

УДК 539.186

А.І Опачко¹, В.М. Симулик², Р.В. Тимчик², Т.М Заяць¹

¹Ужгородський національний університет, кафедра електронних систем, 88000, Ужгород, вул. Капітульна, 13

²Інститут електронної фізики НАН України, відділ теорії елементарних взаємодій, 88000, Ужгород, вул. Університетська, 21
e-mail: vsimulik@gmail.com

ЕНЕРГЕТИЧНІ РІВНІ НАЙНИЖЧИХ АВТОІОНІЗАЦІЙНИХ СТАНІВ АТОМУ Be В ЗАДАЧІ ІОНІЗАЦІЇ ЕЛЕКТРОННИМ УДАРОМ

Методом взаємодіючих конфігурацій у зображенні комплексних чисел отримано енергетичні положення найнижчих ¹S, ¹P, ¹D автоіонізаційних станів атому Be в задачі іонізації атома електронним ударом. Проведено порівняння результатів з енергіями аналогічних станів, які утворюються в задачі розсіювання електронів на іоні Be.

Ключові слова: автоіонізаційні стани, берилій, метод взаємодіючих конфігурацій у зображенні комплексних чисел, квазістаціонарні стани.

Вступ

Дослідження автоіонізаційних явищ у задачі розсіювання електронів на атомах, іонах та задачі іонізації виділилося в самостійний напрямок теоретичної атомної фізики. В останні десятиліття виникла потреба в уточненні характеристик елементарних процесів, які використовуються при теоретичних оцінках у фізиці плазми, лазерній спектроскопії, кристалографії, побудові генераторів рентгєнівського випромінювання, а також для отримання методів розділення ізотопів на атомарному рівні. Саме це і спричинило науковий інтерес до процесів збудження та розпаду квазістаціонарних станів.

На базі теорії ізольованого резонансу Фано та діагоналізаційного наближення були пояснені експериментальні результати досліджень автоіонізаційних станів (AIC) між першим та другим порогом іонізації гелію та гелієподібних іонів. Поява нових експериментальних даних про резонансні структури у парціальних перерізах фотоіонізації гелію в області вище порогу утворення збуджених іонів поставила перед теорією ряд проблем, пов'язаних, в першу чергу, з описом взаємодії великої кількості квазістаціонарних станів, які перекриваються. Теоретичні розрахунки та аналіз

резонансних структур, розпад яких відбувається на декілька станів залишкового іона, в загальному випадку повинні проводитись з врахуванням усіх міжконфігураційних взаємодій. Метод взаємодіючих конфігурацій у зображенні комплексних чисел (МВКЗКЧ), розроблений в [1–3], був успішно застосований до опису квазістаціонарних станів гелію, які утворюються при іонізації He електронами, в області енергій вище порогу утворення збуджених іонів. Задача застосування даного методу до розрахунку процесів іонізації більш складних атомних структур є актуальною. Щоб переконатися у застосовності використання методу для більш складних атомів, у даній роботі було проведено розрахунки положень найнижчих AIC атому Be в задачі іонізації останнього електронами. Метою даної роботи є застосування МВКЗКЧ для дослідження процесу іонізації атома Be електронним ударом в області збудження AIC, а також розрахунок енергетичних положень найнижчих термів ¹S, ¹P, ¹D AIC цього атома. При цьому враховувались автоіонізаційні стани, які знаходяться вище першого порогу іонізації.

Задача оцінки вкладу квазістаціонарних станів у формування кривої, інтерпретації структури перерізів резонансних процесів, зводиться до визначення кривих

відповідних перерізів і характеристик резонансних станів та є основною проблемою в розшифровці спектрів атомів в області вище порогу іонізації. Багато атомів та іонів мають у своїх спектрах цілі комплекси резонансів, які перекриваються. І хоча резонансна структура, що спостерігається в експериментах, складається з окремих асиметричних піків, ідентифікація таких піків з ізольованими резонансами не завжди є обґрунтована достатньо.

