{a}\| - i\|b\|)}. \quad (3.32)$$

Матриця $\|S^{(0)}\|$ описує процес розсіювання без врахування збудження КС системи “іон+електрон”. Другий доданок визначає внесок резонансних процесів у переріз розсіювання. Полюси матриці $\tilde{Z}_{\lambda\mu}$ відповідають збудженню АІС n електронної системи. По змісту ця матриця співпадає з T -матрицею

розсіювання, якщо останню розрахувати у зображенні багатоканального базиса $|\lambda E\rangle$.

3.3. Параметричне представлення диференційних узагальнених сил осцилятора переходу у фіксований канал іонізації

Нехай хвильові функції $|\lambda E\rangle$ задовольняють умовам (3.27). Як було показано вище, у цьому випадку матриця $A_{i\lambda} = \delta_{i\lambda}$. Тоді хвильову функцію $\Psi_{\lambda}^{E(-)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ запишемо наступним чином:

$$|\Psi_{\lambda}^{E(-)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\rangle = |\lambda E\rangle + \sum_m \frac{\tilde{V}_{m\lambda}(E)}{E - E_m(E) + i\Gamma_m(E)/2} (|\tilde{\Phi}_m^E\rangle - i|\chi_m^E\rangle), \quad (3.33)$$

де

$$|\tilde{\Phi}_m^E\rangle = |\varphi_m^c\rangle + \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{|\chi_m^{E'}\rangle}{E - E'} dE' \quad \text{і} \quad |\chi_m^E\rangle = \pi \sum_{\lambda} \tilde{V}_{m\lambda}(E) |\lambda E\rangle, \quad (3.34)$$

індексу λ ставимо у відповідність набір квантових чисел, що визначається співвідношенням (3.13). Для розрахунку сили осцилятора (або перерізу іонізації) потрібно визначити амплітуду іонізації. Як відомо, амплітуду іонізації у загальному випадку можна записати у вигляді:

$$T_{|0\rangle \rightarrow |\lambda E\rangle} = \sqrt{C(E)} \langle \Psi_{\lambda}^{E(-)} | \hat{t} | 0 \rangle \quad (3.35)$$

де $|0\rangle \equiv |n_0 L_0 S_0\rangle$ і означає хвильову функцію початкового стану атома, $C(E)$ – кінематичний множник.

Підстановка виразів (3.33), (3.34) у (3.35) визначає парціальні амплітуди резонансної іонізації

$$T_{|0\rangle \rightarrow |\lambda E\rangle} = t_{\lambda}^{dir}(E) + \sum_m \frac{H_{m\lambda}(E)}{\varepsilon_m(E) + 1} \quad (3.36)$$

Величини, які входять у формулу (3.36) визначаються наступними співвідношеннями:

$$t_{\lambda}^{dir}(E) = \sqrt{C(E)} \langle \lambda E | \hat{t} | 0 \rangle, \quad H_{m\lambda}(E) = 2\tilde{V}_{m\lambda}(E) [t_m(E) - i\tau_m(E)] \Gamma_m^{-1}(E), \quad (3.37)$$

$$t_m(E) = \sqrt{C(E)} \langle \tilde{\mathcal{O}}_m^E | \hat{t} | 0 \rangle, \quad \tau_m(E) = \sqrt{C(E)} \langle \chi_m^E | \hat{t} | 0 \rangle.$$

Парціальна диференційна сила осцилятора переходу у канал іонізації λ пропорційна квадрату модуля виразу (3.36). Розрахунок повного перерізу іонізації здійснюється сумуванням всіх парціальних внесків за індексом λ .

Виділимо серед усіх каналів, врахованих у задачі, деяку групу каналів. Нехай Δ – множина всіх каналів реакції, а α – деяка підмножина множини Δ , так що $\alpha \in \Delta$. Диференційну силу осцилятора переходу із збудженням каналів, що характеризуються індексом λ (причому $\lambda \in \alpha$), запишемо наступним чином:

$$\frac{\partial f_{\alpha}(E)}{\partial E} = G(E) \sum_{\lambda \in \alpha} \left| t_{\lambda}^{dir}(E) + \sum_m \frac{H_{m\lambda}(E)}{\varepsilon_m(E) + i} \right|^2 \quad (3.38)$$

де $G(E)$ – нормувальний множник, який зв'язує переріз із диференційною силою осцилятора переходу, а саме

$$\sigma_{\alpha}(E) = \frac{1}{G(E)} \frac{\partial f_{\alpha}(E)}{\partial E}, \quad (3.39)$$

$$\begin{aligned} \text{або } \sigma_{\alpha}(E) = \sigma_{\alpha}^{dir}(E) + \sum_{\lambda \in \alpha} \left\{ \sum_m \left[\frac{t_{\lambda}^{dir*}(E) H_{m\lambda}(E)}{(\varepsilon_m(E) + i)(\varepsilon_n(E) - i)} + \frac{t_{\lambda}^{dir}(E) H_{m\lambda}^*(E)}{\varepsilon_m(E) - i} \right] + \right. \\ \left. + \sum_{nm} \frac{H_{m\lambda}(E) H_{n\lambda}^*(E)}{(\varepsilon_m(E) + i)(\varepsilon_n(E) - i)} \right\} \end{aligned} \quad (3.40)$$

Скориставшись співвідношенням $\frac{1}{(x+i)(y-i)} = \frac{1}{y-x-2i} \left(\frac{1}{x+i} - \frac{1}{y-i} \right)$, приведемо вираз (3.40) до вигляду, аналогічному формулам Шоре [86] у наближенні неперетинаючихся резонансів

$$\sigma_{\lambda}(E) = \sigma_{\lambda}^{dir}(E) + \sum_m \frac{\Gamma_m(E) P_{m\lambda}(E) + \varepsilon_m(E) Q_{m\lambda}(E)}{\varepsilon_m^2(E) + 1}. \quad (3.41)$$

Дійсні функції повної енергії $P_{m\lambda}(E)$ і $Q_{m\lambda}(E)$ є подвоєними частинами, відповідно, дійсної і комплексної частин комплексної функції $N_{m\lambda}(E)$, де остання має наступний вигляд:

$$N_{am}(E) = \sum_{\lambda \in \alpha} H_{m\lambda}(E) \left(t_{\lambda}^{dir}(E) + \sum_n \frac{H_{m\lambda}(E)}{\varepsilon_n(E) - \varepsilon_m(E) + 2i} \right)^*. \quad (3.42)$$

Таким чином, переріз резонансної іонізації визначається набором наступних функцій повної енергії: $\sigma_{\lambda}^{dir}(E)$, $N_{cm}(E)$, $\varepsilon_m(E)$, $\Gamma_m(E)$. Із виразу (3.41) видно, що набір параметрів $\sigma_{\lambda}^{dir}(E)$ і $N_{cm}(E)$ може бути вибраний неоднозначно, тобто, значення виразу (3.41) є інваріантними відносно наступного перетворення функцій:

$$N_{cm}(E) = \tilde{N}_{m\alpha}(E) + (d_{m\alpha}(E)\varepsilon_m(E) + g_{m\alpha}(E)) + i(d'_{m\alpha}(E)\varepsilon_m(E) + g'_{m\alpha}(E)), \quad (3.43)$$

де $d_{m\alpha}(E)$, $d'_{m\alpha}(E)$, $g_{m\alpha}(E)$, $g'_{m\alpha}(E)$ - довільні дійсні неперервні функції повної енергії E . Вибір цих функцій будемо проводити, виходячи з неперервності функцій $N_{cm}(E)$ і $\tilde{N}_{m\alpha}(E)$. Цю процедуру надалі будемо називати процедурою калібрування параметра $N_{cm}(E)$. Практично калібрування $N_{cm}(E)$ зводиться до виключення явної залежності від E у виразі (3.41). У результаті калібрування отримаємо вираз для параметра $N_{cm}(E)$, а саме

$$N_{cm}(E) = \sum_{\lambda\alpha} \Gamma_m(E) H_{m\lambda}(E) \left[t_{\lambda}^{dir}(E) + \sum_n \frac{H_{n\lambda}(E) \Gamma_n(E)}{E_m(E) - E_n(E) + \frac{i}{2}(\Gamma_n(E) + \Gamma_m(E))} \right], \quad (3.44)$$

де функції $d_{m\alpha}(E)$, $d'_{m\alpha}(E)$, $g_{m\alpha}(E)$, $g'_{m\alpha}(E)$ визначені наступним чином: $g_{m\alpha}(E) = 0$, $g'_{m\alpha}(E) = 0$, $d_{m\alpha}(E) = \text{Re}(R_{m\alpha}(E))$, $d'_{m\alpha}(E) = \text{Im}(R_{m\alpha}(E))$, а функція $R_{m\alpha}(E)$ при цьому має вигляд

$$R_{m\alpha}(E) = \sum_n \sum_{\lambda\alpha} [H_{m\lambda}(E) H_{n\lambda}^*(E)] \times \\ \times \frac{\Gamma_n(E) - \Gamma_m(E)}{[E_m(E) - E_n(E) + i(\Gamma_n(E) + \Gamma_m(E))][\varepsilon_n(E) - \varepsilon_m(E) + 2i]}. \quad (3.45)$$

Виходячи з формул (3.41), (3.44), можна перейти до системи характеристик взаємодіючих КС, аналогічних до введених Фано у роботі [48] для одного ізольованого резонанса, а саме

$$q_{m\alpha}(E) = \text{tg}(\beta_{m\alpha}(E)), \quad \sigma_{m\alpha}(E) = |N_{m\alpha}(E)|^2 \cos(\beta_{m\alpha}(E)), \\ \rho_{m\alpha}^2(E) = \frac{\sigma_{m\alpha}(E)}{\sigma_{\alpha}^{dir}(E)}, \quad \beta_{m\alpha}(E) = \frac{1}{2} \text{Arg}(N_{m\alpha} E) + \frac{k\pi}{2}, \quad (k \in \mathbb{N}). \quad (3.46)$$

Як бачимо, аргумент комплексної функції $N_{m\alpha}(E)$ визначається неоднозначно, з точністю до $k\pi$ (де k – ціле додатне число). Звідси випливає, що кожному значенню функції $N_{m\alpha}(E)$ відповідають два набори характеристик, заданих співвідношеннями (3.46). Ці функції можна легко виразити через $N_{m\alpha}(E) = 2(P_{m\alpha}(E) + Q_{m\alpha}(E))$. Тоді параметри приймуть наступний вигляд:

$$\begin{aligned}\rho_{m\alpha}^{2(\pm)}(E) &= \frac{P_{m\alpha}(E) \pm \sqrt{P_{m\alpha}^2(E) + Q_{m\alpha}^2(E)}}{\sigma_{\alpha}^{dir}(E)}, \\ q_{m\alpha}^{(\pm)}(E) &= \frac{Q_{m\alpha}(E)}{P_{m\alpha}(E) \pm \sqrt{P_{m\alpha}^2(E) + Q_{m\alpha}^2(E)}}.\end{aligned}\quad (3.47)$$

У випадку ізольованого резонанса обидві системи функцій $q_{m\alpha}^{(\pm)}(E)$ і $\rho_{m\alpha}^{2(\pm)}(E)$ мають простий геометричний зміст. Величини $q_{m\alpha}^{(\pm)}(E)$ визначають відстань між екстремумами резонансної кривої і положення резонанса $E_m(\tilde{E}_m)$. А функції $\rho_{m\alpha}^{2(\pm)}(E)$ є визначані відносно фону амплітуди екстремумів. У випадку кількох взаємодіючих АІС така інтерпретація функцій (3.47) є наближеною. Однозначно набір функцій (3.47) у теорії Фано визначається з умови $\rho^2 > 0$, що в наших позначеннях відповідає вибору знака (+). Вираз для розрахунку перерізів, таким чином, матиме наступний вигляд:

$$\sigma_{\alpha}(E) = \sigma_{\alpha}^{dir}(E) \left[1 + \sum_m \left(\frac{[\varepsilon_m(E) + q_{m\alpha}(E)]^2}{\varepsilon_m^2(E) + 1} \rho_{m\alpha}^2(E) - \rho_{m\alpha}^2(E) \right) \right]. \quad (3.48)$$

У залежності від визначення підмножини каналів α формула (3.48) описуватиме або повні, або парціальні характеристики збудження АІС атомів.

Перейдемо до розгляду спектроскопічних характеристик взаємодіючих КС у повних та парціальних диференційних силах осцилятора переходу. Із виразів (3.41) і (3.48) видно, що збудження і розпад m -го КС за групою каналів $\alpha \in \Delta$ характеризується двома комплексними функціями $N_{cm}(E)$ і $\eta_m(E) = E_m(E) - \frac{i}{2} \Gamma_m(E)$. Функції $\eta_m(E)$ входять у вираз (3.31) для S -матриці

резонансного розсіювання. Нулі цих функцій на комплексній площині енергії визначають полюси S -матриці розсіювання, які відповідають збудженню КС. Згідно положень роботи Зігерта [219], реальна частина комплексної енергії полюса визначає положення резонанса, а уявна частина – його ширину. Таким чином, задача визначення положень і ширин резонансів полягає у знаходженні розв'язків системи незв'язаних комплексних рівнянь

$$E - E_m(E) + \frac{i}{2} \Gamma_m(E) = 0. \quad (3.49)$$

Рівність (3.49) може виконуватись тільки при комплексних значеннях енергії E . Розв'язок рівнянь (3.49) вимагає аналітичного продовження у задачі побудови власних векторів і власних значень комплексної матриці $W_{nm}(E)$ (3.16) при комплексних значеннях енергії E . Так як уявна і дійсна частини цієї матриці зв'язані між собою перетворенням Гільберта, то аналітичним продовженням $W_{nm}(E)$ на всю комплексну площину енергії $E = E_1 + iE_2$ буде наступна матриця:

$$W_{nm}^z(E) = E_n \delta_{nm} + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\gamma_{nm}(E')}{E_1 + iE_2 - E'} dE'. \quad (3.50)$$

Використовуючи співвідношення для контурного інтеграла типу Коші, можна показати, що

$$W_{nm}^z(E) \rightarrow_{E_2 \rightarrow \pm 0} \delta_{nm} E_n + F_{nm}(E_1) \pm i\gamma_{nm}(E) \quad (3.51)$$

Положення полюсів визначаються значеннями E_1 і E_2 при яких матриця $\delta_{nm}(E_1 + iE_2) - W_{nm}^z(E_1 + iE_2)$ вироджується. Умовою виродження матриці є рівність нулю її детермінанта, звідки маємо систему рівнянь для визначення комплексних енергій КС

$$\begin{cases} \operatorname{Re} \left[\det \left\| (E_1 + iE_2) \delta_{nm} - W_{nm}^Z(E_1 + iE_2) \right\| \right] = 0, \\ \operatorname{Im} \left[\det \left\| (e_1 + iE_2) \delta_{nm} - W_{nm}^Z(E_1 + iE_2) \right\| \right] = 0. \end{cases} \quad (3.52)$$

Таким чином, щоб визначити положення та ширину m -резонанса потрібно розв'язати систему рівнянь (3.52). Як було вказано вище, введення системи спектроскопічних параметрів, що характеризують профілі АІС у перерізах іонізації, пов'язано з можливістю використання резонансного наближення у формулах (3.41)–(3.48). У випадку, якщо це наближення можна застосувати, положення і ширини резонансних станів можна визначити із (3.52) у першому порядку теорії збурень.

Знайдемо розв'язки наступних рівнянь

$$E_m(\tilde{E}_m) - \tilde{E}_m = 0. \quad (3.53)$$

Корені цих рівнянь будемо вважати положеннями АІС, а ширини визначимо як значення функцій $\Gamma_m(E)$ при $E = \tilde{E}_m$. Параметризація функцій $N_{m\alpha}(E)$ здійснюється також у точках $E = \tilde{E}_m$, звідки для диференціальних сил осцилятора переходу маємо параметричний вираз

$$\frac{\partial f_\alpha(E)}{\partial E} = \frac{\partial f_\alpha^{dir}(E)}{\partial E} \left[1 + \sum_m \rho_{m\alpha}^2(E) \left[\frac{(\varepsilon_m(E) + q_{m\alpha})^2}{\varepsilon_m^2(E) + 1} - 1 \right] \right], \quad (3.54)$$

де
$$\varepsilon_m(E) = \frac{2[E - E_m(\tilde{E}_m)]}{\Gamma_m(\tilde{E}_m)}; \quad q_{m\alpha}(\tilde{E}_m) = \operatorname{ctg} \left[\frac{1}{2} \operatorname{Arg} [N_{m\alpha}(\tilde{E}_m)] \right],$$

$$\rho_{m\alpha}^2 = \frac{|N_{m\alpha}(\tilde{E}_m)|^2 \sin(\frac{1}{2} \operatorname{Arg}(N_{m\alpha}(\tilde{E}_m)))}{\sigma_\alpha^{dir}(E)}. \quad (3.55)$$

Справедливість введення параметризації повинна аналізуватися у кожній конкретній фізичній задачі шляхом точного розрахунку функцій $N_{m\alpha}(E)$ і $\eta_m(E)$.

У задачах розрахунку диференційних характеристик збудження АІС часто буває необхідним визначити парціальні ширини розпаду КС за кількома каналами. У ДН парціальна ширина вводиться через матричний елемент розпаду наступним чином

$$\tilde{A}_{m\alpha}(E) = 2\pi \sum_{\lambda \in \alpha} \left| \langle m | \hat{V} | \lambda \varepsilon \rangle \right|^2. \quad (3.56)$$

Повна ширина відповідає $\alpha = \Delta(\tilde{\Gamma}_m(E)) = \Gamma_{m\Delta}(E)$. У випадку взаємодіючих КС парціальні ширини введемо за аналогією з ДН (2.64), а саме

$$\tilde{\Gamma}_{m\alpha}(E) = 2\pi \sum_{\lambda \in \alpha} \tilde{V}_{m\alpha}(E) \tilde{V}_{m\lambda}^*(E). \quad (3.57)$$

Але, у даному випадку повна ширина $\Gamma_m(E)$, визначена діагоналізацією комплексної матриці, не співпадає з сумою парціальних ширин, як це було у випадку (3.56).

