

МЕТОД ВЗАЄМОДІЮЧИХ КОНФІГУРАЦІЙ У ЗОБРАЖЕННІ КОМПЛЕКСНИХ ЧИСЕЛ В ЗАДАЧІ ІОНІЗАЦІЇ АТОМІВ ЕЛЕКТРОННИМ УДАРОМ В ОБЛАСТІ ВИЩЕ ПОРОГУ УТВОРЕННЯ ЗБУДЖЕНИХ ІОНІВ

Заяць Т.М.

Ужгородський національний університет, кафедра теоретичної фізики,

88000, Ужгород, вул. Волошина, 32

e-mail: ztm@gaser.uzhgorod.ua

В даній роботі на основі положень формалізму комплексних енергій Зігера формулюється метод взаємодіючих конфігурацій в зображенні комплексних чисел для задачі іонізації атомів електронами. Хвильова функція основного стану вибирається багатопараметричною. Будуються хвильові функції резонансного розсіювання електронів на атомах, які враховують збудження довільної кількості взаємодіючих квазістаціонарних станів системи "електрон + іон", причому останні можуть розпадатись в будь-яку кількість відкритих зв'язаних каналів. В рамках сформульованого методу криві диференціальних сил осциляторів переходів параметризуються.

1. Постановка задачі іонізації атомів електронним ударом

По своїй природі резонансна іонізація є процесом багаточастинковим. Для її послідовного теоретичного опису необхідно враховувати змішування конфігурацій дискретного та неперервного спектру. Тому навіть у відносно простих випадках, фотоіонізації, відповідний математичний апарат є досить громіздким. Причому, якщо розрахунків з резонансної фотоіонізації проведено досить багато, роботи, в яких вивчається іонізація електронами не є багаточисельними. Зробимо постановку задачі іонізації атома електронним ударом в борнівському наближенні по налітаючому електрону.

Розглянемо іонізацію атома швидкими електронами з імпульсом \vec{k}_0 , який розсіюється на кут χ з імпульсом \vec{k} . Нехай атом в початковому стані характеризується квантовими числами повного орбітального моменту і спіну та їх проекціями L_0, S_0, M_0, M_{s_0} . Стан системи після реакції визначається квантовими числами залишкового іона L_f, S_f, M_f, M_{s_f} та вибраного електрона, що має імпульс \vec{k} та проекцію спіну m_s . В подальшому всюди застосовується атомна система одиниць, а енергія вимірюється в рідбергах (Ry).

В борнівському наближенні амплітуда іонізації задається виразом:

$$T_{o \rightarrow f}^{L_f M_f S_f M_{s_f} m_s}(\vec{k}, \vec{Q}) = \langle L_f M_f S_f M_{s_f}; \vec{k} m_s | \sum_{j=1}^Z \hat{t}_j^b(\vec{Q}, \vec{r}_j) | L_0 M_0 S_0 M_{s_0} \rangle, \quad (1.1)$$

$$\text{де } \hat{t}_j^b(\vec{Q}, \vec{r}_j) = -\frac{2a_0}{Q^2} \exp(i\vec{Q}\vec{r}_j), \quad (1.2)$$

а переданий імпульс

$$\vec{Q} = \vec{k}_0 - \vec{k}. \quad (1.3)$$

Позначимо схему розглядуваної реакції як

$$He(n_0 L_0 S_0) + e^-(\vec{k}_0) \rightarrow He^+(nl_1) + e^-(\vec{k}_1) + e^-(\vec{k}), \quad (1.4)$$

де $\vec{k}_0, \vec{k}_1, \vec{k}$ – імпульси налітаючого, вибитого та розсіяного електронів відповідно. В борнівському наближенні УСО (уза-

гальнена сила осцилятора переходу) буде мати вигляд [1]:

$$\frac{\partial f_{nl_1}}{\partial E}(Q) = \frac{E}{Q^2} \sum_{lL} \left| \langle nl_1 El | \sum_{j=1}^2 \exp(i\vec{Q}\vec{r}_j) | n_0 L_0 S_0 \rangle \right|^2. \quad (1.5)$$

В цій 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 гелію з повним моментом L та спіном S_0 , при цьому електрон з моментом l та енергією E знаходиться в полі іона He^+ , електрон якого має квантові числа $|nl\rangle$. Функція основного стану гелію $|n_0 LS_0\rangle$. Розрахункові формули УСО переходу в неперервний спектр приведені в роботах [2,3], а в якості функції основного стану було взято 41-параметричну хвильову функцію Твіда [4].

2. Вибір хвильової функції основного стану атома He

Як правило, для описання основного стану атома гелію вибирають багатопараметричну хвильову функцію. Це зв'язано з тим фактом, що при наявності всього

двох електронів на єдиній в атомі оболонці важливими є кореляції в основному стані. Критерієм вибору тієї чи іншої хвильової функції є значення енергії основного стану атома, яке отримуємо в розрахунках використовуючи ту чи іншу хвильову функцію. Для систематичних точних розрахунків використовують, як правило, багатопараметричні хвильові функції Г'ілераасса (6-ти, 8-ми, чи 56-ти параметричні хвильові функції) [5], Твіда (41-параметрична хвильова функція) [4], або багатоконфігураційну хартрі-фоківську хвильову функцію [6]. Для спрощених розрахунків використовують одноконфігураційне наближення Хартрі-Фока, хвильову функцію Еккарта та інші.

Для описання основного стану атома He ми вибрали 41-параметричну хвильову функцію Твіда, яка має вигляд:

$$F_l(r_1, r_2) = \sum_{m,n} A_{lmn} (r_1^m r_2^n + r_1^n r_2^m) \exp\{-\frac{1}{2} k(r_1 + r_2)\} \quad (2.1)$$

В формулі (2.1), згідно роботи [4] l, m, n, k є параметрами.

В області спектру гелію між другим та третім порогами відкриті чотири канали прямої іонізації, які відповідають електрону над основним і першим збудженим станом залишкового іона He^+ . Як показали дослідження процесів непружного розсі-

ювання електронів на іоні He [7,8] та процесів фотоіонізації [9-11], зв'язок цих відкритих каналів є сильним. Внаслідок цього при описі процесів прямої іонізації He швидкими електронами в області вище порогу утворення збуджених іонів хвильова функція іонізованого гелію розраховувалась в рамках інтегрального фор-

мулювання метода сильного зв'язку відкритих каналів. Для значення $L = 0$ розв'язувалась система трьох інтегральних рівнянь а для $L = 1; 2; 3$ – система чотирьох інтегральних рівнянь для визначення К-матриці розсіювання електрона на іоні He^+ . Явний вигляд таких рівнянь приведений в роботі автора [12]. При розв'язуванні системи рівнянь для К-матриці в якості базисних функцій для опису електрона в неперервному спектрі використовувались розв'язки одноканального рівняння Шредінгера з екранованим кулонівським потенціалом.

