

РОЗРАХУНОК ПОЛОЖЕНЬ ТА ШИРИН АВТОІОНІЗАЦІЙНИХ СТАНІВ, ЯКІ ЗБІГАЮТЬСЯ ДО ПОРОГУ $n=3$ АТОМА ГЕЛІЮ МЕТОДОМ ВЗАЄМОДІЮЧИХ КОНФІГУРАЦІЙ В ЗОБРАЖЕННІ КОМПЛЕКСНИХ ЧИСЕЛ

Т.М. Заяць

Ужгородський національний університет, кафедра теоретичної фізики,

88000, Ужгород, вул. Волошина, 32

e-mail: ztm@gaser.uzhgorod.ua

Розраховано положення та ширини синглетних 1S , 1P , 1D , 1F квазістаціонарних станів, що збігаються до порогу $N=3$ атома гелію, методом взаємодіючих конфігурацій в зображенні комплексних чисел, а також в наближеннях, які з даного методу випливають: (метод взаємодіючих конфігурацій в зображенні дійсних чисел; діагоналізаційне наближення; діагоналізаційне наближення в зображенні комплексних чисел). Результати розрахунків порівнюються з розрахунками інших авторів.

1. Вступ

Як було показано в роботах [1-4] метод взаємодіючих конфігурацій в зображенні комплексних чисел дозволяє зробити ряд наближень, які відповідають нехтуванню в матриці

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

(див.[2]) певними елементами:

А) метод взаємодіючих конфігурацій в зображенні комплексних чисел: задача розв'язується з повною матрицею $W_{nm}(E)$.

А1) метод взаємодіючих конфігурацій в зображенні дійсних чисел; (це наближення відповідає нехтуванню в матриці

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

комплексними складовими $i\gamma_{nm}(E)$);

В) діагоналізаційне наближення в зображенні дійсних чисел полягає в тому, що в матриці $W_{nm}(E)$ нехтуємо сумою всіх

недіагональних членів

$$F_{nm}(E) - i\gamma_{nm}(E);$$

В1) діагоналізаційне наближення з урахуванням переходів зовні енергетичної поверхні (або діагоналізаційне наближення в зображенні комплексних чисел) виникає, якщо в розрахунках знехтуємо членом $F_{nm}(E)$.

Як було показано в роботі [3], повні ширини та положення автоіонізаційних станів, отримані у вищевказаних наближеннях суттєво відрізняються. Значення параметрів Фано q та ρ^2 для цих станів розраховані при значенні переданого імпульса $Q=0.1$ а.о.⁻¹ відрізняються ще більше. А це означає, що вид резонансних кривих перерізів сильно залежить від вибору варіанту розрахунку.

2. Положення та ширини АІС

Положення та ширини синглетних 1S , 1P , 1D , 1F отримані в чотирьох варіантах розрахунку:

Результати розрахунків для 5-ти найнижчих автоіонізаційних станів при кожному L подані в таблицях 1-4. Значення параметрів Фано q та ρ^2 для цих станів

приведені при значенні переданого імпульса $Q=0.1$ а.о.⁻¹.

Таблиця 1.

N AIC	E_r , eB	Γ_r , eB	q_{tot}	ρ^2_{tot}	$q_{n=2}$	$\rho^2_{n=2}$	варіант розрахунку
1.	69.323	0.089	5.48	0.19	6.18	0.14	A
2.	70.320	0.180	4.71	0.55	4.06	0.79	
3.	71.371	0.041	2.77	0.31	2.88	0.25	
4.	71.860	0.046	3.66	0.78	3.26	1.00	
5.	72.081	0.018	2.54	0.38	2.93	0.87	
1.	69.324	0.090	5.40	0.18	6.10	0.12	A1
2.	70.308	0.185	4.65	0.52	3.92	0.77	
3.	71.369	0.041	2.60	0.29	2.76	0.23	
4.	71.858	0.044	3.51	0.70	3.12	0.92	
5.	72.062	0.0184	1.98	0.35	2.12	0.28	
1.	69.396	0.083	3.85	0.16	4.50	0.11	B
2.	70.490	0.173	3.88	0.49	3.35	0.69	
3.	71.401	0.041	2.24	0.29	2.33	0.23	
4.	71.910	0.042	3.67	0.55	3.25	0.72	
5.	72.081	0.020	2.12	0.38	2.16	0.33	
1.	69.397	0.082	4.25	0.16	4.84	0.11	B1
2.	70.499	0.166	4.42	0.51	3.84	0.71	
3.	70.406	0.041	2.29	0.30	2.34	0.25	
4.	71.913	0.044	3.48	0.62	3.10	0.79	
5.	72.083	0.021	1.74	0.47	1.71	0.43	

Спектроскопічні характеристики 5-ти найнижчих ¹S резонансів в наближеннях A, A1, B, B1; значення переданого імпульса $Q=0.1$ а.е.⁻¹.

