

## НОВЫЙ МЕТОД РАСЧЕТА ШИРИНЫ АВТОИОНИЗАЦИОННЫХ СОСТОЯНИЙ ПРИ РАССЕЯНИИ ЭЛЕКТРОНОВ НА МНОГОЭЛЕКТРОННЫХ ИОНАХ

А. А. Садовой, А. С. Ульянов  
РФЯЦ-ВНИИЭФ

С использованием формализма функции Грина дан вывод интегрального уравнения Шредингера, описывающего рассеяние электронов на многоэлектронных ионах. С использованием "диагонализационного" приближения в квадратичном по взаимодействию приближении получено аналитическое выражение для резонансной части амплитуды рассеяния. На основе ее анализа получено аналитическое выражение для ширины автоионизационных состояний. Развита техника расчета многоэлектронных матричных элементов с включенными волновыми функциями непрерывного спектра рассеиваемого электрона, входящих в аналитические формулы для ширины и смещения резонанса. Аналитически исследована роль обменных эффектов при рассеянии электронов на многоэлектронных ионах, для чего волновые функции компанд-состояния рассчитывались методом многомерных угловых кулоновских функций, обеспечивающим высокое качество волновой функции.

Представлены в качестве примера развитого формализма результаты численных расчетов ширины  $2^1P$  резонанса в рассеянии электрона на водородоподобном ионе гелия.

### Введение

Данные об элементарных процессах, происходящих при столкновении электронов с ионами и нейтральными атомами, находят широкое применение в современной физике и новой технике: в физике плазмы, лазерной технике, термоядерных исследованиях, квантовой химии, астрофизике, физике ядерных реакций с тяжелыми ионами и др. Один из способов накачки газовых лазеров базируется на процессах возбуждения атомов и ионов электронным ударом. В астрофизике многие наблюдаемые эмиссионные линии связаны с возбуждением положительно заряженных ионов электронным ударом. Во всех этих процессах важную роль играют автоионизационные состояния (АИС), т. е. квазистационарные состояния в системе налетающий электрон – мишень. Эти состояния являются атомными аналогами компанд-состояний в ядерной физике.

В результате столкновений ионов с атомами в плазме происходит возбуждение АИС многозарядных ионов, что влияет на энергетический баланс плазмы. Кроме того, эти процессы используются для диагностики параметров плазмы. Первым экспериментально зарегистрированным около 40 лет назад был  $S$ -резонанс при упругом рассеянии электронов на гелии, который был обнаружен на 0,5 эВ ниже порога  $2S$  гелия [1]. Широкие экспериментальные исследования резонансных явлений при рассеянии электронов на многоэлектронных ионах начались в 60-х годах прошлого столетия. Последнее

было обусловлено достижением разрешающей способности электростатических анализаторов в несколько десятков милливольт при токах измерения  $\sim 10(-7)$  А и появлением источников излучения непрерывного спектра, синхротронного излучению ускорителей.

Теоретическое осмысление экспериментальных данных началось с работы Уго Фано [2], в которой было показано, что интерференция дискретного АИС с прилегающим континуумом приводит к резонансам в сечениях упругого рассеяния и возбуждения. Однако проведение теоретических исследований было связано с выполнением большого объема вычислений. Поэтому доведение теоретических работ до конкретного смысла стало возможным лишь с появлением современных быстроедействующих ЭВМ. Однако и до последнего времени при теоретическом описании резонансных явлений при рассеянии электронов на ионах используются многочисленные приближения, часто трудно контролируемые. Поэтому представляются целесообразными поиски новых методов теоретического описания резонансных явлений при рассеянии электронов на многозарядных ионах, базирующихся на многоэлектронной теории атома. В данной работе предложен новый метод расчета ширин автоионизационных состояний и приведены результаты методических численных расчетов.

За плодотворные обсуждения различных результатов работы авторы выражают благодарность Жмайло В. А., Рыбаченко В. Ф., Дзюбе Б. М., Повышеву В. М.