Стани гелію в області неперервного спектру, де розміщені АІС, що сходяться до третього порогу, описувались хвильовою функцією, яка враховує всі міжконфігураційні взаємодії скінченного числа базисних конфігурацій, які відповідають двоелектронним збудженням в області між другим та третім порогамі (закриті канали) та електрону з позитивним значення енергії над основним та першим збудженим станом іона He^+ (відкриті канали). В розрахунках враховувались стани з повним моментом гелію $L \leq 3$.

Для кожного моменту L підпростір закритих каналів заповнювався двадцятьма конфігураціями, а в якості базисних функцій для їх опису використовувались кулонівські хвильові функції з зарядом $z = 2$. Далі підпростір цих станів попередньо діагоналізувався. Підпростір відкритих каналів включає три конфігурації для $L = 0$ і чотири для інших моментів L . Що відповідає включенню в розрахунок каналів, які відповідають основному і першому збудженому стану іона He^+ $1s\epsilon L, 2s\epsilon L, 2p\epsilon(L-1), 2p\epsilon(L+1)$.

3. Формалізм методу взаємодіючих конфігурацій в зображенні комплексних чисел в застосуванні до задачі резонансної іонізації атомів електронами

Задача опису та інтерпретації структури перерізів резонансних процесів зводиться до визначення кривих відповідних перерізів та характеристик резонансних станів. Оцінка вкладу кожного квазістаціонарного стану в формування кривої є ос-

новною проблемою в розшифровці спектрів атомів в області вище порогу іонізації. В 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 [13]. Параметри, що характеризують розраховану резонансну структуру, отримані шляхом "фітування" по FUMILI, не завжди відповідають реальним станам даної системи.

Зупинимось на описанні формалізму методу взаємодіючих конфігурацій в зображенні комплексних чисел, стосовно задачі іонізації атомів електронним ударом.

Будемо вважати, що стан системи з N електронів в полі ядра, яке має заряд Z описується набором хвильових функцій, які в свою чергу задовольняють стаціонарному рівнянню Шредінгера:

$$\hat{H}\Psi_{jE}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_n) = E\Psi_{jE}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_n). \quad (3.1)$$

В формулі (3.1) \hat{H} – гамільтоніан системи, конкретний вигляд якого визначається постановкою фізичної задачі; \vec{r}_i – набір координат i -го електрона; E – повна енергія системи.

В даному параграфі ми знайдемо такі розв'язки рівняння (3.1.), які відповідають станам атома з одним електроном в неперервному спектрі. Зобразимо оператор Гамільтона \hat{H} системи у вигляді суми двох операторів \hat{H}_0 та \hat{V}' . Нехай \hat{H}_0 – модельний гамільтоніан системи. Набір власних функцій оператора \hat{H}_0 можна подати у вигляді об'єднання двох підпросторів, які визначають множини станів дискретного та неперервного спектрів відповідно. Позначимо ці підпростори відповідно D і C . Матриця гамільтоніана \hat{H} в зображенні оператора \hat{H}_0 може бути записана наступним чином:

$$\|\hat{H}\| = \begin{vmatrix} \|\hat{H}^{DD}\| & \|\hat{V}^{DC}\| \\ \|\hat{V}^{CD}\| & \|\hat{H}^{CC}\| \end{vmatrix}, \quad (3.2)$$

де оператори \hat{H}^{DD} та \hat{H}^{CC} – є проєкціями гамільтоніана \hat{H} на підпростори D та C . Матриці операторів \hat{V}^{DC} та \hat{V}^{CD} характе-

ризують взаємодію між підпросторами дискретних та неперервних станів.

Позначимо далі набори хвильових функцій дискретного спектру $|n\rangle$, а неперервного спектру $|\lambda E\rangle$. Нехай ці функції задовольняють наступним умовам:

$$\langle n|\hat{H}^{DD}|n\rangle = E_n \delta_{nm}; \quad \langle \lambda'E'|\hat{H}^{CC}|\lambda E\rangle = E \delta_{\lambda\lambda'} \delta(E - E'). \quad (3.3)$$

Використовуючи техніку проєкційних операторів Фешбаха [14,15] можна показати, що розв'язки рівняння (3.3) мають наступні властивості:

$$\langle n|\lambda E\rangle = 0; \quad \hat{H}^{CC}|n\rangle = 0; \quad \hat{H}^{DD}|\lambda E\rangle = 0, \quad (3.4a)$$

$$\langle n|m\rangle = \delta_{nm}; \quad (3.4b)$$

$$\langle \lambda E|\lambda'E'\rangle = \lambda_{\lambda\lambda'} \delta(E - E'). \quad (3.4в)$$

Звідки випливає, що набір хвильових функцій $|n\rangle \cup |\lambda E\rangle$ є повною ортонормованою системою і задовольняє вимогам Фано [16-18]. В зображенні цього базису матрицю гамільтоніана \hat{H} запишемо у наступному вигляді:

$$\|\hat{H}\| = \begin{vmatrix} E_n \delta_{nm} & \|\hat{V}^{DC}\| \\ \|\hat{V}^{CD}\| & E \delta_{\lambda\lambda'} \delta(E - E') \end{vmatrix}. \quad (3.5)$$

Якщо порівняємо цю формулу з (3.2) то можемо розділити взаємодію у вигляді суми модельного гамільтоніана \hat{H}_0^M та, так званої, залишкової взаємодії \hat{V}_M^r . Тоді

$$\|\hat{H}_0^M\| = \begin{vmatrix} \|\hat{H}^{DD}\| & 0 \\ 0 & \|\hat{H}^{CC}\| \end{vmatrix}, \quad (3.6a)$$

$$\|\hat{V}_M^r\| = \begin{vmatrix} 0 & \|\hat{V}^{DC}\| \\ \|\hat{V}^{CD}\| & 0 \end{vmatrix}. \quad (3.6b)$$

Рівняння Шредінгера з гамільтоніаном \hat{H} в зображенні (3.6) перетворюється в систему інтегро-алгебраїчних рівнянь:

$$\begin{cases} (E_n - E) a_{\lambda n}^{iE} + \sum_{\lambda'} \int_0^\infty b_{\lambda\lambda'}^{iE}(E') \cdot V_{n\lambda'}(E') dE' = 0 \\ \sum_m a_{\lambda m}^{iE} V_{m\lambda'}^*(E') + (E' - E) b_{\lambda\lambda'}^{iE}(E') = 0 \end{cases} \quad (3.7)$$

де i – індекс лінійно-незалежного розв'язку системи рівнянь (3.7); в подальшому цей індекс опустимо. Індекс λ нумерує канал реакції розсіювання і визначає асимптотику функції та квантові числа системи іон + електрон в неперервному спектрі. $a_{\lambda m}^E$ та $b_{\lambda\lambda'}^E(E')$ – коефіцієнти розкладу функції $\Psi_\lambda^E(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ по базису станів дискретного $|n\rangle$ та неперервного спектрів $|\lambda E\rangle$. $V_{n\lambda}$ – матричний елемент оператора \hat{V}^{CD} ; $V_{n\lambda}(E) = V_{n\lambda}^*(E)$.