Таблиця 2.

N AIC	E_r , eB	Γ_r , eB	q_{tot}	ρ^2_{tot}	$q_{n=2}$	$\rho^2_{n=2}$	варіант розрахунку
1.	69.865	0.198	0.59	0.07	0.98	0.69	A
2.	71.251	0.001	13.95	10 ⁻⁴	-1.58	0.02	
3.	71.465	0.074	-1.12	0.01	-14.06	10 ⁻⁴	
4.	71.660	0.079	0.43	0.08	0.78	0.77	
5.	71.760	0.0006	5.2	0.018	5.1	0.17	
1.	69.855	0.199	0.33	0.07	0.74	0.72	A1
2.	71.251	0.001	17.90	10 ⁻⁵	-1.82	0.02	
3.	71.463	0.067	-1.79	0.01	-3.61	0.02	
4.	71.661	0.080	0.06	0.07	0.47	0.78	
5.	71.761	0.0006	5.4	0.016	5.24	0.15	
1.	69.918	0.176	0.38	0.07	0.78	0.70	B
2.	71.242	0.001	19.63	10 ⁻⁵	-1.71	0.02	
3.	71.472	0.068	-2.08	0.01	-6.50	10 ⁻³	
4.	71.684	0.060	0.10	0.07	0.50	0.78	
5.	71.759	0.0007	6.0	0.01	5.9	0.099	
1.	69.928	0.165	0.63	0.07	1.01	0.67	B1
2.	71.241	0.001	16.63	10 ⁻⁵	-1.52	0.02	
3.	71.481	0.062	-1.47	0.01	-89.30	10 ⁻⁵	
4.	71.688	0.063	0.46	0.07	0.80	0.75	
5.	71.760	0.0007	6.11	0.011	6.3	0.098	

Спектроскопічні характеристики 5-ти найнижчих ¹P резонансів в наближеннях A, A1, B, B1; значення переданого імпульса $Q=0.1$ а.е.⁻¹.

Таблиця 3.

N AIC	E_r , eB	Γ_r , eB	q_{tot}	ρ_{tot}^2	$q_{n=2}$	$\rho_{n=2}^2$	варіант розрахунку
1.	69.694	0.150	1.40	0.02	8.4	0.001	A
2.	70.540	0.119	-0.42	0.04	1.65	0.16	
3.	71.211	0.011	-1.80	0.24	10.71	0.11	
4.	71.558	0.017	-0.03	0.29	-2.50	0.30	
5.	71.565	0.252	-1.40	0.069	2.7	0.19	
1.	69.685	0.150	1.31	0.010	8.32	0.01	A1
2.	70.543	0.116	-0.40	0.040	1.56	0.12	
3.	71.210	0.011	-1.81	0.200	10.40	0.11	
4.	71.560	0.018	0.06	0.290	-2.12	0.24	
5.	71.564	0.250	-1.45	0.067	2.5	0.19	
1.	69.671	0.151	-2.30	0.02	-2.15	0.14	B
2.	70.504	0.122	-0.95	0.04	0.83	0.10	
3.	71.225	0.011	-2.10	0.96	7.20	0.19	
4.	71.550	0.214	-1.81	0.07	6.50	0.06	
5.	71.560	0.033	2.22	0.11	2.50	0.196	
1.	69.685	0.151	-2.41	0.120	-2.40	0.12	B1
2.	70.521	0.120	-0.92	0.036	0.89	0.12	
3.	71.228	0.010	-2.11	0.802	6.80	0.17	
4.	71.556	0.210	-1.72	0.067	6.00	0.049	
5.	71.560	0.212	2.1	0.096	2.40	0.17	

Спектроскопічні характеристики 5-ти найнижчих 1D резонансів в наближеннях А, А1, В, В1; значення переданого імпульса $Q=0.1$ а.е. $^{-1}$

Таблиця 4.