# 1. Интегральное уравнение для рассеяния электронов и его решение

Для описания двухчастичных каналов рассеяния будем исходить из уравнения Шредингера

$$\{H_1 + H_2 + V - E\} \Psi = 0, \quad (1.1)$$

где  $H_1$  и  $H_2$  – гамильтонианы сталкивающихся частиц;  $V$  – потенциальная энергия взаимодействия этих же частиц;  $E$  – полная энергия всей системы. Если определить следующим образом функцию Грина этих частиц без взаимодействия

$$(H_1 + H_2 - E)G_0 = I, \quad (1.2)$$

то можно переписать исходное уравнение Шредингера в интегральной форме уравнения Липмана – Швингера

$$\Psi = \Psi_0 - G_0 V \Psi. \quad (1.3)$$

Если считать взаимодействие малым, то, используя связь

$$G_0 = G + G_0 V G, \quad (1.4)$$

можно получить приближенное выражение для волновой функции (ВФ)  $\Psi$

$$\Psi \approx \Psi_0 - G V \Psi. \quad (1.5)$$

Решая уравнение (1.3) методом итераций, подставляя в правую часть его выражение (1.5), получим следующее интегральное уравнение Шредингера:

$$\Psi \approx \Psi_0 - G_0 V (\Psi_0 - G V \Psi). \quad (1.6)$$

Для описания резонансного рассеяния электронов рассмотрим некоторые решения данного уравнения, с этой целью воспользуемся спектральным представлением функции Грина системы

$$G(A, A') = \sum_{\lambda} \frac{\Phi_{\lambda}(A) \Phi_{\lambda}(A')}{E_{\lambda} - E}, \quad (1.7)$$

где  $\Phi_{\lambda}$  – ВФ АИС. Отметим, что суммирование в последней формуле подразумевает и интегрирование по непрерывному спектру. Подставим выражение (1.7) в (1.6) и перепишем в виде

$$\Psi = J_0 + G_0 V \sum_{\lambda} \Phi_{\lambda} \frac{C_{\lambda}}{E_{\lambda} - E}, \quad (1.8)$$

где введены следующие обозначения:

$$C_{\lambda} = \langle \Phi_{\lambda} V \Psi \rangle, \quad J_0 = \Psi_0 - G_0 V \Psi_0. \quad (1.9)$$

После подстановки (1.8) в выражение для  $C_{\lambda}$  в (1.9) получим систему алгебраических уравнений для неизвестных коэффициентов

$$C_{\lambda} = \langle \Phi_{\lambda} V J_0 \rangle + \sum_{\lambda'} C_{\lambda'} \frac{\langle \Phi_{\lambda} V G_0 V \Phi_{\lambda'} \rangle}{E_{\lambda'} - E}. \quad (1.10)$$

Далее воспользуемся приближенным решением этой системы, которое назовем “диагонализационным” [3]. Это решение получается, если пренебречь недиагональными членами в рассматриваемой системе алгебраических уравнений, что позволяет приближенно записать

$$C_{\lambda} \approx \langle \Phi_{\lambda} V J_0 \rangle \left\{ 1 + \frac{\langle \Phi_{\lambda} V G_0 V \Phi_{\lambda} \rangle}{E_{\lambda} - E} \right\}^{-1}. \quad (1.11)$$

Следует отметить, что диагонализационное приближение справедливо при малых энергиях налетающего электрона, когда можно пренебречь связью каналов.

В итоге, подставляя (1.11) в (1.8) и используя (1.9), получим представление для ВФ всей системы

$$\Psi = \Psi_0 - G_0 V \Psi_0 + \sum_{\lambda} \frac{\langle G_0 V \Phi_{\lambda} \rangle \langle \Phi_{\lambda} V J_0 \rangle}{E_{\lambda} - E - \langle \Phi_{\lambda} V G_0 V \Phi_{\lambda} \rangle}. \quad (1.12)$$

Первое слагаемое в этой формуле соответствует потенциальному рассеянию, второе – борн-кулоновскому рассеянию [4], третье слагаемое описывает резонансные эффекты.

Для последующих расчетов амплитуд рассеяния, положения и ширины компаунд-резонанса необходимо получить явный вид асимптотики функции Грина.

