

НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ
ІНСТИТУТ ФІЗИКИ КОНДЕНСОВАНИХ СИСТЕМ

ТИМЧИК Роман Володимирович



УДК 539.186

**РОЗРАХУНКИ НИЖНІХ АВТОІОНІЗАЦІЙНИХ СТАНІВ
АТОМІВ БЕРИЛІЮ, МАГНІЮ, КАЛЬЦІЮ**

01.04.02 – теоретична фізика

А В Т О Р Е Ф Е Р А Т

дисертації на здобуття наукового ступеня
кандидата фізико-математичних наук

Львів – 2019

Дисертацією є рукопис.

Робота виконана в Інституті електронної фізики Національної академії наук України

Науковий керівник: доктор фіз.-мат. наук, старший науковий співробітник **Симулик Володимир Михайлович**, Інститут електронної фізики НАН України (м. Ужгород), провідний науковий співробітник відділу фотоядерних процесів.

Офіційні опоненти: член.-кор. НАН України, доктор фіз.-мат. наук, професор **Денисов Віталій Юрійович**, Інститут ядерних досліджень НАН України (м. Київ), заступник директора з наукової роботи;

доктор фіз.-мат. наук, професор **Ваврух Маркіян Васильович**, Львівський національний університет імені Івана Франка (м. Львів), професор кафедри астрофізики.

Захист відбудеться “13” березня 2019 року о 15 год. 30 хв. на засіданні спеціалізованої вченої ради Д 35.156.01 при Інституті фізики конденсованих систем Національної академії наук України:

за адресою: 79011, м. Львів, вул. Свенціцького, 1.

З дисертацією можна ознайомитись у науковій бібліотеці Інституту фізики конденсованих систем НАН України за адресою:

79026, м. Львів, вул. Козельницька, 4.

Автореферат розісланий “11” лютого 2019 року.

Вчений секретар

спеціалізованої вченої ради Д 35.156.01,

доктор фіз.-мат. наук



А.М. Швайка

ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

Актуальність теми. *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.

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 автоіонізаційних станів, що виникають при іонізації атомів Be, Mg, Ca електронним ударом.

2. Цілеспрямоване поетапне ускладнення розрахунків енергетичних положень та ширин автоіонізаційних станів, 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 квазістаціонарних станів, розрахованих на основі різних багатопараметричних хвильових функцій основного стану атома.

4. Розрахунок енергетичних положень та ширин автоіонізаційних станів, 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 автоіонізаційних станів 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 автоіонізаційних станів досліджуваних у дисертації атомних систем. Проводилось також порівняння даних отриманих для різних процесів у електронних оболонках атомних систем, а саме, результати розрахунків автоіонізаційних станів у процесі іонізації атома порівнювались з даними розрахунків автоіонізаційних станів 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 взаємодіючих конфігурацій у зображенні комплексних чисел, відомий першим успішним дослідженням автоіонізаційних станів, 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 автоіонізаційних станів. Завдяки адекватному вибору хвильової функції основного стану суттєво покращено точність розрахунків.

Методом взаємодіючих конфігурацій у зображенні комплексних чисел 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 автоіонізаційних станів змінюються сильніше, ніж повні ширини.

На основі використання методу взаємодіючих конфігурацій у зображенні комплексних чисел до дослідження процесу іонізації атомних систем у термах 1S , 1P , 1D , 1F розраховано енергетичні положення та ширини нижніх автоіонізаційних станів атомів Be, Mg, а також 1P квазістаціонарних станів 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. Метод взаємодіючих конфігурацій у зображенні комплексних чисел може застосовуватись для розрахунків спектроскопічних характеристик автоіонізаційних станів, 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 метод взаємодіючих конфігурацій у зображенні комплексних чисел, 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 методу взаємодіючих конфігурацій у зображенні комплексних чисел. 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 квазістаціонарних станів, 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.