У практичних розрахунках методом сильного зв'язку каналів, наприклад [63], положення резонанса визначається значенням енергії, при якому власна фаза відповідного каналу рівна $\pi/2$. Визначення цієї величини зводиться до розв'язку наступних рівнянь

$$\text{Arg}[\eta_i(E)] = \pi/2, \quad (3.58)$$

де $\eta_i(E)$ – власне число S -матриці, що відповідає каналу i . Набір ширин може бути визначений також і через значення функції $\Gamma_m(E)$ у точках \tilde{E}_m , які задовольняють (3.58). Але такий спосіб визначення положень та ширин має суттєвий недолік – множина розв'язків рівнянь (3.58) містить також корені, обумовлені наявністю у неперервному спектрі атома так званих “резонансів форми”. Вирішення питання ідентифікації АІС у даному випадку буде полягати у безпосередньому аналізі полюсів S -матриці розсіювання, яка визначена рівнянням (3.31). Вивчення характеристик збудження “резонансів форми”

полягає в аналізі властивостей виразів (3.31). та (3.32). При такому способі визначення положень резонансних станів, кожний канал реакції має свій набір розв'язків рівняння (3.30). Ширини ж, при використанні апарату МСЗК, визначаються фітуванням функцій $\eta_i(E)$.

3.4. Чисельна реалізація методу взаємодіючих конфігурацій у зображенні комплексних чисел. Для завершення опису МВКЗКЧ залишається коротко викласти чисельну реалізацію формалізму і схему обчислювального процесу

Найбільш трудомістким при проведенні розрахунків сил осциляторів переходів, чи перерізів іонізації атомів та іонів, на основі викладеного тут формалізму, є побудова хвильових функцій, які б задовільняли умовам (3.7). Найпростіше така задача формулюється у зображенні власних функцій гамільтоніана моделі незалежних частинок, у локальному потенціалі з центральною симетрією (наприклад модель Германа–Скілмана). Але у цьому випадку, розклади для хвильових функцій, які задовольняють рівнянням (3.7), (3.8), збігаються дуже повільно і для досягнення достовірного результату доводиться враховувати значну кількість членів розкладу, що в свою чергу веде до накопичення числової похибки, зв'язаної з обчислювальними процедурами.

При проведенні розрахунків у моделях Хартрі–Фока виникають проблеми, що пов'язані з побудовою наборів функцій, які б задовольняли умовам повноти базиса. У випадку збудження конфігурацій типу “частинка – дірка” проблема використання хартрі-фоківського базиса розв'язується доволі просто, наприклад у МХФО. А от включення у розрахунок резонансних станів більш складної природи ставить ряд проблем, які до цього часу залишаються актуальними.

Основна увага при розробці схеми обчислювального процесу була звернута на проблеми узгодження якості базисних функцій з формою оператора залишкової взаємодії між підпросторами виділених станів.

Запишемо повний гамільтоніан атома у вигляді матриці інтегро-диференційних операторів. Відкриті канали у розглядуваній області енергій позначимо індексом P , а закриті – Q .

$$\|\hat{H}\| = \left\| \begin{array}{c} (\hat{h}_P - k_P^2)\delta_{PP} + \hat{V}_{PP'}; \hat{V}_{PQ} \\ \hat{V}_{QP}; (\hat{h}_Q - k_Q^2)\delta_{QQ'} + \hat{V}_{QQ'} \end{array} \right\|, \quad (3.59)$$

де оператори $\hat{V}_{\lambda\lambda'}$ ($\lambda = P; Q$) мають наступний вигляд

$$\hat{V}_{\lambda\lambda'}(\vec{r}_n) = \langle \Psi_\lambda(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_{n-1}) | \hat{V} | \Psi_{\lambda'}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_{n-1}) \rangle, \quad (3.60)$$

де $\Psi_\lambda(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_{n-1})$ – хвильова функція іона. Представлення (3.59) відповідає системі інтегро-диференційних рівнянь, яку можна записати у матричній формі

$$\|\hat{H}\|\vec{R} = 0, \quad (3.61)$$

де вектор \vec{R} описуватиме поведінку електрона у кожному з каналів реакції.

Щоб застосувати до розв'язку цієї системи рівнянь положення комплексного формалізму, переходимо до енергетичного представлення у базисі власних функцій наступного модельного гамільтоніана

$$\|\hat{H}^{\text{mod}}\| = \|\hat{h}_P - k_P^2 + \hat{V}_{PP}^M\| \delta_{PP'}, \quad (3.62)$$

де \hat{V}_{PP}^M – оператор модельного потенціала, який вибираємо з міркувань зручності отримання хвильових функцій, які б задовольняли рівнянню Шредінгера з гамільтоніаном (3.62). Цьому оператору відповідає система незв'язаних інтегро-диференційних рівнянь другого порядку. Розв'язок цієї системи може бути знайдений відомими чисельними методами.

Нехай $\rho_\lambda^i(\vec{r})$ – власні вектори гамільтоніана (3.62), а ξ_λ – власні значення. Оскільки оператор (3.61) має дискретний і неперервний спектри, то має виконуватись умова повноти, яку спрощено можна записати як

$$\left(\sum_i + \int d\nu \right) \rho_\nu^i(\vec{r}) \rho_\nu^i(\vec{r}') = \delta(\vec{r} - \vec{r}'). \quad (3.63)$$

Таким чином кожний канал реакції, що описується системою рівнянь з гамільтоніаном (3.62), може бути представлений розкладом за функціями, які

отримані у різних моделях. Запишемо тоді зв'язок вектора \vec{R} з векторами $\rho_\lambda^i(\vec{r})$ через коефіцієнти моделі комплексного формалізму

$$\vec{R}_\lambda^i(E, \vec{r}) = \sum_n a_{n\lambda}^{iE} \rho_\lambda^n(\vec{r}) + \int b_{\lambda\lambda'}^{iE}(\varepsilon) \rho_\lambda^n(\vec{r}, \varepsilon) d\varepsilon. \quad (3.64)$$

У зображенні даного розкладу матриця (3.59) може бути приведена до вигляду (3.6). Оператори $\|\hat{H}^{DD}\|$ і $\|\hat{H}^{CC}\|$ у даному випадку будуть мати наступний вигляд:

$$\|\hat{H}^{DD}\| = \left\| \begin{array}{c} E_n^P \delta_{nm} + V_{nm}^{PP}; V_{nm}^{PQ} \\ V_{nm}^{QP}; E_n^Q \delta_{nm} + V_{nm}^{QQ} \end{array} \right\|, \quad (3.65)$$

$$\|\hat{H}^{CC}\| = \left\| \begin{array}{c} (E - E')\delta(E - E') + V_{EE'}^{PP}; V_{EE'}^{PQ} \\ V_{EE'}^{QP}; (E - E')\delta(E - E') + V_{EE'}^{QQ} \end{array} \right\|. \quad (3.66)$$

Оператори \hat{V}^{PP} і \hat{V}^{QQ} описують взаємодію у підпросторі відкритих та закритих каналів, а оператори \hat{V}^{PQ} і \hat{V}^{QP} – зв'язок між цими підпросторами. Залишкова взаємодія у зображенні власних функцій операторів (3.65) і (3.66) визначається матрицею

$$\|\hat{V}^r\| = \left\| \begin{array}{c} 0; \hat{V}^{PQ} \\ \hat{V}^{QP}; 0 \end{array} \right\|. \quad (3.67)$$

Задача побудови базиса хвильових функцій, що задовольняють умовам (3.7) і (3.8) зводиться таким чином до діагоналізації матриць (3.65) та (3.66), що відповідає розв'язку систем лінійних однорідних алгебраїчних рівнянь

$$\begin{cases} (E_n^P - E)a_n^{iP} + \sum_{m^D} a_m^{iP} V_{nm}^{PP} + \sum_{m^Q} a_m^{iQ} V_{nm}^{PQ} = 0, \\ (E_n^Q - E)a_n^{iQ} + \sum_{m^P} a_m^{iP} V_{nm}^{QP} + \sum_{m^Q} a_m^{iQ} V_{nm}^{QQ} = 0, \end{cases} \quad (3.68)$$

і системи інтегральних рівнянь з сингулярними ядрами, яка у K -матричному зображенні має вигляд (див. [167, 168]):

$$K_\lambda^i(\varepsilon, \varepsilon_\lambda) + \sum_{\mu \in P \cup Q} \int_0^\infty K_\lambda^\mu(\varepsilon', \varepsilon_\lambda) \frac{V_\mu^{ir}(\varepsilon, \varepsilon')}{\varepsilon' - \varepsilon_\mu} d\varepsilon' = -V_\lambda^{ir}(\varepsilon, \varepsilon_\lambda). \quad (3.69)$$

Матриці взаємодії V_{μ}^{ir} та K_{λ}^i мають наступну структуру:

$$\|V^r\| = \left\| \begin{array}{l} V_{i\mu}^{PP}; V_{i\mu}^{PQ} \\ V_{\mu i}^{QP}; V_{i\mu}^{QQ} \end{array} \right\|, \quad \|K\| = \left\| \begin{array}{l} K_{i\lambda}^{PP}; K_{i\lambda}^{PQ} \\ K_{\lambda i}^{QP}; K_{i\lambda}^{QQ} \end{array} \right\|. \quad (3.70)$$

Хвильові функції неперервного спектра $|\lambda E\rangle$, що входять у матричні елементи $V_{\lambda}^{ir}(\varepsilon)$ і $V_{\lambda'}^{\lambda r}(\varepsilon, \varepsilon')$ визначені тільки при значенні енергії E . Щоб сформулювати спосіб розв'язку системи (3.68), (3.69) необхідно визначити всі функції $|\lambda E\rangle$ при будь-яких значеннях енергії E , таким чином, щоб не порушити умови повноти набору (3.63). Визначимо функції $|\lambda E\rangle$ при $E \in (-\infty; \infty)$ наступним чином:

$$|\lambda E\rangle = \begin{cases} |\lambda E\rangle, E \geq 0, \\ 0, E < 0 \end{cases}, \quad \text{або } V|\lambda E\rangle = \theta(E)|\lambda E\rangle, \quad (3.71)$$

де $\theta(E)$ – ступінчаста функція Хевісайда. Матричні елементи $V_{\lambda'}^{\lambda}(E, E')$ у даному випадку можуть бути записані у наступному вигляді:

$$V_{\lambda'}^{\lambda}(E, E') = \theta(E)V_{\lambda'}^{\lambda}(E, E')\theta(E'). \quad (3.72)$$

Підстановка виразів (3.71) і (3.72) у систему рівнянь (3.69) дозволяє звести її до наступного вигляду:

$$K_{\lambda}^i(E', E) + \sum_{\mu} \int_{-\infty}^{\infty} K_{\lambda}^{\mu}(E'', E) \frac{V_{\mu}^{\lambda}(E', E'')}{E'' - E} dE'' = -V_{\lambda}^i(E', E). \quad (3.73)$$

Система хвильових функцій, яка визначається розв'язками рівнянь (3.68) та (3.73) утворює базис для побудови диференційних сил осциляторів (або перерізів) резонансного розсіювання та резонансної іонізації.

При побудові чисельних розв'язків системи рівнянь (2.81) були використані ітераційний та безітераційний методи розв'язку. При розв'язку системи рівнянь ітераційним способом система (3.73) записується у вигляді:

$$K_{\lambda}^i(E', E) = -\sum_{\mu} \int_{-\infty}^{\infty} K_{\lambda}^{\mu}(E'', E) \frac{V_{\mu}^{\lambda}(E', E'')}{E'' - E} dE'' - V_{\lambda}^i(E', E). \quad (3.74)$$

В якості нульового наближення вибираємо:

$$K_{\lambda}^{i(0)}(\varepsilon, \varepsilon_{\lambda}) = -V_{\lambda}^i(\varepsilon, \varepsilon_{\lambda}). \quad (3.75)$$

Інтегрування в смислі головного значення у виразі (3.74) здійснюється через розрахунок вагових коефіцієнтів Гауса–Крістофеля (Бахвалов [222]). В якості критерію збіжності ітераційної схеми використовувалась різниця елементів K -матриці розсіювання, отриманих у двох послідовних ітераціях, а саме

$$\left| K_{\lambda}^{i(j)}(\varepsilon, \varepsilon_{\lambda}) - K_{\lambda}^{i(j+1)}(\varepsilon, \varepsilon_{\lambda}) \right| \leq \delta; \forall \varepsilon. \quad (3.76)$$

Використання цього методу дозволяє зробити оцінки збіжності рядів теорії збурень для K -матриці розсіювання, вважаючи параметром малості величину міжканальної взаємодії.

Безітераційний метод має застосування в околі порогу іонізації. Як відомо, в околі порогів іонізації ряди теорії збурень збігаються досить повільно [141], тому розв'язок системи (2.81) проводився також безітераційним способом. Цей спосіб ґрунтується на зведенні системи (2.81) до системи лінійних алгебраїчних рівнянь.

Нехай $C_i(\varepsilon_{\lambda})$ – вагові коефіцієнти Гауса–Крістофеля, побудовані для обчислення інтегралів з ваговою функцією $(\varepsilon - \varepsilon_{\lambda})^{-1}$. Інтеграли, які входять у систему (3.73) у цьому випадку, можна записати у вигляді суми значень функцій у вузлах інтегрування помножених на значення вагових коефіцієнтів. Тоді система рівнянь (3.73) перетвориться у систему лінійних алгебраїчних рівнянь, відносно значень функції $K_{\lambda}^i(\varepsilon, \varepsilon_{\lambda})$ у вузлах сітки інтегрування:

$$K_{\lambda}^i(\varepsilon_k, \varepsilon_{\lambda}) + \sum_{\mu} \sum_j C_{\mu}(\varepsilon_j) K_{\lambda}^{\mu}(\varepsilon_j, \varepsilon_{\lambda}) V_{\mu}^i(\varepsilon_k, \varepsilon_j) = -V_{\lambda}^i(\varepsilon_k, \varepsilon_{\lambda}). \quad (3.77)$$

Чисельний розв'язок цієї системи рівнянь був проведений методом Гаусса.

Таким чином, робоча схема обчислювального процесу передбачає алгоритм дій, що складається з 12 послідовних кроків-пунктів. Розрахунок енергетичних залежностей диференціальних сил осциляторів прямих і резонансних переходів передбачає виконання всіх пунктів алгоритму Точність відтворення результатів чисельних розрахунків визначається у даному методі

кількістю врахованих конфігурацій у розкладах для хвильових функцій базису $|n\rangle$ і $|\lambda E\rangle$, які задовольняють умовам (3.8).

На даний момент часу опубліковано ряд програмних комплексів, які реалізують методику розрахунку атомних структур у задачах фотоіонізації атомів і задачах розсіювання електронів на атомах та іонах.

Наприклад, RMATRIX – універсальний комплекс програм, розроблений групою Берка з Королівського університету Белфаста, який дозволяє обчислити у наближенні LS -зв'язку сили зіткнень електронів з атомами та іонами, а також елементи K -матриці у три стадії: STG1/STG2/STG3.. Не так давно Скотт і Тейлор модифікували RMATRIX таким чином, що стало можливим враховувати проміжковий зв'язок на основі гамільтоніана Брейта–Паулі у задачах зіткнення. Це реалізовано у програмах RECUP/RECU/STGF. Розвиток цього комплексу програм продовжується.

Пакет універсальних програм IMPACT [143] базується на зведенні інтегро-диференціальних рівнянь до системи алгебраїчних. У випадку зв'язаних станів, коли всі канали закриті це приводить до розв'язку задачі на власні значення. Розв'язки, які отримуються у наближенні “замороженого остова” потрібні у багатьох додатках до комплексу, для цього програма INTER забезпечує їх табульований вивід методом інтерполяції в інтервалах між точками, які обчислює IMPACT. Цей комплекс програм розроблений групою Сітона.

Пакет NIEM базується на методі інтегральних рівнянь без ітерацій і використовує LS -зв'язок у задачі розсіювання електрона на мішені [223]. Він організований в чотири стадії: POTC1/NIE2/ASYM3/GRN2.

Комплекс програм DSTWAV дозволяє у наближенні спотворених хвиль і LS -зв'язку розраховувати сили осциляторів і елементи K -матриці для електрон-атомних і електрон-іонних процесів. Парціальні хвилі тут апроксимуються розв'язками, які отримані у модельному статичному потенціалі. Коефіцієнти розкладу знаходяться варіаційним методом [224, 225]. Цей комплекс програм також розроблений групою Сітона.

Програмне забезпечення, реалізоване у вищезгаданих пакетах, має вузько спеціалізовану структуру. Можна виділити центральне ядро пакета, розраховане на реалізацію деякого класу фізичних задач, та програми, які забезпечують функціонування ядра. Можливість використання окремих модулів пакета в автономному режимі обмежена, у зв'язку зі специфікою стикування цих програм з іншими компонентами комплексу. Розвиток індивідуальних засобів спілкування програміста з ЕОМ, розвиток потужних персональних ЕОМ, дозволяє ставити задачу створення інструментальних пакетів прикладних програм, управління якими здійснюється інтерпретуючою програмою, яка може бути реалізована на досить простій вхідній мові. Перевага такого способу організації обчислень полягає у можливості гнучкої перебудови функціональної схеми пакета програм у процесі його експлуатації.