Нагадаємо, що по Фано [16]:

$$\Psi_\lambda^E(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \sum_m a_{\lambda m}^E |m\rangle + \sum_{\lambda'} \int_0^\infty b_{\lambda\lambda'}^E(E') |\lambda'E'\rangle dE' \quad (3.8)$$

Відмітимо, що в класичній роботі Фано також показано, якщо в розкладі (3.8)

обмежитись одним членом, то задача знаходження коефіцієнтів $a_{\lambda m}^E$ та $b_{\lambda\lambda'}^E(E')$ роз-

в'язується аналітично.

Для розрахунку характеристик квазі-стаціонарних станів, слід вимагати виконання умови нормування функції $\Psi_\lambda^E(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ на δ -функцію по енергії. Задача опису парціальних сил осцилятора переходу (чи перерізів іонізації) окрім цього вимагає врахування відповідних асимптотичних граничних умов, які дозволяють

$$\Psi_{jL_f M_f}^E(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = \sum_{\vec{r}_N \rightarrow \infty} \sum_{j'L_f' M_f' \lambda' \mu'} \langle L_f' M_f' \lambda' \mu' | LM \rangle \times \Psi_{jL_f M_f}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_{N-1}) \frac{1}{\vec{r}_N} Y_{\lambda' \mu'}(\theta_N, \varphi_N) \{ \delta_{\lambda \lambda'} \delta_{\mu \mu'} \delta_{L_f L_f'} \exp(i\theta_{jL_f}(\vec{r}_N)) - [S_{jL_f M_f}^{j'L_f' M_f' LM}]^\dagger \exp(-i\theta_{jL_f}(\vec{r}_N)) \}. \quad (3.9)$$

де j, L_f, M_f – квантові числа, що характеризують іон; λ, μ – квантові числа вибитого електрона; $\Psi_{jL_f M_f}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_{N-1})$ – хвильова функція іона;

$S_{jL_f M_f}^{j'L_f' M_f' LM}$ – S -матриця розсіювання,

$$\theta_{jL_f}(\vec{r}_N) = k_{jL_f} \vec{r}_N + \frac{z'}{k_{jL_f}} \ln(k_{jL_f} \vec{r}_N); z' - \text{заряд}$$

іона на нескінченності.

Для побудови набору хвильових функцій $\Psi_\lambda^E(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ з асимптотичною поведінкою (3.9) слід визначити асимптотичні

покласти у відповідність індексу лінійно-незалежного розв'язку системи (3.7) той набір квантових чисел, який характеризує досліджуваний канал. Згідно роботи Берка [19] в зображенні повного моменту, задачі іонізації відповідає система хвильових функцій, які мають наступну асимптотику:

властивості функцій базису $|\lambda E\rangle$ і вибрати відповідний спосіб обходу полюсів розв'язків системи (3.7). З квантової теорії розсіювання відомо (див., наприклад [20]), що набору хвильових функцій з асимптотикою (3.9) відповідає спосіб обходу полюса знизу.

Використовуючи формулу для обчислення контурного інтеграла типу Коші, можемо подати формальний розв'язок системи рівнянь (3.8) у наступному вигляді:

$$b_{\lambda \lambda'}^E(E') = P \frac{\sum_m a_{\lambda m}^E V_{m \lambda}(E)}{E - E'} + \left[A_{\lambda \lambda'} \pm i\pi \sum_m a_{\lambda m}^E V_{m \lambda'}(E) \right] \delta(E - E') \quad (3.10)$$

Вибір знаку в квадратних дужках ($\pm i\pi$) визначає спосіб обходу полюсу "зверху", або "знизу". Матриця $A_{\lambda \lambda'}$ залежить від асимптотичних властивостей функцій базису $|\lambda E\rangle$. Різниця з методом Фано тут полягає в тому, що на місці квадра-

тних дужок у Фано ставиться дійсна величина.

Підстановка виразу (3.10) в систему рівнянь (3.7) призводить до системи неоднорідних алгебраїчних рівнянь з комплексною матрицею коефіцієнтів:

$$(E_n - E) a_{\lambda n}^E + \sum_m [F_{nm}(E) - i\gamma_{nm}(E)] a_{\lambda m}^E = - \sum_{\lambda'} A_{\lambda \lambda'} V_{\lambda n}(E); \quad (3.11a)$$

$$\gamma_{nm}(E) = \pi \sum_\lambda V_{n\lambda}(E) \cdot V_{\lambda m}(E); F_{nm}(E) = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty \frac{\gamma_{nm}(E')}{E - E'} dE'. \quad (3.11b)$$

Розв'язок системи (3.11) проведемо наступним чином. Спочатку визначимо власні вектори та власні значення симетричної комплексної матриці, яка входить в ліву частину системи рівнянь (3.11). Позначимо цю матрицю $W_{nm}(E)$.

$$W_{nm}(E) = E_n \delta_{nm} + F_{nm}(E) - i\gamma_{nm}(E). \quad (3.12)$$

Так як елементи матриці $W_{nm}(E)$ є функціями повної енергії E , то її власні значення та власні вектори також будуть залежати від E . Нехай $B_{nm}(E)$ та $\eta_n(E)$ є матриця власних векторів та вектор власних значень матриці $W_{nm}(E)$. Матриця (3.12) неєрмітова, а тому $B_{nm}(E)$ та $\eta_n(E)$ – комплексні величини. Позначимо:

$$\eta_n(E) = E_n(E) + i\tilde{\gamma}_n(E), \quad (3.13)$$

$$\text{де } \tilde{\gamma}_n = \frac{\Gamma_n(E)}{2}.$$

В теорії матриць [21] показано, що для власних векторів симетричної комплексної матриці вірним є наступне співвідношення:

$$\sum_{m'} B_{m'm}(E) \cdot \tilde{M}_{\lambda m'} [E - E_{m'}(E) + i\Gamma_{m'}(E)/2] = \sum_{\lambda'} A_{\lambda\lambda'} V_{\lambda'm}(E). \quad (3.16)$$

