



УДК 524.

© С. М. Бурков, Е. А. Мазур, 2008

ПРОГРАММНЫЙ КОМПЛЕКС ДЛЯ РАСЧЕТОВ ХАРАКТЕРИСТИК АТОМНЫХ СИСТЕМ

Бурков С. М. – канд. физ. - мат. наук, доц. директор ХКЦ НИТ, тел. (4212) 74-46-02;
Мазур Е. А. – помощник проректора по НРиИ, тел. (4212) 22-44-19 (ТОГУ)

Представлен комплекс программ расчета параметров взаимодействия электромагнитного поля с атомными системами. Подробно рассмотрены вопросы формирования модели атомной системы с исследованием ее качества. Работоспособность комплекса проверяется на примере резонансного фоторазвала отрицательного иона лития.

The program complex to calculate the interaction parameters of an electromagnetic field with atomic systems is suggested. The different aspects of the atomic system modeling are discussed. The quality of the program complex is tested with an example of the resonance photodetachment of the negative lithium ions.

Ключевые слова: взаимодействие электромагнитного поля с атомами, резонансный фоторазвал, фотоионизация, каналы распада, непрерывный спектр, комплекс программ.

Материал статьи основывается на результатах работ по созданию программного обеспечения для расчетов характеристик атомных систем, выполненных в НИИЯФ МГУ [1–4]. На основе данного программного комплекса были выполнены расчеты резонансной фото и электроионизации атома гелия [5–8], исследованы процессы фоторазвала отрицательных ионов водорода и лития [9–10]. Комплекс программ, адаптированный для ЕС ЭВМ, использовался в учебном процессе на физфаке МГУ в теоретическом практикуме [11–12].

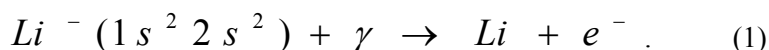
Развитие сетевых технологий и рост производительности компьютеров позволили создать версию программного обеспечения, которая в значительной мере автоматизирует все стадии вычислений и не требует больших затрат машинного времени. На рис. 1 приведена схема работы современной версии программного комплекса и порядок вычислений характеристик атомных систем.



Рис. 1. Схема организации процесса вычислений

Постановка задачи и построение модели расчетов

Рассмотрим работу комплекса программ на примере задачи фоторазвала отрицательного иона лития, представленной в [10]. Рассчитывается сечение следующего процесса:



В зависимости от энергии фотона атом лития может оставаться как в основном, так и возбужденных состояниях. Энергетическая диаграмма этих процессов представлена на рис. 2. Экспериментальный порог фотоотрыва электрона составляет 0,6135 эВ. При этом атом лития остается в основном состоянии $1s^2 2s^2$. С увеличением энергии фотона атом лития может оставаться в возбужденных состояниях, представленных следующими конфигурациями: $1s^2 2p(^2P)$, $1s^2 3p(^2P)$, $1s^2 3s(^2S)$ и $1s^2 3d(^2D)$. Очевидно, что с дальнейшим увеличением энергии фотона число возможных состояний остаточного атома лития будет возрастать. Однако, оставаясь в рамках модели [10], ограничимся рассмотрением интервала энергий, представленного на рис. 2.

Таким образом, для описания процесса фоторазвала нам потребуются волновые функции вышеуказанных состояний атома лития и волновые функ-



ции, описывающие свободное движение электрона.

