

# ЕНЕРГІЇ НАЙНИЖЧИХ $^1S$ , $^1P$ , $^1D$ , $^1F$ АВТОІОНІЗАЦІЙНИХ СТАНІВ АТОМА Mg В МЕТОДІ ВЗАЄМОДІЮЧИХ КОНФІГУРАЦІЙ

Т.М. Заяць<sup>1</sup>, А.І. Опачко<sup>2</sup>, В.М. Симулик<sup>3</sup>, Р.В. Тимчик<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Ужгородський національний університет, кафедра електронних систем,  
88000, Ужгород, вул. Капітульна, 13,

e-mail: ztm@gaser.uzhgorod.ua

<sup>2</sup>Закарпатський обласний центр науково-технічної творчості  
учнівської молоді, 88000, Ужгород, вул. Будителів, 1

<sup>3</sup>Інститут електронної фізики НАН України, відділ теорії  
елементарних взаємодій, 88000, Ужгород, вул. Університетська, 21,

e-mail: sim@uzhgorod.ua

З використанням методу взаємодіючих конфігурацій у зображенні комплексних чисел розраховано енергетичні положення найнижчих  $^1S$ ,  $^1P$ ,  $^1D$ ,  $^1F$  автоіонізаційних станів атома Mg в задачі іонізації атома електронним ударом. Коротко викладено основні положення формалізму методу. Проведено опосередковане порівняння наших результатів з енергіями аналогічних станів, які утворюються в задачі розсіювання електронів на іоні  $Mg^+$ . Для  $^1P$ -станів проведено також безпосереднє порівняння з експериментальними даними та результатами розрахунків R-матричним методом.

## Вступ

Вивчення автоіонізаційних явищ у задачах іонізації та розсіювання електронів на атомах та іонах в останні десятиліття виділилося в самостійний напрямок теоретичної атомної фізики. Науковий інтерес до опису процесів збудження та розпаду квазістаціонарних станів обумовлений необхідністю уточнення характеристик елементарних процесів, які використовуються при проведенні теоретичних оцінок і розрахунків у фізиці плазми, лазерній спектроскопії, фізиці твердого тіла, кристалографії, при розробці технологічних методів розділення ізотопів на атомарному рівні, конструюванні генераторів когерентного ультрафіолетового та

рентгенівського випромінювання, а також в інших областях фізики.

Експериментальні дослідження автоіонізаційних станів (АІС) між першим та другим порогом іонізації гелію та гелієподібних іонів якісно були пояснені на базі теорії ізольованого резонансу Фано та діагоналізаційного наближення. Поява нових експериментальних даних про резонансні структури у парціальних перерізах фотоіонізації гелію в області вище порогу утворення збуджених іонів (точніше, в області між другим та третім порогом, до яких збігаються енергетичні положення АІС у задачі іонізації атома) поставили перед теорією ряд проблем, пов'язаних, в першу чергу, з описом взаємодії великої кількості квазістаціонарних станів, які перекриваються, і розпад

яких відбувається на декілька відкритих каналів. Теоретичні розрахунки та аналіз резонансних структур, розпад яких відбувається на декілька станів залишкового іона, в загальному випадку повинні проводитись з врахуванням всіх 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.

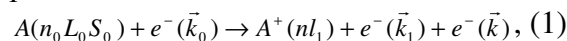
Задача застосування даного методу до розрахунку процесів іонізації більш складних атомних структур є актуальною. Перспективним об'єктом для досліджень, як видно з літератури [4–12], виявляється атом магнію. Метою даної роботи є застосування МВКЗКЧ до дослідження процесу іонізації атома Mg електронним ударом в області збудження АІС, зокрема розрахунок енергетичних положень найнижчих  $^1S$ ,  $^1P$ ,  $^1D$ ,  $^1F$  АІС цього атома.