Домноживши ліву та праву частину системи (3.16) на матрицю $B_{nm}(E)$ і вра-

$$\sum_k B_{ik}(E) \cdot B_{jk}(E) = \delta_{ij} \beta_j(E), \quad (3.14)$$

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

Наступним етапом після визначення власних векторів та власних значень матриці $W_{nm}(E)$, знайдемо коефіцієнти розкладу $a_{\lambda m}^E$. Розв'язок системи рівнянь (3.11) будемо шукати у вигляді лінійної комбінації власних векторів $B_{nm}(E)$, тобто:

$$a_{\lambda m}^E = \sum_{m'} B_{m'm}(E) \cdot \tilde{M}_{\lambda m'}(E). \quad (3.15)$$

Підстановка (3.15) в систему (3.11) з врахуванням того, що $B_{nm}(E)$ є власними векторами матриці $W_{nm}(E)$, визначає систему лінійних рівнянь відносно коефіцієнтів лінійної комбінації (3.15). Тобто:

ховуючи властивість (3.14), знайдемо вираз для $\tilde{M}_{\lambda m}(E)$:

$$\tilde{M}_{\lambda m}(E) = \frac{\sum_{k\lambda'} B_{nk}(E) V_{k\lambda'}(E) A_{\lambda\lambda'}}{E - E_m(E) + i\Gamma_m(E)/2} = \frac{\sum_{\lambda'} \tilde{V}_{m\lambda'} A_{\lambda\lambda'}}{E - E_m(E) + i\Gamma_m(E)/2}, \quad (3.17)$$

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

Розв'язок (3.17) визначає коефіцієнти розкладу з точністю до матриці $A_{\lambda\lambda}$. Властивості матриці $A_{\lambda\lambda}$ в свою чергу зале-

жать від асимптотичних властивостей функцій базису $|\lambda E\rangle$. Вирази для коефіцієнтів розкладу матимуть наступний вигляд:

$$a_{\lambda m}^E = \sum_{m'} B_{m'm}(E) \frac{\sum_{\lambda'} A_{\lambda\lambda'} \tilde{V}_{\lambda m'}(E)}{E - E_{m'}(E) + i\Gamma_{m'}(E)/2}, \quad (3.18a)$$

а з врахуванням (3.17) :

$$a_{\lambda m}^E = \sum_{m'} \tilde{M}_{\lambda m'}(E) \cdot B_{m'm}(E) \quad (3.186)$$

Зручно також ввести матрицю $M_{\lambda m}(E)$, яка зв'язана з матрицею $\tilde{M}_{\lambda m}(E)$ співвідношенням:

$$M_{\lambda m}(E) = \tilde{M}_{\lambda m}(E) \times [E - E_m(E) + i\Gamma_m(E)/2] \quad (3.18в)$$

Тоді зв'язок між матрицею $M_{\lambda m}(E)$ та матрицями $A_{\lambda\lambda'}$, $B_{mn}(E)$ та $V_{n\lambda}(E)$ буде виражений формулою:

$$M_{n\lambda}(E) = \sum_k \sum_{\lambda'} B_{nk}(E) \cdot V_{k\lambda'} \cdot A_{\lambda'\lambda} \quad (3.19)$$

причому

$$[M_{n\lambda}(E)]^* = M_{\lambda n}(E) \quad (3.20)$$

чого не можна стверджувати про матрицю $\tilde{M}_{\lambda m}(E)$.

Визначимо матрицю $A_{\lambda\lambda'}$. Для цього виконаємо підстановку (3.17) та (3.18) в розклад (3.8). Вигляд розв'язку рівняння Шредінгера в даному випадку буде наступний:

$$\Psi_{\lambda}^{E(-)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \sum_{\lambda'} A_{\lambda\lambda'} |\lambda'E\rangle + \sum_m \frac{M_{\lambda m}(E)}{E - E_m(E) + i\Gamma_m(E)/2} \times \left[\sum_n B_{mn}(E) |n\rangle + \sum_{\lambda'} \left(\int_0^{\infty} \frac{\tilde{M}_{\lambda'm}(E')}{E - E'} \right) \sum_{\lambda} A_{\lambda\lambda'} |\lambda E'\rangle dE' - i\pi \tilde{M}_{\lambda m} \sum_{\lambda'} A_{\lambda'\lambda} |\lambda'E\rangle \right] \quad (3.21)$$

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

$$\varphi_{\lambda}^E(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \sum_{\lambda'} A_{\lambda\lambda'} |\lambda'E\rangle \quad \text{та} \quad \tilde{\varphi}_m^E(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \sum_n B_{mn}(E) \cdot |n\rangle \quad (3.22)$$

то попередня формула (3.21) прийме вигляд:

$$\Psi_{\lambda}^{E(-)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \varphi_{\lambda}^E(\vec{r}_1, \vec{r}_2) + \sum_m \frac{M_{\lambda m}(E)}{E - E_m(E) + i\Gamma_m(E)/2} \times \left[\tilde{\varphi}_m^E(\vec{r}_1, \vec{r}_2) + \sum_{\lambda'} \left(\int_0^{\infty} \frac{M_{\lambda'm}(E')}{E - E'} \tilde{\varphi}_{\lambda'}^{E'}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) dE' - i\pi M_{\lambda m}(E) \varphi_{\lambda}^E(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \right) \right] \quad (3.23)$$

Хвильові функції $|\lambda E\rangle$, а отже і $\varphi_{\lambda}^E(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \sum_{\lambda'} A_{\lambda\lambda'} |\lambda'E\rangle$, є функціями багатоканальними, і вираз для асимптотики

таких функцій може бути записаний у вигляді:

$$|\lambda E\rangle \quad r_n \rightarrow \infty \rightarrow \sum_j \frac{\Psi_j(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_{n-1})}{\vec{r}_n} [\tilde{b}_{\lambda j} \cos(\theta_j(\vec{r}_n) + \xi_j) + \tilde{a}_{\lambda j} \sin(\theta_j(\vec{r}_n) + \xi_j)] \quad (3.24)$$

