

ЗАСТОСУВАННЯ МЕТОДУ ВЗАЄМОДІЮЧИХ КОНФІГУРАЦІЙ В ЗОБРАЖЕННІ КОМПЛЕКСНИХ ЧИСЕЛ ДО ЗАДАЧІ ІОНІЗАЦІЇ ІОНІВ

Т.М. Заяць, А.І. Опачко¹, В.М. Симулик²

Ужгородський національний університет, кафедра електронних систем,
88000, Ужгород, вул. Капітульна, 13,
e-mail: ztm@gaser.uzhgorod.ua

¹Закарпатський обласний центр науково-технічної творчості учнівської молоді, 88000,
Ужгород, вул. Будителів, 1

²Інститут електронної фізики НАН України, відділ теорії елементарних взаємодій, 88000,
Ужгород, вул. Університетська, 21,
e-mail: sim@iep.uzhgorod.ua

Обрунтовано можливість застосування методу взаємодіючих конфігурацій в зображенні комплексних чисел до задач іонізації іонів фотонами, електронами та іншими частинками. Отримано положення автоіонізаційних станів іонів H^- та Li^+ , які збігаються до порогу $n=3$. В розрахунках для основного стану іонів використана багатопараметрична функція Твіда.

Вступ

В роботах [1-5] сформульований метод взаємодіючих конфігурацій в зображенні комплексних чисел (МВКЗКЧ), розроблена робоча схема обчислювального процесу для задач іонізації атомів фотонами та електронами. В цих же роботах проведено розрахунки положень та повних ширин автоіонізаційних станів, які збігаються до третього порогу атома гелію. Показано, що в межах методу МВКЗКЧ можна зробити наступні наближення:

1) метод взаємодіючих конфігурацій в зображенні дійсних чисел; (це наближення відповідає нехтуванню в матриці $W_{nm}(E) = E_n \delta_{nm} + F_{nm}(E) - i\gamma_{nm}(E)$ (див. [2]) комплексними складовими $i\gamma_{nm}(E)$);

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

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

1. Деякі переваги та наближення МВКЗКЧ

Зупинимось більш детально на певних перевагах методу МВКЗКЧ.

Задача чисельного розрахунку хвильових функцій іонів вимагає введення обмеження на кількість враховуваних конфігурацій дискретного та неперервного спектру, які входять в розклад:

$$\Psi_{\lambda}^E(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \sum_m a_{\lambda m}^E |m\rangle + \sum_{\lambda'} \int_0^{\infty} b_{\lambda\lambda'}^E(E') |\lambda'E'\rangle dE' \quad (1)$$

Ці обмеження вводяться в двох пунктах: по-перше, при розрахунку хвильових функцій базиса. По-друге, при побудові і діагоналізації комплексної матриці $W_{nm}(E)$. Наближення, яке ми робимо в першому пункті, пов'язане з визначенням

конкретного вигляду операторів \hat{H} , \hat{H}^{DD} та \hat{H}^{CC}

$$\langle n | \lambda E \rangle = 0; \hat{H}^{CC} | n \rangle = 0; \hat{H}^{DD} | \lambda E \rangle = 0; \quad (2)$$

$$\langle n | m \rangle = \delta_{nm}; \langle \lambda E | \lambda' E' \rangle = \lambda_{\lambda\lambda'} \delta(E - E').$$

і до формулювання способу розв'язку системи рівнянь:

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

Наближення другого пункту стосуються вибору підмножини хвильових функцій базису і спрощень, які можуть бути зроблені при побудові і діагоналізації комплексної матриці $W_{nm}(E)$. Слід відмітити, що обмеження по кількості врахованих станів є обов'язковим наближенням в, так званих, точних методах теорії реакцій.

Розглянемо зв'язок описаного нами формалізму методу взаємодіючих конфігурацій в представленні комплексних чисел з іншими методами, які враховують зв'язок каналів, і які використовуються для розрахунку як прямої так і резонансної

іонізації атомів.