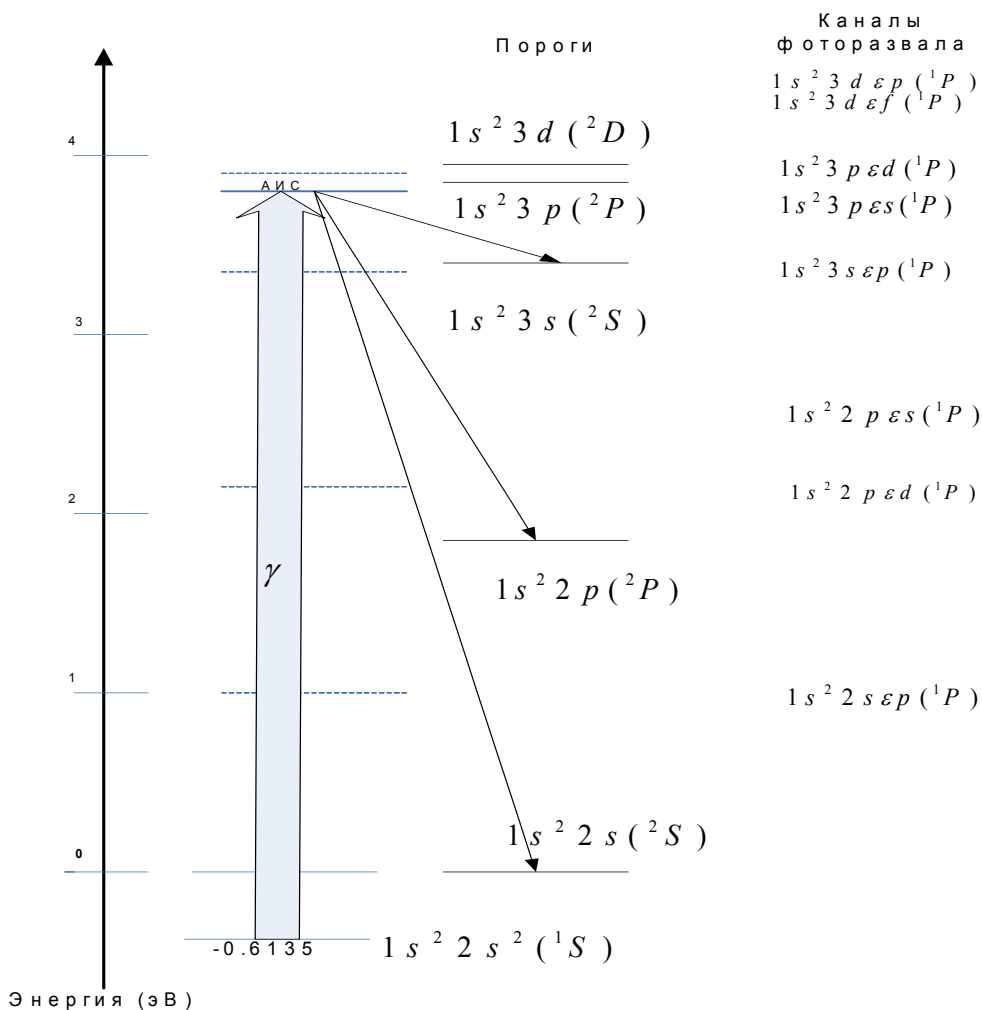


Рис. 2. Энергетическая модель непрерывного спектра отрицательного иона лития

Волновая функция системы атом + электрон в нерелятивистском приближении удовлетворяет уравнению Шредингера:

$$H \Psi (r_1, \dots, r_N) = E \Psi (r_1, \dots, r_N), \quad (2)$$

где $H = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N (\Delta_i + \frac{2Z}{r_i}) + \sum_{i<j} \frac{1}{|r_i - r_j|}$ – гамильтониан системы из

N электронов в поле ядра с зарядом Z , Δ_i – оператор Лапласа, r_i – набор пространственных и спиновых координат i – го электрона атомной системы. Для рассматриваемой нами задачи $N=4, Z=3$.

Решение уравнения (2) будем искать в виде разложения по волновым функциям, описывающим состояния системы из $N-1$ электрона (в данном случае – по функциям атома лития):

$$\Psi_E = \overline{A} \sum_k \Phi_k(r_1, \dots, r_{N-1}) \phi_{kE}(r_{N-1}), \quad (3)$$

где \overline{A} – оператор антисимметризации, учитывающий эффекты электронного обмена, Φ_k – волновые функции атома, ϕ_{kE} – волновые функции свободного электрона. Полный набор состояний Φ_k бесконечен и учитывает также состояния атома с непрерывным спектром, т.е. является дискретно-непрерывным множеством. Поэтому построение модели расчетов состоит в ограничении ряда (3) и выборе таких состояний Φ_k , которые бы обеспечили сходимость в рассматриваемом интервале энергий E . Для случая фоторазвала отрицательного иона лития необходимо учесть пять состояний атома, находящихся в интервале энергий, приведенных на рис. 2.

Таким образом, для построения модели исследуемого процесса требуется получить волновые функции $1s, 2s, 3s, 2p, 3p, 3d$ электронов, адекватно описывающих состояния атома лития и энергии E_i , соответствующие порогам открытия вышеприведенных каналов реакции. Отметим далее, что связь величин E из (2), E_i и \mathcal{E} – энергии электрона в канале дается выражением $\mathcal{E} = E - E_i$. Если $\mathcal{E} > 0$ – канал открыт, если $\mathcal{E} < 0$ – закрыт. Величина E отсчитывается от энергии основного состояния отрицательного иона лития и равна энергии фотона.