ОСНОВНИЙ ЗМІСТ РОБОТИ

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. Фаддєєва, метод Фано, сильного зв'язку каналів, R -матриці, діаголізаційний метод, метод взаємодіючих конфігурацій, метод Шоре, K -гармонік, гіперсферичних координат, мультиконфігураційний 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 атома. Продемонстровано, що задовільною і зручною для опису автоіонізаційних станів атома гелію та іонів H^- , Li^+ , Be^{++} є 41-параметрична хвильова функція Твіда:

$$\Psi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \sum_{\ell} B_{\ell} Y_{\ell}^{00}(\mathbf{r}_2) F_{\ell}(r_1, r_2), \quad (1)$$

де Y_{ℓ}^{00} 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, $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}, \mathbf{r}_{12}$ – це стандартні позначення взаємних відстаней обох електронів і ядра, r_i – відповідний модуль радіус-вектора i -го електрона, $C_{\ell\mu\ell-\mu}^{LM} \equiv \langle \ell\mu\ell-\mu | LM \rangle$ – коефіцієнти векторного підсумовування, n, ℓ, m – квантові числа (головне, орбітальне і магнітне, відповідно), $F_{\ell}(r_1, r_2)$ – радіальні функції, що описують внесок $(n\ell)^2$ конфігурацій у основний стан. Забезпечено лінійну незалежність набору $F_{\ell}(r_1, r_2)$ і правильну асимптотику розв'язку. Функції $F_{\ell}(r_1, r_2)$ мали наступний вигляд:

$$F_{\ell}(r_1, r_2) = \sum_{nm} A_{nm}^{\ell} [\chi_n^{\alpha}(r_1) \chi_n^{\beta}(r_2) + \chi_n^{\alpha}(r_2) \chi_n^{\beta}(r_1)], \quad (2)$$

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 (1), (2) 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). Твід навів формулювання однопараметричної варіаційної задачі для розглядуваних розкладів. Було запропоновано шукати функції $\chi_n^{\alpha}(r)$ у наступному вигляді

$$\chi_n^{\alpha}(r) = r^n \exp(-\frac{\alpha}{2} r); \quad \alpha = \beta, \quad (3)$$

де α визначається з умови мінімуму енергії основного стану. Коефіцієнти A_{nm}^{ℓ} обчислено за допомогою діагоналізації матриці відповідного гамільтоніана. У

залежності від числа, враховуваних у розкладі (2) 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 використано наступну функцію Твіда:

$$F_\ell(r_1, r_2) = \sum_{m,n} A_{\ell mn} (r_1^n r_2^m + r_1^m r_2^n) \exp\{-\frac{1}{2} k(r_1 + r_2)\}. \quad (4)$$

Порівняння результатів використання різних хвильових функцій наведене у таблиці 5 дисертації. Аналіз результатів показаних у таблиці 5 дисертації, зокрема, призводить до висновку про те, 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.

Далі у роботі пояснено вибір 4-, 12- та 20-ти електронних хартрі-фоківських функцій основного стану для опису автоіонізаційних станів атомів Be, Mg, Ca.

У розділі 3 виконано постановку задачі іонізації атомів електронами, обґрунтовано 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 обґрунтовано можливість його застосування до розрахунків автоіонізаційних станів складних атомів, зокрема атомів берилію, магнію, кальцію. Вказано основні наближення методу. Сформульовано висновки до розділу.

Основні положення формалізму методу полягають у наступному.

Стан системи з N електронів у полі ядра, яке має заряд Z , описано набором хвильових функцій, що, у свою чергу, задовольняють стаціонарне рівняння Шредінгера

$$\hat{H}\Psi_{jE}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_n) = E\Psi_{jE}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_n). \quad (5)$$

У формулі (5) $\hat{H}$ – гамільтоніан системи, конкретний вигляд якого визначається постановкою фізичної задачі; $\mathbf{r}_i$ – набір координат i -го електрона; E – повна енергія системи.

Оператор Гамільтона $\hat{H}$ системи представлено у вигляді суми двох операторів $\hat{H}_0$ та $\hat{V}^r$, де $\hat{H}_0$ – модельний гамільтоніан системи. Набір власних функцій оператора $\hat{H}_0$ подано у вигляді об'єднання двох підпросторів, які визначають множини станів дискретного та неперервного спектрів відповідно. Ці підпростори

позначено як D і C . Матриця гамільтоніана $\hat{H}$ у зображенні оператора $\hat{H}_0$ записана наступним чином:

$$\|\hat{H}\| = \left\| \begin{pmatrix} \hat{H}^{DD} & \hat{V}^{DC} \\ \hat{V}^{CD} & \hat{H}^{CC} \end{pmatrix} \right\|, \quad (6)$$

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.