Функция Грина для совокупности невзаимодействующих систем определяется уравнением

$$\left( H(\vec{\xi}) + H(\vec{r}) - E \right) G(\vec{\xi}, \vec{r}; \vec{\xi}', \vec{r}') = \delta_{\lambda\lambda'} \delta(\vec{r} - \vec{r}'). \quad (1.13)$$

Для ее нахождения воспользуемся полнотой системы функций соответствующего уравнения

$$\left( H(\vec{\xi}) + H(\vec{r}) - E \right) \Phi_\lambda(\vec{\xi}, \vec{r}) = 0, \quad (1.14)$$

решение которого можно искать в виде

$$\Phi_\lambda(\vec{\xi}, \vec{r}) = \varphi_\lambda(\vec{\xi}) \Psi_k(\vec{r}), \quad (1.15)$$

где  $\varphi_\lambda$  – ВФ мишени;  $\Psi_k$  – ВФ налетающего электрона. Учитывая определение ВФ мишени

$$\left( H(\vec{\xi}) - \varepsilon_\lambda \right) \varphi(\vec{\xi}) = 0, \quad (1.16)$$

последнее уравнение можно преобразовать к виду

$$\left( H(\vec{r}) - E + \varepsilon_\lambda \right) \Psi_k(\vec{r}) \varphi_\lambda(\vec{\xi}) = 0. \quad (1.17)$$

Уравнение непрерывного спектра имеет два линейно независимых решения, одно удовлетворяет условию конечности в нуле, а второе имеет расходящуюся волну на бесконечности. Следовательно, в соответствии с определением функции Грина можно записать

$$G(\vec{\xi}, \vec{r}; \vec{\xi}', \vec{r}') = \begin{cases} -\sum_{\lambda} \frac{1}{k_\lambda} \varphi_\lambda(\vec{\xi}) u_k(\vec{r}) \varphi_\lambda(\vec{\xi}') v_k(\vec{r}') & \text{при } r < r'; \\ -\sum_{\lambda} \frac{1}{k_\lambda} \varphi_\lambda(\vec{\xi}) v_k(\vec{r}) \varphi_\lambda(\vec{\xi}') u_k(\vec{r}') & \text{при } r > r'. \end{cases} \quad (1.18)$$

При наличии кулоновского взаимодействия для построения функции Грина необходимо использовать решения радиального уравнения Шредингера с асимптотиками

$$u_l(r) \sim \sin\left(kr - \frac{\pi l}{2} + \frac{1}{k} \ln 2kr + \delta_l\right); \quad (1.19)$$

$$v_l(r) \sim \cos\left(kr - \frac{\pi l}{2} + \frac{1}{k} \ln 2kr + \delta_l\right), \quad (1.20)$$

где  $\delta_l$  – кулоновская фаза. Используя приведенные функции, для радиальной части функции Грина можно записать выражение

$$g_{kl}(r, r') = \begin{cases} -\frac{1}{k} [u_l(kr) v_l(kr') + i u_l(kr) u_l(kr')], & r \leq r'; \\ -\frac{1}{k} [u_l(kr') v_l(kr) + i u_l(kr) u_l(kr')], & r \geq r', \end{cases} \quad (1.21)$$

где радиальная часть функции Грина  $g_{kl}(r, r')$  определяется из выражения

$$G(\vec{r}, \vec{r}') = \sum_{lm} \frac{g_l(r, r')}{rr'} Y_{lm}(\Omega) Y_{lm}^*(\Omega). \quad (1.22)$$

Для нахождения асимптотики радиальной части функции Грина при  $r > r'$ , исходя из приведенного выше выражения, можно записать

$$g_{kl}(r, r') = -\frac{1}{k} u_l(kr') [v_l(kr) + i u_l(kr)] = -\frac{1}{k} e^{i\left(kr + \frac{1}{k} \ln 2kr - \frac{\pi l}{2} + \delta_l\right)} u_l(kr'). \quad (1.23)$$

При выводе последнего выражения использована формула Муавра и асимптотические формулы для регулярного и нерегулярного решений кулоновской задачи. Если далее учесть явный вид полной функции Грина, то можно получить

$$G(r, r') = \frac{1}{kr} e^{i\left(kr + \frac{1}{k} \ln 2kr\right)} \sum_{lm} Y_{lm}(\Omega) Y_{lm}^*(\Omega') e^{i\delta_l - \frac{\pi l}{2}} \frac{u_l(kr')}{r'}. \quad (1.24)$$

Теорема сложения сферических функций позволяет упростить это выражение

$$G(\vec{r}, \vec{r}') = -\frac{1}{kr} e^{i\left(kr + \frac{1}{k} \ln 2kr\right)} \sum_{l=0}^{\infty} (-i)^l e^{i\delta_l} \frac{2l+1}{4\pi} P_l\left(\frac{\vec{r}\vec{r}'}{rr'}\right) \frac{u_l(kr')}{r'}. \quad (1.25)$$