Построение волновых функций, описывающих состояния порогов

Волновую функцию связанного состояния электрона будем искать в соответствии с оболочечной моделью атома в следующем виде:

$$\varphi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad (4)$$

где r, θ, φ – сферические координаты, $R_{nl}(r)$ – радиальная функция, $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ – сферическая гармоника, n, l, m – квантовые числа электрона, определяющие соответственно энергию, момент и проекцию момента.

Состояния системы с $N-1$ электроном Φ_k построим в виде антисимметризованных произведений одночастичных функций (4). Минимизация функ-



ционала $E_k = \langle \Phi_k | H_{N-1} | \Phi_k \rangle$ в координатах волновых функций $\varphi_{nlm}(r, \theta, \varphi)$ приводит к системе нелинейных, интегродифференциальных уравнений метода Хартри-Фока. Процедура численного решения этих уравнений достаточно хорошо отработана, и имеются пакеты программ, реализующие данный метод. Для выполнения расчетов использовался пакет программ Фрозе-Фишер, опубликованный в [13]. При нахождении одночастичных атомных волновых функций методом самосогласованного поля следует учитывать, что при полном самосогласовании они будут принадлежать различным полным наборам. Это может сказаться на результатах дальнейших расчетов сечений фоторазвала. Поэтому при расчете базиса в данной работе использовалась следующая процедура. Вначале производился расчет основного состояния положительного иона $L^+(1s^2)$, потом в поле жесткого кора рассчитывались состояния атома Li , соответствующие $2s, 3s, 2p, 3p, 3d$. Радиальная функция $R_{nl}(r)$ из (4) представлялась в табличном виде на неравномерной сетке $\{r_i, N_r\}$, где N_r – число точек в сетке. Для каждой атомной орбитали в [13] используется своя сетка с разным числом точек N_r . Для удобства проведения дальнейших расчетов и в целях создания базы данных численные орбитали приводятся к аналитической форме Слейтера

$$R_{nl}(r) = \sum_i A_i^{nl} r^{m_{inl}} e^{-\xi_{inl} r}. \quad (5)$$

Поиск коэффициентов A_i^{nl} и нелинейных параметров ξ_{inl} осуществлялся путем минимизации среднеквадратичного отклонения

$$\zeta^2 = \sum_{j=1}^{N_r} (R_{nl}^{X\Phi}(r_j) - \sum_i A_i^{nl} r_j^{m_{inl}} e^{-\xi_{inl} r_j})^2, \quad (6)$$

где $R_{nl}^{X\Phi}(r)$ – численная функция, полученная методом Хартри-Фока. Параметры m_{inl} – целые положительные числа, задаваемые пользователем. Количество членов в сумме (5) определяется свойствами искомой радиальной функции.

Для решения рассматриваемой здесь задачи удобно воспользоваться известными свойствами функций $R_{nl}^{X\Phi}(r)$ и аналитической формой (5). Так, например, из свойств атомных орбиталей известно:

$$\int_0^\infty R_{nl}^{X\Phi}(r) R_{kl}^{X\Phi}(r) dr = \delta_{nk},$$

$$R_{nl}^{X\Phi}(r) \xrightarrow{r \rightarrow 0} r^{l+1}, R_{nl}^{X\Phi}(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} e^{-\sigma r}, \quad (7)$$

где число узлов функций $R_{nl}^{X\Phi}(r)$ соответствует $n-l$, параметр σ определяется из расчетов по методу Хартри-Фока и имеет смысл эффективного

заряда ядра, действующего на данный электрон. Заметим далее, что параметры варьирования A_i^{nl} в выражение (6) входят линейно, что при применении условия равенства нулю частных производных в точке минимума к (6) приводит к системе линейных уравнений относительно A_i^{nl} при фиксированных значениях ξ_{inl} . Это позволяет сформулировать процедуру поиска локальных минимумов выражения (6) методом сопряженных градиентов относительно только экспоненциальных параметров. Линейные параметры найдутся на каждом шаге расчетов решением системы линейных уравнений. Учет граничных условий и требования ортогональности (7) значительно ускоряют процедуру и дают хорошую точность построения одноэлектронных волновых функций (5). Данный алгоритм реализован в виде комплекса программ и апробирован на примере, рассматриваемом в этой работе.

