

В.М. СИМУЛИК,<sup>1</sup> Т.М. ЗАЯЦЬ,<sup>2</sup> Р.В. ТИМЧИК<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Інститут електронної фізики НАН України, відділ теорії елементарних взаємодій  
(Вул. Університетська, 21, Ужгород 88000; e-mail: vsimulik@gmail.com)

<sup>2</sup> Кафедра електронних систем, Ужгородський національний університет  
(Вул. Капітульна, 13, Ужгород 88000)

<sup>3</sup> Інститут електронної фізики НАН України, відділ електронних процесів  
(Вул. Університетська, 21, Ужгород 88000, Україна)

## ЗАСТОСУВАННЯ МЕТОДУ ВЗАЄМОДІЮЧИХ КОНФІГУРАЦІЙ У ЗОБРАЖЕННІ КОМПЛЕКСНИХ ЧИСЕЛ ДО РОЗРАХУНКІВ СПЕКТРОСКОПІЧНИХ ХАРАКТЕРИСТИК АВТОІОНІЗАЦІЙНИХ СТАНІВ АТОМІВ Be, Mg, Ca

УДК 539.18, 539.184.3

*Метод взаємодіючих конфігурацій у зображенні комплексних чисел, який раніше застосовувався до опису квазістаціонарних станів атому гелію, використовується для розрахунку процесів іонізації більш складних атомних структур. Досліджено спектроскопічні характеристики найнижчих квазістаціонарних станів атомів Be, Mg, Ca в задачі іонізації цих атомів електронним ударом. Виконано розрахунки енергетичних положень та ширин найнижчих  $^1S$ ,  $^1P$ ,  $^1D$ ,  $^1F$  автоіонізаційних станів атомів Be, Mg та найнижчих  $^1P$  автоіонізаційних станів атома Ca.*

*Ключові слова:* автоіонізаційні стани, квазістаціонарні стани, накладання конфігурацій.

### 1. 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 зумовлений 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 структу-

ри у парціальних перерізах фотоіонізації гелію в області вище порога утворення збуджених іонів (точніше, в області між другим та третім порогом, до яких збігаються енергетичні положення АІС у задачі іонізації атома) поставили перед теорією низку 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.

Одним з перших теоретичних методів, на основі яких були отримані результати, що збіглися з експериментальними даними, став метод накладання конфігурацій (або метод взаємодіючих конфігурацій). У прийнятій в даній роботі термінології цей формалізм називається методом взаємодіючих конфігурацій у зображенні дійсних чисел (див. розділ 3 нижче). Суттєвим кроком став метод взаємодіючих конфігурацій у зображенні комплексних чисел (МВКЗКЧ або метод ВКЗКЧ).

© В.М. СИМУЛИК, Т.М. ЗАЯЦЬ, Р.В. ТИМЧИК, 2015

Метод ВКЗКЧ був розроблений в [1–5] і успішно застосований до опису квазістаціонарних станів гелію, які утворюються при його іонізації електронами, в області енергій вище порогу утворення збуджених іонів.

На сучасному етапі розвитку цього методу принциповим кроком є його застосування [6–9] до розрахунку процесів іонізації більш складних атомних структур. Перспективними об'єктами для досліджень, як видно з літератури [10–26], виявляються атоми берилію, магнію, кальцію. У наших роботах МВКЗКЧ застосовано до розрахунків спектроскопічних характеристик АІС атомів Ве, Mg, Са в задачі іонізації цих атомів електронним ударом, зокрема, виконано розрахунки енергетичних положень та ширин найнижчих  $^1S$ ,  $^1P$ ,  $^1D$ ,  $^1F$  АІС атомів Ве, Mg та найнижчих  $^1P$  АІС атому Са.

## 2. Загальна характеристика методу

Метод ВКЗКЧ застосовано для розрахунків енергетичних положень та ширин квазістаціонарних станів у задачі іонізації атомів Ве, Mg, Са електронним ударом. Коротко описано основні положення та формалізм методу.