Принимая во внимание определение ВФ непрерывного спектра

$$\Psi_k^-(\vec{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} (-i)^l e^{i\delta_l} \frac{2l+1}{4\pi} P_l\left(\frac{\vec{r}\vec{r}'}{rr'}\right) \frac{u_l(kr)}{kr}, \quad (1.26)$$

последнее выражение для асимптотики функции Грина можно записать так

$$G(\vec{r}, \vec{r}') = -\frac{1}{r} e^{i\left(kr + \frac{1}{k} \ln 2kr\right)} \left(\Psi_k^-(\vec{r}')\right)^*. \quad (1.27)$$

## 2. Возбуждение $2^1P$ резонанса при упругом рассеянии электрона на водородоподобном гелии

ВФ компаунд-состояния  $\text{He}^+ + e^-$  является решением уравнения Шредингера

$$\left\{ -\frac{\hbar}{2m} (\Delta_1 + \Delta_2) - \frac{Ze^2}{r_1} - \frac{Ze^2}{r_2} + \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} - E \right\} \Phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \mu_1, \mu_2) = 0. \quad (2.1)$$

Будем искать решение этого уравнения в рамках метода многомерных угловых кулоновских функций МУКФ [5] в виде ряда по амплитудам  $X_{K_V}(\rho)$

$$\Phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \mu_1, \mu_2) = \sum_{K_V} \frac{X_{K_V}(\rho)}{\rho^{\frac{5}{2}}} U_{K_V}(\Omega, \mu), \quad (2.2)$$

где многомерные угловые функции  $U_{K_V}(\Omega, \mu)$  определяются так

$$U_{K_V}(\Omega) = \sum_{j_z} \langle j_1 j_{z1} j_2 j_{z2} | J J_z \rangle \sum_{i=1}^j \sqrt{\frac{\Gamma(2K_i + 6)}{2}} \frac{1}{\rho^{K_i}} \begin{vmatrix} \varphi_{\omega_1}(1) & \varphi_{\omega_1}(2) \\ \varphi_{\omega_2}(1) & \varphi_{\omega_2}(2) \end{vmatrix}, \quad (2.3)$$

где  $\rho = r_1 + r_2$  – коллективная переменная;  $\varphi_{\omega_i}(k) \equiv \varphi_{n_i l_i j_i j_{z_i}}(\vec{r}_k) = \frac{r_k^{n_i}}{\sqrt{\Gamma(2n_i + 2l_i + 3)}} \sum_{m_i} \langle l_i m_i \frac{1}{2} \mu_i | j_i j_{z_i} \rangle Y_{l_i m_i}(\vec{r}_k) \chi_{\frac{1}{2} \mu_i}$

базисные функции;  $Y_{l_i m_i}(\vec{r}) = r^{l_i} Y_{l_i m_i}(\Omega)$ ;  $K_i$  – степень полинома  $P(\varphi_{\omega_i}(\vec{r}_k)) = \begin{vmatrix} \varphi_{\omega_1}(1) & \varphi_{\omega_1}(2) \\ \varphi_{\omega_2}(1) & \varphi_{\omega_2}(2) \end{vmatrix}$ .

Из анализа угловой части МЭ можно найти допустимые значения углового момента налетающего электрона, обеспечивающего формирование компаунд-состояния с заданным моментом.

Ниже будет рассмотрено возбуждение  $2^1P$  резонанса при рассеянии электрона на водородоподобном гелии. Для этого состояния двухчастичные квантовые числа равны  $S = 0$   $L = 1$   $J = 1$ .

Исходя из правил отбора, следует, что для орбитального момента  $l$  и полного механического момента  $j_3$  налетающего электрона допустимо только

$$l = 1, \quad j_3 = \frac{1}{2}. \quad (2.4)$$

Основное состояние водородоподобного иона гелия – это  $1S$  с энергией  $E_0 = 2$  ат.ед. Расчетное значение энергии связи компаунд-состояния  $2^1P$   $E_\lambda \approx -1,692$  ат. ед. = 46 эВ [5]. Следует отметить, что это значение с точностью до сотых долей процента согласуется с данными, приведенными в [6]. Следовательно, возбуждение этого резонанса возможно при энергии налетающего электрона