Рівняння Шредінгера зведено до системи інтегро-алгебраїчних рівнянь

$$\begin{cases} (E_n - E)a_{\lambda n}^{iE} + \sum_{\lambda'} \int_0^\infty b_{\lambda\lambda'}^{iE}(E') \cdot V_{n\lambda'}(E') dE' = 0 \\ \sum_m a_{\lambda m}^{iE} V_{m\lambda'}^*(E') + (E' - E)b_{\lambda\lambda'}^{iE}(E') = 0 \end{cases}, \quad (7)$$

де i – індекс лінійно-незалежного розв'язку системи рівнянь (7). 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 $\hat{V}^{CD}$; $V_{n\lambda}(E) = V_{n\lambda}^*(E)$. Система (7) – це основні рівняння методу.

Кінцевий вираз для розрахунку перерізів має наступний вигляд:

$$\sigma_\alpha(E) = \sigma_\alpha^{dir}(E) \left[1 + \sum_m \left(\frac{[\varepsilon_m(E) + q_{m\alpha}(E)]^2}{\varepsilon_m^2(E) + 1} \rho_{m\alpha}^2(E) - \rho_{m\alpha}^2(E) \right) \right]. \quad (8)$$

У залежності від визначення підмножини каналів α формула (8) описує або повні, або парціальні характеристики збудження автоіонізаційних станів атомів.

Представлено розгляд спектроскопічних характеристик взаємодіючих квазістаціонарних станів у повних та парціальних диференціальних силах осцилятора переходу. Із виразів $\sigma_\lambda(E) = \sigma_\lambda^{dir}(E) + \sum_m \frac{\Gamma_m(E)P_{m\lambda}(E) + \varepsilon_m(E)Q_{m\lambda}(E)}{\varepsilon_m^2(E) + 1}$ і (8) видно, що

збудження і розпад m -го квазістаціонарного стану за групою каналів $\alpha \in \Delta$ характеризується двома комплексними функціями $N_{\alpha m}(E)$ і $\eta_m(E) = E_m(E) - \frac{i}{2}\Gamma_m(E)$.

Функції $\eta_m(E)$ входять у вираз для S -матриці резонансного розсіювання. Нулі цих функцій на комплексній площині енергії визначають полюси S -матриці розсіювання, які відповідають збудженню квазістаціонарних станів. Згідно формалізму Зігерта, дійсна частина комплексної енергії полюса визначає положення резонансу, а уявна частина – його ширину. Таким чином, задача визначення положень $E_m(E)$ і ширин

$\Gamma_m(E)$ резонансів полягає у знаходженні розв'язків системи незв'язаних комплексних рівнянь

$$E - E_m(E) + \frac{i}{2} \Gamma_m(E) = 0. \quad (9)$$

Рівність (9) виконується тільки при комплексних значеннях енергії E . Розв'язок рівнянь (9) вимагає аналітичного продовження у задачі побудови власних векторів і власних значень комплексної матриці $W_{nm}(E) = E_n \delta_{nm} + F_{nm}(E) - i\gamma_{nm}(E)$ 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 $E = E_1 + iE_2$ є наступна матриця:

$$W_{nm}^z(E) = E_n \delta_{nm} + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\gamma_{nm}(E')}{E_1 + iE_2 - E'} dE'. \quad (10)$$

Із співвідношення для контурного інтеграла типу Коші слідує:

$$W_{nm}^z(E) \rightarrow_{E_2 \rightarrow \pm 0} \delta_{nm} E_n + F_{nm}(E_1) \pm i\gamma_{nm}(E) \quad (11)$$

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 одержано систему рівнянь для визначення комплексних енергій квазістаціонарних станів

$$\begin{cases} \text{Re}[\det\|(E_1 + iE_2)\delta_{nm} - W_{nm}^z(E_1 + iE_2)\|] = 0, \\ \text{Im}[\det\|(E_1 + iE_2)\delta_{nm} - W_{nm}^z(E_1 + iE_2)\|] = 0. \end{cases} \quad (12)$$