Метод ВКЗКЧ є точним квантово-механічним методом розрахунку характеристик атомних систем. Даний метод є подальшим розвитком та узагальненням відомого методу взаємодіючих конфігурацій у зображенні дійсних чисел. Представлений метод має переваги у порівнянні зі стандартним методом взаємодіючих конфігурацій у зображенні дійсних чисел та у порівнянні з іншими методами розрахунків енергетичних положень та ширин квазістаціонарних станів атомів. По-перше – це можливість знаходити не лише положення, а і ширини квазістаціонарних станів, по-друге – нові можливості для ідентифікації резонансів. Метод ВКЗКЧ дозволяє на основі результатів розрахунків оцінити внесок кожного резонансного стану в переріз процесу і у випадку застосовності резонансного наближення ввести набір характеристик, що визначають положення і ширини квазістаціонарних станів, а також контури резонансної лінії у перерізах іонізації. Підхід дає можливість також досліджувати застосовність наближених методів оцінки перерізів у конкретних задачах і межі застосування наближених методів. Вказані переваги дають можливість успішно застосовува-

ти МВКЗКЧ не лише до процесів розсіювання, а і до значно складніших процесів іонізації атомів електронами.

Мета даних досліджень полягає в ілюстрації можливостей методу ВКЗКЧ для знаходження спектроскопічних характеристик складних атомів. Для дослідження квазістаціонарних станів вибрано [6–9] багатоелектронні атомні системи – атоми Ве, Mg та Са. Можливості методу проілюстровано на прикладі такого актуального для досліджень процесу, яким є задача іонізації атома електронним ударом [6–9]. Аналіз спектра втрат вибитих електронів дає можливість проводити опосередковане порівняння одержаних результатів з результатами задачі розсіювання. Результати доповідались на міжнародних наукових конференціях [6–9].

## 3. Основні положення методу взаємодіючих конфігурацій у зображенні комплексних чисел у застосуванні до розрахунків процесів іонізації атомів електронним ударом

Наведемо основні положення МВКЗКЧ для дослідження процесів іонізації атомів електронним ударом.

Нехай схема реакції, що розглядається, така:

$$A(n_0L_0S_0) + e^-(\mathbf{k}_0) \rightarrow A^+(nl_1) + e^-(\mathbf{k}_1) + e^-(\mathbf{k}), \quad (1)$$

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

$$\frac{df_{nl_1}}{dE}(Q) = \frac{E}{Q^2} \sum_{lL} |\langle nL_1El | \times \times \sum_{j=1}^n \exp(i\mathbf{Q}\mathbf{r}_i) | n_0L_0S_0 \rangle|^2. \quad (2)$$

У цій формулі  $E = k_0^2 - k^2$  – енергія втрат,  $\mathbf{Q} = \mathbf{k}_0 - \mathbf{k}$  – переданий імпульс,  $|nl_1El : LS_0\rangle$  – хвильова функція атома з повним моментом  $L$  та спіном  $S$  (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 має вигляд  $|n_0LS_0\rangle$ .

Зауважимо, що процес (1) є значно складнішим фізичним явищем у порівнянні з розсіюванням

електрона на атомі. Точні теоретичні розрахунки таких процесів є проблемою сучасної теоретичної фізики. Тому розгляд цієї задачі для багатоелектронних атомів методом ВКЗКЧ є важливим і актуальним науковим кроком.

Вибір хвильової функції основного стану диктується бажаною точністю кінцевих результатів розрахунку. У випадку двоелектронної системи – це багатопараметрична хвильова функція типу функції Гілераасса, а у випадку атомів Be, Mg, Ca – як правило, хвильова функція Хартрі–Фока, отримана в багатоконфігураційному наближенні. Система рівнянь МВКЗКЧ має такий вигляд:

$$(E_n - E)a_{\lambda n}^{Ei} + \sum_{\lambda'} \int_0^\infty b_{\lambda\lambda'}^{Ei}(E')V_{n\lambda'}(E')dE',$$

$$\sum_m a_{\lambda m}^{Ei}V_{m\lambda'}^*(E') + (E' - E)b_{\lambda\lambda'}^{Ei}(E') = 0. \quad (3)$$

Множники  $a_{\lambda m}^{Ei}$  та  $b_{\lambda\lambda'}^{Ei}(E')$  – це коефіцієнти розкладу хвильової функції  $\Psi_\lambda^E(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  за базисом

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

Базисні хвильові функції задовольняють умови:

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

де  $\hat{H}$  – повний гамільтоніан системи.