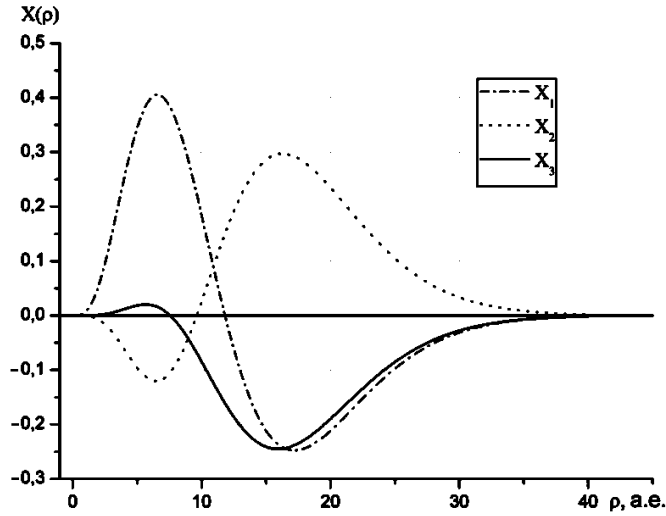
$$\varepsilon = \frac{2m}{\hbar^2} k_0^2 = E_\lambda - E_0 = 8,2 \text{ эВ}. \quad (2.5)$$

Волновое число рассеиваемого электрона (в ат. ед.)

$$k = \frac{Z}{\sqrt{2\varepsilon}}. \quad (2.6)$$

В разложении ВФ компаунд-состояния (2.2) будем учитывать первые три амплитуды  $X_{K_V}$  разложения, причем амплитуде  $X_1$  соответствует одночастичное возбуждение  $1s \rightarrow 1p$ , амплитуде  $X_2$  – двухчастичное возбуждение  $1s \rightarrow 1p, 1s \rightarrow 2s$ , амплитуде  $X_3$  – двухчастичное возбуждение  $1s \rightarrow 2s, 1s \rightarrow 2p$ . Решая систему дифференци-

альных уравнений 2-го порядка для указанных амплитуд разложения ВФ компаунд-состояния, получим вид этих амплитуд (см. рисунок).



Амплитуды разложения ВФ компаунд-состояния  $2^1P^-$

### 3. Метод расчета ширины резонанса компаунд-состояния

Для нахождения выражения для ширины резонанса компаунд-состояния необходимо найти явный вид асимптотики третьего слагаемого знаменателя ВФ системы

$$\Psi = J_0 + \frac{\langle G_0 V \Phi_\lambda | \Phi_\lambda V \Psi_0 \rangle}{E - E_\lambda - \langle \Phi_\lambda V G_0 V \Phi_\lambda \rangle}, \quad (3.1)$$

где оператор потенциальной энергии равен

$$V = \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} - \frac{e^2}{r_1}. \quad (3.2)$$

Учитывая явный вид многочастичной функции Грина, можно записать

$$\frac{\Gamma}{2} = \langle \Phi_\lambda V | \text{Im } G_0 | V \Phi_\lambda \rangle = \frac{1}{k} \sum_{lm} \langle \Phi_\lambda V \varphi(1) v_{lm}(2) \rangle \langle \varphi(1) v_{lm}(2) V \Phi_\lambda \rangle = \frac{1}{k} \sum_{lm} |M_2^{lm}|^2, \quad (3.3)$$

где определен характерный многоэлектронный матричный элемент

$$M_2^{lm} = \langle \Phi_\lambda V \varphi(1) v_{lm}(2) \rangle. \quad (3.4)$$

Как уже упоминалось, при возбуждении  $2^1P$  резонанса в рассеянии электрона на водородоподобном гелии допустимо одно значение  $l = 1$ . Следовательно, в этом случае

$$\frac{\Gamma}{2} = \frac{1}{k} |M_2^{l=1}|^2. \quad (3.5)$$

Для упрощения численных расчетов ширины компаунд-резонанса рассмотрим следующий матричный элемент:

$$M_l = \sum_{m\mu_3 j_{z1}} \left\langle j_1 j_{z1} \frac{1}{2} \mu_3 \left| J J_z \right. \right\rangle \left\langle l m \frac{1}{2} \mu_3 \left| j_3 j_{z3} \right. \right\rangle \int_0^\infty \int_0^\infty \frac{u_l(kr_2)}{r_2} Y_{lm}(\Omega_2) \varphi(\vec{r}_1) \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \Phi_\lambda(\vec{r}_1, \vec{r}_2) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2, \quad (3.6)$$