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

$$\|\tilde{a}\|^2 + \|\tilde{b}\|^2 = 1. \quad (3.25)$$

Підстановка (3.23) в (3.21) визначатиме асимптотичні властивості розв'язків Ψ_{λ}^E в представленні дійсного базису $|\lambda E\rangle$, який задовольняє граничним умовам (3.23). З врахуванням вищесказаного матимемо:

$$\Psi_i^E(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_n) = \sum_{j=1}^{n-1} \frac{\Psi_j(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_{n-1})}{2ir_n} \{(\tilde{a}_{\lambda_j} + i\tilde{b}_{\lambda_j}) \exp(i\theta_j(\vec{r}_n)) - (\tilde{a}_{\lambda_j} - i\tilde{b}_{\lambda_j}) \exp(i\theta_j(\vec{r}_n)) + i\pi \sum_{\mu} Z_{\lambda\mu}(E, E')(\tilde{a}_{\lambda\mu} - i\tilde{b}_{\lambda\mu}) \exp(i\theta_j(\vec{r}_n))\}. \quad (3.26)$$

З цієї рівності видно, що для забезпечення виконання граничних умов (3.9) для функції $\Psi_{jL_j\lambda,LM}^E(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_n)$ слід матрицю $A_{\lambda\lambda'}$ вибрати в наступному вигляді:

$$\|A\| = \|\tilde{a} + i\tilde{b}\|^{-1}. \quad (3.27)$$

Порівняння (3.26) з (3.24) показує, що вираз (3.26) визначає лінійне перетворення, яке приводить хвильові функції базису $|\lambda E\rangle$ до асимптотики, що відповідає задачі іонізації. Звідси випливає, що якщо хвильові функції базису задовільняють граничним умовам (3.9), то матриця $A_{\lambda\lambda'} = \delta_{\lambda\lambda'}$. Із виразу (3.26) з врахуванням умови нормування (3.25) і (3.27) можна записати зв'язок матриць $\|\tilde{a}\|$ і $\|\tilde{b}\|$ з S -матрицею розсіювання.

$$S_{\lambda\mu}(E) = S_{\lambda\mu}^{(0)}(E) + \tilde{Z}_{\lambda\mu} * (E), \quad (3.28a)$$

де $\tilde{Z}_{\lambda\mu}(E) = i\pi[A_{\lambda\lambda'} Z_{\lambda'\nu} A_{\nu\mu}]$. Вираз (3.28a) складається з двох доданків. Перший доданок визначається наступним чином:

$$|\Psi_{\lambda}^{E(-)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\rangle = |\lambda E\rangle + \sum_m \frac{\tilde{V}_{m\lambda}(E)}{E - E_m(E) + i\Gamma_m(E)/2} (|\tilde{\Phi}_m^E\rangle - i|\chi_m^E\rangle), \quad (4.1)$$

$$\text{де } |\tilde{\Phi}_m^E\rangle = |\varphi_m^c\rangle + \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{|\chi_m^{E'}\rangle}{E - E'} dE' \text{ і } |\chi_m^E\rangle = \pi \sum_{\lambda} \tilde{V}_{m\lambda}(E) |\lambda E\rangle, \quad (4.2)$$

індексу λ ставимо у відповідність набір квантових чисел, що визначається співвідношенням (3.9). Для розрахунку сили осцилятора (або перерізу) іонізації потрібно визначити амплітуду іонізації. Як відомо амплітуду іонізації в загальному випадку можна записати у вигляді:

$$\|S^{(0)}\| = \frac{\|\tilde{a}\| + i\|b\|}{2(\|\tilde{a}\| - i\|b\|)}. \quad (3.286)$$

Матриця $\|S^{(0)}\|$ описує процес розсіювання без врахування збудження квазістаціонарних станів системи "іон + електрон". Другий доданок визначає вклад резонансних процесів в переріз розсіювання. Полюси матриці $\tilde{Z}_{\lambda\mu}$ відповідають збудженню автоіонізаційних станів n -електронної системи. По змісту ця матриця співпадає з T -матрицею розсіювання, якщо останню розрахувати в зображенні багатоканального базису $|\lambda E\rangle$:

4. Параметричне зображення диференціальних узагальнених сил осцилятора переходу (УСО) переходу

Нехай хвильові функції $|\lambda E\rangle$ задовольняють умовам (3.8). Як було показано в розділі 2 в цьому випадку матриця $A_{\lambda\lambda} = \delta_{\lambda\lambda}$. Тоді хвильову функцію $\Psi_{\lambda}^{E(-)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ запишемо наступним чином:

$$T_{|0\rangle \rightarrow |\lambda E\rangle} = \sqrt{C(E)} \langle \Psi_{\lambda}^{E(-)} | \hat{r} | 0 \rangle, \quad (4.3)$$

$$|0\rangle \equiv |n_0 L_0 S_0\rangle \quad (4.4)$$

де (4.4) означає хвильову функцію початкового стану атома. $C(E)$ – кінематичний множник.

Підстановка виразів (4.1)-(4.2) у (4.3)

визначить парціальні амплітуди резонансної іонізації:

$$T_{|0\rangle \rightarrow |\lambda E\rangle} = t_\lambda^{dir}(E) + \sum_m \frac{H_{m\lambda}(E)}{\varepsilon_m(E) + 1}. \quad (4.5)$$

$$t_\lambda^{dir}(E) = \sqrt{C(E)} \langle \lambda E | \tilde{t} | 0 \rangle; H_{m\lambda}(E) = 2\tilde{V}_{m\lambda}(E) [t_m(E) - i\tau_m(E)] \Gamma_m^{-1}(E), \quad (4.6a)$$

$$t_m(E) = \sqrt{C(E)} \langle \tilde{\Phi}_m^E | \tilde{t} | 0 \rangle; \tau_m(E) = \sqrt{C(E)} \langle \chi_m^E | \tilde{t} | 0 \rangle. \quad (4.6b)$$

Парціальна диференціальна сила осцилятора переходу в канал іонізації λ пропорційна квадрату модуля виразу (4.5). Розрахунок повного перерізу іонізації здійснюється сумуванням всіх парціальних вкладів по індексу λ . Виділимо серед всіх каналів врахованих в задачі деяку групу каналів. Нехай Δ – множина всіх каналів реакції, а α – деяка підмножина множини Δ , так що $\alpha \in \Delta$. Диференціальну силу осцилятора переходу із збудженням каналів, що характеризуються індексом λ , причому $\lambda \in \alpha$ за-

Величини, які входять в формулу (4.5) визначаються наступними співвідношеннями:

пишемо наступним чином:

$$\frac{\partial f_\alpha(E)}{\partial E} = G(E) \sum_{\lambda \in \alpha} \left| t_\lambda^{dir}(E) + \sum_m \frac{H_{m\lambda}(E)}{\varepsilon_m(E) + 1} \right|^2 \quad (4.7a)$$

де $G(E)$ – нормувальний множник, який зв'язує переріз з диференційною силою осцилятора переходу наступним чином:

$$\sigma_\alpha(E) = \frac{1}{G(E)} \frac{\partial f_\alpha(E)}{\partial E} \quad (4.7b)$$