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

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

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 ВКЗКЧ 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

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

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

Аналіз формул (8), (9) дозволяє порівняти різні наближення, які можна зробити у МВКЗКЧ. Видно, що в межах методу ВКЗКЧ можливі наступні наближення:

1) метод взаємодіючих конфігурацій в зображенні дійсних чисел; (це наближення відповідає нехтуванню в матриці (8) комплексними складовими  $i\gamma_{nm}(E)$ );

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

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

Повне врахування всіх членів матриці (8) – це і є, власне, МВКЗКЧ, переваги якого над переліченими наближеннями очевидні.

Після знаходження власних векторів та власних значень матриці  $W_{nm}(E)$  отримуємо можливість розраховувати положення і ширини квазістаціонарних станів, які знаходяться вище порога утворення збуджених іонів [1–5]. Парціальні амплітуди резонансної іонізації можна визначити таким чином:

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

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

$$t_{\lambda}^{\text{dir}}(E) = \sqrt{C(E)} \langle \lambda E | \hat{t} | 0 \rangle, \quad (11)$$

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

де

$$t_m(E) = \sqrt{C(E)} \langle \tilde{F}_m^E | \hat{t} | 0 \rangle, \quad (12)$$

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

Таким чином, вирази для перерізів параметризуються:

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

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 такий вигляд:

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

Отже, переріз резонансної іонізації визначається набором таких функцій повної енергії:  $\sigma_{\lambda}^{\text{dir}}(E)$ ,  $N_{\alpha m}(E)$ ,  $\varepsilon_m(E)$ ,  $\Gamma_m(E)$  [5]. Детальніше про формалізм методу див. у [5].

#### 4. Іонізація атома Ве електронним ударом в області збудження автоіонізаційних станів

У роботі [8] методом ВКЗКЧ розпочато дослідження іонізації атома Ве електронним ударом в області збудження АІС і проаналізовані спектри втрат. Досліджувалась також фотоіонізація даного атома. Автоіонізаційні стани, які виникають при цьому, можна порівнювати з АІС, що утворюються в задачі розсіяння електронів на відповідному іоні. У розрахунках як базисні конфігурації використано кулонівські хвильові функції. Для кожного терму було враховано до 25 базисних конфігурацій.

Нижче, у табл. 1, наведено результати наших розрахунків енергетичних положень та ширин найнижчих  $^1S$ ,  $^1P$ ,  $^1D$ ,  $^1F$  АІС атома Ве в задачі іонізації цього атома електронним ударом, отриманих у [8] методом ВКЗКЧ. Результати порівнюються з енергіями та ширинами АІС, отриманими в іншій задачі розсіяння [13] електронів на іоні  $\text{Ве}^+$ . Тому таке порівняння є опосередкованим.

Таблиця 1. Енергетичні положення та ширини найнижчих  $^1S$ ,  $^1P$ ,  $^1D$ ,  $^1F$  АІС атома берилію, отриманих у наближенні МВКЗКЧ у задачі іонізації атома електронним ударом, [13] – розрахунок положень автоіонізаційних станів у діагоналізаційному наближенні у задачі розсіяння електронів на іоні  $\text{Ве}^+$