Положення і ширини m -резонанса отримано шляхом розв'язку системи рівнянь (12). Введення системи спектроскопічних параметрів, що характеризують профілі автоіонізаційних станів у перерізах іонізації, пов'язано з можливістю використання резонансного наближення у формулі (8). Положення і ширини резонансних станів визначено із (12) у першому порядку теорії збурень. Знайдено розв'язки наступних рівнянь

$$E_m(\tilde{E}_m) - \tilde{E}_m = 0. \quad (13)$$

Корені цих рівнянь вважаємо положеннями автоіонізаційних станів, а ширини визначаємо як значення функцій $\Gamma_m(E)$ при $E = \tilde{E}_m$.

Система лінійних алгебраїчних рівнянь методу взаємодіючих конфігурацій у зображенні комплексних чисел записана через власні вектори і власні значення комплексної матриці (11), де

$$\gamma_{mn}(E) = \pi \sum_{\lambda} V_{m\lambda}(E) V_{n\lambda}(E), \quad F_{mn}(E) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{\gamma_{mn}(E')}{E - E'} dE'. \quad (14)$$

На основі формул (11), (14) порівняно різні наближення методу взаємодіючих конфігурацій у зображенні комплексних чисел:

1) метод взаємодіючих конфігурацій у зображенні дійсних чисел; відповідає нехтуванню у матриці (11) комплексними складовими $i\gamma_{nm}(E)$;

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

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

Повне врахування всіх членів матриці (11) – це і є, власне, метод взаємодіючих конфігурацій у зображенні комплексних чисел, переваги якого над переліченими наближеннями очевидні.

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.

Зокрема, для атома магнію отримані наступні результати:

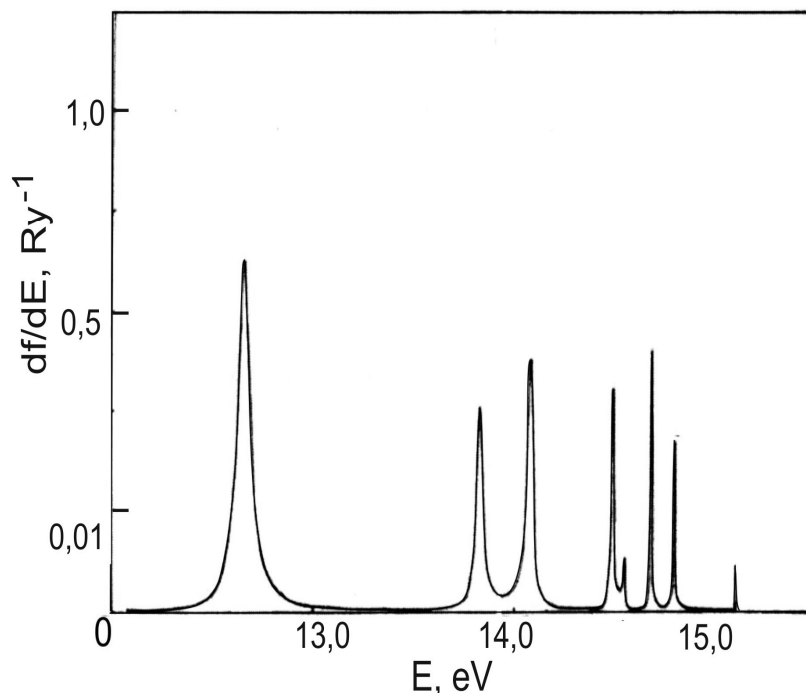


Рис.1. 1S резонанси у диференціальних силах осцилятора переходу, які проявляються у спектрах втрат, у задачі іонізації Mg електронами у границі малих переданих імпульсів. Величина переданого імпульсу ($Q = 0.1$ а.о. $^{-1}$).