Анализ качества модели

Для исследования качества полученных волновых функций произведем расчет энергий уровней атома лития, приведенных на рис. 2 и основного состояния отрицательного иона лития. Оценки энергий произведем методом конфигурационного взаимодействия в представлении LS – связи. Для проведения этих расчетов реализован алгоритм, описанный в [12]. В качестве входных данных для проведения расчетов вводятся параметры полученных выше орбиталей и описание конфигураций, задающих состояния атомной системы, Программный комплекс выполняет расчет матрицы гамильтониана и проводит ее диагонализацию. Кроме того, имеется возможность оценки сил осцилляторов оптических переходов в соответствии с формулами длины и скорости. Полученные собственные значения гамильтониана соответствуют энергетическим уровням рассматриваемой модели атома. В случае рассматриваемого здесь примера матрица гамильтониана имеет вид:

$$H_{nlm\lambda} = \delta_{LL'} \delta_{SS'} \langle 1s^2 nl : LS \mid H_{N-1} \mid 1s^2 m\lambda : L'S' \rangle \quad (8)$$

При подстановке в выражение (8) квантовых чисел порогов, приведенных на рис. 2, получим матрицу гамильтониана, которая имеет блочную структуру, соответствующую полным моментам $^2S, ^2P, ^2D$. Диагонализация и последующий расчет сил осцилляторов позволит оценить качество модели атома путем сравнения с табличными значениями и результатами других авторов. Выполним расчет энергии основного состояния иона Li^- , для этого из полученных орбиталей построим всевозможные конфигурации, имеющие полный момент и полный спин, равные нулю. В данном случае число таких конфигураций равно 10. Наименьшее собственное число матрицы гамильтониана будет соответствовать энергии основного состояния. В таблице сравниваются данные из расчетов [10], других авторов и результаты, полученные в рамках данного комплекса программ.



Сравнение полученных результатов показывает, что построенная с помощью настоящего комплекса программ модель адекватно описывает свойства рассматриваемой атомной системы, тогда как модель, использованная нами ранее в [10], имеет ряд существенных недостатков. Это, прежде всего, связано с отсутствием вычислительных возможностей на момент выполнения расчетов [10]. Недостаток оперативной памяти и невысокое быстродействие ЕС ЭВМ не позволяли полноценно реализовать все этапы расчетов. Рассмотрим далее процедуру моделирования волновых функций непрерывного спектра, расчет матричных элементов и сечений фоторазвала исследуемой модели.

Положение порогов иона $L\bar{i}$ по отношению к первому порогу фоторазвала. $1s^2 2s(^2S)$

Состояние (Li)	Пороговая энергия (эВ)		
	Настоящий расчет	[10]	[15]
$1s^2 3d(^2D)$	3,88	3,83	3,88
$1s^2 3p(^2P)$	3,83	3,80	3,83
$1s^2 3s(^2S)$	3,368	3,40	3,37
$1s^2 2p(^2P)$	1,85	1,84	1,85
$1s^2 2s(^2S)$	0	0	0
Энергия основного состояния иона $L\bar{i}$			
$1s^2 2s(^1S)$	-0,609	-0,58625	-0,61362

Построение волновых функций непрерывного спектра атомной системы на примере иона $L\bar{i}$

Волновые функции $\phi_{kE}(r_N)$, описывающие движение выбитого электрона в канале, можно найти путем подстановки разложения (3) в уравнение (2). Усредняя данное уравнение по всем координатам $N-1$ электрона и угловым N -го, получим систему линейных интегро-дифференциальных уравнений для радиальных волновых функций. В рассматриваемом случае фоторазвала отрицательного иона лития система будет содержать восемь уравнений следующего вида:

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{2Z}{r} + k_j^2 \right) \rho_{j\lambda}(r) - \sum_i W_{ij}(r) \rho_{i\lambda}(r) = 0, \quad (9)$$

где $W_{ij}(r)$ – матрица нелокальных операторов, описывающих взаимодействие электрона с атомной системой, $k_j^2 = E - E_j$, E_j – энергии порогов из таблицы. Данную систему уравнений следует решать численно на радиальной сетке.

ке с граничными условиями, которые в случае нейтрального атома имеют вид:

$$\rho_{j\lambda}(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{1}{\sqrt{k_j}} (\delta_{j\lambda} \sin(k_j r - \frac{1}{2} \pi l_j) + K_{j\lambda} \cos(k_j r - \frac{1}{2} \pi l_j)), \quad k_j \geq 0,$$

$$\rho_{j\lambda}(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{1}{\sqrt{2|k_j|}} \delta_{j\lambda} \exp(-|k_j| r), \quad k_j < 0, \quad (10)$$

где $K_{j\lambda}$ – матрица реактанса.