Формалізм методу

Розглянемо коротко формалізм МВКЗКЧ.

Нехай схема розглядуваної реакції:

$$A(n_0 L_0 S_0) + e^-(\vec{k}_0) \rightarrow A^+(nl_1) + e^-(\vec{k}_1) + e^-(\vec{k}), \quad (1)$$

де \vec{k}_0 , \vec{k}_1 , \vec{k} – імпульси налітаючого, вибитого та розсіяного електронів, відповідно. Тоді у борнівському наближенні для налітаючого електрона узагальнена сила осцилятора переходу має вигляд:

$$\frac{\partial f_{nl_1}}{\partial E}(Q) = \frac{E}{Q^2} \sum_{l_1} \left| \langle nl_1 El | \sum_{j=1}^n \exp(i\vec{Q}\vec{r}_j) | n_0 L_0 S_0 \rangle \right|^2. \quad (2)$$

У даній формулі $E = k_0^2 - k^2$ – енергія втрат, $\vec{Q} = \vec{k}_0 - \vec{k}$ – переданий імпульс, $|nl_1 El : LS_0\rangle$ – хвильова функція атома з повним моментом L та спіном S_0 (при цьому електрон з моментом l та енергією E знаходиться у полі іона A^+ , електрон якого має квантові числа $|nl_1\rangle$). Функція основного стану атома є $|n_0 LS_0\rangle$. Вибір хвильової функції основного стану диктується бажаною точністю кінцевих результатів розрахунку. В даній роботі в якості хвильової функції основного стану була використана багатоконфігураційна хвильова функція Хартрі – Фока.

Система рівнянь МВКЗКЧ має наступний вигляд:

$$\begin{cases} (E_n - E)a_{\lambda n}^{Ei} + \sum_{\lambda'} \int_0^\infty b_{\lambda\lambda'}^{Ei}(E') \cdot V_{n\lambda'}(E') dE' = 0, \\ \sum_m a_{\lambda m}^{Ei} V_{m\lambda'}^*(E') + (E' - E)b_{\lambda\lambda'}^{Ei}(E') = 0. \end{cases} \quad (3)$$

Множники $a_{\lambda m}^{Ei}$ та $b_{\lambda\lambda'}^{Ei}(E')$ – це коефіцієнти розкладу $\Psi_\lambda^E(\vec{r}_1, \vec{r}_2) =$

$$\Psi_\lambda^E(\vec{r}_1, \vec{r}_2) =$$

$$\sum_m a_{\lambda m}^{Ei} |m\rangle + \sum_{\lambda'} \int_0^\infty b_{\lambda\lambda'}^{Ei}(E') |\lambda'E'\rangle dE'. \quad (4)$$

Базисні хвильові функції задовольняють умовам:

$$\begin{aligned} \langle m | \hat{H} | n \rangle &= E_n \delta_{nm}, \\ \langle \lambda'E' | \hat{H} | \lambda E \rangle &= E \delta_{\lambda\lambda'} \delta(E - E'), \end{aligned} \quad (5)$$

де \hat{H} – повний гамільтоніан системи.

Формальний розв'язок для $b_{\lambda\lambda'}^{Ei}(E')$ вибираємо у вигляді

$$b_{\lambda\lambda'}^{Ei}(E') = P \frac{\sum_m a_{\lambda m}^{Ei} V_{m\lambda'}(E)}{E - E'} + \left[A_{\lambda\lambda'} \pm i\pi \sum_m a_{\lambda m}^{Ei} V_{m\lambda'}(E) \right] \delta(E - E'), \quad (6)$$

$$\text{де } V_{m\lambda}(E) = \langle m | \hat{H} | \lambda E \rangle.$$

Матриця $A_{\lambda\lambda'}$ залежить від асимптотичних властивостей функцій базису $|\lambda E\rangle$. Підстановка (6) у (3) приводить систему рівнянь методу взаємодіючих конфігурацій у зображенні комплексних чисел до системи алгебраїчних лінійних рівнянь для коефіцієнтів $a_{\lambda m}^{Ei}$:

$$(E_n - E)a_{\lambda n}^{Ei} + \sum_m [F_{nm}(E) - i\gamma_{nm}(E)] a_{\lambda m}^{Ei} = -\sum_{\lambda'} A_{\lambda\lambda'} V_{\lambda n}(E), \quad (7)$$