У більшості розрахунків атомних структур процес обчислень зручно організувати таким чином, щоб результат роботи однієї програми міг бути використаний рядом інших програм. Наприклад, хвильові функції, розраховані у наближенні Хартрі–Фока, можуть використовуватись у задачах іонізації, у задачах розсіювання електронів на атомах, у задачах розрахунку спектрів та ряді інших задач. У такому випадку зручним є створення бази даних, в якій зберігаються хвильові функції досліджуваних атомів та іонів, а також інші фізичні величини, що часто використовуються.

При проведенні розрахунків у рамках описаного у перших параграфах даного розділу МКЗКЧ був реалізований принцип створення інструментального пакета прикладних програм, орієнтованого на розрахунок атомних структур. На базі таких прикладних програм реалізований комплекс програм для обчислення диференціальних сил осциляторів переходів, згідно МКЗКЧ. Комплекс програм містить.

1. Програми обчислення матричних елементів типу $V_{nm}(E)$, $V_{n\lambda}^r(E)$ та $V_{\lambda\lambda'}(\varepsilon, \varepsilon')$ з кулоновськими хвильовими функціями та хвильовими функціями неперервного спектра, розрахованими в екранувальному потенціалі.

2. Програми обчислення амплітуд збудження станів дискретного та неперервного спектрів атомів He та Mg. Хвильові функції основного стану розраховуються у наближенні Твіда [216] та Хартрі–Фока [185–188].

3. Програма побудови попередньо діагоналізованих станів неперервного спектра атома. Алгоритм роботи цієї програми базується на розв'язку системи інтегральних рівнянь типу (3.74). У залежності від вихідних даних програма здійснює розв'язок рівнянь (3.74) методом послідовних наближень, або методом зведення їх до системи алгебраїчних лінійних рівнянь. Результатом роботи програми є матричний елемент типу $V_{n\lambda}^r(E)$ та амплітуди, що описують прямий процес збудження атома чи іона, розраховані з врахуванням зв'язку каналів: $t_n = \langle \xi_n | \hat{t} | 0 \rangle$, $t_\lambda^{(0)}(\varepsilon) = \langle \xi_\lambda(\varepsilon) | \hat{t} | 0 \rangle$.

4. Програма, що реалізує комплексний формалізм (МВКЗКЧ), який описано вище. Ця програма використовує результат роботи попередніх програм і здійснює розрахунок енергетичних залежностей параметрів $E_n(E), \Gamma_n(E), N_{m\lambda}(E), H_{m\lambda}(E)$. Після цього, обчислює за цими значеннями параметри Фано та Шоре для кожного АІС окремо і розраховує перерізи іонізації у резонансному наближенні. У залежності від вибору параметрів розрахунок здійснюється МВКЗДЧ, ДН, МВКЗДЧ, ДКН.

Зв'язок між підпрограмами здійснюється через просту базу даних, яка розміщена на пристрої прямого доступу і розрахована для роботи з даним комплексом програм.

Відпрацьовано алгоритми чисельного розв'язку системи рівнянь МВКЗКЧ.

3.5. Основні наближення методу взаємодіючих конфігурацій у зображенні комплексних чисел

Як показано у підрозділі 3.2, систему лінійних алгебраїчних рівнянь МВКЗКЧ (3.15) можна виразити через власні вектори і власні значення комплексної матриці (3.16) $W_{nm}(E) = E_n \delta_{nm} + F_{nm}(E) - i\gamma_{nm}(E)$,

де

$$\gamma_{mn}(E) = \pi \sum_{\lambda} V_{m\lambda}(E) V_{n\lambda}(E), \quad (3.78)$$

$$F_{mn}(E) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{\gamma_{mn}(E')}{E - E'} dE'. \quad (3.79)$$

Саме після знаходження власних векторів та власних значень матриці $W_{nm}(E)$ виникає можливість розраховувати положення і ширини КС, які знаходяться вище порогу утворення збуджених іонів.

Аналіз формул (3.16), (3.78) і (3.79) дозволяє порівняти різні наближення, які можна зробити у МВКЗКЧ. Видно, що у межах методу ВКЗКЧ можливі наступні наближення:

1) метод взаємодіючих конфігурацій у зображенні дійсних чисел (МВКЗДЧ); це наближення відповідає нехтуванню у матриці (3.16) комплексними складовими $i\gamma_{nm}(E)$;

2) діагоналізаційне наближення у зображенні дійсних чисел (ДНЗДЧ) полягає у тому, що у матриці $W_{nm}(E)$ нехтуємо сумою всіх недіагональних членів $F_{nm}(E) - i\gamma_{nm}(E)$;

3) діагоналізаційне наближення (ДН) з урахуванням переходів зовні енергетичної поверхні, або діагоналізаційне наближення у зображенні комплексних чисел (ДНЗКЧ) виникає, якщо у розрахунках знехтуємо членом $F_{nm}(E)$.

Повне врахування всіх членів матриці (3.16) – це і є, власне, МВКЗКЧ, переваги якого над переліченими наближеннями очевидні.

3.6. Висновки до розділу 3

1. Виконано постановку задачі іонізації атомів електронами, обрентовано вибір наближення за налітаючим електроном і приведено загальні формули розрахунку відповідних УСО переходів.

2. Викладено основні положення формалізму МВКЗКЧ, виведено вирази для розрахунку хвильових функцій основного і кінцевого станів, а також

розрахункові формули матричних елементів, які входять у вирази для УСО переходів чи перерізів.

3. Описано метод ВКЗКЧ і обґрунтовано можливість його застосування до розрахунків АІС складних атомів, зокрема атомів берилію, магнію, кальцію.

4. Вказано основні наближення МВКЗКЧ.

РОЗДІЛ 4

ЕНЕРГЕТИЧНІ ПОЛОЖЕННЯ І ШИРИНИ АВТОІОНІЗАЦІЙНИХ СТАНІВ ІОНІВ H^- , Li^+ , Be^{++} ТА АТОМІВ Be , Mg , Ca У МЕТОДІ ВЗАЄМОДІЮЧИХ КОНФІГУРАЦІЙ У ЗОБРАЖЕННІ КОМПЛЕКСНИХ ЧИСЕЛ

Представлено результати обчислень АІС іонів H^- , Li^+ , Be^{++} та атомів Be , Mg , Ca у МВКЗКЧ. Розділ містить завершальний етап у нашому крок за кроком переході від опису АІС атома гелію до розрахунків енергетичних положень та ширин КС складних атомів на основі МВКЗКЧ. Розвиток МВКЗКЧ, таким чином, відбувався поетапно через дослідження гелієподібних іонів H^- , Li^+ , Be^{++} до атомів, що містять 4, 12 і 20 електронів, а саме, Be , Mg , Ca . Наведено точні розрахунки нижніх АІС.

Результати розділу опубліковано у [1, 3–6, 8–14, 16, 18, 21].

4.1. Енергетичні положення і ширини автоіонізаційних станів негативного іона H^- та іона Li^+ , що збігаються до порогу $n=3$

Представлено результати розрахунків задачі іонізації електронним ударом іонів H^- , Li^+ . Обчислення виконані у МВКЗКЧ. Наведено енергетичні положення та ширини чотирьох нижніх АІС негативного іона водню та трьох нижніх АІС іона Li^+ , які збігаються до порогу $n=3$. Результати розрахунків представлено у таблицях 6 і 7, відповідно. Порівняння з експериментальними і теоретичними результатами інших авторів також показано у цих таблицях.

Спочатку приведено порівняння з роботами, що не увійшли до таблиць 6, 7. Зокрема, перший та четвертий резонанси, представлені у таблиці 6 порівнюються також, відповідно, з АІС $E=12.650$, $\Gamma=0.02758$ і $E=12.837$, $\Gamma=0.00163$ роботи [95]. Далі, три КС, представлені у таблиці 7 порівнюються

з резонансами $E=175.80$, $E=178.18$ і $E=179.37$ з роботи [96], відповідно. Статті [95, 96] – це експериментальні дослідження.

В експерименті лабораторії Лос Аламос [95] спостерігались дві ями у графіку перерізу фоторозщеплення іона H^- при енергіях фотонів 12.650 ± 0.004 і 12.837 ± 0.004 еВ якраз під порогом $n=3$ водню. Застосовувався метод перетину ультрафіолетового лазерного пучка з пучком релятивістських іонів H^- . Спостережувані ями графіка інтерпретувались як два перші члени 1P ряду резонансів Фешбаха "+" типу, що сходиться до порогу $n=3$.

В експерименті [96] використовувався механізм взаємодії пучок-фольга. Заселення високо збуджених станів літію досягалось завдяки проходженню пучка 300-KeV Li^+ іонів через тонку вуглецеву фольгу. Енергії збудження $LiI (1s2s^2)^2S^e$ і $LiII (2s2p)^{1,3}P^0$ термів визначались з точністю до 0,5%.

Вкажемо також на експеримент [97], в якому досліджувались результати реакції $h\nu + Li \rightarrow Li^{+**} + e^-$. Завдяки реестрації власних для Li^+ ліній розпаду Аугера була отримана важлива інформація про енергетичні положення та ширини ряду двічі іонізованих рівнів іона, що включають найнижче розташовані $(3l, 3l')$ стани.

У таблиці 6 результати наших досліджень АІС негативного іона водню на основі МВКЗКЧ порівняно з результатами робіт [226–228].

Робота [226] теоретична. Досліджувалось збудження атомів водню електронами до станів $n=2$ при енергіях налітаючих електронів від 10.9 до 12.1 еВ. Детально вивчався ефект виникнення резонансів у перерізах розсіювання нижче порогу $n=3$. Для проведення розрахунків використовувався варіаційний алгебраїчний метод. Базис налічував 14 функцій, що містили 6 власних станів і 8 псевдостанів атома.

У теоретичній роботі [227] розраховувались енергії АІС від'ємного іона водню, що збігаються до водневих порогів $n=3$ та $n=4$. Досліджувались стани з кількома різними симетріями. Використовувався формалізм Фешбаха.

Власні значення відповідного QHQ оператора Фешбаха визначались варіаційним методом Релея–Рітца. Відповідні тріальні хвильові функції складаються з розкладів у термінах продуктів водневих станів та функцій, що розпадаються експоненціально.

К.Т. Чанг у теоретичних дослідженнях [228] також використовує техніку проєктивних операторів Фешбаха. Вивчалися резонансні стани двох-електронних систем у області енергій непружного розсіювання.

Таблиця 6

Енергетичні положення та ширини нижніх АІС іона H^- , що збігаються до порогу $n=3$, у МВКЗКЧ. Порівняння з розрахунками інших авторів

№	E, eV	Γ , eV	E, eV [226]	Γ , eV [226]
1	12.6598	0.0304	12.6586	0.0329
2	12.7801	0.0010	12.7677	0.0012
3	12.8479	0.0026	12.8382	0.0030
4	12.8591	0.0018	12.8416	0.0022
№	E, eV	Γ , eV	E, eV [227]	E, eV [228]
1	12.6598	0.0304	12.6605	12.6602
2	12.7801	0.0010	12.7656	12.7658
3	12.8479	0.0026	12.8330	12.8332
4	12.8591	0.0018	12.8394	12.8408

У таблиці 7 результати наших досліджень АІС позитивного іона літію на основі МВКЗКЧ порівняно з результатами робіт [192, 229].

Відома робота [192] є теоретичною. Використовується розроблений її автором метод комплексних обертів гамільтоніана. Досліджувались КС кількох гелієподібних атомів, у тому числі і позитивного іона літію. Використовувались хвильові функції типу Гіллерааса. У розрахунках було

використано базис з 161 членом для S станів і з 165 членами для P станів. На цій основі було визначено кілька нижніх АІС, що збігаються до порогу $n=3$.

Автор теоретичної роботи [229] використав ДН. Досліджувалась багатоканальна резонансна фотоіонізація декількох найпростіших двох-електронних систем, у тому числі і позитивного іона літію. Отримано енергетичні положення, повні та парціальні ширини основних низько розташованих КС, що збігаються до порогу $n=3$.

Таблиця 7

Енергетичні положення та ширини нижніх 1P АІС іона Li^+ , що збігаються до порогу $n=3$, у МВКЗКЧ; порівняння з розрахунками інших авторів

1P	E, eV	Γ , eV	E, eV [229]	Γ , eV [229]
1	175.58	0,281	175.77	0.321
2	178.27	0,071	178.58	0.078
3	179.45	0,016	179.60	0.019
1P	E, eV	Γ , eV	E, eV [192]	Γ , eV [192]
1	175.58	0,281	175.49	0.272
2	178.27	0,071	178.10	0.068
3	179.45	0,016	-	-

4.2. Енергетичні положення і ширини автоіонізаційних станів іона Be^{++}

Представляємо енергетичні положення та ширини 1P АІС у задачі фотоіонізації гелієподібного іона берилію. Наведені тут КС знаходяться нижче порогу $n=3$ іона Be^{++} . Методом ВКЗКЧ розраховано перші три 1P резонанси вище порогу $n=2$. Результати порівнюються з теоретичними розрахунками інших авторів [192, 229]. Положення та ширини розрахованих АІС приведено у таблиці 8.

При проведенні розрахунків у МВКЗКЧ у якості хвильової функції основного стану використовувалась 41-параметрична хвильва функція Твіда.

Теоретичні дослідження, виконані у роботах [192, 229], вже коротко представлено вище, оскільки саме у них методами комплексних обертів гамільтоніана та у рамках ДН розраховано положення та ширини нижніх АІС позитивного іона літію, що збігаються до порогу $n=3$. Аналогічні дослідження проведено у [192, 229] також і для гелієподібного іона берилію.

Таблиця 8

Порівняння енергетичних положень та ширин АІС, що знаходяться нижче порогу $n=3$ гелієподібного іона Be^{++} і розраховані у МВКЗКЧ, з теоретичними результатами інших авторів (представлено перші три 1P резонанси вище порогу $n=2$)

Е, eV	Г, eV	Е, eV [192]	Г, eV [192]	Е, eV [229]	Г, eV [229]
329.18	0.318	329.50	0.324	329.55	0.412
333.24	0.0081	333.35	0.086	333.69	0.088
337.47	0.0019	-	-	337.66	0.0023

4.3. Енергетичні положення і ширини автоіонізаційних станів атома Ве

Початком досліджень КС атому Ве можна вважати роботу Пашена та Крюгера [72] 1931-го року, в якій при вивченні ВУФ спектрів атома Ве було виявлено декілька станів, що лежать вище порогу іонізації. Мабуть це і були перші дослідження АІС атома Ве.

Слід згадати також експериментальні дослідження Юхансона у 1961-1962 роках, див., наприклад, [98] і посилання там, Було досліджено спектр зв'язаних станів нейтрального атома берилію у діапазоні 18200-2050 ангстрем. Описано терми нижче порогу іонізації, а саме, що належать до $2snl$ та конфігурації $2p^2$. У цих роботах також описано дві лінії із ВУФ області пов'язані з переходами із $2p3s \ ^3P^0$ та $2p3d \ ^3P^0$ АІС берилію.

Зауважимо, що берилій не є простим елементом для експериментальних досліджень завдяки своїм шкідливим (токсичним) хімічним властивостям. Таким чином, для цього елемента теоретичні розрахунки різноманітних характеристик набувають особливої ваги.

Наше порівняння з експериментальними даними розпочинається з найнижчих АІС берилію, які були досліджені французькими науковцями [99, 100]. Вимірювання було проведено у 1969–1972 роках. Спектр поглинання берилію досліджувався у діапазоні 2000-500 ангстрем, включаючи серію $2pns$ $^1P^o$, $n=3-11$ та серію $2pnd$ $^1P^o$, $n=3-6$, що збігаються до $2p$ $^2P^o$ рівня Be^+ . Робота [100] чи не єдина, у якій КС атома берилію отримані у експериментах по фотоабсорбції.

Дослідження процесу іонізації електронним ударом атома Be у інтервалі збудження АІС на основі наших розрахунків у МВКЗЧ стартували з короткої доповіді [14]. Аналізувались спектри енергетичних втрат. Фотоіонізація атома також досліджувалась. Роботи були продовжені у [1, 4–6].

Для розрахунку положень резонансів $2pnl^{2S+1}L$ і їх ширин у задачі іонізації Be електронним ударом використовувався базис з 30 конфігурацій. У розрахунок були включені наступні стани: $2pnL\pm 1$, $2snL$ і $3dnL\pm 2$. Після проведення діагоналізації матриці взаємодії ми отримуємо значення енергій АІС відносно основного стану остова. Використання моделі "замороженого" остова, розрахованого у наближенні Хартрі-Фока, означає нехтування кореляційною енергією остова, кореляціями між електронами остова і валентними електронами, а також поляризацією остова валентними електронами. Так як взаємне розміщення розглядуваних АІС визначається в основному міжелектронною взаємодією валентних електронів Be , то не врахована кореляційна взаємодія буде приводити тільки до загального енергетичного зсуву всіх розрахованих АІС. Одержано положення та ширини нижніх АІС у задачі іонізації атома Be електронним ударом.

Прояв резонансів у диференціальних силах осцилятора переходу Ve продемонстровано, наприклад, на рис. 1. Аналізувався також інший графічний матеріал з парціальними хвилями. Зокрема, у розрахованих парціальних силах осцилятора переходу $2p\ ^2P^0$ рівнів Ve^+ для випадку $L=0-3$, $S=0,1$ видно, що резонанси чітко проявляються у всіх парціальних хвилях і значення перерізів у максимумах у кілька разів переважає значення перерізу (диференціальної сили осцилятора переходу) нерезонансної іонізації. Приведений графік відповідає значенню переданого імпульсу $0,5\ \text{a.o.}^{-1}$.