Процедура численного решения системы уравнений (9) значительно осложняется наличием нелокального потенциала $W_{ij}(r)$. Обменная часть этого оператора имеет вид

$$W_{ij}(r) \approx \sum_{nl} R_{nl}(r) \int_0^{\infty} U_{ij}^{nl}(r, r') \rho_j(r') dr' \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \exp(-\mu r),$$

т. е. экспоненциально затухает. Дальнодействующим является только локальный потенциал, обусловленный связанными электронами атома. Таким образом, на расстоянии, где волновые функции связанных электронов затухают, система уравнений (9) может быть переписана в следующем виде:

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{2Z}{r} + k_j^2 \right) y_{j\lambda}(r) - \sum_i \sum_{n=2}^{\infty} \frac{C_n^{j\lambda}}{r^n} y_{i\lambda}(r) = 0. \quad (11)$$

Алгоритмы нахождения матрицы регулярных и нерегулярных решений уравнений (11) хорошо отработаны и описаны [14]. Таким образом, все значения r можно разделить на две части: $r \in (0, r_a)$ – зона реакции и $r > r_a$ – асимптотическая зона, где справедливы уравнения (11).

Решения системы уравнений (9) в области $r \in (0, r_a)$ будем искать в виде разложения по полному набору, определяемому следующей граничной задачей:

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{2Z}{r} + k_j^2 \right) v_{jl}(r) - V(r) v_{jl}(r) = \sum_n \lambda_{nl} R_{nl}(r) \quad (12)$$

$$v_{jl}(0) = 0, \quad r_a \frac{dv_{jl}(r_a)}{dr} = b v_{jl}(r_a).$$

Решение граничной задачи (12) позволяет получить полный дискретный набор функций, ортогональных к атомным волновым функциям $R_{nl}(r)$.

Таким образом, для решения поставленной выше задачи мы можем получить следующий базис, определяющий разложение в следующих угловых моментах:

$$l=0 - (1 s, 2 s, 3 s, 4 \bar{s}, \dots, m_s \bar{s}),$$



$$\begin{aligned}
 l=1 & - (2 \bar{p}, 3 \bar{p}, 4 \bar{p}, 5 \bar{p}, \dots, m_p \bar{p}), \\
 l=2 & - (3 \bar{d}, 4 \bar{d}, 5 \bar{d}, \dots, m_d \bar{d}), \\
 l=3 & - (4 \bar{f}, 5 \bar{f}, \dots, m_f \bar{f}).
 \end{aligned} \tag{13}$$

Раскладывая решения уравнения (9) в ряд по базису (13), подставляя разложение в (3) и (2) и усредняя по всем координатам, получим систему линейных однородных уравнений. Собственные векторы C_{ijr} и собственные значения E_r матрицы этой системы определяют коэффициенты разложения волновой функции N -электронной системы (в данном случае $L\bar{i}$). Асимптотические свойства волновой функции (3) задаются соотношением

$$\begin{aligned}
 \rho_\lambda(r_a) &= \sum_j \Re_{j\lambda}(E) \left(r_a \frac{d\rho_j(r)}{dr} - b\rho_j(r) \right) \Big|_{r=r_a}, \\
 \Re_{j\lambda}(E) &= \frac{1}{2r_a} \sum_k \frac{w_{\lambda k}(r_a) w_{rj}(r_a)}{E - E_k}
 \end{aligned} \tag{14}$$

где $w_{j\lambda}(r) = \sum_k C_{jk\lambda} v_j(r)$, $\Re_{j\lambda}(E)$ – R-матрица.

Сшивка полученных решений с решениями асимптотических уравнений (11) позволяет получить K и S -матрицы процесса рассеяния и построить волновые функции с требуемыми граничными условиями.

Сечения фоторазвала иона $L\bar{i}$ и анализ резонансных состояний

Расчет сечений фоторазвала иона $L\bar{i}$ производится в дипольном приближении по формулам длины и скорости:

$$\sigma_\lambda(E) = 4\pi^2 \alpha \omega \left| \langle \Psi_\lambda^{LS}(E) | \hat{D} | \Psi_k^{(L-1)S} \rangle \right|^2. \tag{15}$$

В выражении (14) \hat{D} – дипольный оператор, $\Psi_k^{(L-1)S}$ – волновая функция начального состояния атомной системы, $\Psi_\lambda^{LS}(E)$ – конечного состояния, рассчитанные в R-матричном подходе с использованием базиса (13). Величины $m_l = 30$ для всех парциальных волн. Результаты расчета сечений между первым и вторым порогами фоторазвала приводятся на рис. 3.