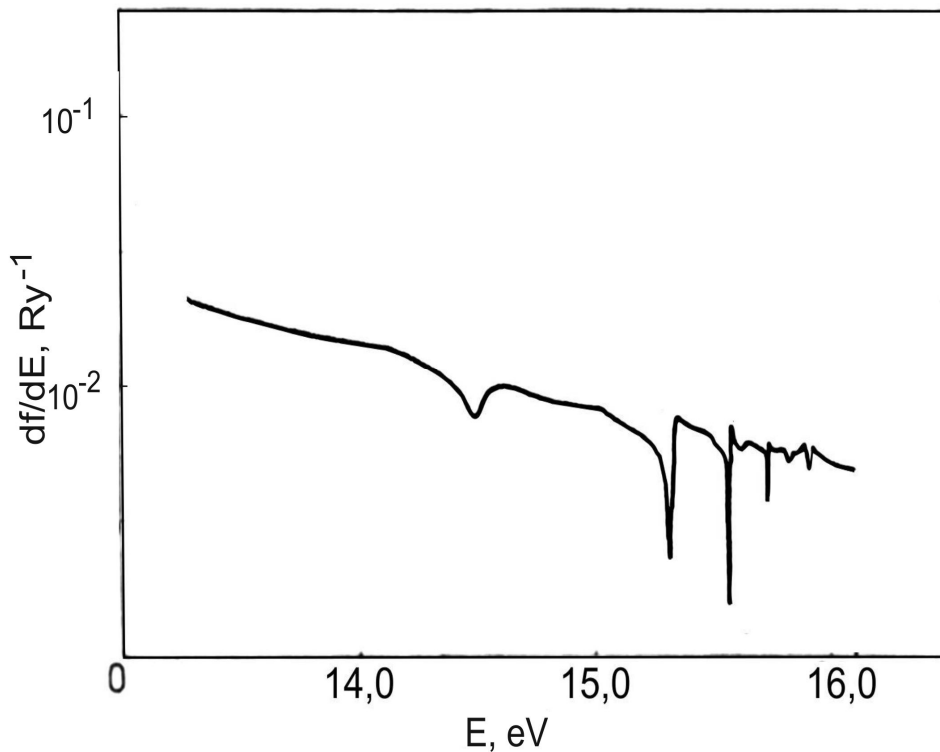


Рис. 2. 1P резонанси у диференціальних силах осцилятора переходу, які проявляються у спектрах втрат, у задачі іонізації Mg електронами у границі малих переданих імпульсів. Величина переданого імпульсу ($Q=0.1$ а.о. $^{-1}$).

Як видно з рисунків (і їх порівняння з графіком для берилію), резонансна структура парціальних перерізів для Mg^+ має більше різноманіття, ніж для Be^+ , що пов'язано з квазівиродженістю $4s\ ^2S$ 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 $3s\ ^2S$.

У таблицях наведено оригінальні наукові результати, які полягають у розрахунку за допомогою методу взаємодіючих конфігурацій у зображенні комплексних чисел енергетичних положень та ширин нижніх 1S , 1P , 1D , 1F автоіонізаційних станів атома Mg у задачі іонізації цього атома електронним ударом, див. таблицю 1. Новизна полягає у застосуванні методу взаємодіючих конфігурацій у зображенні комплексних чисел. Розглянуто процес іонізації атома електронним ударом, що є можливим саме завдяки застосуванню цього методу. Дослідження процесу іонізації електронним ударом містить елементи новизни, оскільки автори, що 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 діагоналізаційному наближенні відповідних положень та ширин автоіонізаційних станів у задачі розсіювання електронів на іоні Mg^+ (таблиця 1), хоча і є лише опосередкованим (інший об'єкт у іншій задачі), але реально свідчить про достовірність одержаних нами результатів.

Таблиця 1

Енергетичні положення та ширини нижніх 1S , 1P , 1D , 1F автоіонізаційних станів атома Mg, отриманих у наближенні методу взаємодіючих конфігурацій у зображенні комплексних чисел у задачі іонізації атома електронним ударом, 1 – розрахунок у діагоналізаційному наближенні положень автоіонізаційних станів у задачі розсіяння електронів на іоні Mg^+ .