где  $l$  – орбитальный момент налетающего электрона;  $m$  – проекция этого момента на выделенное направление;  $\frac{1}{2}$  и  $\mu_3$  – спин и его проекция соответственно;  $j_3, j_{z3}$  – полный механический момент и его проекция. Непосредственное интегрирование при замене переменных

$$r = r_1 + r_2, \quad r_1 = r \sin \theta, \quad r_2 = r(1 - \sin \theta) \quad (3.7)$$

дает следующее выражение для матричного элемента  $M_l$  :

$$M_l = \frac{(2Z)^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{2}} \sum_{K_\nu i=1}^j \Delta_{K_\nu i} \sqrt{\frac{\Gamma(2K_i+6)}{2}} \sqrt{\frac{\Gamma(n_1+1)\Gamma(n_2+1)}{\Gamma(n_1+2l_1+3)\Gamma(n_2+2l_2+3)}} \sum_{p_1=0}^{m_1} \beta_{n_1 l_1}^{p_1} \sum_{p_2=0}^{n_2} \beta_{n_2 l_2}^{p_2} \left( Y^d H_{l p_1 p_2}^d - Y^{ex} H_{l p_1 p_2}^{ex} \right), \quad (3.8)$$

где  $Y^d$  и  $Y^{ex}$  – угловые части МЭ для прямого и обменного взаимодействий соответственно;  $\Delta_{K_\nu i}$ ,  $\beta_{nl}^p$  – численные коэффициенты, полученные в результате перехода к ортонормированному базису многомерных угловых функций (см. [5]).

При вычислении данного матричного элемента столкнемся с двумя различными случаями. Рассмотрим сначала случай, когда  $K_i - l_1 - p_2 - l_2 - p_2 > 0$ . Тогда, сделав замену переменных  $\sin \theta = x$ ,  $y = \frac{r}{\rho}$ , получим

$$H_{l p_1 p_2}^d = \frac{1}{\Gamma(K_i - p_1 - p_2 - l_1 - l_2)} \int_0^\infty X_{K_\nu}(\rho) \rho^2 d\rho \int_0^1 dy (1-y)^{K_i - p_1 - p_2 - l_1 - l_2 - 1} y^{p_1 + p_2 + l_1 + l_2 + 3} \times \left[ \int_0^{\frac{1}{2}} e^{-Zrx} U_l(kr(1-x)) x^{2l_1 + p_1 + 2} (1-x)^{p_2 + l_2 - l_1} dx + \int_0^1 e^{-Zrx} U_l(kr(1-x)) x^{p_1 + 1} (1-x)^{l_1 + p_2 + l_2 + 1} dx \right]. \quad (3.9)$$

Если же  $K_i - l_1 - p_2 - l_2 - p_2 = 0$ , то выражение для  $H_{l p_1 p_2}^d$  выглядеть будет так

$$H_{l p_1 p_2}^d = \int_0^\infty X_{K_\nu}(\rho) \rho^2 d\rho \times \left[ \int_0^{\frac{1}{2}} e^{-Zrx} U_l(kr(1-x)) x^{2l_1 + p_1 + 2} (1-x)^{p_2 + l_2 - l_1} dx + \int_0^1 e^{-Zrx} U_l(kr(1-x)) x^{p_1 + 1} (1-x)^{l_1 + p_2 + l_2 + 1} dx \right], \quad (3.10)$$

Сделав аналогичные вычисления для слагаемых, отвечающих обменному взаимодействию, получим выражения для  $H_{l p_1 p_2}^{ex}$

$$H_{l p_1 p_2}^{ex} = \frac{1}{\Gamma(K_i - p_1 - p_2 - l_1 - l_2)} \int_0^\infty X_{K_\nu}(\rho) \rho^2 d\rho \int_0^1 dy (1-y)^{K_i - p_1 - p_2 - l_1 - l_2 - 1} y^{p_1 + p_2 + l_1 + l_2 + 3} \times \left[ \int_0^{\frac{1}{2}} e^{-Zrx} U_l(kr(1-x)) x^{2l_2 + p_2 + 2} (1-x)^{p_1 + l_1 - l_2} dx + \int_0^1 e^{-Zrx} U_l(kr(1-x)) x^{p_2 + 1} (1-x)^{l_2 + p_1 + l_1 + 1} dx \right], \quad (3.11)$$