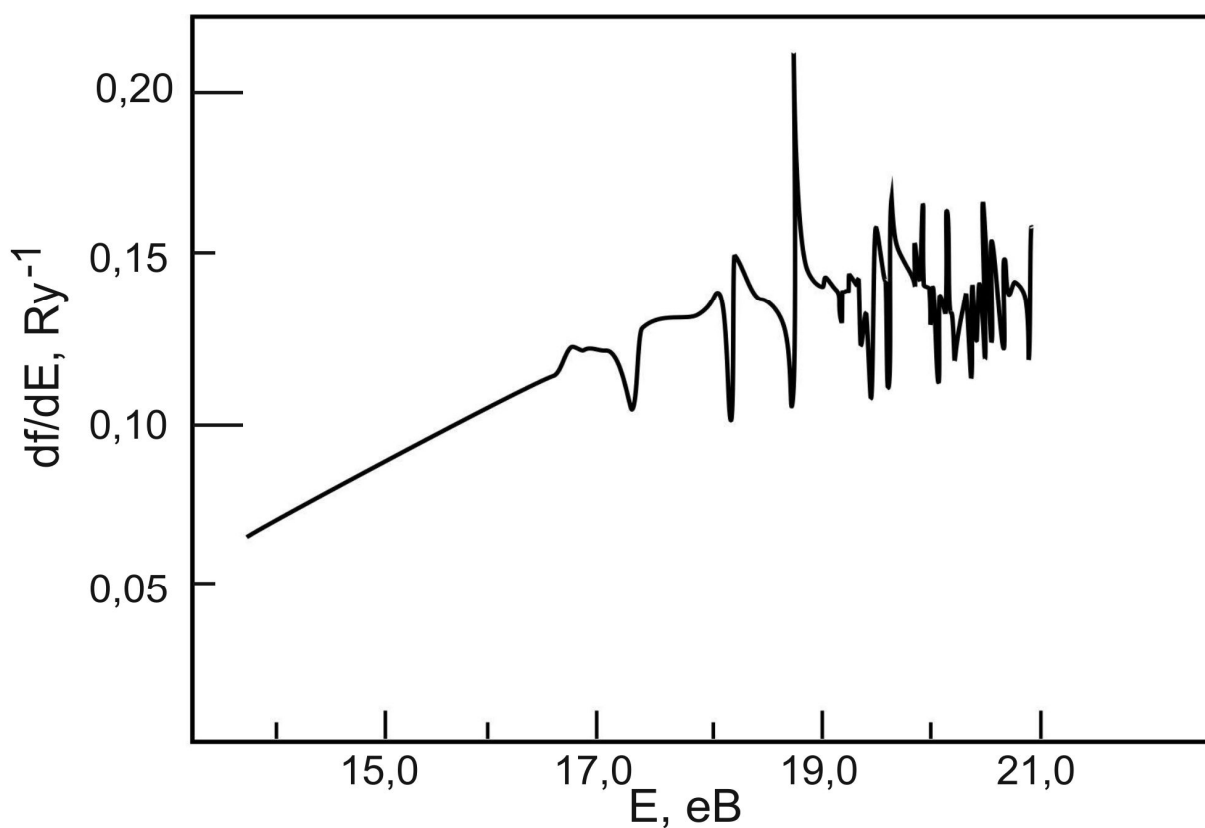


Рис.1. Енергетична залежність диференціальної сили осцилятора переходу від енергії налітаючих електронів у задачі іонізації Ve електронним ударом у спектрах втрат розсіяних електронів. Величина переданого імпульсу ($Q=0.5\ \text{a.o.}^{-1}$)

Таблиця 9 представляє результати розрахунків у МВКЗКЧ енергетичних положень та ширин нижніх 1S , 1P , 1D , 1F АІС атома Ve . Ці резонанси розраховані у задачі іонізації атома електронним ударом. Перш за

все, результати порівняно з енергетичними положеннями та ширинами АІС розрахованими у роботі [230], де представлена інша задача розсіювання електронів на іоні Be^+ . Отже, хоча таке порівняння і є корисним, але не є прямим, а є лише опосередкованим. З іншого боку, таким чином, черговий раз продемонстрована одна і та ж сама фізична природа АІС, яка не залежить від процесу, що призводить до їх виникнення.

При проведенні розрахунків у МВКЗКЧ у якості хвильової функції основного стану використовувалась 4-ти електронна хартрі-фоківська функція.

У таблиці 10 представлені енергії 1P станів, що знаходяться між першим та другим порогами іонізації атома берилію. Ці розрахунки на основі МВКЗКЧ порівняно з експериментальними та теоретичними результатами інших авторів [99, 100, 191, 230–232].

Таблиця 9

Енергетичні положення та ширини нижніх 1S , 1P , 1D , 1F АІС атома Be , отриманих у наближенні МВКЗКЧ у задачі іонізації атома електронним ударом, [230] – розрахунок у діагоналізаційному наближенні положень автоіонізаційних станів у задачі розсіювання електронів на іоні Be^+ .

1S	E, eV	Γ , eV	E, eV [230]	Γ , eV [230]	1P	E, eV	Γ , eV	E, eV [230]	Γ , eV [230]
$3s^2$	16.42	0.0803	16.40	0.0818	$3s3p$	17.70	0.157	17.68	0.169
$3p^2$	18.65	0.0110	18.57	0.0116	$3s4p$	18.85	0.0318	18.83	0.0321
$3s4s$	18.82	0.0351	18.74	0.0358	$3s5p$	19.45	0.00601	19.41	0.0062
$3s5s$	19.48	0.0163	19.45	0.0167	$3s6p$	19.73	0.0157	19.68	0.0161
$3s6s$	19.77	0.00869	19.75	0.00884	$3p4s$	19.81	0.00328	19.77	0.0033
$3s7s$	19.96	0.00518	19.92	0.00527	$3s7p$	19.89	0.0274	19.82	0.0282
			-	-	$3s8p$	19.95	0.0140	19.93	0.0143

1D	E, eB	Γ , eB	E, eB [230]	Γ , eB [230]	1F	E, eB	Γ , eB	E, eB [230]	Γ , eB [230]
$3s3d$	17.62	0.0214	17.56	0.0220	$3p3d$	18.96	0.0203	18.95	0.0214
$3p^2$	18.31	0.0224	18.67	0.0230	$3s4f$	19.43	0.0149	19.43	0.0155
$3s4d$	19.09	0.0378	19.09	0.0389	$3s5f$	19.72	0.0070	19.70	0.00717
$3s5d$	19.60	0.0121	19.56	0.0128	$3s6f$	19.88	0.0023	19.85	0.00235
$3d^2$	19.67	0.00789	19.63	0.0796	$3s7f$	19.95	0.00021	19.94	0.00023
$3s6d$	19.81	0.00331	19.79	0.0034	$3s8f$	19.97	0.0019	-	-

Таблиця 10

Порівняння положень АІС атома Ве, які знаходяться між першим та другим порогами іонізації цього атома, з результатами інших авторів.

1P	МВКЗКЧ E, eB	E, eB [99]	E, eB [100]	E, eB [231]	E, eB [230]	E, eB [191]	E, eB [232]
$2p3s$	10.71	10.71	10.93	10.77	10.73	10.63	10.91
$2p3d$	11.84	11.86	11.86	11.86	11.85	12.03	11.83
$2p4s$	12.03	11.97	12.10	12.07	12.09	12.09	12.09
$2p4d$	12.42	12.47	12.50	12.49	12.49	12.61	12.44

Експерименти [99, 100] коротко описані вище.

Робота [191] – це теоретичні розрахунки, виконані на основі методу хаотичних фаз з обміном. У якості основного результату отримано АІС берилію поблизу першого порогу іонізації атому.

Робота [231] – це також теоретичні розрахунки. Тут використано звичайний метод взаємодіючих конфігурацій у зображенні комплексних чисел.

Теоретичним методом у [232] є не ітеративний варіаційний метод R -матриці поєднаний з багатоканальним методом квантового дефекта на поверхні R -матриці. Основним результатом є фотоіонізація основного стану

$1s^2 2s^2 \ ^1S$ атомарного берилію у діапазоні енергій між порогами $\text{Be}^+ (2s)$ і $\text{Be}^+ (3d)$.

Стосовно таблиць 9, 10 у цілому, відмітимо, що у літературі відсутні подібні результати, одержані на основі точних методів розрахунку, і тим паче – на основі МВКЗКЧ. Як правило, до наших робіт досліджувались АІС, що виникають у процесі розсіювання електронів на іоні Be^+ . Проведене порівняння з розрахунками відповідних положень АІС [230] у ДН у задачі розсіювання електронів на іоні Be^+ (таблиця 9), хоча і є лише опосередкованим, оскільки є іншим об'єктом у іншій задачі, але цілком реально свідчить про достовірність одержаних нами результатів. Такі порівняння проводимо із-за відсутності інформації про спектри втрат в задачах іонізації Be електронним ударом.

4.4. Енергетичні положення і ширини автоіонізаційних станів атома Mg

Як і у ситуації з берилієм, початок досліджень АІС атома Mg також слід віднести до 1931-го року, коли при вивченні ВУФ спектрів атома Mg Пашен та Крюгер [72] виявили стани магнію, що лежать вище порогу іонізації.

Найнижчі АІС магнію (як і берилію) також були досліджені французькими науковцями [99, 100] у 1969–1972 роках. Були проведені експерименти для отримання спектра поглинання випарів магнію у діапазоні 1450-1000 ангстрем. Було виявлено чітку резонансну структуру переріза, яка зумовлена $3pns \ ^1P^0$, $n=4-9$ та $3pnd \ ^1P^0$ АІС магнію. Крім того, в області першого порогу іонізації Mg^+ спостерігались лінії, які були ідентифіковані як $4snp \ ^1P^0$, $n=4-6$ АІС Mg , що збігаються до $4s \ ^2S$ рівня Mg^+ . Під час розшифрування спектрів було отримано енергії вище згаданих станів, проте ширин отримано не було.

Детальне експериментальне дослідження спектра фотопоглинання магнію в області 2000-700 ангстрем було проведено у 1978 році у м. Бонн (Німеччина) [103]. У якості джерела неперервного спектра в області дального

ультрафіолета був використаний синхрофазотрон Боннського університету. У експериментах вже використовувалась сучасна техніка. Резонанси $3s^{21}S \rightarrow 3pns \ ^3P^0$ спостерігались при $n=3-12$, а резонанси $3s^{21}S \rightarrow 4snp \ ^1P^0$ навіть при $n=18$. Було ідентифіковано 10 резонансів, що виникають внаслідок переходів у високолежачі АІС.

У експериментах Росса та його колег [104, 105] із Саутгемпського університету (Англія) заселення АІС проводилось електронним ударом а їх реєстрація – спеціальним спектрометром. У період із 1977 по 1980 роки цією групою дослідників були виконані широкі експериментальні дослідження АІС магнію.

Більш детальний огляд експериментальних досліджень АІС атома магнію наведено у розділі 1 дисертації. У якості теоретичних робіт, що стосуються нижніх АІС магнію, вкажемо на розрахунки у ДН, до чого залучились і вчені з Ужгорода [230], а також розрахунки методом R -матриці [233]. Зауважимо, що у роботі [233] використано специфічний метод R -матриці. А саме, не ітеративний варіаційний метод R -матриці поєднаний з багатоканальним методом квантового дефекту на поверхні R -матриці. Основним результатом тут є теоретичний опис фотоіонізації основного стану $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 \ ^1S$ атомарного магнію у діапазоні енергій між порогами $Mg^+ (3s)$ і $Mg^+ (4p)$.

Як бачимо з літератури, дослідження іонізації атома Mg (та іона Mg^+) фотонами і електронами є актуальною проблемою, про що свідчать як експериментальні, так і теоретичні роботи багатьох авторів, див., наприклад, публікації [99, 100, 103–115, 230, 233]. Ми дослідили методом ВКЗКЧ іонізацію атома Mg електронним ударом в області збудження АІС у роботах [1, 3, 6].

Для розрахунку положень резонансів $2pnl^{2s+1}L$ і їх ширин у задачі іонізації Mg електронним ударом, як і для Be, використовувався базис з 30 конфігурацій, у розрахунок були включені наступні стани: $3pL \pm 1$, $3snL$ і

$3dnL\pm 2$. Енергії і ширини деяких із розрахованих нами $3pnl$ АІС Mg^+ представлено у таблиці 11.

На рис. 2 і рис. 3 графічно зображено 1S та 1P резонанси у диференціальних силах осцилятора переходу, які проявляються у спектрах втрат, у задачі іонізації Mg електронами у границі малих переданих імпульсів, зокрема, при значенні переданого імпульсу ($Q=0.1$ а.о.⁻¹).

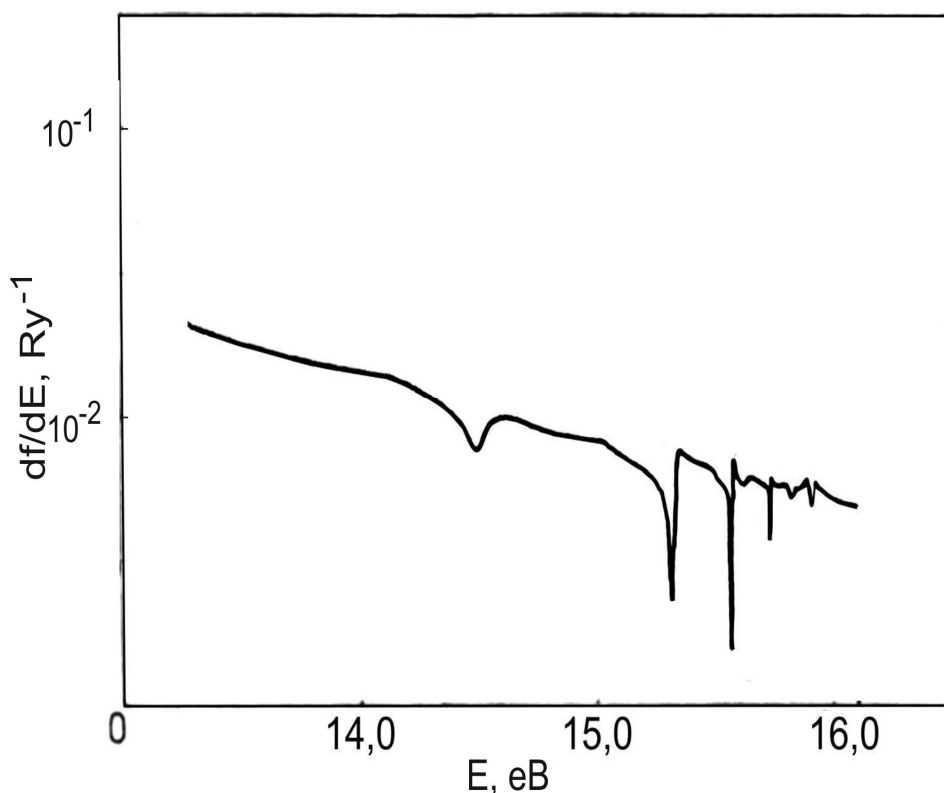


Рис. 2. 1P резонанси у диференціальних силах осцилятора переходу, які проявляються у спектрах втрат, у задачі іонізації Mg електронами у границі малих переданих імпульсів. Величина переданого імпульсу ($Q=0.1$ а.о.⁻¹).

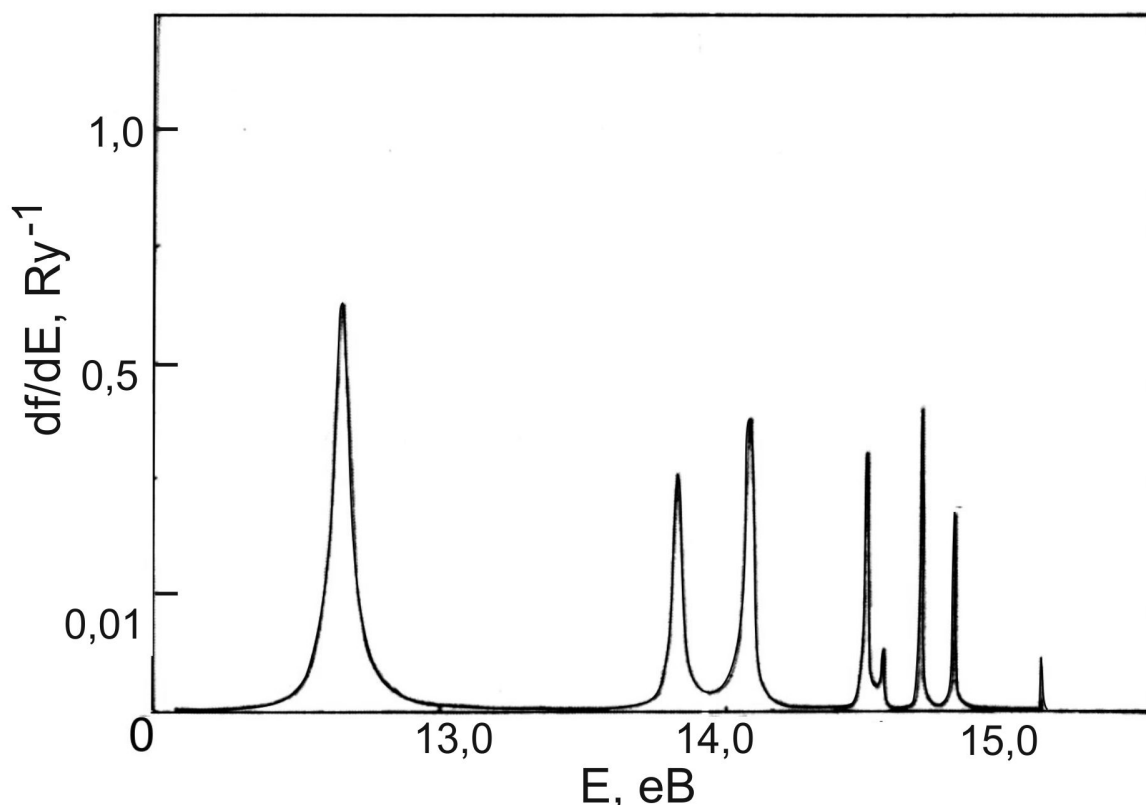


Рис.3. 1S резонанси у диференціальних силах осцилятора переходу, які проявляються у спектрах втрат, у задачі іонізації Mg електронами у границі малих переданих імпульсів. Величина переданого імпульсу ($Q=0.1$ а.о. $^{-1}$)

Парціальні диференціальні сили осцилятора переходу (парціальні перерізи) збудження $3p\ ^2P^0$ станів Mg^+ для $L=0-3$, $S=0,1$ приведено на рис. 2 і рис. 3. Як видно з графіків, резонансна структура парціальних перерізів для Mg^+ має більше різноманіття, ніж для Be^+ , що пов'язано з квазивиродженістю $4s\ ^2S$ і $3d\ ^2D$ станів Mg^+ . Це призводить до того, що в область енергій між рівнями $3p\ ^2P^0$ і $4s\ ^2S$ попадає значно більша кількість АІС (майже у 10 разів) ніж для випадку Be^+ між рівнями $2p\ ^2P^0$ і $3s\ ^2S$.