В процесі побудови розв'язків системи рівнянь (3) задача була зведена до системи лінійних неоднорідних рівнянь відносно коефіцієнтів розкладу $a_{m\lambda}^E$. Щоб показати зв'язок з інтегральним формалізмом єдиної теорії ядерних реакцій, виключимо із системи (3) коефіцієнти $a_{m\lambda}^E$ і запишемо систему інтегральних рівнянь відносно коефіцієнтів $b_{\lambda\lambda'}^{iE}$:

$$\begin{cases} (E' - E) b_{\lambda}^{iE} + \sum_{\mu} \int b_{\mu}^E(E'') V_{\lambda\mu}^{ef}(E', E'') dE'' = 0, \\ V_{\lambda\mu}^{ef}(E', E'') = \sum_m \frac{V_{m\lambda}(E') V_{\mu m}(E'')}{E - E_m(E)}. \end{cases} \quad (4)$$

Використовуємо комплексне представлення формального розв'язку (4) в формі:

$$b_{\lambda}^{iE}(E') = \frac{\bar{Z}_{i\lambda}(E, E')}{E - E' + i\delta} + i\delta_{i\lambda} \delta(E - E'), \quad (5)$$

що приводить (4) до рівняння, аналогічного рівнянню Ліпмана - Швінгера:

$$\bar{Z}_{i\lambda}(E', E) + \sum_{\mu} \int \bar{Z}_{\mu\lambda}(E'', E) \frac{V_{i\mu}^{ef}(E', E'')}{E - E' + i\delta} dE'' = -V_{i\lambda}^{ef}(E', E) \quad (6)$$

Порівнюючи вирази (4) і (6), можна показати, що матриця $Z_{i\lambda}(E', E'')$ на

енергетичній поверхні співпадає з T - матрицею резонансного розсіювання, яка визначається другим доданком в формулі:

$$N_{\alpha n}(E) = \sum_{\lambda\epsilon\alpha} H_{m\lambda}(E) (t_{\lambda}^{dir}(E) + \sum_n \frac{H_{m\lambda}(E)}{\epsilon_n(E) - \epsilon_m(E) + 2i})^*, \quad (7)$$

див. [5]. Ядра системи інтегральних рівнянь (6) факторизуються, що дає можливість виразити функції $\bar{Z}_{i\lambda}(E, E')$ в явному виді через розв'язок лінійної задачі:

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

Загальний вид функцій $V_{\lambda\mu}^{ef}(E', E)$, які входять в ядра рівнянь Ліпмана - Швінгера, визначається через матричні елементи оператора \hat{V}^{ef} , вираз для якого приведений в [5]. На базисі власних функцій моделі незалежних частинок оператор \hat{V}^{ef} не дозволяє розділити змінні

із-за наявності доданка \hat{V}^r . Можна показати, що при однакових наближеннях [1–5], зроблених на етапі постановки задачі, розв’язок рівнянь Ліппмана - Швінгера точно відповідає S – матриці розсіювання, отриманій в рамках нашого підходу. Таким чином, формалізм, описаний в [1-5], може розглядатися як засіб точного розв’язку інтегральних рівнянь єдиної теорії ядерних реакцій.

В теорії іонізації використовується метод хаотичних фаз з обміном (МХФО) або RPAE [6]. Цей метод по суті також базується на розв’язуванні інтегральних рівнянь. Рівняння МХФО для амплітуд фотоіонізації крім багатоелектронних кореляцій в кінцевому стані атома враховують також зміни ефективного поля внаслідок динамічної поляризації атома фотоном, що відповідає включенню в розрахунок міжелектронних кореляцій в початковому стані. Врахування таких ефектів виходить за рамки постановки нашої задачі і відноситься до розрахунку хвильових функцій початкового стану атома і побудови оператора \hat{t} у виразі:

$$T_{|0\rangle \rightarrow |\lambda E\rangle} = \sqrt{C(E)} \langle \Psi_{\lambda}^{E(-)} | \hat{t} | 0 \rangle \quad (9)$$

з відповідними поправками. В кінцевому стані, якщо обмежитися розрахунком тільки одночастинкових-ододиркових станів в моделі Хартрі - Фока, МВКЗКЧ і МХФО мають однаковий порядок точності. Включення в МХФО станів більш складної природи (наприклад дві частинки - дві дирки і т.д.) є проблематичним. В той же час МВКЗКЧ дозволяє враховувати стани цього типу.