1S	E, eB	Γ , eB	E, eB ¹	Γ , eB ¹	1P	E, eB	Γ , eB	E, eB ¹	Γ , eB ¹
$4s^2$	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 ¹	Γ , eB ¹	1F	E, eB	Γ , eB	E, eB ¹	Γ , eB ¹
$3d4s$	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

Частина одержаних тут результатів, а саме енергетичні положення 1P автоіонізаційних станів атома Mg, безпосередньо порівняна з експериментом та R -матричним розрахунком, таблиця 2. Результати розрахунків, проведених методом взаємодіючих конфігурацій у зображенні комплексних чисел, знаходяться у

хорошому узгодженні з відповідними розрахунками специфічним R -матричним методом ² та експериментальними результатами ³, див. таблицю 2.

Таблиця 2

Порівняння розрахунків положень та ширин автоіонізаційних станів атома магнію, одержаних методом взаємодіючих конфігурацій у зображенні комплексних чисел з експериментом ³ та розрахунками ² для 1P -станів (²—це задача фотоіонізації, фотоіонізаційна межа, ¹—задача розсіювання).

1P	E, eV	Γ , eV	E, eV ¹	Γ , eV ¹	E, eV ²	Γ , eV ²	E, eV ³
$4s4p$	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

У висновках підведено підсумки досліджень і зроблено узагальнюючі висновки.

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

¹ 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).

² 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).

³ 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).

ВИСНОВКИ

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 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.

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 автоіонізаційних станів атомів Be, Mg, Ca.

7. 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.

СПИСОК ОПУБЛІКОВАНИХ ПРАЦЬ ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ

1. Симулик В.М. Застосування методу взаємодіючих конфігурацій у зображенні комплексних чисел до розрахунків спектроскопічних характеристик автоіонізаційних станів атомів Be, Mg, Ca / В.М. Симулик, Т.М. Заяць та **Р.В. Тимчик** // Укр. фіз.. журн. 60, (11), 1094–1101, (2015).
2. Симулик В.М. Вибір хвильової функції основного стану He для прецезійних обчислень параметрів квазістаціонарних станів / В.М. Симулик, Т.М. Заяць та **Р.В. Тимчик** // Укр. фіз.. журн. 61, (11), 956–961 (2016).

3. Заяць Т.М. Енергії найнижчих 1S , 1P , 1D , 1F автоіонізаційних станів атома Mg в методі взаємодіючих конфігурацій / Т.М. Заяць, А.І. Опачко, В.М. Симулик, **Р.В. Тимчик** // Науковий вісник Ужгородського університету. Серія Фізика. 24, 180–184 (2009).
4. Опачко А.І. Енергетичні рівні найнижчих автоіонізаційних станів атому Be в задачі іонізації електронним ударом / А.І. Опачко, В.М. Симулик, **Р.В. Тимчик**, Т.М. Заяць // Науковий вісник Ужгородського університету. Серія – Фізика. 29, 201–204 (2011).
5. Zajac T.M. The beryllium atom lowest autoionizing states in the method of interacting configurations in the complex number representations / T.M. Zajac, V.M. Simulik, **R.V. Tymchyk** // Int. J. Theor. Math. Phys. 6, (4), 110–114 (2016).
6. Simulik V.M. The method of interacting configurations in complex number representations: from helium to the complex atoms / V.M. Simulik, **R.V. Tymchyk**, T.M. Zajac // Univ. J. Phys. Appl. 11, (5), 162–175 (2017).
7. Заяц Т.М. О выборе волновой функции основного состояния He для прецизионных расчетов параметров автоионизационных состояний выше порога образования возбужденных ионов / Т.М. Заяц, В.М. Симулик, **Р.В. Тимчик** // Журн. тех. фіз.. 88, (7), 970–976 (2018).
8. Simulik V.M. Calculations for electron-impact ionization of beryllium in the method of interacting configurations in the complex number representations / V.M. Simulik, T.M. Zajac, **R.V. Tymchyk** // arXiv: 1608.04078v1 [physics, atom-ph] (2016).
9. Simulik V.M. Calculations for electron-impact ionization of magnesium and calcium atoms in the method of interacting configurations in the complex number representation / V.M. Simulik, Y.-N.Y. Tsmur, **R.V. Tymchyk**, T.M. Zajac // arXiv: 1706.08874v1 [physics, atom-ph] (2017).
10. Заяць Т.М. Про задачу точного розрахунку іонізації атома Mg електронним ударом в області енергії вище порогу утворення збуджених іонів / Т.М. Заяць, А.І. Опачко, В.М. Симулик, **Р.В. Тимчик** // Програма і тези доповідей Міжнародної конференції молодих учених і аспірантів ІЕФ-2009, (Інститут електронної фізики НАН України, Ужгород, 2009), с. 73.
11. Zajac T. Ionization of Mg atom by electron impact in the region of autoionizing states excitation / T. Zajac, A. Opachko, V. Simulik, **R. Tymchyk** // Book of abstracts of 41-th EGAS Conference, edited by: J. Kwela, T.J. Wasowicz, (University of Gdansk, Gdansk, 2009), p. 156.
12. Tymchyk R. Calculation of energetic positions of the lowest autoionizing states of Mg atom / **R. Tymchyk**, T. Zajac, V. Simulik, A. Opachko // Abstracts of 10-th European Conference on Atoms Molecules and Photons, (Salamanca, 2010), Electron collisions, P-055.
13. Opachko A.I. Energetic positions of the lowest autoionizing states of beryllium in the problem of electron-impact ionization of atom / A.I. Opachko, V.M. Simulik, **R.V. Tymchyk**, T.M. Zajac // International Conference of Young Scientists and Post-Graduates, (Institute of Electron Physics, Uzhgorod, 2011), p. 135.