При проведенні розрахунків у МВКЗКЧ у якості хвильової функції основного стану використовувалась 12-ти електронна хартрі-фоківська функція.

Порівняння наших результатів проведено, по-перше, опосередковано з аналогічними станами, які утворюються у задачі розсіяння електронів на іоні Mg^+ [230], див. таблицю 11. У відомій роботі [230] розрахунки проведені у

ДН. Далі, оскільки у задачі іонізації атома електронним ударом 1P -стани за енергетичними положеннями повинні співпадати з аналогічними станами у задачі фотоіонізації атома Mg, то для 1P -станів, по-друге, можемо провести безпосереднє порівняння наших результатів з експериментом [103] та розрахунками методом R -матриці [233], див. таблицю 12.

Таблиця 11

Енергетичні положення та ширини нижніх 1S , 1P , 1D , 1F АІС атома Mg, отриманих у наближенні МВКЗКЧ у задачі іонізації атома електронним ударом, [230] – розрахунок у діагоналізаційному наближенні положень автоіонізаційних станів у задачі розсіяння електронів на іоні Mg⁺.

1S	E, eB	Γ , eB	E, eB [230]	Γ , eB [230]	1P	E, eB	Γ , eB	E, eB [230]	Γ , eB [230]
$4s^2$	13.08	0.0987	13.04	0.1010	$4s4p$	14.15	0.157	14.18	0.143
$3d^2$	14.61	0.0480	14.66	0.0502	$3d4p$	15.01	0.172	14.95	0.162
$4s5s$	14.92	0.0425	14.97	0.0473	$4s5p$	15.34	0.0324	15.29	0.0301
$4s6s$	15.48	0.0196	15.53	0.0185	$3d5p$	15.53	0.0775	15.56	0.0758
$3d4d$	15.59	0.0140	15.64	0.0129	$4s6p$	15.68	0.0682	15.64	0.0667
$4s7s$	15.78	0.0115	15.80	0.0107	$3d4f$	15.77	0.0481	15.74	0.0448
$4s8s$	15.80	0.0069	-	-	$4s7p$	15.85	0.0059	15.86	0.0048
1D	E, eB	Γ , eB	E, eB [230]	Γ , eB [230]	1F	E, eB	Γ , eB	E, eB [230]	Γ , eB [230]
$3d4s$	13.62	0.262	13.66	0.272	$3d4p$	14.15	0.0225	14.66	0.0230
$3d^2$	14.31	0.253	14.38	0.269	$4s4f$	15.01	0.0110	15.28	0.0113
$4d4s$	14.89	0.0192	14.96	0.0189	$3d5p$	15.34	0.0540	15.53	0.0589
$3d5s$	15.28	0.0869	15.30	0.0951	$3d4f$	15.53	0.0052	15.63	0.0053
$4p^2$	15.47	0.0570	15.49	0.0578	$4s5f$	15.68	0.0201	15.71	0.0205
$3d4d$	15.58	0.0865	15.55	0.0876	$3d6p$	15.77	0.0104	15.88	0.0109
$4s5d$	15.69	0.0258	15.66	0.0248	$4s6f$	15.85	0.0125	15.90	0.0131

Таблиця 12

Порівняння розрахунків положень та ширин АІС атома магнію, одержаних методом МКЗКЧ з експериментом [103] та розрахунками [233] для 1P -станів ([233] – це задача фотоіонізації, фотоіонізаційна межа, [230] – задача розсіювання).

1P	E, eV	Γ , eV	E, eV [230]	Γ , eV [230]	E, eV [233]	Γ , eV [233]	E, eV [103]
$4s4p$	14.15	0.157	14.18	0.143	14.2213	0.3921	14.18
$3d4p$	15.01	0.172	14.95	0.162	14.9048	0.6078	-
$4s5p$	15.34	0.0324	15.29	0.0301	15.3133	0.0931	15.24
$3d5p$	15.53	0.0775	15.56	0.0758	15.7264	0.0890	-
$4s6p$	15.68	0.00682	15.64	0.00667	15.6653	0.0142	15.61
$3d4f$	15.77	0.0481	15.74	0.0448	-	-	-
$4s7p$	15.85	0.00592	15.86	0.00476	15.8675	0.0095	15.83
$4s8p$	15.90	0.0087	-	-	15.9802	0.0111	15.98
$3d6p$	15.93	0.0295	-	-	16.007	0.0417	-
$4s9p$	15.95	0.0011	-	-	16.065	0.0019	16.06

Наведено оригінальні наукові результати, які полягають у розрахунку за допомогою МКЗКЧ [1, 3, 6, 9] енергетичних положень та ширин нижніх 1S , 1P , 1D , 1F АІС атома Mg у задачі іонізації цього атома електронним ударом, див. таблицю 11. Новизна полягає у застосуванні точного методу розрахунку, яким є метод взаємодіючих конфігурацій, і тим паче – метод МКЗКЧ. Розглянуто процес іонізації атома електронним ударом, що є можливим саме завдяки застосуванню МКЗКЧ. Дослідження процесу іонізації електронним ударом також містить елементи новизни. Фізики-теоретики, які використовують інші методи розрахунків процесів у атомних оболонках, як правило, досліджують простіші процеси, наприклад, – розсіювання електронів та фотонів на іоні Mg⁺. Проведене порівняння з розрахунками у ДН відповідних положень та ширин АІС у задачі

розсіювання електронів на іоні Mg^+ (таблиця 11), хоча і є лише опосередкованим (інший об'єкт у іншій задачі), але реально свідчить про достовірність одержаних нами результатів. Частина одержаних тут результатів, а саме енергетичні положення 1P АІС атома Mg , безпосередньо порівняна з експериментом та R -матричним розрахунком, таблиця 12. Результати розрахунків, проведених МВКЗКЧ, знаходяться у хорошому узгодженні з відповідними розрахунками специфічним R -матричним методом [233] та експериментальними результатами [103], див. таблицю 12.

4.5. Енергетичні положення і ширини автоіонізаційних станів атома Ca

Короткий огляд експериментів, у яких досліджувались АІС атома кальцію, виконано у розділі 1, де розглянуто одержані у роботах [116–120] результати та методи досліджень.

При проведенні розрахунків у МВКЗКЧ у якості хвильової функції основного стану використовувалась 20-ти електронна хартрі-фоківська функція.

Застосування МВКЗКЧ до розрахунків нижніх АІС атома кальцію розпочато нами у [16] і продовжено у [1, 6, 9]. Знайдено енергії та ширини найнижчих 1P станів. Результати порівняно з даними інших авторів. У таблиці 13, окрім результатів наших розрахунків [1, 6, 9], представлено експериментальні данні [120] і результати теоретичних досліджень інших авторів [147, 234]. Такий аналіз підтверджує класифікацію АІС запропоновану у роботі [146]. Наші результати добре узгоджуються з теоретичними розрахунками інших авторів.

Експеримент [120] виконано в Ужгороді в ІЕФ НАН України колективом авторів О.Б. Шпенник, Е.Е. Контрош та І.В. Чернишова. Експериментальні дослідження виконувались методом перетинаючихся електронного і атомного пучків з реєстрацією позитивних іонів кальцію, що утворювались. Для формування електронного пучка ($E_{1/2} = 0.15$ eВ)

Таблиця 13

Порівняння енергетичних положень та ширин АІС атома кальцію, розрахованих у МВКЗКЧ, з теоретичними розрахунками інших авторів [147, 234] і експериментом [120]

1P	E, eV	E, eV [120]	E, eV [147]	E, eV [234]
<i>3d5p</i>	6.601	6.59	6.604	6.633
<i>3d6p</i>	7.033	7.02	7.038	7.080
<i>3d7p</i>	7.397	7.39	7.342	7.415
<i>3d8p</i>	7.465	7.47	7.471	7.502
<i>3d9p</i>	7.551	-	7.556	7.575
<i>3d10p</i>	7.610	-	7.614	7.624
<i>4p5s</i>	7.159	7.13	7.166	7.300
<i>3d4f</i>	6.937	-	6.938	6.960
<i>3d5f</i>	7.240	7.25	7.248	7.260
<i>3d6f</i>	7.425	-	7.427	7.427
<i>3d7f</i>	7.523	-	7.529	7.527
<i>3d8f</i>	7.591	-	7.596	7.593
1P	Γ eV	Γ eV [120]	Γ eV [147]	Γ eV [234]
<i>3d5p</i>	0.0801	0.21	0.0702	0.0846
<i>3d6p</i>	0.0059	0.17	0.0056	0.0067
<i>3d7p</i>	0.0451	-	0.0509	0.0399
<i>3d8p</i>	0.0261	0.14	0.0232	0.0315
<i>3d9p</i>	0.0163	-	0.0141	0.0282
<i>3d10p</i>	0.0140	-	0.0101	0.0207
<i>4p5s</i>	0.0129	0.15	0.0139	0.0132
<i>3d4f</i>	0.00006	-	0.000004	0.00001
<i>3d5f</i>	0.0059	-	0.0028	0.00003
<i>3d6f</i>	0.0019	0.17	0.0014	0.0024
<i>3d7f</i>	0.0009	-	0.0011	0.00007
<i>3d8f</i>	0.00007	-	0.00008	0.00006

використовувався гіпоциклоїдальний електронний монохроматор. Було досліджено іонізацію атома кальцію електронним ударом у припороговій області енергій (від 6.11 до 16 еВ). Аналіз особливостей перерізу іонізації показав наявність внеску від збудження та розпаду нижніх АІС атома, що збігаються до порогів збудження $3d$ -, $4p$ -, $5s$ -рівнів іона, а також резонансів (короткоживучих станів відемних іонів). Ідентифікація особливостей перерізу була виконана завдяки залученню експериментальних і теоретичних даних по фотоіонізації (фотопоглинанню).

Робота [147] – це теоретичні дослідження виконані також в Ужгороді колективом авторів О.І. Зацарінний, В.І. Лендел та Е.А. Масалович з ІЕФ НАН України та Ужгородського Державного університету. Використовувалось ДН.

У теоретичній роботі [234] застосовано розроблений Берком та Тейлором метод R -матриці. Розраховано фотоіонізацію нейтрального кальцію з $^1S^e$ основного стану. Для опису початкового стану Ca та кінцевого стану Ca^+ використовувались хвильові функції МВК.

4.6. Висновки до розділу 4

МВКЗКЧ, який добре відомий завдяки прецезійному опису КС атома гелію, вперше застосовано для розрахунку процесів іонізації більш складних атомних систем. Досліджено спектроскопічні характеристики нижніх АІС іонів H^- , Li^+ , Be^{++} та атомів Be , Mg , Ca у задачі іонізації цих атомних систем електронним ударом.

Особливої уваги заслуговує той факт, що досліджувався процес іонізації атомних систем електронним ударом. Розрахунки енергетичних положень та ширин АІС на основі інших теоретичних методів, огляд яких представлено у розділі 1, мають справу із суттєвими труднощами при застосуванні таких методів до процесу іонізації атомних систем. Як правило, досліджується процес розсіювання електронів і фотонів на атомах та іонах.

Тому основне значення виконаних тут досліджень полягає в успішному розрахунку таких АІС багатоелектронних атомних систем, які виникають у процесі іонізації цих систем електронами.

Як видно з огляду теоретичних методів у розділі 1, далеко не всі з них годяться для адекватного опису багаточастинкових систем у цілому і складних атомів зокрема. Особливо це стосується розрахунків ширин резонансів, що виникають у таких фізичних об'єктах. У даному розділі перелік методів, що можуть застосовуватися до розрахунків багаточастинкових систем, суттєво поповнено успішною апробацією на складних атомах такого потужного формалізму, яким є МВКЗКЧ.

На основі МВКЗКЧ виконано розрахунки енергетичних положень і ширин нижніх 1S , 1P , 1D , 1F АІС декількох багатоелектронних атомів, а саме Be, Mg, Ca. Результати досліджень представлено у вісьмох таблицях. Показано, що результати розрахунків добре узгоджуються з відомими експериментальними даними та розрахунками інших процесів на основі інших теоретичних методів.

ВИСНОВКИ

У дисертації представлено поетапний розвиток методу взаємодіючих конфігурацій у зображенні комплексних чисел, починаючи з його застосування до розрахунків автоіонізаційних станів іонів H^- , Li^+ , Be^{++} , до обчислень процесів у електронних оболонках складних атомів Be , Mg , Ca .

1. Успішно розвинуто обчислювальні можливості методу взаємодіючих конфігурацій у зображенні комплексних чисел і вперше застосовано цей метод для отримання повних та парціальних характеристик автоіонізаційних станів Be , Mg , Ca . Таким чином, розширено можливості застосування цього методу на опис багатоелектронних атомних систем.

2. Обґрунтовано вибір хвильової функції основного стану атома для адекватного опису процесів іонізації багатоелектронних атомів. Виконано порівняння та аналіз характеристик квазістаціонарних станів, знайдених на основі різних багатопараметричних хвильових функцій основного стану атома. Завдяки адекватному вибору хвильової функції основного стану суттєво покращено точність розрахунків.

3. Вперше спостережено ефект особливої зміни парціальних ширин у порівнянні із повними ширинами при застосуванні різних хвильових функцій основного стану.

4. Енергетичні положення та ширини АІС іонів H^- , Li^+ , Be^{++} та атомів Be , Mg , Ca розраховано в межах точного квантово-механічного методу, яким є метод взаємодіючих конфігурацій у зображенні комплексних чисел, що добре відомий завдяки прецезійному опису квазістаціонарних станів атома гелію.

5. Метод взаємодіючих конфігурацій у зображенні комплексних чисел успішно застосовано до більш складної, ніж задача розсіювання електрона на іоні, проблеми, а саме до задачі розрахунку процесу іонізації багатоелектронних атомів.

6. Уточнено положення та ширини нижніх АІС атомів Be , Mg , Ca .

7. Наочно продемонстровано переваги МВКЗКЧ у порівнянні з іншими методами розрахунків багаточастинкових задач атомної фізики. Показано, що переваги полягають в автоматичному отриманні не лише енергетичних положень, але і ширин квазістаціонарних станів, а також у застосовності до опису процесів іонізації багатоелектронних систем.