Проблема опису та інтерпретації структури перерізів резонансних процесів зводиться до визначення кривих відповідних перерізів і характеристик резонансних станів. Оцінка вкладу кожного квазістаціонарного стану в формування кривої є основною проблемою в 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 обґрунтованим.

### Формалізм методу

Коротко опишемо формалізм МВКЗКЧ.

Нехай схема розглядуваної реакції:



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

$$\frac{\partial f_{nl_1}}{\partial E}(Q) = \frac{E}{Q^2} \sum_{l_1} \left| \langle nl_1El | \sum_{j=1}^n \exp(i\vec{Q}\vec{r}_j) | n_0L_0S_0 \rangle \right|^2. \quad (2)$$

У цій формулі  $E = k_0^2 - k^2$  – енергія втрат,  $\vec{Q} = \vec{k}_0 - \vec{k}$  – переданий імпульс,  $|nl_1El : LS_0\rangle$  – 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  $|n_0LS_0\rangle$ . Вибір хвильової функції основного стану диктується бажаною точністю кінцевих результатів розрахунку. У випадку двоелектронної системи – це багато-параметрична хвильова функція типу функції Гілераасса, а у випадку атомів Mg, Ca, Ba – як правило, хвильова функція Хартрі – Фока, отримана в багато-конфігураційному наближенні.

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

$$\Psi_\lambda^E(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \sum_m a_{\lambda m}^{Ei} |m\rangle + \sum_{\lambda'} \int_0^\infty b_{\lambda\lambda'}^{Ei}(E') |\lambda'E'\rangle dE'. \quad (4)$$

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

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

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  $a_{\lambda m}^{Ei}$ :

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

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, які знаходяться вище порогу утворення збуджених іонів [1–3].

Таблиця 1. Енергетичні положення найнижчих  $^1S$ ,  $^1P$ ,  $^1D$ ,  $^1F$  АІС атома Mg, отриманих в наближенні МВКЗКЧ в задачі іонізації атома електронним ударом. Порівняння з [4] є опосередкованим. [4] – розрахунок в діагоналізційному наближенні положень автоіонізаційних станів у задачі розсіяння електронів на іоні  $Mg^+$ .

$^1S$	E, eB	E, eB [4]	$^1P$	E, eB	E, eB [4]	$^1D$	E, eB	E, eB [4]	$^1F$	E, eB	E, eB [4]
$4s^2$	13,08	13,04	$4s4p$	14,15	14,18	$3d4s$	13,62	13,66	$3d4p$	14,63	14,66
$3d^2$	14,61	14,66	$3d4p$	15,01	14,95	$3d^2$	14,31	14,38	$4s4f$	15,31	15,28
$4s5s$	14,92	14,97	$4s5p$	15,34	15,29	$4d4s$	14,89	14,96	$3d5p$	15,56	15,53
$4s6s$	15,48	15,53	$3d5p$	15,53	15,56	$3d5s$	15,28	15,30	$3d4f$	15,64	15,63
$3d4d$	15,59	15,64	$4s6p$	15,68	15,64	$4p^2$	15,47	15,49	$4s5f$	15,74	15,71
$4s7s$	15,78	15,80	$3d4f$	15,77	15,74	$3d4d$	15,58	15,55	$3d6p$	15,89	15,88
$4s8s$	15,80	-	$4s7p$	15,85	15,86	$4s5d$	15,69	15,66	$4s6f$	15,92	15,90
$3d5d$	15,82	-	$4s8p$	15,90	-		15,73			15,93	
$3s9s$	15,85	-	$3d6p$	15,93	-		15,78			15,95	
$3s10s$	15,86	-	$4s9p$	15,95	-		15,81			15,97	

Парціальні амплітуди резонансної іонізації можна визначити наступним чином:

$$T_{|0\rangle \rightarrow |\lambda E\rangle}(E) = t_{\lambda}^{dir}(E) + \sum_m \frac{H_{m\lambda}(E)}{\epsilon_m(E) + 1}. \quad (10)$$