14. Opachko A.I. Lowest autoionizing states of beryllium in photoionization problem / A.I. Opachko, V.M. Simulik, **R.V. Tymchyk**, T.M. Zajac // 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. Zajac T.M. 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 / T.M. Zajac, V.M. Simulik, **R.V. Tymchyk** // (Institute of Electron Physics, Uzhgorod, 2012) p. 62–63.
16. Simulik V.M. Autoionizing states of Ca in the problem of ionization of calcium atom by the electrons / V.M. Simulik, **R.V. Tymchyk**, T.M. Zajac // Abstracts of the 44-th Conference of the European Group on Atomic Systems (University of Gothenburg, Gothenburg, 2012) p. 197.
17. Тимчик Р.В. О волновой функции основного состояния многоэлектронных атомов в задаче ионизации электронным ударом, Збірник тез XV Міжнародної молодіжної науково-практичної конференції «Людина і космос» / **Р.В. Тимчик**, В.М. Симулик, Т.М. Заяц // (Нац. центр аерокосмічної освіти молоді ім. О.М. Макарова, Дніпропетровськ, 2013), с. 73.
18. Tymchyk R.V. Lowest autoionizing states of Ca in the problem of electron impact ionization / **R.V. Tymchyk**, V.M. Simulik, T.M. Zajac // Програма і тези доповідей Міжнародної конференції молодих учених і аспірантів ІЕФ-2013. (Інститут електронної фізики НАН України, Ужгород, 2013), с. 219.
19. Тимчик Р.В. Залежність парціальних характеристик квазістаціонарних станів від вибору функції основного стану / **Р.В. Тимчик**, Т.М. Заяць, В.М. Симулик // Міжнародна конференція молодих учених і аспірантів. Матеріали конференції ІЕФ-2015 (Інститут електронної фізики НАН України, Ужгород, 2015), с. 230–231.
20. Popovich V.I. Autoionizing states partial characteristics dependence from the microobjects ground state wavefunction choice / V.I. Popovich, **R.V. Tymchyk**, T.M. Zajac, V.M. Simulik // 4-th International Meeting Clusters and Nanostructured Materials. Program and materials, (Uzhgorod, 2015), p. 114.
21. Simulik V.M. The method of interacting configurations in the complex number representation: from helium to complex atom / V.M. Simulik, **R.V. Tymchyk**, Y.-N.Y. Tsmur, T.M. Zajac // Міжнародна конференція молодих учених і аспірантів, (Інститут електронної фізики НАН України, Ужгород, 2017), с. 156.

АНОТАЦІЯ

Тимчик Р.В. Розрахунки нижніх автоіонізаційних станів атомів берилію, магнію, кальцію. – На правах рукопису.