або

$$\sigma_\alpha(E) = \sigma_\alpha^{dir}(E) + \sum_{\lambda \in \alpha} \left\{ \sum_m \left[\frac{t_\lambda^{dir*}(E) H_{m\lambda}(E)}{(\varepsilon_m(E) + i)(\varepsilon_n(E) - i)} + \frac{t_\lambda^{dir}(E) H_{m\lambda}^*(E)}{\varepsilon_m(E) - i} \right] + \sum_{nm} \frac{H_{m\lambda}(E) H_{n\lambda}^*(E)}{(\varepsilon_m(E) + i)(\varepsilon_n(E) - i)} \right\}. \quad (4.8)$$

Скориставшись співвідношенням $\frac{1}{(x+i)(y-i)} = \frac{1}{y-x-2i} \left(\frac{1}{x+i} - \frac{1}{y-i} \right)$

приведемо вираз (4.8) до вигляду, аналогічному формулам Шоре [22] в наближенні неперетинаючихся резонансів:

$$\sigma_\lambda(E) = \sigma_\lambda^{dir}(E) + \sum_m \frac{\Gamma_m(E) P_{m\lambda}(E) + \varepsilon_m(E) Q_{m\lambda}(E)}{\varepsilon_m^2(E) + 1}. \quad (4.9)$$

Дійсні функції повної енергії $P_{m\lambda}(E)$ і $Q_{m\lambda}(E)$ є подвоєними частинами відповідно дійсної і комплексної частин комплекс-

ної функції $N_{m\lambda}(E)$, де остання має наступний вигляд:

$$N_{am}(E) = \sum_{\lambda \in \alpha} H_{m\lambda}(E) (t_\lambda^{dir}(E) + \sum_n \frac{H_{m\lambda}(E)}{\varepsilon_n(E) - \varepsilon_m(E) + 2i})^*. \quad (4.10)$$

Таким чином переріз резонансної іонізації визначається набором наступних функцій повної енергії: $\sigma_\lambda^{dir}(E); N_{cm}(E); \varepsilon_m(E); \Gamma_m(E)$. Із виразу (4.9) видно, що набір

$$N_{cm}(E) = \tilde{N}_{m\alpha}(E) + (d_{m\alpha}(E)\varepsilon_m(E) + g_{m\alpha}(E)) + i(d'_{m\alpha}(E)\varepsilon_m(E) + g'_{m\alpha}(E)), \quad (4.11)$$

де $d_{m\alpha}(E); d'_{m\alpha}(E); g_{m\alpha}(E); g'_{m\alpha}(E)$ – довільні дійсні неперервні функції повної енергії E . Вибір цих функцій будемо проводити, виходячи з неперервності функцій $N_{cm}(E)$ і $\tilde{N}_{m\alpha}(E)$. Цю процедуру в подальшому будемо називати процедурою ка-

параметрів $\sigma_\lambda^{dir}(E)$ і $N_{cm}(E)$ може бути вибраний неоднозначно, тобто, значення виразу (4.9) є інваріантними відносно наступного перетворення функцій:

лібрування параметра $N_{cm}(E)$. Практично калібрування $N_{cm}(E)$ зводиться до виключення явної залежності від E у виразі (4.9). В результаті виконання калібрування отримаємо вираз для параметра $N_{cm}(E)$:

$$N_{cm}(E) = \sum_{\lambda \in \alpha} \Gamma_m(E) H_{m\lambda}(E) \left[t_\lambda^{dir}(E) + \sum_n \frac{H_{n\lambda}(E) \Gamma_n(E)}{E_m(E) - E_n(E) + \frac{i}{2}(\Gamma_n(E) + \Gamma_m(E))} \right], \quad (4.12)$$

функції $d_{m\alpha}(E); d'_{m\alpha}(E); g_{m\alpha}(E); g'_{m\alpha}(E)$ визначені наступним чином: $g_{m\alpha}(E) = 0; g'_{m\alpha}(E) = 0; d_{m\alpha}(E) = \text{Re}(R_{m\alpha}(E))$

$d'_{m\alpha}(E) = \text{Im}(R_{m\alpha}(E))$, а функція $R_{m\alpha}(E)$ при цьому є:

$$R_{m\alpha}(E) = \sum_n \sum_{\lambda \in \alpha} [H_{m\lambda}(E) H_{n\lambda}^*(E)] \times \frac{\Gamma_n(E) - \Gamma_m(E)}{[E_m(E) - E_n(E) + i(\Gamma_n(E) + \Gamma_m(E))][\varepsilon_n(E) - \varepsilon_m(E) + 2i]}. \quad (4.13)$$

Виходячи з формул (4.9), (4.12) можна перейти до системи характеристик взаємодіючих автоіонізаційних станів, анало-

гічним до введених Фано в роботі [16] для одного ізольованого резонансу, а саме:

$$q_{m\alpha}(E) = \text{tg}(\beta_{m\alpha}(E)); \sigma_{m\alpha}(E) = |N_{m\alpha}(E)|^2 \cos(\beta_{m\alpha}(E)), \quad (4.14a)$$

$$\rho_{m\alpha}^2(E) = \frac{\sigma_{m\alpha}(E)}{\sigma_\alpha^{dir}(E)}; \beta_{m\alpha}(E) = \frac{1}{2} \text{Arg}(N_{m\alpha} E) + \frac{k\pi}{2}; (k \in \mathbb{N}). \quad (4.14b)$$

Як бачимо аргумент комплексної функції $N_{m\alpha}(E)$ визначається неоднозначно, з точністю до $k\pi$ (де k – ціле додатне число). Звідси випливає. Що кожному значенню функції $N_{m\alpha}(E)$ відповідають два

набори характеристик, заданих співвідношеннями (4.14). Функції (4.14) можна легко виразити через $N_{m\alpha}(E) = 2(P_{m\alpha}(E) + Q_{m\alpha}(E))$. Тоді параметри приймуть наступний вигляд:

$$\rho_{m\alpha}^{2(\pm)}(E) = \frac{P_{m\alpha}(E) \pm \sqrt{P_{m\alpha}^2(E) + Q_{m\alpha}^2(E)}}{\sigma_{\alpha}^{dir}(E)}, \quad (4.15a)$$

$$q_{m\alpha}^{(\pm)}(E) = \frac{Q_{m\alpha}(E)}{P_{m\alpha}(E) \pm \sqrt{P_{m\alpha}^2(E) + Q_{m\alpha}^2(E)}}. \quad (4.15b)$$