$^1S$	$E$ , eВ	$\Gamma$ , eВ	$E$ , eВ [13]	$\Gamma$ , eВ [13]
$3s^2$	16,42	0,0803	16,40	0,0818
$3p^2$	18,65	0,0110	18,57	0,0116
$3s4s$	18,82	0,0351	18,74	0,0358
$3s5s$	19,48	0,0163	19,45	0,0167
$3s6s$	19,77	0,00869	19,75	0,00884
$3s7s$	19,96	0,00518	19,92	0,00527
$^1P$	$E$ , eВ	$\Gamma$ , eВ	$E$ , eВ [13]	$\Gamma$ , eВ [13]
$3s3p$	17,70	0,157	17,68	0,169
$3s4p$	18,85	0,0318	18,83	0,0321
$3s5p$	19,45	0,00601	19,41	0,0062
$3s6p$	19,73	0,0157	19,68	0,0161
$3p4s$	19,81	0,00328	19,77	0,0033
$3s7p$	19,89	0,0274	19,82	0,0282
$3s8p$	19,95	0,0140	19,93	0,0143
$^1D$	$E$ , eВ	$\Gamma$ , eВ	$E$ , eВ [13]	$\Gamma$ , eВ [13]
$3s3d$	17,62	0,0214	17,56	0,0220
$3p^2$	18,31	0,0224	18,67	0,0230
$3s4d$	19,09	0,0378	19,09	0,0389
$3s5d$	19,60	0,0121	19,56	0,0128
$3d^2$	19,67	0,00789	19,63	0,0796
$3s6d$	19,81	0,00331	19,79	0,0034
$^1F$	$E$ , eВ	$\Gamma$ , eВ	$E$ , eВ [13]	$\Gamma$ , eВ [13]
$3p3d$	18,96	0,0203	18,95	0,0214
$3s4f$	19,43	0,0149	19,43	0,0155
$3s5f$	19,72	0,0070	19,70	0,00717
$3s6f$	19,88	0,0023	19,85	0,00235
$3s7f$	19,95	0,00021	19,94	0,00023
$3s8f$	19,97	0,0019	–	–

Крім того, у табл. 2 для станів  $^1P$ , які знаходяться між першим та другим порогами іонізації атома берилію, приведено порівняння енергетичних положень з різними розрахунками інших авторів [10–15].

У літературі відсутні подібні результати, одержані на основі точних методів розрахунку, зокрема на основі методу взаємодіючих конфігурацій, і тим паче – на основі МКЗКЧ. Проведене порівняння з розрахунками [13] в діагоналізаційному наближенні відповідних положень автоіонізаційних станів у задачі розсіювання електронів на іоні  $Be^+$  (табл. 1), хоча і є лише опосередкованим, оскільки є іншим об'єктом у іншій задачі, але цілком реально свідчить про достовірність одержаних нами результатів.

### 5. Іонізація атома Mg електронним ударом в області збудження автоіонізаційних станів

Дослідження іонізації атома Mg (та іона  $Mg^+$ ) фотонами та електронами є актуальною проблемою, про що свідчать як експериментальні, так і теоретичні роботи багатьох авторів, див., наприклад, публікації [13, 16–23]. Ми розпочали досліджувати методом МКЗКЧ іонізацію атома Mg електронним ударом в області збудження АІС у роботах [6, 7]. Нижче, у табл. 3, наведено результати наших розрахунків енергетичних положень та ширин найнижчих  $^1S, ^1P, ^1D, ^1F$  АІС атома Mg в зада-

чі іонізації атома електронним ударом, отриманих в наближенні МКЗКЧ.