які можна виразити через власні вектори і власні значення комплексної матриці

$$W_{nm}(E) = E_n \delta_{nm} + F_{nm}(E) - i\gamma_{nm}(E), \quad (8)$$

де

$$\gamma_{nm}(E) = \pi \sum_{\lambda} V_{n\lambda}(E) \cdot V_{\lambda m}(E);$$

$$F_{nm}(E) = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty \frac{\gamma_{nm}(E')}{E - E'} dE'. \quad (9)$$

Після знаходження власних векторів та власних значень матриці $W_{nm}(E)$ отримуємо можливість розраховувати положення і ширини квазістаціонарних станів [1–3].

Іонізація атома Ве електронним ударом в області збудження автоіонізаційних станів

В даній роботі ми досліджуємо іонізацію атома Ве електронним ударом в області збудження АІС і аналізуємо

спектри втрат. Автоіонізаційні стани, які виникають при цьому, є аналогом квазістаціонарних станів, що утворюються в задачі розсіяння електронів на відповідному іоні. В розрахунках в якості базисних конфігурацій використано кулонівські хвильові функції. Для кожного терму було враховано до 25 базисних конфігурацій.

Нижче у таблиці 1 для станів 1P приведено порівняння з розрахунками

інших авторів. В таблиці 2 наведено результати наших розрахунків енергетичних положень найнижчих 1S , 1P , 1D , АІС атома Ве в задачі іонізації атома електронним ударом, отриманих в наближенні МВКЗКЧ. Результати порівнюються з положеннями АІС, отриманими в задачі розсіяння електронів на іоні Be^+ .

Таблиця 1

Порівняння розрахунків для 1P станів атома Ве

1P	E, eV МВКЗКЧ	E, eV [4]	E, eV [5]	E, eV [6]	E, eV [7]	E, eV [8]	E, eV [9]
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

Таблиця 2

Результати розрахунків енергетичних положень найнижчих 1S , 1P , 1D АІС атома Ве

1S	E, eV МВКЗКЧ	E, eV [7]	1P	E, eV МВКЗКЧ	E, eV [7]	1D	E, eV МВКЗКЧ	E, eV [7]
2p ²	9,72	9,74	2p3s	10,71	10,73	2p3p	11,52	11,44
2p3p	11,83	11,88	2p3d	11,84	11,85	2p4p	12,32	12,29
2p6p	12,91	12,95	2p4s	12,03	12,09	2p6p	12,88	12,87
2p7p	13,00	13,04	2p4d	12,42	12,49	2p6f	12,95	12,94

Висновки

У статті викладені оригінальні наукові результати, які полягають у розрахунку за допомогою МВКЗКЧ [1–3] енергетичних положень найнижчих 1S , 1P , 1D АІС атома Ве в задачі іонізації цього атома електронним ударом, див. таблицю 1. У літературі відсутні подібні результати, одержані на основі точних методів розрахунку, зокрема, на основі методу взаємодіючих конфігурацій, і тим

паче – на основі МВКЗКЧ. Проведене порівняння з розрахунками в діагоналізаційному наближенні відповідних положень автоіонізаційних станів у задачі розсіювання електронів на іоні Be^+ (таблиця 1), хоча і є лише опосередкованим, оскільки є іншим об'єктом у іншій задачі, але цілком реально свідчить про достовірність одержаних нами результатів.