N AIC	E_r , eB	Γ_r , eB	q_{tot}	ρ_{tot}^2	$q_{n=2}$	$\rho_{n=2}^2$	варіант розрахунку
1.	70.886	0.091	1.25	0.02	1.20	0.62	A
2.	71.479	0.005	3.70	0.001	2.34	0.03	A
3.	71.992	0.024	0.86	0.03	0.09	0.58	
4.	72.135	10.0	2.51	0.03	2.18	0.71	
5.	72.143	0.0035	2.10	0.0096	1.83	0.15	
1.	70.875	0.092	1.09	0.02	1.05	0.64	A1
2.	71.482	0.005	2.57	0.001	2.10	0.03	
3.	71.998	0.024	0.70	0.03	0.74	0.55	
4.	72.135	10.1	2.00	0.03	2.20	0.69	
5.	72.142	0.0035	2.5	0.0095	1.65	0.15	
1.	70.875	0.087	1.07	0.02	1.10	0.65	B
2.	71.480	0.005	2.37	0.001	1.89	0.04	
3.	71.992	0.025	0.68	0.03	0.73	0.59	
4.	72.138	10.0	3.29	0.02	2.66	0.59	
5.	72.145	0.0035	2.02	0.0077	1.75	0.11	
1.	70.888	0.087	1.22	0.02	1.19	0.62	B1
2.	71.482	0.005	2.56	0.001	2.13	0.04	
3.	71.994	0.023	0.84	0.02	0.86	0.57	
4.	72.136	10.2	3.38	0.02	2.70	0.35	
5.	72.143	0.036	1.5	0.012	1.27	0.21	

Спектроскопічні характеристики 5-ти найнижчих 1F резонансів в наближеннях А, А1, В, В1; значення переданого імпульса $Q=0.1$ а.о. $^{-1}$.

Вищевказані параметри були обчислені в інтервалі переданих імпульсів $Q=0.1 \text{ а.о.}^{-1} - Q=5.5 \text{ а.о.}^{-1}$, з кроком $\Delta Q=0.1 \text{ а.о.}^{-1}$. Значення $Q=0.1 \text{ а.о.}^{-1}$ для таблиць 1 - 4 вибрано з метою порівняння параметрів Фано для 1P резонансів з фотоіонізаційною межею, для яких $Q=0$.

Приведемо також порівняння даних результатів з розрахунками положень та ширин АІС, з робіт інших авторів - Таблиця 5. Звернемо увагу на той факт, що більшість авторів приводить невелику кількість автоіонізаційних станів, як правило 2-3 стани. Основна причина полягає в тому, що вищі стани в таких випадках погано ідентифікуються, що підкреслює необхідність пошуку

більш точних та потужних методів для оцінки вкладу автоіонізаційних станів в УСО переходу. Як бачимо з таблиці 5, узгодження з розрахунками інших авторів добре. Методи розрахунків відрізнялись. Так, розрахунок [9,11,14] діагоналізаційне наближення в представленні дійсних чисел, розрахунок [10] - метод сильного зв'язку в диференційному формулюванні з включенням псевдостанів, розрахунок [12] - метод комплексних обертань, розрахунок [13] - метод сильного зв'язку каналів. Різниця в кінцевих результатах розрахунків обумовлена в першу чергу різницею між самими методами обчислень, різницею у виборі базису хвильових функцій дискретних станів АІС, які включаються в розрахунок, різницею у виборі функції основного стану (для задач іонізації), а також іншими причинами.

Таблиця 5.