Відповідність між інтегральним формалізмом теорії ядерних реакцій та диференціальним формулюванням методу сильного звязку каналів (МСЗК) встановлено (див. огляди Балашова [7], та роботи [8-10]). У випадку вироджених порогів іонізації інтегральний формалізм можна розглядати як математичний спосіб розв'язку рівнянь МСЗК. А при наявності в системі невироджених порогів іонізації ці два методи відрізняються точністю врахування “підпорогових” станів. Ці “підпорогові” стани відрізняються від розглянутих квазістаціонарних станів

(КС) тільки основним квантовим числом в підпросторі закритих каналів.

Формалізм МВКЗКЧ реалізує багатоканальну теорію резонансних процесів у випадку довільного числа станів в підпросторах відкритих та закритих каналів, і як показано в [5], кінцеві вирази для перерізів резонансної іонізації в частинних випадках - розпад одного автоіонізаційного стану (АІС) в один відкритий канал, розпад декількох АІС в один відкритий канал, - які розглянув Фано, виходять однаковими при використанні дійсного та комплексного формалізму. Але спосіб введення характеристик в цих двох підходах здійснюється на різному рівні фізичних наближень. В зображенні комплексних чисел характеристики резонансів вводяться з врахуванням взаємодії КС через неперервний спектр, в тому числі і через точку спектра на енергетичній поверхні. Тому на базі МВКЗКЧ можуть вводитися наближення, які дозволяють дослідити цей ефект. В зображенні дійсних чисел цього зробити не вдається. Отже, зручність зображення комплексних чисел полягає зокрема в тому (в порівнянні з іншими методами), що взаємодію АІС через неперервний спектр на енергетичній поверхні і поза нею можна виділити явно. Нехтування останнім, забезпечує в рамках МВКЗДЧ перехід до ДН. Таке ж фізичне наближення в рамках МВКЗКЧ дозволяє при оцінці характеристик КС врахувати і вивчити взаємодію резонансів через неперервний спектр на енергетичній поверхні.

Таким чином, даний підхід – МВКЗКЧ можна розглядати, як узагальнення відомих методів Фано [11-13], ДН та МВКЗДЧ, стосовно опису збудження довільного числа АІС та їх розпаду в довільну кількість каналів.

2. Результати розрахунків

Наводимо положення найнижчих автоіонізаційних станів, які збігаються до порогу $N=3$ для іонів H^- та Li^+ , отриманих в наближенні МВКЗКЧ в задачі іонізації іонів електронами.

№ п/п	H ⁻ , E _r , eV	Li ⁺ , E _r , eV
1	13,787	174,123
2	13,896	174,856
3	13,995	175,326
4	14,102	175,521
5	14,187	175,743
6	14,254	176,103

Для проведення класифікації наведених станів слід було би навести і проаналізувати їхні ширини, як це, наприклад, зроблено для АІС атома гелію [1-5]. Оскільки отримати ширини H⁻ проблематично, то в даній роботі від класифікації станів ми тимчасово

утримуємося. На сьогодні авторам невідомі результати інших розрахунків положень АІС для від'ємного іона водню, тому і відсутні порівняння з результатами інших авторів.

Зауважимо, що результати розрахунку збуджених АІС такого іона, як H⁻, представляють інтерес тільки з точки зору аналізу працездатності програмного комплексу МВКЗКЧ для довільної двохелектронної системи, що, власне, і ставилося за мету в даній роботі. На сьогоднішній день спостерігати такі високозбуджені АІС навряд чи можливо.