Порівняння наших результатів проведено, поперше, з аналогічними станами, які утворюються в задачі розсіювання електронів на іоні  $Mg^+$  [13],

Таблиця 3. Енергетичні положення та ширини найнижчих  $^1S, ^1P, ^1D, ^1F$  АІС атома Mg, отриманих в наближенні МКЗКЧ в задачі іонізації атома електронним ударом, [13] – розрахунок положень автоіонізаційних станів у діагоналізаційному наближенні у задачі розсіювання електронів на іоні  $Mg^+$

$^1S$	$E, eV$	$\Gamma, eV$	$E, eV$ [13]	$\Gamma, eV$ [13]
$4s^2$	13,08	0,0987	13,06	0,1010
$3d^2$	14,61	0,0480	14,66	0,0502
$4s5s$	14,92	0,0425	14,97	0,0473
$4s6s$	15,48	0,0196	15,53	0,0185
$3d4d$	15,59	0,0140	15,64	0,0129
$4s7s$	15,78	0,0115	15,80	0,0107
$4s8s$	15,80	0,0069	–	–
$^1P$	$E, eV$	$\Gamma, eV$	$E, eV$ [13]	$\Gamma, eV$ [13]
$4s4p$	14,15	0,157	14,18	0,143
$3d4p$	15,01	0,172	14,95	0,162
$4s5p$	15,34	0,0324	15,29	0,0301
$4s6p$	15,68	0,0682	15,64	0,0667
$3d4f$	15,77	0,0481	15,74	0,0448
$4s7p$	15,85	0,0059	15,86	0,0048
$3s8p$	19,95	0,0140	19,93	0,0143
$^1D$	$E, eV$	$\Gamma, eV$	$E, eV$ [13]	$\Gamma, eV$ [13]
$3d4s$	13,62	0,262	13,66	0,272
$3d^2$	14,31	0,253	14,38	0,269
$4d4s$	14,89	0,0192	14,96	0,0189
$3d5s$	15,28	0,0869	15,30	0,0951
$4p^2$	15,47	0,0570	15,49	0,0578
$3d4d$	15,58	0,0865	15,55	0,0876
$4s5d$	15,69	0,0258	15,66	0,0248
$^1F$	$E, eV$	$\Gamma, eV$	$E, eV$ [13]	$\Gamma, eV$ [13]
$3d4p$	14,15	0,0225	14,66	0,0230
$4s4f$	15,01	0,0110	15,28	0,0113
$3d5p$	15,34	0,0540	15,53	0,0589
$3d4f$	15,53	0,0052	15,63	0,0053
$4s5f$	15,68	0,0201	15,71	0,0205
$3d6p$	15,77	0,0104	15,88	0,0109
$4s6f$	15,85	0,0125	15,90	0,0131

Таблиця 2. Порівняння положень АІС атома Be, отриманих методом МКЗКЧ, які знаходяться між першим та другим порогами іонізації цього атома, з результатами інших авторів

$^1P$	$E, eV$	$E, eV$ [10]	$E, eV$ [11]	$E, eV$ [12]
$2p3s$	10,71	10,71	10,93	10,77
$2p3d$	10,84	11,86	11,86	11,86
$2p4s$	12,03	11,97	12,10	12,07
$2p4d$	12,42	12,47	12,50	12,49
$^1P$	$E, eV$	$E, eV$ [13]	$E, eV$ [14]	$E, eV$ [15]
$2p3s$	10,71	10,73	10,63	10,91
$2p3d$	10,84	11,85	12,03	11,83
$2p4s$	12,03	12,09	12,09	12,09
$2p4d$	12,42	12,49	12,61	12,44

див. табл. 3. Оскільки у [13] розглянута інша задача, а саме – задача розсіювання, то таке порівняння є опосередкованим. У роботі [13] розрахунки проведені в діагоналізаційному наближенні. Далі, оскільки в задачі іонізації атома електронним ударом  $^1P$ -стани за енергетичними положеннями повинні збігатися з аналогічними станами в задачі фотоіонізації атома Mg, то для  $^1P$ -станів, по-друге, можемо провести безпосереднє порівняння наших результатів з експериментом [16] та розрахунками методом R-матриці [17]. В табл. 4 розрахунки енергетичних положень та ширин АІС атома магнію, одержані з використанням МВКЗКЧ для  $^1P$ -станів, безпосередньо порівнюються з експериментальними даними роботи [16] та теоретичними даними, одержаними за допомогою R-матричного формалізму [17], а також – з задачею розсіювання електронів на іоні  $Mg^+$  [13].