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

Метод взаємодіючих конфігурацій у зображенні комплексних чисел розвинуто для отримання енергетичних положень та ширин автоіонізаційних станів, що виникають у процесі іонізації атомів Be, Mg, Ca електронним ударом. Обґрунтовано вибір хвильової функції основного стану атома. На цій основі суттєво покращено точність розрахунків. Вперше виявлено ефект особливої зміни парціальних ширин у порівнянні із повними ширинами при застосуванні різних хвильових функцій основного стану. Уточнено енергетичні положення та ширини нижніх автоіонізаційних станів іонів H^- , Li^+ , Be^{++} та атомів Be, Mg, Ca. Показано, що переваги методу полягають в автоматичному отриманні не лише енергетичних положень, але і ширин квазістаціонарних станів, а також у застосовності до опису не лише процесів розсіювання електронів на атомах, але і процесів іонізації багатоелектронних систем.

Ключові слова: атом, іон, автоіонізаційні стани, квазістаціонарні стани, резонанси, взаємодіючі конфігурації, хвильова функція.

АННОТАЦИЯ

Тимчик Р.В. Расчет нижних автоионизационных состояний атомов бериллия, магния, кальция. – На правах рукописи.

Диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук (доктора философии) по специальности 01.04.02 «Теоретическая физика» – Институт физики конденсированных систем НАН Украины, Львов, 2019.

Метод взаимодействующих конфигураций в представлении комплексных чисел развито для получения энергетических положений и ширин автоионизационных состояний, возникающих в процессе ионизации атомов Be, Mg, Ca электронным ударом. Обосновано выбор волновой функции основного состояния атома, благодаря чему существенно улучшена точность расчетов. Впервые наблюдался эффект особенного изменения парциальных ширин в сравнении с полными ширинами при использовании разных волновых функций основного состояния. Уточнены энергетические положения и ширины нижних автоионизационных состояний ионов H^- , Li^+ , Be^{++} и атомов Be, Mg, Ca. Показано, что преимущества метода состоят в автоматическом получении не только энергетических положений, но и ширин квазистационарных состояний, а также в возможности применения к описанию не только процессов рассеяния электронов на атомах, но и процессов ионизации многоэлектронных систем.

Ключевые слова: атом, ион, автоионизационные состояния, квазистационарные состояния, резонансы, взаимодействующие конфигурации, волновая функция.

ABSTRACT

Tymchyk R.V. Calculations of the lowest autoionizing states of the beryllium, magnesium and calcium atoms. – Manuscript.

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

Thesis is devoted to the development of the method of interacting configurations in the complex numbers representation for the many-electron atomic systems description and to the calculations of the lowest autoionizing states characteristics of the ions H^- , Li^+ , Be^{++} and the beryllium, magnesium, calcium atoms. The choice of the atomic ground state wave function, which is necessary for such calculations, is under consideration as well.

Here the method is applied to the calculations of the processes in the atomic shells of the complex many-electron atomic systems. 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 by the complication of calculations of the energetic positions and widths of autoionizing states, which are formed in the process of ionization of atomic systems, step by step from the ions H^- , Li^+ , Be^{++} to the many-electron atomic systems such as the beryllium, magnesium and calcium atoms.

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. In thesis we investigate the process of atomic systems ionization by electrons and photons, which, contrary to the scattering process investigation, is related to the challenge problem of modern theory. The autoionizing states, converging to the threshold $n=3$ in the continuous spectrum of the Be, Mg and Ca atoms, have been investigated. An extension of the method application for many-electron atomic systems is fulfilled here for the first time.

The review of modern theoretical methods, which are used in calculations of processes in atomic shells, is presented. The main experimental methods are described briefly as well.

The results of calculations are presented in thesis in 13 tables and 3 figures and are compared with both experimental and theoretical data found by other authors.

The method is formulated for the arbitrary kind of interaction, which gives the possibility for application in future not only for the region of atomic physics but for the processes in nuclear and high energy particle physics as well.

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

1. 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 many-electron atomic systems.

2. The choice of the atom ground state wave function for adequate description of the many-electron atoms ionization processes has been justified. The comparison and analysis of the quasistationary states characteristics calculated on the basis of different many-parametric 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.

3. 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.

4. 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.

5. 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 many-electron atoms ionization has been calculated.

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

7. The advantages of the method of interacting configurations in complex numbers representation, in comparison with other methods of calculations of many-electron 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 many-electron systems.

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