У випадку ізольованого резонансу обидві системи функцій $q_{m\alpha}^{(\pm)}(E)$ і $\rho_{m\alpha}^{2(\pm)}(E)$ мають простий геометричний зміст. Величини $q_{m\alpha}^{(\pm)}(E)$ визначають відстань між екстремумами резонансної кривої і поло-

ження резонансу: $E_m(\tilde{E}_m)$. $\rho_{m\alpha}^{2(\pm)}(E)$ – є визначені відносно фону амплітуди екстремумів. У випадку кількох взаємодіючих автоіонізаційних станів така інтерпретація функцій (4.15) є наближеною. Однозначно набір функцій (4.15) в теорії Фано визначається з умови $\rho^2 > 0$, що в наших позначеннях відповідає вибору знака (+). Вираз для розрахунку перерізів, таким чином, матиме наступний вигляд:

$$\sigma_{\alpha}(E) = \sigma_{\alpha}^{dir}(E) \left[1 + \sum_m \left(\frac{[\varepsilon_m(E) + q_{m\alpha}(E)]^2}{\varepsilon_m^2(E) + 1} \rho_{m\alpha}^2(E) - \rho_{m\alpha}^2(E) \right) \right]. \quad (4.16)$$

В залежності від визначення підмножини каналів α формула (4.16) описуватиме або повні або парціальні характеристики збудження квазістаціонарних станів атомів.

Перейдемо до розгляду спектроскопічних характеристик взаємодіючих квазістаціонарних станів в повних та парціальних диференціальних силах осцилятора переходу. Із виразів (4.9) і (4.16) видно, що збудження і розпад m -го квазістаціонарного стану по групі 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 (3.28), для S – матриці резонансного розсіювання. Нулі цих функцій на комплексній площині енергії визначають полюси S – матриці розсіювання, які відповідають збудженню квазістаціонарних станів. Згідно положень роботи Зігерта [22], реальна частина комплексної енергії полюса визначає положення резонансу, а уявна частина – його ширину. Таким чином, задача визначення

положень і ширин резонансів полягає в знаходженні розв'язків системи нез'язаних комплексних рівнянь:

$$E - E_m(E) + \frac{i}{2} \Gamma_m(E) = 0. \quad (4.17)$$

Рівність (4.17) може виконуватись тільки при комплексних значеннях енергії E . Розв'язок рівнянь (4.17) вимагає аналітичного продовження в задачі побудови власних векторів і власних значень комплексної матриці $W_{nm}(E)$ (3.12) при комплексних значеннях енергії E . Так як уявна і дійсна частини цієї матриці зв'язані між собою перетворенням Гільберта, то аналітичним продовженням $W_{nm}(E)$ на всю комплексну площину енергії $E = E_1 + iE_2$ буде наступна матриця:

$$W_{nm}^z(E) = E_n \delta_{nm} + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\gamma_{nm}(E')}{E_1 + iE_2 - E'} dE'. \quad (4.18)$$

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

$$W_{nm}^z(E) \rightarrow_{E_2 \rightarrow \pm 0} \delta_{nm} E_n + F_{nm}(E_1) \pm i\gamma_{nm}(E). \quad (4.19)$$

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 рів-

ність нулю її детермінанта, звідки маємо систему рівнянь для визначення комплекс-

них енергій квазістаціонарних станів:

$$\begin{cases} \operatorname{Re}[\det\|(E_1 + iE_2)\delta_{nm} - W_{nm}^z(E_1 + iE_2)\|] = 0, \\ \operatorname{Im}[\det\|(E_1 + iE_2)\delta_{nm} - W_{nm}^z(E_1 + iE_2)\|] = 0. \end{cases} \quad (4.20)$$

Таким чином, щоб визначити положення та ширину m – резонансу потрібно розв’язати систему рівнянь (4.20). Як було вказано вище, введення системи спектроскопічних параметрів, що характеризують профілі АІС в перерізах іонізації, пов’язано з можливістю використання резонансного наближення в формулах (4.9)-(4.16). У випадку, якщо це наближення можна застосувати, положення і ширини резонансних станів можна визначити із (4.20) в першому порядку теорії збурень.

Знайдемо розв’язки наступних рівнянь:

$$E_m(\tilde{E}_m) - \tilde{E}_m = 0. \quad (4.21)$$

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

$$\frac{\partial f_\alpha(E)}{\partial E} = \frac{\partial f_\alpha^{dir}(E)}{\partial E} \left[1 + \sum_m \rho_{m\alpha}^2(E) \left[\frac{(\varepsilon_m(E) + q_{m\alpha})^2}{\varepsilon_m^2(E) + 1} - 1 \right] \right]. \quad (4.22a)$$

$$\varepsilon_m(E) = \frac{2[E - E_m(\tilde{E}_m)]}{\Gamma_m(\tilde{E}_m)}; \quad q_{m\alpha}(\tilde{E}_m) = \operatorname{ctg} \left[\frac{1}{2} \operatorname{Arg}[N_{m\alpha}(\tilde{E}_m)] \right], \quad (4.22b)$$

$$\rho_{m\alpha}^2 = \frac{|N_{m\alpha}(\tilde{E}_m)|^2 \sin(\frac{1}{2} \operatorname{Arg}[N_{m\alpha}(\tilde{E}_m)])}{\sigma_\alpha^{dir}(E)}. \quad (4.22b)$$

Справедливість введення параметризації повинна аналізуватися в кожній конкретній фізичній задачі шляхом точного розрахунку функцій $N_{m\alpha}(E)$ і $\eta_m(E)$. В задачах розрахунку диференціальних характеристик збудження АІС часто буває необхідним визначити парціальні ширини розпаду квазістаціонарних станів по кільком каналам розпаду. В діагоналізаційному наближенні парціальна ширина вводиться через матричний елемент розпаду, як:

$$\tilde{\Gamma}_{m\alpha}(E) = 2\pi \sum_{\lambda\alpha} |\langle m | \tilde{V} | \lambda \varepsilon \rangle|. \quad (4.23)$$

Повна ширина відповідає $\alpha = \Delta(\tilde{\Gamma}_m(E) = \Gamma_{m\Delta}(E))$. У випадку взаємодіючих квазістаціонарних станів парціальні ширини введемо по аналогії з діаго-

налізаційним наближенням (4.23), а саме:

$$\tilde{\Gamma}_{m\alpha}(E) = 2\pi \sum_{\lambda\alpha} \tilde{V}_{m\alpha}(E) \tilde{V}_{m\lambda}^*(E). \quad (4.24)$$