**Таблиця 4.** Порівняння розрахунків положень та ширин АІС атома магнію, одержаних методом ВКЗКЧ, з експериментом [16] та розрахунками [17] для  $^1P$ -станів ([17] – це задача фотоіонізації, фотоіонізаційна межа, [13] – задача розсіювання)

$^1P$	$E$ , еВ	$\Gamma$ , еВ	$E$ , еВ [13]	$\Gamma$ , еВ [13]
4s4p	14,15	0,157	14,18	0,143
3d4p	15,01	0,172	14,95	0,162
4s5p	15,34	0,0324	15,29	0,0301
3d5p	15,53	0,0775	15,56	0,0758
4s6p	15,68	0,00682	15,64	0,00667
3d4f	15,77	0,0481	15,74	0,0448
4s7p	15,85	0,00592	15,86	0,00476
4s8p	15,90	0,0087	–	–
3d6p	15,93	0,0295	–	–
4s9p	15,95	0,0011	–	–

  

$^1P$	$E$ , еВ	$\Gamma$ , еВ	$E$ , еВ [17]	$\Gamma$ , еВ [17]	$E$ , еВ [16]
4s4p	14,15	0,157	14,2213	0,3921	14,18
3d4p	15,01	0,172	14,9048	0,6078	–
4s5p	15,34	0,0324	15,3133	0,0931	–
3d5p	15,53	0,0775	15,7264	0,0890	15,24
4s6p	15,68	0,00682	15,6653	0,0142	15,61
3d4f	15,77	0,0481	–	–	–
4s7p	15,85	0,00592	15,8675	0,0095	15,83
4s8p	15,90	0,0087	15,9802	0,0111	15,98
3d6p	15,93	0,0295	16,007	0,0417	–
4s9p	15,95	0,0011	16,065	0,0019	16,06

Наведено оригінальні наукові результати, які полягають у розрахунку за допомогою МВКЗКЧ [1–5] енергетичних положень та ширин найнижчих  $^1S$ ,  $^1P$ ,  $^1D$ ,  $^1F$  АІС атома Mg в задачі іонізації цього атома електронним ударом, див. табл. 3. Новизна полягає у застосуванні точного методу розрахунку, яким є метод взаємодіючих конфігурацій, і тим паче – метод ВКЗКЧ. Проведене порівняння з розрахунками в діагоналізаційному наближенні відповідних положень та ширин АІС у задачі розсіювання електронів на іоні  $Mg^+$  (табл. 3), 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 порів-

**Таблиця 5.** Порівняння розрахунків положень та ширин АІС атома кальцію, одержаних методом ВКЗКЧ, з теоретичними результатами інших авторів та з експериментом [24]

$^1P$	$E$ , еВ	$E$ , еВ [24]	$E$ , еВ [25]	$E$ , еВ [26]
3d5p	6,601	6,59	6,604	6,633
3d6p	7,033	7,02	7,038	7,080
3d7p	7,397	7,39	7,342	7,415
3d8p	7,465	7,47	7,471	7,502
3d9p	7,551	–	7,556	7,575
3d10p	7,610	–	7,614	7,624
4p5s	7,159	7,13	7,166	7,300
3d4f	6,937	–	6,938	6,960
3d5f	7,240	7,25	7,248	7,260
3d6f	7,425	–	7,427	7,427
3d7f	7,523	–	7,529	7,527
3d8f	7,591	–	7,596	7,593

  

$^1P$	$\Gamma$ , еВ	$\Gamma$ , еВ [24]	$\Gamma$ , еВ [25]	$\Gamma$ , еВ [26]
3d5p	0,0801	0,21	0,0702	0,0846
3d6p	0,0059	0,17	0,0056	0,0067
3d7p	0,0451	–	0,0509	0,0399
3d8p	0,0261	0,14	0,0232	0,0315
3d9p	0,0163	–	0,0141	0,0282
3d10p	0,0140	–	0,0101	0,0207
4p5s	0,0129	0,15	0,0139	0,0132
3d4f	0,00006	–	0,000004	0,00001
3d5f	0,0059	–	0,0028	0,00003
3d6f	0,0019	0,17	0,0014	0,0024
3d7f	0,0009	–	0,0011	0,00007
3d8f	0,00007	–	0,00008	0,00006

няна з експериментом та R-матричним розрахунком, див. табл. 4. Результати розрахунків, проведених МВКЗКЧ, знаходяться в хорошому узгодженні з відповідними розрахунками R-матричним методом [17] та експериментальними результатами [16], див. табл. 4.