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. В.М. Симулик, Т.М. Заяць та Р.В. Тимчик, “Застосування методу взаємодіючих конфігурацій у зображенні комплексних чисел до розрахунків спектроскопічних характеристик автоіонізаційних станів атомів Be, Mg, Ca,” Укр. фіз. журн. **60**, (11), 1094-1101, (2015).
2. В.М. Симулик, Т.М. Заяць та Р.В. Тимчик, “Вибір хвильової функції основного стану He для прецизійних обчислень параметрів квазістаціонарних станів,” Укр. фіз. журн. **61**, (11), 956-961 (2016).
3. Т.М. Заяць, А.І. Опачко, В.М. Симулик, Р.В. Тимчик, “Енергії найнижчих 1S , 1P , 1D , 1F автоіонізаційних станів атома Mg в методі взаємодіючих конфігурацій,” Науковий вісник Ужгородського університету. Серія Фізика **24**, 180–184 (2009).
4. А.І. Опачко, В.М. Симулик, Р.В. Тимчик, Т.М. Заяць, “Енергетичні рівні найнижчих автоіонізаційних станів атому Be в задачі іонізації електронним ударом,” Науковий вісник Ужгородського університету. Серія – Фізика **29**, 201–204 (2011).
5. Т.М. Zajac, V.M. Simulik, R.V. Tymchyk, “The beryllium atom lowest autoionizing states in the method of interacting configurations in the complex number representations,” Int. J. Theor. Math. Phys. **6**, (4), 110–114 (2016).
6. V.M. Simulik, R.V. Tymchyk, T.M. Zajac, “The method of interacting configurations in complex number representations: from helium to the complex atoms,” Univ. J. Phys. Appl. **11**, (5), 162–175 (2017).
7. Т.М. Заяць, В.М. Симулик, Р.В. Тимчик, “О выборе волновой функции основного состояния He для прецизионных расчетов параметров автоионизационных состояний выше порога образования возбужденных ионов,” Журн. тех. физ. **88**, (7), 970–976 (2018).
8. V.M. Simulik, T.M. Zajac, R.V. Tymchyk, “Calculations for electron-impact ionization of beryllium in the method of interacting configurations in the

- complex number representations,” arXiv: 1608.04078v1 [physics, atom-ph] (2016).
9. V.M. Simulik, Y-N.Y. Tsmur, R.V. Tymchyk, T.M. Zajac, “Calculations for electron-impact ionization of magnesium and calcium atoms in the method of interacting configurations in the complex number representation,” arXiv: 1706.08874v1 [physics, atom-ph] (2017).
 10. Т.М. Заяць, А.І. Опачко, В.М. Симулик, Р.В. Тимчик, “Про задачу точного розрахунку іонізації атома Mg електронним ударом в області енергії вище порогу утворення збуджених іонів,” Програма і тези доповідей Міжнародної конференції молодих учених і аспірантів ІЕФ-2009, (Інститут електронної фізики НАН України, Ужгород, 2009), с. 73.
 11. T. Zajac, A. Opachko, V. Simulik, R. Tymchyk, “Ionization of Mg atom by electron impact in the region of autoionizing states excitation,” Book of abstracts of 41-th EGAS Conference, edited by: J. Kwela, T.J. Wasowicz, (University of Gdansk, Gdansk, 2009), p. 156.
 12. R. Tymchyk, T. Zajac, V. Simulik, A. Opachko, “Calculation of energetic positions of the lowest autoionizing states of Mg atom,” Abstracts of 10-th European Conference on Atoms Molecules and Photons, (Salamanca, 2010), Electron collisions, P-055.
 13. A.I. Opachko, V.M. Simulik, R.V. Tymchyk, T.M. Zajac, “Energetic positions of the lowest autoionizing states of beryllium in the problem of electron-impact ionization of atom,” International Conference of Young Scientists and Post-Graduates, (Institute of Electron Physics, Uzhgorod, 2011), p. 135.
 14. A.I. Opachko, V.M. Simulik, R.V. Tymchyk, T.M. Zajac, “Lowest autoionizing states of beryllium in photoionization problem,” Book of abstracts of 43-th EGAS Conference, edited by A. Weis, J.-Cl. Dousse, M. Allan, P. Knowles, (University of Fribourg, Fribourg, 2011), p. 203.
 15. T.M. Zajac, V.M. Simulik, R.V. Tymchyk, “Sampling of the helium atom ground state wave function in the ionization problem,” Programme and abstracts of BGL-8 International Conference on Non-Euclidean Geometry in

- Modern Physics and Mathematics, (Institute of Electron Physics, Uzhgorod, 2012) p. 62-63.
16. V.M. Simulik, R.V. Tymchyk, T.M. Zajac, "Autoionizing states of Ca in the problem of ionization of calcium atom by the electrons," Abstracts of the 44-th Conference of the European Group on Atomic Systems (University of Gothenburg, Gothenburg, 2012) p. 197.
 17. P.B. Тимчик, В.М. Симулик, Т.М. Заяц, "О волновой функции основного состояния многоэлектронных атомов в задаче ионизации электронным ударом," Збірник тез XV Міжнародної молодіжної науково-практичної конференції «Людина і космос». (Нац. центр аерокосмічної освіти молоді ім. О.М. Макарова, Дніпропетровськ, 2013), с. 73.
 18. R.V. Tymchyk, V.M. Simulik, T.M. Zajac, "Lowest autoionizing states of Ca in the problem of electron impact ionization," Програма і тези доповідей Міжнародної конференції молодих учених і аспірантів ІЕФ-2013. (Інститут електронної фізики НАН України, Ужгород, 2013), с. 219.
 19. P.B. Тимчик, Т.М. Заяць, В.М. Симулик, "Залежність парціальних характеристик квазістаціонарних станів від вибору функції основного стану," Міжнародна конференція молодих учених і аспірантів. Матеріали конференції ІЕФ-2015 (Інститут електронної фізики НАН України, Ужгород, 2015), с. 230-231.
 20. V.I. Popovich, R.V. Tymchyk, T.M. Zajac, V.M. Simulik, "Autoionizing states partial characteristics dependence from the microobjects ground state wavefunction choice," 4-th International Meeting "Clusters and Nanostructured Materials". Program and materials, (Uzhgorod, 2015), p. 114.
 21. V.M. Simulik, R.V. Tymchyk, Y-N.Y. Tsmur, T.M. Zajac, "The method of interacting configurations in the complex number representation: from helium to complex atom," Міжнародна конференція молодих учених і аспірантів, (Інститут електронної фізики НАН України, Ужгород, 2017), с. 156.

22. С.М. Бурков, Т.М. Заяц, С.И. Страхова, “Ионизация гелия быстрыми электронами в области выше порога образования возбужденных ионов,” *Оптика и спектроскопия* **63**, (3), 17–25 (1988).
23. S.M. Burkov, Letyaev N.A. Letyaev, S.I. Strakhova, T.M. Zajac, “Photon and electron ionization of helium to the $n=2$ state of He^+ ,” *J. Phys. B: Atom. Mol. Phys.* **21**, (7), 1195–1208 (1988).
24. S.M. Burkov, S.I. Strakhova, T.M. Zajac “Total and partial generalized oscillator strength for transitions to the continuum of helium,” *J. Phys. B: Atom. Mol. Phys.* **23**, (20), 3677–3689 (1990).
25. Т.М. Заяць, “Пряма іонізація гелію електронним ударом в області вище порогу утворення збуджених іонів,” *Науковий Вісник Ужгородського університету: серія ”Фізика”* **11**, 12–20 (2002).
26. Т.М. Заяць, “Розрахунок положень та ширин автоіонізаційних станів, які збігаються до порогу $N=3$ атома гелію методом взаємодіючих конфігурацій у зображенні комплексних чисел,” *Науковий Вісник Ужгородського університету: серія “Фізика”* **12**, 69–74 (2002).
27. Т.М. Заяць, А.І. Опачко, “Резонансна іонізація гелію електронним ударом в області вище порогу утворення збуджених іонів,” *Науковий Вісник Ужгородського університету: серія “Фізика”* **12**, 75–82 (2002).
28. Т.М. Заяць, А.І. Опачко, “Парціальні характеристики автоіонізаційних станів, які збігаються до третього порогу атома гелію,” *Науковий Вісник Ужгородського університету: серія “Фізика”* **13**, 28–31 (2003).
29. Т.М. Заяць, “Дослідження залежностей параметрів Фано ρ^2 та q -індексів від переданого імпульса в повних та парціальних (на $n=2$ та $n=1$ стани залишкового іона He) кривих узагальнених сил осцилятора переходу в континуум гелію,” *Науковий Вісник Ужгородського університету: серія “Фізика”* **13**, 55–66 (2003).
30. T.M. Zajac, V.M. Simulik, “The Method of Interacting Configuration in Complex Number Representation: Application for Calculations of Spectroscopic Characteristics of Quasi-Stationary States in Two Electron

- System,” *International Journal of Pure and Applied Physics* **2**, (3), 231–248 (2006).
31. G.J. Schulz, “Resonances in electron impact on atoms,” *Rev. Mod. Phys.* **45**, (3), 378-422 (1973).
 32. D.E. Golden, “Resonances in electron, atom and molecular scattering,” *Adv. Atom. Mol. Phys.* **14**, (1), 1–85 (1978).
 33. В.И. Лендзел, В.Т. Навроцкий, Е.П. Сабад, “Резонансы в рассеянии электронов на атомах и ионах,” *Усп. физ.. наук.* **151**, (3), 425-468 (1987).
 34. Л.И.Гудзенко, С.И. Яковленко, *Плазменные лазеры* (Наука, Москва, 1978), 356 с.
 35. П. А. Бохан, редактор, *Эффективные газоразрядные лазеры на парах металлов* (Сб. статей, ИОА СО РАН, Томск, 1978), с. 209.
 36. В.С. Летохов “Селективное действие лазерного излучения на вещество,” *Усп. физ.. наук.* **125**, (5), 57–96 (1978).
 37. И.И. Балыкин, Г.И. Беков, В.С. Летохов., В.И. Мишин, “Лазерное детектирование единичных атомов,” *Усп. физ.. наук.* **132**, (2), 293–343 (1980).
 38. Б.М. Смирнов, *Введение в физику плазмы*, 2 изд. (Наука, Москва 1982), 223 с.
 39. Л.М. Биберман, В.С. Воробьёв, И.Т. Якубов, *Кинетика неравновесной низкотемпературной плазмы* (Наука, Москва 1982), 378 с.
 40. А. Далгарно, *Ридберговские атомы в астрофизике*, В сб. *Ридберговские атомы в астрофизике* (Под ред. Р. Стеббинса, Ф. Даннинга, Мир, Москва 1985), с. 9.
 41. Ф.Г. Берк и др., *Возбуждение атомов и уширение спектральных линий*, В сб. *Атомы в астрофизике* (Под ред. Л.А. Вайнштейна, Мир, Москва 1986), 348 с.
 42. K. Saha, *The Earth’s Atmosphere – It’s Origin, Composition and Properties*, In book *The Earth’s Atmosphere* (Springer, Berlin, 2008), p. P.9–26.

43. T.K. Fang, J.I. Lo, T.S. Yih, T.N. Chang, "Photoionization of Ca in a static electric field," *Phys Rev. A* **82**, (6), 063402(1–12) (2010).
44. В.И. Герасимов, "Наблюдение контуров Фано в спектрах КР-молекулярных кристаллов," *Оптика и спектроскопия* **58**, (3) 707–709 (1985).
45. Л.П. Пресняков, "Рентгеновская спектроскопия высокотемпературной плазмы," *Усп. физ. наук.* **119**, (5), 49–73 (1976).
46. Ю.П. Гонгарский, Ю.Ц. Оганесян, Ю.Э. Пенионжкевич, Г.М. Тер-Акопьян, *Ядерные реакции с тяжелыми ионами* (МГИФИ, Москва 1995), 244 с.
47. Ю.Э. Пенионжкевич, "Ядерные реакции с тяжелыми ионами и синтез новых ядер," *Сорос. образ. журн.* **7**, (3), 67–74 (2001).
48. U. Fano, "Effect of configuration interaction on intensities and phase shifts," *Phys. Rev. A* **124**, (6), 1866–1874 (1961).
49. V.V. Balashov, S.I. Grishanova, I.M. Kruglova, V.S. Senashenko, "Possibilities of diagonalization method for calculation the atomic system resonances," *Phys. Lett. A* **27**, (2), 101–102 (1968).
50. М. Гольдбергер, К. Ватсон, *Теория столкновений* (Мир, Москва 1967), 826 с.
51. Н. Мотт, Г. Месси, *Теория атомных столкновений* (Мир, Москва 1969), 551 с.
52. Т.Ю. Ву, Т. Омура, *Квантовая теория рассеяния* (Наука, Москва 1969), 451 с.
53. Р.Н. Ли, *Квантовая теория рассеяния и излучения* (НГУ, Новосибирск 2011), 133 с.
54. Ф. Калоджеро, *Метод фазовых функций в теории потенциального рассеяния* (Мир, Москва 1972), 292 с.
55. В. В. Бабилов, *Метод фазовых функций в квантовой механике* (Наука, Москва 1976), 287 с.

56. P.G. Burke, A. Hibbert, W.D. Robb, "Electron scattering by complex atoms," *J. Phys. B: Atom. Mol. Phys.* **4**, (2), 153–161 (1971).
57. K.A. Berrington, P.G. Burke, W.C. Fon, K.T. Taylor, "Photoionisation of helium," *J. Phys. B: Atom. Mol. Phys.* **15**, (17), 603–608 (1982).
58. В.П. Жигунов, Б.Н. Захарьев, *Методы сильной связи каналов в квантовой теории рассеяния* (Атомиздат, Москва 1974), 224 с.
59. М.К. Гайлитис, "Метод сильной связи каналов в теории электрон-атомных столкновений," *Усп. физ. наук.* **116**, (4) 665–686 (1975).
60. P. McGuire, D.J. Kouri, "Quantum mechanical close coupling approach to molecular collisions. j_z -conserving coupled states approximation," *J. Chem. Phys.* **60**, (6), 2488–2499 (1974).
61. П. Берк, М. Ситон, Численные методы решения интегродифференциальных уравнений теории столкновений электрона с атомами. В сб.: *Вычислительные методы в физике атомных и молекулярных столкновений* (Мир, Москва 1974), с. 9–81.
62. K. Smith, R. P. McEachran, P. A. Fraser, "Resonances in cross sections for excitation hydrogen atom," *Phys. Rev.* **125**, (2), 553–558 (1962).
63. M.J. Seaton, "Computer programs for the calculation of electron-atom collision cross sections. II. A numerical method for solving the coupled integrodifferential equations," *J. Phys. B* **7**, (14), 1817–1840 (1974).
64. A.G. Abrashkevich et al., "Doubly excited states of H- and He in the coupled-channel hyperspherical adiabatic approach," *Phys. Rev. A* **45**, (7), 5274–5277 (1992).
65. A.G. Abrashkevich, M. Shapiro, "Photoionization of two-electron atoms via the hyperspherical artificial-channel method: Application H⁻ and He," *Phys. Rev. A* **50**, (2) 1205–1217 (1994).
66. A.G. Abrashkevich, M.S. Kaschiev, S.I. Vinitsky, "A new method for solving an eigenvalue problem for a system of three Coulomb particles within the hyperspherical adiabatic approach," *J. Comput. Phys.* **163**, (2), 328–348 (2000).

67. C. Froese Fischer, "Oscillator strengths for some D-F transitions in the Mg sequence," *J. Opt. Soc. Am.* **69**, (1), 118–125 (1979).
68. N Vaeck, M Godefroid, J E Hansen, "MCHF oscillator strength and lifetime calculations in neutral calcium," *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **24**, (2), 361–381 (1991).
69. K.T. Compton, J.C. Boyce, "Extreme ultraviolet spectra excited by controlled electron impacts," *J. Franklin Inst.* **205**, 497–513 (1928).
70. P.G. Kruger, "New lines in the arc and spark spectrum of helium," *Phys. Rev.* **36**, (5), 855–860 (1930).
71. R. Whiddington, H. Priestley, "Note on a new transition produced by electron impact in helium," *Proc. Roy. Soc. A* **145**, (855), 462–465 (1934).
72. F. Paschen, P.G. Kruger, *Ann. Phys. Lpz.* **8**, 1005–1010 (1931).
73. R.P. Madden, K. Codling, "Autoionizing atomic energy levels in He, Ne and Ar, Xe," *Phys. Rev. Lett.* **10**, (12), 516–518 (1963).
74. R.P. Madden, K. Codling, D. L. Ederer, "Resonances in the photoionization continuum of Ne (20–150 eV)," *Phys Rev.* **155**, (1), 26–37 (1967).
75. K. Codling, R. P. Madden, D.L. Ederer, "Resonances in the photoionization continuum of Ar," *Phys Rev.* **177**, (1), 136–151 (1969).
76. J. A. Simpson, S. R. Mielczarek, J. Cooper, "Observation of optically forbidden transitions in the continuum of the rare gases by electron loss measurements," *J. Opt. Soc. Am.* **54**, (2), 269–270 (1964).
77. J. A. Simpson, G. E. Chamberlain, S.R. Mielczarek, "Excitation of optically forbidden states in the ionization continuum by electron impact," *Phys. Rev.* **139**, (4) 1039–1041 (1965).
78. S.M. Silverman, E.N. Lassetre, "Additional collision cross section for helium especially in the ionized continuum," *J. Chem. Phys.* **40**, (5), 1265–1271 (1964).
79. M.E. Rudd, "Observation of autoionization levels in He by positive ion bombardment," *Phys. Rev. Lett.* **13**, (16), 503–505 (1964).

80. M.E. Rudd, "New autoionizing levels in helium," *Phys. Rev. Lett.* **15**, (14), 580–581 (1965).
81. W. Mehlhorn, "Auger electrons of autoionizing levels of helium," *Phys.Lett.* **21**, (2), 155–156 (1966).
82. H. Suzuki, A. Konishi, M. Yamamoto, K. Wakiya, "Line shapes in energy spectra of electrons emitted in autoionization of He excited with electron impact," *J. Phys. Soc. Japan* **28**, (2), 534-535 (1970).
83. N. Oda, P. Nishimura, S. Tahira, "Energy spectra of electrons from autoionization states in helium by electron impact," *Phys. Rev. Lett.* **24**, (2), 42–45 (1970).
84. N. Oda, S. Tahira, P. Nishimura, P. Koike, "Energy and angular distribution of electrons ejected from autoionization states in helium by electron impact," *Phys. Rev. A* **15**, (2), 574–587 (1977).
85. P. Gelebart, R.J. Tweed, J. Peresse, "Measurement of the absolute differential cross section for autoionization from the levels $(2s2p) \ ^3P$ and $(2s^2) \ ^1S$ of helium," *J. Phys. B* **7**, (6), L74–L78 (1974).
86. P. Gelebart, R.J. Tweed, J. Peresse, "Autoionization by electron impact: experiment with He," *J. Phys. B* **9**, (6), 1739–1748 (1976).
87. A.Pochatt, R.J. Tweed, M. Doritch, J. Peresse, "Double and triple differential cross sections for autoionization of helium by electron impact," *J. Phys. B* **15**, (14), 2269–2283 (1982).
88. B.W. Shore, "Scattering theory of absorption-line profiles and refractivity," *Rev. Mod. Phys.* **39**, (2), 439–462 (1967).
89. J. Comer, P.H. Read, "Electron impact studies of autoionizing states in Neon and Helium," *J. Electr. Spectr.* **1**, (1), 3–11 (1972/73).
90. H.G. Berry, J. Desesquelles, M. Dufay, "Lifetime measurements of autoionizing levels by beam-foil technique," *Phys. Lett.* **36A**, (3), 237–238 (1971).
91. H.G. Berry, I. Martinson, L.J. Curtis, L. Lundin, "Lifetimes of some doubly excited levels in neutral helium," *Phys. Rev. A* **3**, (6), 1934–1937 (1971).