Резонанс	Даний розрахунок, варіант А	[9]	[10]	[11]	[12]	[13]	[14]
1S	$E=69.34 \text{ eV}$ $\Gamma=0.0886 \text{ eV}$	69.38 0.0828	69.40 0.0825	-	69.39 0.0816	69.39 0.0816	69.37 0.0972
1S	$E=70.32 \text{ eV}$ $\Gamma=0.1795 \text{ eV}$	70.47 0.146	70.41 0.203		70.38 0.181	70.36 0.181	70.47 0.158
1S	$E=71.37 \text{ eV}$ $\Gamma=0.0409 \text{ eV}$						71.38 0.0564
1S	$E=71.86 \text{ eV}$ $\Gamma=0.046 \text{ eV}$						71.89 0.0462
1S	$E=72.05 \text{ eV}$ $\Gamma=0.024 \text{ eV}$						72.061 0.0288
1P	$E=69.86 \text{ eV}$ $\Gamma=0.198 \text{ eV}$	69.90 0.151	69.92 0.204	69.89 0.150	69.87 0.191	69.89 0.189	69.90 0.183
1P	$E=71.24 \text{ eV}$ $\Gamma=0.001 \text{ eV}$			71.22 0.0006	71.31 0.0381		71.23 0.0010
1P	$E=71.46 \text{ eV}$ $\Gamma=0.068 \text{ eV}$						71.46 0.0668
1P	$E=71.67 \text{ eV}$ $\Gamma=0.081 \text{ eV}$						71.67 0.058
1P	$E=71.76 \text{ eV}$ $\Gamma=0.0006 \text{ eV}$						71.74 0.0009
1D	$E=69.69 \text{ eV}$ $\Gamma=0.150 \text{ eV}$	69.65 0.242	69.67 0.154			69.92 0.136	69.65 0.199
1D	$E=70.54 \text{ eV}$ $\Gamma=0.119 \text{ eV}$	70.49 0.115					70.49 0.128
1D	$E=71.21 \text{ eV}$ $\Gamma=0.011 \text{ eV}$						71.20
1D	$E=71.56 \text{ eV}$ $\Gamma=0.017 \text{ eV}$						71.54

3. Висновки.

Таким чином можемо зробити наступні висновки:

1. Метод взаємодіючих конфігурацій в зображенні комплексних чисел враховує всі види взаємодії між резонансами, включаючи зв'язок цих станів через неперервний спектр, а тому дані розрахунки можна відносити до категорії прецезійних.
2. Порівняння з іншими наближеними розрахунками, які впливають з

методу взаємодіючих конфігурацій в зображенні комплексних чисел, дозволяє вказати, яка взаємодія переважає в формуванні того, чи іншого резонансного профілю.

3. Аналіз спектроскопічних характеристик резонансів отриманих в різних наближеннях дає можливість відпрацювати методику оптимізації влучення в розрахунок мінімальної кількості станів, необхідних для забезпечення достатньо точного відтворення резонансного перерізу іонізації

1. Fano U. Effect of configuration interaction on intensities and phase shifts. // *Phys.Rev.A.*, 1961., v.124, N6, p. 1866-1874.
2. 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.
3. 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.
4. 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.
5. 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.
6. 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*, т.50, с.1315-1321.
7. 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.
8. Фано У., Купер Дж. Спектральное распределение сил осцилляторов в атомах. *Современные проблемы физики.* – М., из-во “Наука”, 1972, стр.199.
9. Herrick D.R., Sinanoglu O. Comparison of double excited helium energy levels isoelectronic series; autoionization life time and group theoretical configuration mixing predictions with large-configurations interactions and experimental spectra.// *Phys.Rev.A.*, 1975, N11, p.97-105.
10. Berrington K.A., Burke P.G. Photoionization of He.// *J.Phys.B: Atom. and Mol. Phys.*, 1982, v.15, p.L603-L608.
11. Balashov V.V., Lipovetsky S.S., Senashenko V.S., On the shape of resonance lines in spectra of the electron ejected from atoms by fast particles. // *Phys.Lett.*, 1972, v.40A., p.389-390.
12. Ho Y. Autoionization states of helium isoelectronic sequence below N=3 hydrogenic thresholds.// *J.Phys.B: Atom. and Mol. Phys.*, 1979, v.12, p.387-399.
13. Gallaway J., Wakid S. Two-electron excited states of helium.// *Phys.Lett.A.* 1978, v.66, p.201-203.
14. Лендъел В.И., Навроцкий В.Т., Сабад Е.П. “Теория резонансных явлений в электрон-атомных столкновениях» Львов: Вища школа. Изд-во при Львов. ун-те, 1984.-140ст.

CALCULATION POSITIONS AND WIDTHS AUTOIONISATION STATES, WHICH ARE CONVERGING TO THE N=3 THRESHOLD OF HELIUM BY THE METHOD OF CONFIGURATION INTERACTION IN COMPLEX NUMBER REPRESENTATION

T.M. ZAJAC

Uzhgorod nationality university, department of theoretical,

88000, Uzhgorod, st. Voloshina, 32

e-mail: ztm@gaser.uzhgorod.ua

Positions and widths singlet 1S , 1P , 1D , 1F quasistationary states, which are converged to the $N=3$ threshold of helium, calculated by the method of configuration interaction in complex number representation and in approximations which are following this method: (the method of configuration interaction in real number representation; the diagonal approximation; the diagonal approximation in complex number representation). Result our calculation are compared with results other authors.