## 6. Іонізація атома Са електронним ударом в області збудження автоіонізаційних станів

Застосування методу ВКЗКЧ до розрахунків найнижчих АІС атома кальцію започатковано у [9]. Розраховано енергетичні положення та ширини найнижчих  $^1P$  станів. Результати порівняно з даними, одержаними іншими авторами. Нижче у табл. 5, окрім наших розрахунків [9], представлено експериментальні дані [24] та теоретичні розрахунки [25, 26]. Аналіз одержаних результатів показує, що можливо дотримуватись класифікації АІС, яка запропонована у [25].

Результати наших обчислень добре узгоджуються з теоретичними даними, одержаними іншими авторами.

## 7. Висновки

Метод взаємодіючих конфігурацій у зображенні комплексних чисел, який раніше застосовувався до опису квазістаціонарних станів атома гелію, застосовано для розрахунку процесів іонізації більш складних атомних систем. Досліджено спектроскопічні характеристики найнижчих АІС атомів Ве, Mg, Са в задачі іонізації цих атомів електронним ударом. Виконано розрахунки енергетичних положень та ширин найнижчих  $^1S$ ,  $^1P$ ,  $^1D$ ,  $^1F$  автоіонізаційних станів атомів Ве, Mg та найнижчих  $^1P$  автоіонізаційних станів атома Са. Результати розрахунків порівняно з відомими експериментальними даними та розрахунками на основі інших методів. На цій основі робиться висновок про успішну апробацію методу для розрахунків автоіонізаційних станів багатоелектронних атомів та процесів іонізації і збудження атомів електронами.

1. S.M. Burkov, N.A. Letyaev, S.I. Strakhova, and T.M. Zajac *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **21**, 1195 (1988).
2. С.М. Бурков, Т.М. Заяць, С.І. Страхова, *Оптика и спектроскопия* **63**, 17 (1988).
3. S.M. Burkov, S.I. Strakhova, and T.M. Zajac, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **23**, 3677 (1990).