когда  $K_i - l_1 - p_2 - l_2 - p_2 > 0$ ;

$$H_{l p_1 p_2}^{ex} = \int_0^\infty X_{K_\nu}(\rho) \rho^2 d\rho \times \left[ \int_0^{\frac{1}{2}} e^{-Zrx} U_l(kr(1-x)) x^{2l_2 + p_2 + 2} (1-x)^{p_1 + l_1 - l_2} dx + \int_0^1 e^{-Zrx} U_l(kr(1-x)) x^{p_2 + 1} (1-x)^{l_2 + p_1 + l_1 + 1} dx \right], \quad (3.12)$$

когда  $K_i - l_1 - p_2 - l_2 - p_2 = 0$ .

При расчете ширины резонанса необходимо учесть влияние экранировки заряда ядра. Согласно (3.2), это приводит к дополнительному слагаемому  $\Delta M_l$ , выражение для которого имеет вид

$$\Delta M_l = \left\langle lm \frac{1}{2} \mu_3 \left| j_3 j_{z3} \right. \right\rangle \int_0^\infty \int_0^\infty \frac{u_l(kr_2)}{r_2} Y_{lm}(\Omega_2) \Phi(\vec{r}_1) \frac{1}{r_2} \Phi_\lambda(\vec{r}_1, \vec{r}_2) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2. \quad (3.13)$$

Следует отметить, что

$$\Delta M_l = \Delta M^d + \Delta M^{ex}, \quad (3.14)$$

где первое и второе слагаемые определяют соответственно прямое и обменное взаимодействия. Выражения для этих величин получены непосредственным интегрированием и выглядят следующим образом:

$$\begin{aligned} \Delta M^d = & -\delta_{JJ_z}^{J_1 J_2} \delta_0^{l_1} \delta_l^{l_2} \frac{(2Z)^{\frac{3}{2}}}{2} \sum_{K_v}^j \Delta_{K_v i} \sqrt{\frac{\Gamma(2K_i + 6)}{2}} \sqrt{\frac{\Gamma(n_1 + 1)\Gamma(n_2 + 1)}{\Gamma(n_1 + 2l_1 + 3)\Gamma(n_2 + 2l_2 + 3)}} \times \\ & \times \sum_{p_1=0}^{n_1} \beta_{n_1 l_1}^{p_1} \sum_{p_2=0}^{n_2} \beta_{n_2 l_2}^{p_2} \frac{1}{\Gamma(K_i - p_1 - p_2 - l_1 - l_2)} \int_0^\infty X_{K_v}(\rho) \rho^{\frac{1}{2}} d\rho \times \\ & \times \int_0^1 dy (1-y)^{K_i - p_1 - p_2 - l_1 - l_2 - 1} y^{p_1 + p_2 + l_1 + l_2 + 3} \int_0^1 e^{-Zrx} U_l(kr(1-x)) x^{l_1 + p_1 + 2} (1-x)^{p_2 + l_2} dx, \end{aligned} \quad (3.15)$$

когда  $K_i - l_1 - p_2 - l_2 - p_2 > 0$ ;

$$\begin{aligned} \Delta M^d = & -\delta_{JJ_z}^{J_1 J_2} \delta_0^{l_1} \delta_l^{l_2} \frac{(2Z)^{\frac{3}{2}}}{2} \sum_{K_v}^j \Delta_{K_v i} \sqrt{\frac{\Gamma(2K_i + 6)}{2}} \sqrt{\frac{\Gamma(n_1 + 1)\Gamma(n_2 + 1)}{\Gamma(n_1 + 2l_1 + 3)\Gamma(n_2 + 2l_2 + 3)}} \times \\ & \times \sum_{p_1=0}^{n_1} \beta_{n_1 l_1}^{p_1} \sum_{p_2=0}^{n_2} \beta_{n_2 l_2}^{p_2} \int_0^\infty X_{K_v}(\rho) \rho^{\frac{1}{2}} d\rho \int_0^1 e^{-Zrx} U_l(kr(1-x)) \cdot x^{l_1 + p_1 + 2} (1-x)^{p_2 + l_2} dx, \end{aligned} \quad (3.16)$$

когда  $K_i - l_1 - p_2 - l_2 - p_2 = 0$ .