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1. Burkov S.M., Letyaev N.A. Letyaev, S.I. Strakhova, Zajac T.M. Photon and electron ionization of helium to the N=2 state of He^+ // J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys. – 1988. – v.21. – p.1995–1208.
2. Burkov S.M., Strakhova S.I., Zajac T.M., Total and partial generalized oscillator strength for transitions to the continuum of helium // J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys. – 1990. – v.21. – p.3677–3689.

3. Заяць Т.М. Метод взаємодіючих конфігурацій у зображенні комплексних чисел в задачі іонізації атомів електронним ударом в області вище порогу утворення збуджених іонів // Науковий Вісник Ужгородського університету: серія "Фізика". – 2002. – №11. – с.72–86.
4. Mehlman-Ballofet G. and Esteva J.M. Far Ultraviolet Absorption Spectra with Auto-

ionized Levels of Beryllium and Magnesium // *Astrophys. Journal* – 1969. – v.157, – p. 945–956.

5. Esteva J.M., Mehlman-Ballofet G. and Romand J. Spectres d'absorption dans l'ultraviolet lointain de Be, B, C, N, Mg, Al ET Si // *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, – 1972. – v.12, – p.1291–1294.

6. Altic P.L. Photo-Ionization Cross Section of Beryllium near Threshold // *Phys. Rev.* – 1968. – v.169, – p.21–26.

7. Lengyel V.I., Navrotsky V.T. and Sabad E.P. Resonant scattering of low-energy
Стаття надійшла до редакції 28.05.2011

electrons by Be⁺ and Mg⁺ ions // *Journal of Physics B* – 1990. – v.23, – p. 2847–2867.

8. Hsin-Chang Chi, Keh-Ning Huang and Cheng K.T. Autoionizing levels of beryllium from the multiconfiguration relativistic random-phase approximation // *Phys. Rev. A* – 1991. – v.43, – p.2542–2545.

9. Dae-Soung Kim, Swaraj S. Tayal, Hsiao-Ling Zhou, and Steven T. Manson, Photoionization of atomic beryllium from the ground state // *Phys. Rev. A* – 2000. – v.61, – p.62701–62710

A.I. Opachko¹, V.M. Simulik², R.V. Tymchyk² and T.M. Zajac¹

¹ Department of Electronic Systems, Uzhhorod National University, Uzhhorod, Ukraine

² Institute of Electron Physics, National Academy of Sciences, Uzhhorod, Ukraine

ENERGETIC POSITIONS OF THE LOWEST AUTOIONIZING STATES OF Be ATOM IN THE PROBLEM OF ELECTRON- IMPACT IONIZATION

The method of interacting configurations in complex number representation (MICCNR) is applied to the problem of electron impact ionization of Be atom. The energetic positions of the lowest ¹S, ¹P, ¹D autoionizing states are obtained. The comparison of our data with energies of similar states, which are formed in the problem of the scattering of electrons by the Be ion, is carried out.

Key words: autoionizing states, beryllium, method of interacting configurations in complex number representations, quazistationary states.

A.I. Опачко¹, В.М. Симулик², Р.В. Тимчик², Т.М. Заяць¹

¹Ужгородський національний університет, кафедра електронних систем

²Інститут електронної фізики НАН України, відділ теорії елементарних взаємодій,

ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ УРОВНИ НИЗШИХ АВТОИОНИЗАЦИОННЫХ СОСТОЯНИЙ АТОМА Be В ЗАДАЧЕ ИОНИЗАЦИИ ЭЛЕКТРОННЫМ УДАРОМ

Методом взаимодействующих конфигураций в представлении комплексных чисел получены энергетические положения низших ¹S, ¹P, ¹D автоионизационных состояний атома Be в задаче ионизации атома электронным ударом. Проведено сравнение результатов с энергиями аналогичных состояний, которые образуются в задаче рассеяния электронов на ионе Be.

Ключевые слова: автоионизационные состояния, бериллий, метод взаимодействующих конфигураций в представлении комплексных чисел, квазистационарные состояния.