92. H.G. Berry, J. Desesquelles, M. Dufay, "Energies and lifetimes of doubly excited states in HeI," *Phys. Rev. A* **6**, (2), 600–606 (1972).
93. P. Dhez, D.L. Ederer, "Photoionization resonance profile parameter of the $3s3p\ ^1P$ two-electron excitation in HeI," *J. Phys. B* **6**, (4), L59–L64 (1973).
94. P.R. Woodruff, J.A.R. Samson, "Measurements of partial cross sections and autoionization in the photoionization of helium to $\text{He}^+(N=2)$," *Phys. Rev. A* **25**, (2), 848–856 (1982).
95. M. E. Hamm and others, "Observation of narrow resonances in the H photodetachment cross section near the $n=3$ threshold," *Phys. Rev. Lett.* **43**, (23), 1715–1718 (1979).
96. R. Bruch, G. Paul, J. Andra, L. Lipsky, "Autoionization of foil-excited states in Li I and Li II," *Phys. Rev. A* **12**, (5), 1808–1824 (1975).
97. S. Diehl et al, "New high-resolution measurements of doubly excited states of Li^+ ," *J. Phys. B: Atom. Mol. Opt. Phys.* **32**, (17), 4193–4207 (1999).
98. L. Johansson, "Additions to the Displaced Term System of Be I," *Phys. Scrip.* **10**, (5), 236–240 (1974).
99. G. Mehlman-Ballofet, J.M. Esteva, "Far-ultraviolet absorption spectra with auto-ionized levels of Beryllium and Magnesium," *Astrophys. J.* **157**, (4), 945–956 (1969).
100. J.M. Esteva, G. Mehlman-Ballofet, J. Romand, "Spectres d'absorption dans l'ultraviolet lointain de Be, B, C, N, Mg, Al et Si," *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **12**, (9), 1291–1302 (1972).
101. T.M. Clark, J.D. Fassett, T.B. Lucatorto, L.J. Moore, W. W. Smith, "Observation of autoionizing states of Beryllium by resonance-ionization mass spectrometry," *J. Opt. Soc. Am. B* **2**, (6), 891–896 (1985).
102. R. Wehlitz, D. Lukic, J. B. Bluett, "Resonance parameters of autoionizing Be $2pnl$ states," *Phys. Rev. A* **68**, (5), 052708(1–5) (2003).
103. M.A. Baig, J.P. Connerade, "Extensions to the spectrum of doubly excited Mg I in the vacuum ultraviolet," *Proc. Roy. Soc. A* **364**, (1718), 353–366 (1978).

104. D. Rassi, V. Pejcev, T.W. Ottley, K.J. Ross, "High-resolution ejected spectrum of magnesium autoionizing levels following two-electron excitation by low-energy electron impact," *J. Phys. B* **10**, (14), 2913–2921 (1977).
105. V. Pejcev, D. Rassi, K.J. Ross, "The ejected-electron spectrum of magnesium autoionizing levels following two-electron excitation to states of the type $4snl$ by low-energy electron impact," *J. Phys. B* **13**, (9), 305–309 (1980).
106. W. Williams, S. Trajmar, "Electron impact excitation of magnesium at 10, 20 and 40 eV impact energies," *J. Phys. B* **11**, (11), 2021–2029 (1978).
107. D.J. Bradley, P. Ewart, J.V. Nicholas, R.D. Shaw, "Photoionization from the selective excited $3s3p\ ^1P_1^0$ state to the $3p^2\ ^1S_0$ autoionization level of MgI," *Phys. Rev. Lett.* **31**, (5), 263–266 (1973).
108. D.J. Bradley, P. Ewart, J.V. Nicholas, R.D. Shaw, "Excited-state absorption spectroscopy of alkaline earths. II. Magnesium arc spectra," *J. Phys. B* **8**, (18), 2934–2938 (1975).
109. D.J. Bradley, C.H. Dugan, P. Ewart, A.P. Prudie, "Absolute photoionization cross-section measurement of selectively excited Magnesium," *Phys. Rev. A* **13**, (4), 1416–1421 (1976).
110. B. Breuckmann, V. Schmidt, W. Schmitz, "The electron spectrum following ionization and excitation of L-shell electrons in magnesium vapour," *J. Phys. B: Atom. Mol. Phys.* **9**, (17), 3037–3046 (1976).
111. R. Okasaka, K. Fukuda, "Doubly excited levels of alkaline-earth elements near the first ionization limit. I. Magnesium," *J. Phys. B* **15**, (3), 347–356 (1982).
112. Y.L. Shao, C. Fotakis, D. Charalambidis, "Multiphoton ionization of Mg in the wavelength region of 300-214 nm," *Phys. Rev. A* **48**, (5), 3636–3643 (1993).
113. R.F. Boivin, S.K. Srivastava, "Electron-impact ionization of Mg," *J. Phys. B: Atom. Mol. Opt. Phys.* **31**, (10), 2381–2394 (1998).
114. M.J. Ford and others, "Electron-impact double ionization of magnesium," *Phys. Rev. A* **57**, (1), 325–330 (1998).

115. A. Reber and others, “Above-threshold ionization near the $3p4d\ ^1F^0$ autoionizing state in magnesium,” *Phys. Rev. A* **71**, (5), 053402(1–7) (2005).
116. R.H. McFarland, “Electron-Impact Ionization Measurements of Surface-Ionizable Atoms,” *Phys. Rev.* **159**, (1), 20–26 (1967).
117. S. Okudaira, “Multiple ionization of Ca, Sr and Ba by electron impact,” *J. Phys. Soc. Jap.* **29**, (2), 409–415 (1970).
118. Y. Okuno, “Ionization cross section of Ca, Sr and Ba by electron impact,” *J. Phys. Soc. Jap.* **31**, (4), 1189–1195 (1971).
119. D. Svejanojic, A.J. Murray, “Single ionization of calcium by electron impact,” *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **36**, (17), 3591–3605 (2003).
120. Е.Э. Контрош, И.В. Чернышова, О.Б. Шпеник, “Припороговая ионизация атома кальция электронным ударом,” *Оптика и спектроскопия.* **110**, (4), 538–546 (2011).
121. Л.Д. Фаддеев, “Теория рассеяния для системы трех частиц,” *Журн. эксп. теор. физ.* **39**, (4), 1459–1467 (1960).
122. J.C. Ball, C.Y. Chen, D.Y. Wong, “Faddeev equations for atomic problems and solutions for the (e,H) system,” *Phys. Rev.* **173**, (1), 202–213 (1968).
123. V.N. Mileev, V.S. Senashenko, E.Yu. Tsymbal, “On the theory of resonance ionization at atoms by fast protons,” *J. Phys. B: Atom. Mol. Opt. Phys.* **14**, (15), 2625–2633 (1981).
124. A.A. Kvitsinsky, A. Wu, C.Y. Hu, “Scattering of electrons and positrons on hydrogen using the Faddeev equations,” *J. Phys. B: Atom. Mol. Opt. Phys.* **28**, (2), 275–285 (1995).
125. С.П. Меркурьев, Л.Д. Фаддеев, *Квантовая теория рассеяния для систем нескольких частиц* (Наука, Москва 1985), 398 с.
126. E. Nielsen, D.V. Fedorov, A.S. Jensen, E. Garrido, “The three body problems with short-range interactions,” *Phys. Rep.* **347**, (5), 373–459 (2001).
127. J. W. Cooper, U. Fano, F. Prats, “Classification of two-electron excitation levels of helium,” *Phys. Rev. Lett.* **10**, (12), 518–521 (1963).

128. U. Fano, J.W. Cooper, "Line profiles in the far VUV absorption spectra of rare gases," *Phys. Rev. A* **127**, (5), 1364–1379 (1965).
129. U. Fano, F. Prats, "On connection between the theories of collision and atomic spectra," *Proc. Nat. Acad. Sci. India* **A37**, 196–199 (1963).
130. U. Fano, "Correlation of two excited electrons," *Repts. Progr. Phys.* **46**, (2), 97–122 (1968).
131. У. Фано, Дж. Купер, "Спектральное распределение сил осцилляторов в атомах. В сб., Современные проблемы физики (Наука, Москва 1972), 199 с.
132. F.M. Mies, "Configuration interaction theory. Effect of overlapping resonances," *Phys. Rev. A* **175**, (1) 164–176 (1968).
133. A.F. Starace, "Potential Barrier Effect in Photoionization. I. General Theory," *Phys. Rev. B* **5**, (5), 1773–1784 (1972).
134. J.L. Dehmer, A.F. Starace, "Potential Barrier Effect in Photoionization. III. Application to 4d-Shell in Photoionization in Lanthanum," *Phys. Rev. B* **5**, (5), 1792–1796 (1972).
135. P.G. Burke, "Effects of configuration interaction on electron and photon interaction with atoms. In book: Electron and photon interaction with atoms (Eds. Kleinpoppen A. and Mc.Dowell, Academic Press, New-York–London, 1976), p. 1–25.
136. J. Callaway, "Scattering of electrons by atom," *Adv. Phys.* **29**, (5), 771–866 (1980).
137. P.G. Burke, D. McVicar, "Photoionization of helium resonance," *Proc. Phys. Soc.* **86**, (5), 989–995 (1965).
138. V.L. Jacobs, P.G. Burke, D. McVicar, "Photoionization of He above threshold $N=2$," *J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys.* **5**, (4), L67–L70 (1972).
139. P.G. Burke, A.J. Taylor, "The excitation of He⁺ by electron impact," *J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys.* **2**, (1), 44–56 (1969).
140. R.K. Nesbet, "A variational method for multichannel scattering," *J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys.* **14**, (13), L415–L418 (1981).

141. P. G. Burke, M. J. Seaton, In book: Calculation Methods in Computational Physics, v.10, Edt. B. Alder, S. Fernbach, M. Rotenberg, (Academic Press, New-York, 1971), p. 189-230.
142. R. Marriot, “The quantum defect theory,” Proc. Phys. Soc. **72**, (1), 121–129 (1958).
143. M. A. Crees, M. J. Seaton, P. M. H. Wilson, “IMPACT, a program for the solution of the coupled integro-differential equations of electron-atom collision theory,” Comput. Phys. Commun. **15**, 23–83 (1978).
144. E.P. Wigner, L. Eisenbud, “Higher Angular Momenta and Long Range Interaction in Resonance Reaction,” Phys. Rev. **72**, (1), 29–41 (1947).
145. P.G. Burke, K.T. Taylor, “R-matrix theory of photoionization,” J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys. **8**, (16), 2620–2639 (1975).
146. O. Zatsarinny, K. Bartschat, D.V. Fursa, “Calculations for electron-impact excitation and ionization of Beryllium,” J.Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **49**, (23), 235701(1–9) (2016).
147. O.I. Zatsarinny, V.I. Lengyel, E.A. Masalovich, “Resonance structure in the electron-impact excitation of Ca⁺ below the 5s threshold,” Phys. Rev. A **44**, (11), 7343–7354 (1991).
148. P.G. Burke, R-matrix theory of atomic collisions (Springer, New York, 2011), 764 p.
149. O.I. Zatsarinny, K. Bartschat, “The B-spline R-matrix method for atomic processes: application to atomic structure, electron collisions and photoionization,” J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **46**, (11), 112001(1–39) (2013).
150. V.V. Balashov, S.I. Grishanova, “Isobaric analogue resonance as a collective effect of strong coupling of channels,” Phys. Lett. B **28**, (3), 157–158 (1968).
151. В.В. Балашов, С.И. Гришанова, И.М. Круглова, В.С. Сенашенко, “Резонансная фотоионизация атома гелия и гелиеподобных ионов,” Оптика и спектроскопия **28**, (4) 859–868 (1970).

152. V.V Balashov, S.S Lipovetsky, V.S Senashenko, "On the shape of resonance lines in the spectra of electrons ejected from atoms by fast particles," *Phys. Lett. A* **40**, (5), 389–390 (1972).
153. V.V. Balashov, A.N. Grum-Grzhimailo, N.M. Kabachnik, *Polarization and correlation phenomena in atomic collisions*, (Springer-Verlag, Berlin 2000), 243 p.
154. V.V. Balashov, V.B. Beliaev, R.A. Eramjian, N.M. Kabachnik, "Resonance mechanism of neutron emission in muon capture reaction in oxygen," *Phys. Lett.* **9**, (2), 168–170 (1964).
155. V.V. Balashov, G.Ya. Korenman, V.L. Korotkin, V.N. Fetisov, "Excitation of the giant dipole resonance in μ -capture," *Nucl. Phys. B* **1**, (3), 158–168 (1967).
156. H. Feshbach, "The unified theory of nuclear reactions," *Ann. Phys.* **5**, (4), 357–390 (1958).
157. В.В. Балашов, С.С. Липовецкий, А.В. Павличенков, А.Н. Полюдов, В.С. Сенашенко, "Резонансная ионизация атома гелия быстрыми электронами," *Оптика и спектроскопия.* **32**, (1), 10–16 (1972).
158. В.В.Балашов, С.С.Липовецкий, В.С. Сенашенко, "О возможности изучения автоионизационных состояний методом совпадений," *Вестник МГУ, сер. физ. и астр.* **4**, 503–505 (1973).
159. С.С. Липовецкий, В.С. Сенашенко, "Возбуждение и резонансная ионизация гелия электронами," *Оптика и спектроскопия.* **34**, (6), 1046–1056 (1973).
160. В.В. Балашов, *Современное состояние теории резонансов в атомных системах*, Сборник лекций 1-ой Всесоюзной школы по электронным и атомным столкновениям (ХФТИ, Харьков, 1969), с. 111–131.
161. В.В. Балашов, В.С. Сенашенко, *Новый метод исследования автоионизационных состояний в атомах*, Труды 2-го Всесоюзного семинара "Автоионизационные явления в атомах" (МГУ, Москва 1976), с. 206–212.

162. В.В. Балашов, Состояние теории возбуждения автоионизационных состояний быстрыми заряженными частицами, Труды 2-го Всесоюзного семинара "Автоионизационные явления в атомах" (МГУ, Москва 1976), с. 110–117.
163. В.В. Балашов, С.С. Липовецкий, В.С. Сенашенко, "О едином описании профиля резонансных линий в энергетических спектрах рассеянных и испускаемых электронов," Журн. эксп. теор. физ. **63**, (6), 1622–1627 (1972).
164. V.I. Lengyel, V.T. Navrotsky, E.P. Sabad, Resonance phenomena in electron-atom collisions (Springer-Verlag, Berlin 1992), 188 p.
165. D.E. Ramaker, D.M. Schrader, "Multichannel configuration theory. Application to some resonances in helium," Phys. Rev. A **9**, (5), 1980–1981 (1974).
166. H. Feshbach, "The unified theory of nuclear reactions III. Overlapping resonances," Ann. Phys. **43**, (3), 410–420 (1967).
167. C. Bloch, "An introduction the many-body theory of nuclear reaction," Proc. Scola internazionale di Fizica E. Fermi, Course XXXVI (New-York–London, 1968) p. 394–415.
168. C. Bloch, "Une formulation unifiée de la théorie des réactions nucléaires," Nucl. Phys. **4**, (1), 503–528 (1957).
169. A.F. Starace, "Behavior of partial cross section and branching ratio in the neighborhood of a resonance," Phys. Rev. A **16**, (1), 231–242 (1977).
170. Э. Шмидт, Х. Цигельман, Проблема трех тел в квантовой механике (Наука, Москва, 1979), 273 с.
171. P.L. Altick, E.N. Moore, "Configuration interaction in the helium continuum," Phys. Rev. A **147**, (1), 59–64 (1966).
172. S.I. Strakhova, V.A. Shakirov, "The resonance photoionization of Ne in the vicinity of $2p^{-2}3s3p$ ($^1P^0$) resonance in close coupled approximation," J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys. **15**, (14), 2149–2155 (1982).

173. Т.М. Заяц, С.И. Страхова, Взаимодействие автоионизационных состояний различной природы в процессах резонансной фотоионизации аргона и аргоноподобных ионов. Тез. доклад. IX ВКЭАС, (Рига, 1984), с.103.
174. Т.М. Заяц, С.И. Страхова, “Прямая и резонансная фотоионизация ионов изоэлектронных рядов неона и аргона,” *Оптика и спектроскопия*. **59**, (1), 17–22 (1985).
175. P. Bogdanovich, R. Karpukiene, “The theoretical study of the overlapping configurations $2s2p^5 3l$ and $2s^2 2p^4 4l$ in Ar X,” *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **38**, (10), 1557–1568 (2005).
176. B.W Shore, *The theory of coherent atomic excitation* (John Wiley and Sons, New York, 1990), Vol. 1,2, 509 p.
177. Р.К. Петеркоп, *Теория ионизации атомов электронным ударом* (Зинатне, Рига 1975), 190 с.
178. Ф.М. Морс, Г. Фешбах, *Методы теоретической физики* (ИЛ, Москва 1960), т. 2, 456 с.
179. V.A. Khyr et al, “Cluster spectroscopic factors in the K-harmonics method,” *Phys. Lett. B* **76**, (3), 273–276 (1978).
180. W. Bian, X. Zhao, Y. Wang, “Direct solution of the Schrodinger equation for some muonic molecules,” *Chem. Phys.* **242**, (2), 195–202 (1999).
181. E. Nielsen, D.V. Fedorov, A.S. Jensen, E. Garrido, “The three-body problem with short-range interactions,” *Phys. Rep.* **347**, (5), 373–459 (2001).
182. J.A.C. Alcaras, “On the first approximation of the K-harmonics method,” *J. Math. Phys.* **19**, (1), 1–4 (1978).
183. Р.И. Джибути, Н.Б. Крупенникова, *Метод гиперсферических функций в квантовой механике нескольких тел* (Мецниереба, Тбилиси 1984), 181 с.
184. Р.И. Джибути, К.В. Шитикова, *Метод гиперсферических функций в атомной и ядерной физике* (Энергоиздат, Москва 1993), 272 с.
185. C. Froese Fischer, “A multi-configuration Hartree–Fock program,” *Comp. Phys. Comm.* **1**, (3), 151–166 (1969).