4. Т.М. Заяць, *Науковий вісник УжНУ. Сер. Фізика.* **11**, 72 (2002).
5. T.M. Zajac and V.M. Simulik, *Internat. Journ. Pure and Appl. Phys.* **2**, 231 (2006).
6. T. Zajac, A. Opachko, V. Simulik, and R. Tymchyk, *Book of abstracts of 41-th EGAS Conference, University of Gdansk* (Gdansk, Poland, 2009).
7. R. Tymchyk, T. Zajac, V. Simulik, and A. Opachko, *Abstracts of 10-th European Conference on Atoms Molecules and Photons* (Salamanca, Spain, 2010).
8. A.I. Opachko, V.M. Simulik, R.V. Tymchyk, and T.M. Zajac, *Book of abstracts of 43-th EGAS Conference, University of Fribourg* (Fribourg, Switzerland, 2011).
9. V.M. Simulik, R.V. Tymchyk, and T.M. Zajac, *Abstracts of the 44-th Conference of the European Group on Atomic Systems, University of Gothenburg* (Gothenburg, Sweden, 2012).
10. G. Mehlman-Ballofet and J.M. Esteva, *Astrophys. Journ.* **157**, 945–956 (1969).
11. J.M. Esteva, G. Mehlman-Ballofet, and J. Romand, *J. Quant. Spectrosc. Rad. Transf.* **12**, 1291 (1972).
12. P.L. Altic, *Phys. Rev. V* **169**, 21 (1968).
13. V.I. Lengyel, V.T. Navrotsky, and E.P. Sabad, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **23**, 2847 (1990).
14. H.C. Chi, K.N. Huang, and K.T. Cheng, *Phys. Rev. A* **43**, 2542 (1991).
15. D.S. Kim, S.S. Tayal, H.L. Zhou, and S.T. Manson, *Phys. Rev. A* **61**, 062701 (2000).
16. M.A. Baig and J.P. Connerade, *Proc. Roy. Soc. Lond. A* **364**, 353 (1978).
17. D.S. Kim and S.S. Tayal, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **33**, 3235 (2000).
18. Y.L. Shao, C. Fotakis, and D. Charalambidis, *Phys. Rev. A* **48**, 3636 (1993).
19. M.J. Ford, B. El-Marji, J.P. Doering, J.H. Moore, M.A. Coplan, and J.W. Cooper, *Phys. Rev. A* **57**, 325 (1998).
20. K. Bartschat, D. Weflen, and X. Guan, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **40**, 3231 (2007).
21. T.K. Fang and Y.K. Ho, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **32**, 3863 (1999).
22. A. Reber, F. Martin, H. Bachau, and R.S. Berry, *Phys. Rev. A* **65**, 063413(1–7) (2002).
23. A. Reber, F. Martin, H. Bachau, and R.S. Berry, *Phys. Rev. A* **68**, 063401(1–10)(2003).
24. J.E. Kontrosh, I.V. Chernyshova, and O.B. Shpenik, *Optics and Spectroscopy.* **110**, 500 (2011).
25. O.I. Zatsarinny, V.I. Lengyel, and E.A. Masalovich, *Phys. Rev. A* **44**, 7343 (1991).
26. P. Scott, A.E. Kingston, and A. Hibbert, *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **16**, 3945 (1983).

Одержано 27.04.15

*В.М. Симулик, Т.М. Заяц, Р.В. Тимчук*

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА  
ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИХ КОНФИГУРАЦИЙ  
В ПРЕДСТАВЛЕНИИ КОМПЛЕКСНЫХ ЧИСЕЛ  
К РАСЧЕТАМ СПЕКТРОСКОПИЧЕСКИХ  
ХАРАКТЕРИСТИК АВТОИОНИЗАЦИОННЫХ  
СОСТОЯНИЙ АТОМОВ Be, Mg, Ca

Резюме

Метод взаимодействующих конфигураций в представлении комплексных чисел, который ранее применялся к описанию квазистационарных состояний атома гелия, используется для расчета процессов ионизации более сложных атомных структур. Исследованы спектроскопические характеристики нижайших квазистационарных состояний атомов Be, Mg, Ca в задаче ионизации этих атомов электронным ударом. Выполнены расчеты энергетических положений и ширин нижайших  $^1S, ^1P, ^1D, ^1F$  автоионизационных состояний атомов Be, Mg и нижайших  $^1P$  автоионизационных состояний атома Ca.

*V.M. Simulik, T.M. Zayac, R.V. Tymchuk*

APPLICATION OF THE METHOD  
OF INTERACTING CONFIGURATIONS  
IN THE COMPLEX NUMBER REPRESENTATION  
TO CALCULATING THE SPECTROSCOPIC  
CHARACTERISTICS OF THE AUTOIONIZING  
STATES OF Be, Mg, AND Ca ATOMS

S u m m a r y

The method of interacting configurations in the complex number representation, which was earlier applied to describe helium quasistationary states, has been used for the calculation of ionization processes in more complicated atomic systems. The spectroscopic characteristics of the lowest quasistationary states of the Be, Mg, and Ca atoms in the problem of the electron impact ionization of these atoms are investigated. The energies and the widths of the lowest  $^1S, ^1P, ^1D$ , and  $^1F$  autoionizing states of Be and Mg atoms, and the lowest  $^1P$  autoionizing state of a Ca one are calculated.