Література

- Burkov S.M., Strakhova S.I., Zajac T.M. Total and partial generalized oscillator strengths for transitions to the continuum of helium // *J.Phys.B: Atom. and Mol. Phys.*, 1990, v. 23, p. 3677-3690.
- Бурков С.М., Заяц Т.М., Страхова С.И. Ионизация гелия быстрыми электронами в области выше порога образования возбужденных ионов // *Оптика и спектроскопия*, 1988, т.63, вып.3, С.17-25.
- Burkov S.M., Letyaev N.A., Strakhova S.I., Zajac T.M. Photon and electron ionization of helium to the N=3 state of He⁺ // *XV ICPEAC, Abstract of contributed papers.*, Brighton, 1987, p. 216.
- Burkov S.M., Letyaev N.A., Strakhova S.I., 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.
- Zajac T.M., Simulik V.M. The method of interacting configurations in complex number representation: application for calculations of spectroscopic characteristics of quasistationary states in two electron systems // *Internat. Journ. Pure and Appl.Phys.*, 2006, v.2, N 3, p.231-248.
- Амусья М.Я. Атомный фотоэффект. – М.: Наука, 1987, с. 272.
- Балашов В.В. Состояние теории возбуждения автоионизационных состояний быстрыми заряженными частицами // *Автоионизационные явления в атомах. Труды 2-го научного семинара.* – М.: МГУ, 1976. – С. 110-117. Балашов В.В. Современное состояние теории резонансов в атомных системах. - Сборник лекций 1-ой Всесоюзной школы по электронным и атомным столкновениям. – Харьков: ХФТИ, 1979. – С. 111-131.
- Балашов В.В., Липовецкий С.С., Сенашенко В.С. О едином описании профиля резонансных линий в энергетических спектрах рассеянных и испускаемых электронов // *ЖЭТФ*, 1972, т.63., С.1622-1627.
- Балашов В.В., Липовецкий С.С., Сенашенко В.С. О возможности изучения автоионизационных состояний методом совпадений. // *Вестник МГУ, сер.физ. и астр.*, 1973, N 4, С.503-505.
- Липовецкий С.С., Сенашенко В.С. Возбуждение и резонансная ионизация гелия электронами. // *Опт. и спектр.* 1973., т.34, С. 1046-1050.
- Fano U. Effect of configuration interaction on intensities and phase shifts. // *Phys.Rev.A.*, 1961., v.124, N 6, p. 1866-1874.
- Fano U.,Cooper J.W. Line profiles in the far VUV absorption spectra of rare gases // *Phys.Rev.A.*, 1965, v.127, N5, p. 1364-1379.
- Фано У., Купер Дж. Спектральное распределение сил осцилляторов в атомах. *Современные проблемы физики.* – М.: Наука, 1972. –199 с.

APPLICATION OF THE METHOD OF INTERACTING CONFIGURATIONS IN COMPLEX NUMBER REPRESENTATION TO THE PROBLEM OF THE IONIZATION OF IONS

T.M. Zajac, A.I. Opachko¹, V.M. Simulik²

Uzhhorod National University, Department of Electronic Systems, 88000, 13 Kapitulna Str.,
Uzhhorod, e-mail: ztm@gaser.uzhgorod.ua

¹Transcarpathian Regional Center of Scientific and Technical Creative Work of the Pupil's Youth,
88000, Uzhhorod, 1 Buditeliv Str.

²Institute of Electron Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine, Department of the
Theory of Elementary Interactions, 88000, 21 Universitetska Str., Uzhhorod,
e-mail: sim@iep.uzhgorod.ua

The possibility of the application of the method of interacting configurations in complex number representation to the problem of the ionizations of ions by the photons, electrons and other particles is proved. The positions of the autoionizing states of the H^- and Li^+ ions, converging to the threshold $n=3$, are obtained. The multi-parametric Tweed's function in the calculations for the ground state of ions is using.