Величини, які входять у формулу (10), визначаються співвідношеннями:

$$t_{\lambda}^{dir}(E) = \sqrt{C(E)} \langle \lambda E | \hat{t} | 0 \rangle,$$

$$H_{m\lambda}(E) = 2\tilde{V}_{m\lambda}(E) [t_m(E) - i\tau_m(E)] \Gamma_m^{-1}(E), \quad (11)$$

$$\text{де } t_m(E) = \sqrt{C(E)} \langle \tilde{F}_m^E | \hat{t} | 0 \rangle,$$

$$\tau_m(E) = \sqrt{C(E)} \langle \chi_m^E | \hat{t} | 0 \rangle. \quad (12)$$

Таким чином вирази для перерізів параметризуються:

$$\sigma_{\lambda}(E) = \sigma_{\lambda}^{dir}(E) + \sum_m \frac{\Gamma_m(E)P_{m\lambda}(E) + \varepsilon_m(E)Q_{m\lambda}(E)}{\varepsilon_m^2(E) + 1}. \quad (13)$$

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

$$N_{cm}(E) = \sum_{\lambda\epsilon\alpha} H_{m\lambda}(E)(t_{\lambda}^{dir}(E) + \sum_n \frac{H_{m\lambda}(E)}{\varepsilon_n(E) - \varepsilon_m(E) + 2i})^*. \quad (14)$$

Отже, переріз резонансної іонізації визначається набором наступних функцій повної енергії:  $\sigma_{\lambda}^{dir}(E)$ ,  $N_{cm}(E)$ ,  $\varepsilon_m(E)$ ,  $\Gamma_m(E)$  [3].

Таблиця 2. Порівняння розрахунків положень АІС атома магнію з експериментом [5] та розрахунками [6] для  $^1P$ -станів

$^1P$	E, eV	E, eV [5]	E, eV [6]
4s4p	14,15	14,18	14,2213
3d4p	15,01	-	14,9048
4s5p	15,34	15,24	15,3133
3d5p	15,53	-	15,7264
4s6p	15,68	15,61	15,6653
3d4f	15,77	-	15,5198
4s7p	15,85	15,83	15,8675
4s8p	15,90	15,98	15,9802
3d6p	15,93	-	16,007
4s9p	15,95	16,06	16,065

### Іонізація атома магнію електронним ударом в області збудження автоіонізаційних станів

Дослідження іонізації атома Mg (та іона  $Mg^+$ ) фотонами та електронами є ак-

туальною проблемою, про що свідчать як експериментальні, так і теоретичні роботи багатьох авторів, див., наприклад, публікації [4–12]. В даній роботі ми досліджуємо іонізацію атома Mg електронним ударом в області збудження АІС. У таблиці 1 наведено результати наших розрахунків енергетичних положень найнижчих  $^1S$ ,  $^1P$ ,  $^1D$ ,  $^1F$  АІС атома Mg в задачі іонізації атома електронним ударом, отриманих в наближенні МВКЗКЧ. Порівняння наших результатів проведено, поперше, опосередковано з аналогічними станами, які утворюються в задачі розсіювання електронів на іоні  $Mg^+$  [4], див. таблицю 1. В добре відомій роботі [4] розрахунки проведені в діагоналізаційному наближенні. Далі, оскільки в задачі іонізації атома електронним ударом  $^1P$ -стани за енергетичними положеннями повинні співпадати з аналогічними станами в задачі фотоіонізації атома Mg, то для  $^1P$ -станів, по-друге, можемо провести безпосереднє порівняння наших результатів з експериментом [5] та розрахунками методом R-матриці [6]. В таблиці 2 розрахунки енергетичних положень АІС атома магнію, одержані з використанням МВКЗКЧ, для  $^1P$ -станів безпосередньо порівнюються з експериментальними даними роботи [5] та теоретичними даними, одержаними за допомогою R-матричного формалізму [6].