Але, в даному випадку, повна ширина $\Gamma_m(E)$, визначена діагоналізацією комплексної матриці не співпадає з сумою парціальних ширин. Як у випадку (4.23). В практичних розрахунках методом сильного зв’язку каналів, наприклад [19] положення резонансу визначається значенням енергії, при якому власна фаза відповідного каналу рівна $\pi/2$. Визначення цієї величини зводиться до розв’язку наступних рівнянь:

$$\operatorname{Arg}[\eta_i(E)] = \pi/2, \quad (4.25)$$

де $\eta_i(E)$ – власне число S – матриці, що відповідає каналу i . Набір ширин може

бути визначений також і через значення функції $\Gamma_m(E)$ в точках \tilde{E}_m , які задовольняють (4.25). Але такий спосіб визначення положень та ширин має суттєвий недолік – множина розв'язків рівнянь (4.25) містить також корені, обумовлені наявністю в неперервному спектрі атома так званих “резонансів форми”. Вирішення питання ідентифікації АІС в даному випадку буде полягати в безпосередньому аналізі полюсів S – матриці розсіювання, яка визначена рівнянням (3.28). Вивчення характеристик збудження “резонансів форми” полягає в аналізі властивостей виразів (3.28) та (3.29). При такому способі визначення положень резонансних станів, кожний канал реакції має свій набір розв'язків рівняння (3.26). Ширини ж, при використанні апарату МСЗК, визначаються фітуванням функцій $\eta_i(E)$.

Висновки

1. На основі загальних положень, які запропонував Фано та формалізму комплексних енергій Зігерта, сформульовано метод взаємодіючих конфігурацій в зображенні комплексних чисел для опису повних та парціальних диференціальних сил осциляторів переходів в неперервний

спектр в задачі іонізації атомів електронним ударом. Метод сформульований без конкретизації оператора міжчастинкової взаємодії, а тому може бути застосований до інших задач, в тому числі і до задач ядерної фізики.

2. Обґрунтовано вибір функції основного стану атома гелію та конкретизовано вид останньої. Аргументовано доведено необхідність використання в розрахунках такого класу багатопараметричних хвильових функцій, типу Твіда, Г'ілераасса та інших.

3. Розвинуто і реалізовано методику побудови хвильових функцій, які діагоналізують підпростір станів неперервного спектру гамільтоніана розглядуваної системи в широкій області енергій з включенням порогів одночастинкового розпаду.

4. Отримано параметричні вирази для УСО переходу в неперервний спектр атома в області енергій вище порогу утворення збуджених іонів, що дозволяє значно спростити розрахунок перерізів в задачах іонізації атомів електронним ударом. Зокрема проаналізувати залежності параметрів резонансів від переданого імпульсу в спектрах втрат.

- Jacobs V.L. Differential cross sections for electron impact ionization of helium. // Phys. Rev., 1974, v.A10, p.499-505.
- 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.
- Tweed R.J. Correlated wavefunctions for helium-like atomic systems.// J.Phys.B: Atom. and Mol. Phys., 1972, v.5, p.810-819.
- Hylleraas E.A. Nene Berenchung der Energie des Helium Grund-zustande, sowicdes tiefsten Terms von Ortho-Helium.//Z.Phys., 1929, v.54,p.347-366.
- Brage T., Froese Fisher C. Multiconfiguration Hartree-Fock Wave Function. // J. Phys. B: Atom. and Mol. Phys., 1994, v.27, p.5467-5478.
- Burke P.G., Berrington K.A., Sukumar C.V., Electron-atom scattering in intermediate energies. // J.Phys.B: Atom. and Mol. Phys., 1980, v.14, p. 289-305.
- Балашов В.В. Состояние теории возбуждения автоионизационных состояний быстрыми заряженными частицами. Автоионизационные явления в атомах. Труды 2-го научного семинара. - Москва, из-во МГУ 1976, с.110-117.
- 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.
10. 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.
 11. Бурков С.М., Заяц Т.М., Летяев Н.А., Страхова С.И. Проявление автоионизационных состояний в процессах ионизации гелия и гелиеподобного лития фотонами и электронами выше порога образования возбужденных ионов. // Известия АН СССР, серия физическая, 1988, т.50, с.1315-1321.
 12. Заяц Т.М., Страхова С.И. Прямая и резонансная фотоионизация ионов изоэлектронных рядов неона и аргона в области нижайших автоионизационных состояний. // Оптика и спектроскопия., 1985 т.59, вып.1., с.17-22.
 13. 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.
 14. Feshbach H. The unified theory of nuclear reactions.//Ann.of Phys., 1958, v.5., p.357-390. Див. також переклад в книзі А.Лейн, Р.Томас. Теория ядерных реакций при низких энергиях. - М. из-во иностр. Лит. 1960. с.315-359.
 15. Feshbach H. The unified theory of nuclear reactions.//Ann.of Phys., 1962, v.19, p.278-312.
 16. Fano U. Effect of configuration interaction on intensities and phase shifts.//Phys.Rev.A., 1961., v.124, N6, p. 1866-1874.
 17. 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.
 18. Фано У., Купер Дж. Спектральное распределение сил осцилляторов в атомах. Современные проблемы физики. – М., из-во “Наука”, 1972, стр.199.
 19. Берк П., Ситон М. Численные решения интегро-дифференциальных уравнений теории столкновений электрона с атомами. Вычислительные методы в физике атомных и молекулярных столкновений. М., “Мир”, 1974, стр.9-81.
 20. Мотт Н., Месси Г. Теория атомных столкновений. – М., из-во “Мир”, 1969, стр.551.
 21. Ланкастер А. Теория матриц. Из-во “Мир”. 1989, 216 с.
 22. Shore R.W. Scattering theory of absorption line-profiles and refractivity.// Rev.Mod.Phys., 1967, v.39,N2,p.439-462.
 23. Siegert A.J. On the derivation of the dispersion formula for nuclear reaction. // Phys.Rev., 1939,v.56,N1,p.750-752.

CONFIGURATION INTERACTION METHOD IN COMPLEX NUMBER REPRESENTATION TO THE PROBLEM OF ATOM IONIZATION BY ELECTRON IMPACT IN THE REGION ABOVE CREATION THRESHOLD OF EXCITED IONS

Zajac T.M.

Department of Theoretical Physics, Uzhgorod National University,

Voloshina St. 32, Uzhgorod, Ukraine, 88000

e-mail: ztn@gaser.uzhgorod.ua

In the framework of Siegert formalism of complex energies the configuration interaction method in complex number representation to the problem of atom ionization by electron impact is formulated. The wave function of the atom ground state is taken many-parametric variational one. The wave functions of the resonant electron scattering on atoms, taking into account the excitation of arbitrary quantity of interacting quasi-stationary states of system "electron + ion", and these states can decay to arbitrary number of open bound channels. Within the method formulated the curves of differential generalized oscillator strengths are parametrized.