Учитывая начальные и конечные состояния многоэлектронной ВФ мишени, получаем, что  $\Delta M^{ex} = 0$ , так как  $l_2 = 0$ , а в выражении  $\Delta M^{ex}$  содержится множитель  $\delta_0^{l_2}$ . Далее приведем расчетные данные для матричных элементов  $M^d$ ,  $M^{ex}$ ,  $\Delta M^d$  и ширины, которая определяется выражением (3.5). Из представленных в табл. 1 расчетов видно, что наибольший вклад в ширину компаунд-резонанса вносит первая амплитуда в разложении ВФ компаунд-состояния. Таким образом, получена практическая сходимость ряда по многомерным угловым кулоновским функциям. Следовательно, в наших расчетах ширины компаунд-резонанса мы ограничиваемся только тремя членами разложения ВФ.

Таблица 1

Численные значения матричных элементов, отвечающие различным амплитудам разложения

Номер амплитуды	$M^d$	$M^{ex}$	$\Delta M^d$	$\Sigma M$
	а.е.			
$K_v = 1$	0,15077E+00	-0,16753E-01	-0,24007E+00	-0,10605E+00
$K_v = 2$	-0,77347E-01	0,41415E-02	0,10931E+00	0,36112 E-01
$K_v = 3$	0,55632E-03	0,79224E-03	-0,55278E-02	-0,41792 E-02

В табл. 2 представлены численные значения матричных элементов и ширин компаунд-резонанса в зависимости от волнового числа рассеиваемого электрона.

Таблица 2

Численные значения матричных элементов и ширин резонансов для различных волновых чисел рассеиваемого электрона

Волновое число	$M^d$	$M^{ex}$	$\Gamma$
	а.е.		
$k = 0,8$	0,73124E-01	-0,11734E-01	0,94217E-02
$k = 0,9$	0,63360E-01	-0,10656E-01	0,61726E-02
$k = 1,2$	0,44242E-01	-0,82528E-02	0,21587E-02
$k = 1,3$	0,40769E-01	-0,62459E-02	0,70530E-03

Сравнение рассчитанной ширины резонанса с результатами других теоретических работ (см. [7]), где значение ширины колеблется в интервале 0,15–0,20 эВ, указывает на удовлетворительное согласие результатов данных численных расчетов с опубликованными данными. Уточнение полученных численных значений ширины возможно за счет расширения базиса многомерных угловых функций при расчете ВФ компаунд-состояния. Подобные исследования предполагается провести совместно с расчетами дифференциальных сечений рассеяния. Перспективным также представляется развитие данного метода для описания резонансных явлений при неупругом рассеянии электронов на многоэлектронных ионах.

### Список литературы

1. Лендзел В. И., Навроцкий В. Т., Сабад Е. П. Теория резонансных явлений в электрон-атомных столкновениях. Киев: Наукова думка, 1988.
2. Fano U. Effects of configuration interaction on intensities and phase shifts // *Phys. Rev. A*. 1961. Vol. 124, No. 6. P. 1866–1878.

3. Балашов В. В. Современное состояние в теории резонансов в атомных системах // Лекции 1-й Всесоюз. школы по электронным и атомным столкновениям. Харьков. 1969. С. 1–24.

4. Sung Dahm Oh, Macek J., Ed Kelsey Electron excitation of hydrogenlike ions in the Coulomb Born approximation // *Phys. Rev. A*. 1978. Vol. 17, No. 2. P. 873–879.

5. Садовой А. А. Методы многомерных угловых функций в теоретической и прикладной физике. ВНИИЭФ, г. Арзамас-16, 1994.

6. Thakkar A. J., Smith V. H. Compact and accurate integral-transform wave functions. II. The  $2^1S$ ,  $2^3S$ ,  $2^1P$  and  $2^3P$  state of the helium-like ions He through  $Mg^{+10}$  // *Phys. Rev.* 1977. Vol. 15, No.1. P. 16–22.

7. Варе А., Иванов П. Б., Сенашенко В. С. Энергии возбуждения и ширины  $1,3P^{(-)}$  автоионизационных состояний двухэлектронных систем, сходящихся к  $n=3$  порогу // Вестник Московского университета. 1982. Т. 23. Сер. 3, № 1. С. 49–54.

Статья поступила в редакцию 31.05.2005