### Висновки

Стаття містить оригінальні наукові результати, які полягають у розрахунку за допомогою МВКЗКЧ [1–3] енергетичних положень найнижчих  $^1S$ ,  $^1P$ ,  $^1D$ ,  $^1F$  АІС атома Mg 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  $Mg^+$  (таблиця 1),

хоча і є лише опосередкованим (інший об'єкт у іншій задачі), але цілком 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 2. Результати розрахунків, проведених MBKЗКЧ, знаходяться в хорошому узгодженні з відповідними розрахунками R-матричним методом [6] та експериментальними результатами [5], див., таблицю 2.

### Література

1. S.M. Burkov, S.I. Strakhova, T.M. Zajac, J. Phys. B: Atom. Mol. Phys. 21, 3677 (1990).
2. Т.М. Заяць, Науковий Вісник Ужгородського університету: серія «Фізика». 11, 72 (2002).
3. Т.М. Zajac, V.M. Simulik, International Journal of Pure and Applied Physics. 2, 231 (2006).
4. V.I. Lengyel, V.T. Navrotsky, E.P. Sabad, J. Phys. B: Atom. Mol. Phys. 23, 2847 (1990).
5. M.A. Baig, J.P. Connerade, Proc. Roy. Soc. A. 364, 353 (1978).
6. D.S. Kim, S.S. Tayal, J. Phys. B: Atom. Mol. Opt. Phys. 33, 3235 (2000).
7. Y.L. Shao, C. Fotakis, D. Charalambidis, Phys. Rev. A., 48, 3636 (1993)
8. M.J. Ford, B. El-Marji, J.P. Doering, J.H. Moore, M.A. Coplan, J.W. Cooper, Phys. Rev. A., 57, 325 (1998)
9. K. Bartschat, D. Weflen, X. Guan, J. Phys. B: Atom. Mol. Opt. Phys. 40, 3231 (2007).
10. T.K. Fang, Y.K. Ho, J. Phys. B: Atom. Mol. Opt. Phys. 32, 3863 (1999).
11. A. Reber, F. Martin, H. Bachau, R.S. Berry, Phys. Rev. A., 65, 063413 (2002)
12. A. Reber, F. Martin, H. Bachau, R.S. Berry, Phys. Rev. A., 68, 063401 (2003)

## ENERGIES OF THE LOWEST $^1S$ , $^1P$ , $^1D$ , $^1F$ AUTOIONIZING STATES OF Mg ATOM IN THE METHOD OF INTERACTING CONFIGURATIONS

**T.M. Zajac<sup>1</sup>, A.I. Opachko<sup>2</sup>, V.M. Simulik<sup>3</sup>, R.V. Tymchyk<sup>4</sup>**

<sup>1</sup>Uzhgorod National University, Department of Electronic Systems, 13 Kapitulna Str., 88000 Uzhgorod, Ukraine, *e-mail*: ztm@gaser.uzhgorod.ua

<sup>2</sup>Transcarpathian Regional Center of Scientific and Technical Creative Work of the Pupil's Youth, 1 Buditeliv Str., 88000 Uzhgorod, Ukraine

<sup>3</sup>National Academy of Sciences, Institute of Electron Physics, Department of the elementary interactions theory, 21 Universitetska str, 88000 Uzhgorod, Ukraine. *e-mail*: sim@uzhgorod.ua

Energy positions of the lowest  $^1S$ ,  $^1P$ ,  $^1D$ ,  $^1F$  autoionizing states of Mg in the problem of ionization of atom by electron impact are obtained using the method of interacting configurations. The formalism of the method is briefly described. The data obtained are indirectly compared to those for similar states, generated in the problem of electron scattering on the  $Mg^+$  ion. The  $^1P$ -state data are also directly compared to the experiment and the R-matrix calculation results.