186. C. Froese Fischer, *The Hartree-Fock method for atoms – a numerical approach* (John Wiley and Sons, New York 1977). 308 p.
187. C. Froese Fischer, “A general multi-configuration Hartree–Fock program,” *Comp. Phys. Comm.* **14**, (1-2), 145–153 (1978).
188. C. Froese Fischer, “The MCHF atomic-structure package,” *Comp. Phys. Comm.* **128**, (3), 635–636 (2000).
189. M.Ya. Amusia, *Atomic photoeffect* (Springer-Verlag, Berlin 1990), 329 p.
190. M.Ya. Amusia, A.S. Kheifets, “The influence of ‘two-electron–two-hole’ excitations on the $3s^{-1}4p$ autoionization profile in Ar atoms,” *Phys. Lett. A* **82**, (8), 407–411 (1981).
191. H.C. Chi, K.N. Huang, K.T. Cheng, “Autoionizing levels of beryllium from the multiconfiguration relativistic random-phase approximation,” *Phys. Rev. A* **43**, (5), 2542–2545 (1991).
192. Y. Ho, “Autoionization states of helium isoelectronic sequence below $N=3$ hydrogenic thresholds,” *J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys.* **12**, (3), 387–399 (1979).
193. Y.K. Ho, “Complex-coordinate calculations for doubly excited states of two-electron atoms,” *Phys. Rev.* **23**, (5), 2137–2149 (1981).
194. Y.K. Ho, “Doubly-excited $1,3P^0$ autoionization states of He between the $N = 4$ and $N = 6$ thresholds of He^+ ions,” *Z. Phys. D.* **42**, (2), 77–81 (1997).
195. Y. Ho, “Calculation of the $He^- 1s2s^2 \ ^2S$ resonance using fully correlated Hylleraas functions,” *Phys. Rev. A* **59**, (4), 2559–2562 (1999).
196. L. G. Jiao, Y.K. Ho, “Complete supermultiplet structures for the doubly excited intrashell resonances of H^- associated with the H ($N = 2, 3,$ and 4) thresholds,” *Phys. Rev. A* **89**, (5), 052511(1–9) (2014).
197. M.G. Sheppard, K.F. Freed, M.F. Herman, D.L. Yeager, “Generalized perturbation theory of effective valence shell Hamiltonians,” *Chem. Phys. Lett.* **61**, (3), 577-582, (1979).
198. R.K. Chaudhuri, B.P. Das, K.F. Freed, “Application of the effective valence shell Hamiltonian method to accurate estimation of oscillator strengths and

- excitation energies of Mg-like ions,” *J. Chem. Phys.* **108**, (6), 2556–2562 (1998).
199. S. Majumder, B.P. Das, R.K. Chaudhuri, “Excitation energies and oscillator strengths of CaI using multireference many-body perturbation theory,” *Phys. Rev. A* **59**, (5), 3432–3439 (1999).
200. R.G. Parr, W. Yang, “Density-functional theory of atoms and molecules (Oxford university press, New York 1989), 352 p.
201. D. Reichardt, V. Bonacic-Koutecky, P. Fantucci, J. Jellinek, “Ab-initio molecular dynamics based on non-local density functional procedure with Gaussian basis; study of structural and temperature behaviour of metallic clusters,” *Z. Phys. D* **40**, (1), 486–489 (1997).
202. J. Jellinek, P.H. Acioli, “Converting Kohn–Sham eigen energies into electron binding energies,” *J. Chem. Phys.* **118**, (17), 7783–7796 (2003).
203. J. Zhao, X. Zhou, X. Chen, J. Wang, J. Jellinek, “Density-functional study of small and medium-sized As_n clusters up to $n=28$,” *Phys. Rev. B* **73**, (11), 115418(1–10) (2006).
204. M.L. Tiago, J.C. Idrobo, J. Jellinek, J.R. Chelikowsky, “Electronic and optical excitations in Ag_n clusters ($n=1–8$): Comparison of density-functional and many-body theories,” *Phys. Rev. B* **79**, (15), 155419(1–14), (2009).
205. P.G. Burke, K.A. Berrington, C.V. Sukumar, “Electron-atom scattering at intermediate energies,” *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **14**, (2), 289–306 (1981).
206. T.M. Luke, “Calculation of doubly excited resonances in neon,” *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **8**, (9), 1501–1506 (1975).
207. E.A. Hylleraas, “Über den Grundzustand des Heliumatoms,” *Z. Phys. B* **48**, (7-8), 469–494 (1928).
208. E.A. Hylleraas, “Neue Berechnung der Energie des Heliums im Grundzustande, sowie des tiefsten Terms von Ortho-Helium,” *Z. Phys. B* **54**, (5-6), 347–366 (1929).
209. E.A. Hylleraas, “Über den Grundterm der Zweielektronenprobleme von He, H, Li^+ , Be^{++} ,” *Z. Phys. B* **65**, (3-4), 209–225 (1930).

210. В.И. Решетняк, Ф.И. Федоров, “О пробных функциях основного состояния атома гелия,” Докл. АН СССР **263**, (6), 1356–1359 (1982).
211. В.А. Фок, “Об уравнении Шредингера для атома гелия,” Изв. АН СССР, Сер. Физ. **18**, (2), 161–169 (1954).
212. C.L. Pekeris, “1 1S and 2 3S states of helium,” Phys. Rev. **115**, (5), 1216–1221 (1959).
213. C.L. Pekeris, “Excited S states of helium,” Phys. Rev. **127**, (2), 509–511 (1962).
214. П.А. Головинский, И.Ю. Киян, “Отрицательный ион в сильном световом поле,” Усп. физ. наук. **160**, (6), 97–140 (1990).
215. М.К. Евсеев, В.И. Матвеев, “Исследование аналитических волновых функций двухэлектронных систем в динамических взаимодействиях с многозарядными ионами” Журн. тех. физ. **78**, (8), 28–33 (2008).
216. R.J. Tweed, “Correlated wavefunctions for helium-like atomic systems,” J. Phys. B: At. Mol. Phys. **5**, (4), 810–819 (1972).
217. S.A. Alexander, R.L. Coldwell, “Atomic wave function forms,” Int. J. Quant. Chem. **63**, (5), 1001–1022 (1997).
218. V.S. Senashenko, A. Wague, “Resonance photoabsorption of the helium atom in the vicinity of the (3s3p) ¹P resonance,” J. Phys. B: At. Mol. Phys. **12**, (8), L269–L273 (1979).
219. A.J. Siegert, “On the derivation of the dispersion formula for nuclear reaction,” Phys. Rev. **56**, (1), 750–752 (1939).
220. V.L. Jacobs, “Differential cross sections for electron impact ionization of helium,” Phys. Rev. A **10**, (2), 499–505 (1974).
221. П. Ланкастер, Теория матриц (Наука, Москва 1982), 272 с.
222. Н.С. Бахвалов, Численные методы (Наука, Москва 1973), 631 с.
223. R.J.W. Henry, S.P. Rountree, E.R. Smith, “A general program to calculate atomic continuum processes using the NIEM method,” Comput. Phys. Commun. **23**, (3), 233–273 (1981).

224. W.B. Eissner, M.J. Seaton, "Computer program for the calculation of electron-atom collision cross section. I. General theory," *J. Phys B* **5**, (3), 2187-2198 (1972).
225. W.B. Eissner, "The URL distorted wave code," *Comput. Phys. Commun.* **114**, (1-3), 295-341 (2005).
226. L.A. Morgan, M.R.C. McDowell, J. Callaway, "Electron impact excitation of resonances below the $n=3$ levels of atomic hydrogen," *J. Phys. B: Atom. Mol. Phys.* **10**, (16), 3297-3305 (1977).
227. R.S. Oberoi, "Auto-ionization states of two electron atoms," *J. Phys. B: Atom. Mol. Phys.* **5**, (6), 1120-1125 (1972).
228. K.T. Chung, "Projection-operator approximation for autoionization states in the inelastic scattering region," *Phys. Rev. A* **6**, (5), 1809-1813 (1972).
229. A. Wague, "Application of the diagonalization approximation to the $n=3$ resonant photoionization of helium-like systems," *Z. Phys D. At. Mol. Clust.* **6**, (4), 337-344 (1987).
230. V.L. Lengyel, V.T. Navrotsky, E.P. Sabad, "Resonant scattering of low-energy electrons by Be^+ and Mg^+ ions," *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **23**, (16), 2847-2867 (1990).
231. P.L. Altic, "Photo-ionization cross section of beryllium near threshold," *Phys. Rev.* **169**, (1), 21-26 (1968).
232. D.S. Kim, S.S. Tayal, H.L. Zhou, S.T. Manson, "Photoionization of atomic beryllium from the ground state," *Phys. Rev. A* **61**, (6), 062701-062709 (2000).
233. D.S. Kim, S.S. Tayal, "Autoionizing resonances in the photoionization of ground state atomic magnesium," *J. Phys. B: Atom. Mol. Opt. Phys.* **33**, (17), 3235-3247 (2000).
234. P. Scott, A.E. Kingston, A. Hibbert, "Photoionization of neutral calcium," *J. Phys. B: Atom. Mol. Phys.* **16**, (21), 3945-3959 (1983).

ДОДАТКИ

А Список публікацій здобувача за темою дисертації та відомості про апробацію результатів дисертації

А1 Список публікацій

Результати виконаних у дисертації досліджень опубліковані у 21-й роботі [1–21], у тому числі у 7 статтях у наукових журналах [1–7], у 2-х електронних препринтах arXiv [physics, atom-ph] [8, 9], а також у тезах та матеріалах конференцій [10–21].

1. В.М. Симулик, Т.М. Заяць та Р.В. Тимчик, “Застосування методу взаємодіючих конфігурацій у зображенні комплексних чисел до розрахунків спектроскопічних характеристик автоіонізаційних станів атомів Be, Mg, Ca,” Укр. фіз. журн. **60**, (11), 1094-1101, (2015).
2. В.М. Симулик, Т.М. Заяць та Р.В. Тимчик, “Вибір хвильової функції основного стану He для прецезійних обчислень параметрів квазістаціонарних станів,” Укр. фіз. журн. **61**, (11), 956-961 (2016).
3. Т.М. Заяць, А.І. Опачко, В.М. Симулик, Р.В. Тимчик, “Енергії найнижчих 1S , 1P , 1D , 1F автоіонізаційних станів атома Mg в методі взаємодіючих конфігурацій,” Науковий вісник Ужгородського університету. Серія Фізика **24**, 180–184 (2009).
4. А.І. Опачко, В.М. Симулик, Р.В. Тимчик, Т.М. Заяць, “Енергетичні рівні найнижчих автоіонізаційних станів атому Be в задачі іонізації електронним ударом,” Науковий вісник Ужгородського університету. Серія – Фізика **29**, 201–204 (2011).
5. Т.М. Zajac, V.M. Simulik, R.V. Tymchyk, “The beryllium atom lowest autoionizing states in the method of interacting configurations in the complex number representations,” Int. J. Theor. Math. Phys. **6**, (4), 110–114 (2016).

6. V.M. Simulik, R.V. Tymchyk, T.M. Zajac, “The method of interacting configurations in complex number representations: from helium to the complex atoms,” *Univ. J. Phys. Appl.* **11**, (5), 162–175 (2017).
7. Т.М. Заяц, В.М. Симулик, Р.В. Тимчик, “О выборе волновой функции основного состояния He для прецизионных расчетов параметров автоионизационных состояний выше порога образования возбужденных ионов,” *Журн. тех. физ.* **88**, (7), 970–976 (2018).
8. V.M. Simulik, T.M. Zajac, R.V. Tymchyk, “Calculations for electron-impact ionization of beryllium in the method of interacting configurations in the complex number representations,” arXiv: 1608.04078v1 [physics, atom-ph] (2016).
9. V.M. Simulik, Y-N.Y. Tsmur, R.V. Tymchyk, T.M. Zajac, “Calculations for electron-impact ionization of magnesium and calcium atoms in the method of interacting configurations in the complex number representation,” arXiv: 1706.08874v1 [physics, atom-ph] (2017).
10. Т.М. Заяць, А.І. Опачко, В.М. Симулик, Р.В. Тимчик, “Про задачу точного розрахунку іонізації атома Mg електронним ударом в області енергії вище порогу утворення збуджених іонів,” Програма і тези доповідей Міжнародної конференції молодих учених і аспірантів ІЕФ-2009 (Інститут електронної фізики НАН України, Ужгород, 2009), с. 73.
11. T. Zajac, A. Opachko, V. Simulik, R. Tymchyk, “Ionization of Mg atom by electron impact in the region of autoionizing states excitation,” *Book of abstracts of 41-th EGAS Conference*, edited by: J. Kwela, T.J. Wasowicz, (University of Gdansk, Gdansk, 2009), p. 156.
12. R. Tymchyk, T. Zajac, V. Simulik, A. Opachko, “Calculation of energetic positions of the lowest autoionizing states of Mg atom,” *Abstracts of 10-th European Conference on Atoms Molecules and Photons*, (Salamanca, 2010), Electron collisions, P-055.
13. A.I. Opachko, V.M. Simulik, R.V. Tymchyk, T.M. Zajac, “Energetic positions of the lowest autoionizing states of beryllium in the problem of

electron-impact ionization of atom,” International Conference of Young Scientists and Post-Graduates, (Institute of Electron Physics, Uzhgorod, 2011), p. 135.

14. A.I. Opachko, V.M. Simulik, R.V. Tymchyk, T.M. Zajac, “Lowest autoionizing states of beryllium in photoionization problem,” Book of abstracts of 43-th EGAS Conference, edited by A. Weis, J.-Cl. Dousse, M. Allan, P. Knowles, (University of Fribourg, Fribourg, 2011), p. 203.

15. T.M. Zajac, V.M. Simulik, R.V. Tymchyk, “Sampling of the helium atom ground state wave function in the ionization problem,” Programme and abstracts of BGL-8 International Conference on Non-Euclidean Geometry in Modern Physics and Mathematics, (Institute of Electron Physics, Uzhgorod, 2012) p. 62-63.

16. V.M. Simulik, R.V. Tymchyk, T.M. Zajac, “Autoionizing states of Ca in the problem of ionization of calcium atom by the electrons,” Abstracts of the 44th Conference of the European Group on Atomic Systems (University of Gothenburg, Gothenburg, 2012) p. 197.

17. P.V. Тимчик, В.М. Симулик, Т.М. Заяц, “О волновой функции основного состояния многоэлектронных атомов в задаче ионизации электронным ударом,” Збірник тез XV Міжнародної молодіжної науково-практичної конференції «Людина і космос». (Нац. центр аерокосмічної освіти молоді ім. О.М. Макарова, Дніпропетровськ, 2013), с. 73.

18. R.V. Tymchyk, V.M. Simulik, T.M. Zajac, “Lowest autoionizing states of Ca in the problem of electron impact ionization,” Програма і тези доповідей Міжнародної конференції молодих учених і аспірантів ІЕФ-2013. (Інститут електронної фізики НАН України, Ужгород, 2013), с. 219.

19. P.V. Тимчик, Т.М. Заяць, В.М. Симулик, “Залежність парціальних характеристик квазістаціонарних станів від вибору функції основного стану,” Міжнародна конференція молодих учених і аспірантів. Матеріали конференції ІЕФ-2015 (Інститут електронної фізики НАН України, Ужгород, 2015), с. 230-231.

20. V.I. Popovich, R.V. Tymchyk, T.M. Zajac, V.M. Simulik, “Autoionizing states partial characteristics dependence from the microobjects ground state wavefunction choice,” 4-th International Meeting “Clusters and Nanostructured Materials”. Program and materials, (Uzhgorod, 2015), p. 114.

21. V.M. Simulik, R.V. Tymchyk, Y-N.Y. Tsmur, T.M. Zajac, “The method of interacting configurations in the complex number representation: from helium to complex atom,” Міжнародна конференція молодих учених і аспірантів ІЕФ-2015 (Інститут електронної фізики НАН України, Ужгород, 2017), с. 156.

A2 Апробація результатів дисертації

Міжнародна конференція молодих учених і аспірантів ІЕФ-2009, Інститут електронної фізики НАН України, Ужгород, Україна, 2009 р. с. 73 (доповідь)

41-th EGAS Conference (European group of atomic systems), University of Gdansk, Gdansk, Poland, 2009, p. 156 (доповідь)

10-th ECAMP (European Conference on Atoms Molecules and Photons), Salamanca, Spain, 2010) Sec. Electron collisions, P-055 (доповідь)

International Conference of Young Scientists and Post-Graduates, Institute of Electron Physics of NAS of Ukraine, Uzhgorod, Ukraine, 2011, p. 135 (доповідь)

43-th EGAS Conference, University of Fribourg, Fribourg, Switzerland, 2011, p. 203 (доповідь)

BGL-8, International Conference on Non-Euclidean Geometry in Modern Physics and Mathematics, Institute of Electron Physics of NAS of Ukraine, Uzhgorod, Ukraine, 2012, p. 62-63 (доповідь)

44-th Conference of the European Group on Atomic Systems, University of Gothenburg, Gothenburg, Sweden, 2012, p. 197 (доповідь)

XV Міжнародна молодіжна науково-практична конференція «Людина і космос», Нац. центр аерокосмічної освіти молоді ім. О.М. Макарова, Дніпропетровськ, Україна, 2013 р., с. 73 (доповідь)

Міжнародна конференція молодих учених і аспірантів ІЕФ-2013, Інститут електронної фізики НАН України, Ужгород, Україна, 2013 р., с. 219 (доповідь)

Міжнародна конференція молодих учених і аспірантів ІЕФ-2015, Інститут електронної фізики НАН України, Ужгород, Україна, 2015 р., с. 230-231 (доповідь)

4-th International Meeting “Clusters and Nanostructured Materials”, Uzhgorod, 2015, p. 114 (доповідь)

Міжнародна конференція молодих учених і аспірантів ІЕФ-2017, Інститут електронної фізики НАН України, Ужгород, Україна, 2017 р., с. 156 (доповідь)