Как видно из рис. 3, результаты, полученные с помощью данного комплекса программ, находятся в хорошем согласии с аналогичными расчетами. Волнообразное поведение сечений в расчетах [10] объясняется плохим качеством базиса атомных орбиталей и неодинаковой сходимостью R-матричного ряда для различных значений энергии возбуждения. Это, в свою очередь, связано с необходимостью вычисления сечений в окрестности полюсов R-матрицы. Достаточно корректное описание пороговой зависимости в на-

ших расчетах показывает, что построенная нами модель справедлива в рассматриваемом диапазоне энергий.

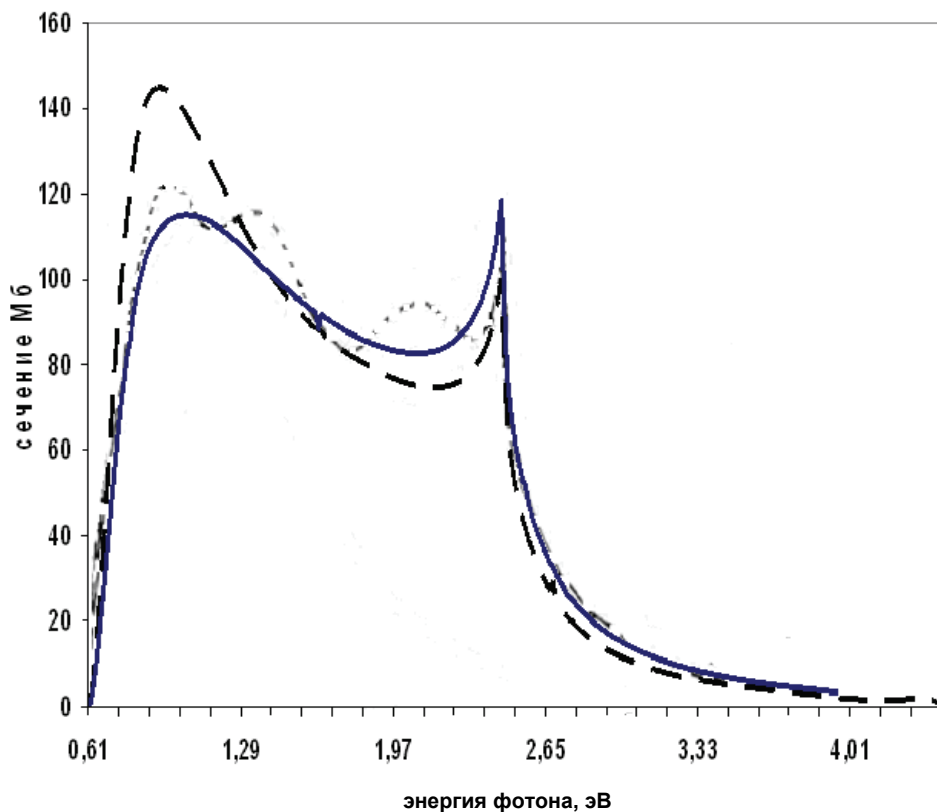


Рис. 3. Сечение фоторазвала отрицательного иона лития в области между первым и вторым порогами: сплошная линия – наш расчет по формулам скорости, штрихованная линия – расчет по формулам длины, точки – расчет [10]

На рис. 4 представлены результаты расчета полного сечения фоторазвала выше второго порога. Наблюдаются каспы, соответствующие порогам $\text{Li}(3s)$ и $\text{Li}(3p)$. В окрестности порога $\text{Li}(3p)$ наблюдается пик, соответствующий автоионизационному ($3s3p$) состоянию отрицательного иона лития.

На рис. 5 приводится расчет [10], выполненный в окрестности автоионизационного состояния. Как видно из сравнения рисунков, наши данные из [10] сильно завышены по отношению к эксперименту. Настоящие расчеты, выполненные по формулам длины (штрихованная линия), находятся в хорошем согласии с экспериментом и расчетами других авторов [15]. Расчеты, выполненные по формулам скорости, хорошо описывают форму кривой сечений (толстая сплошная линия), однако, дают завышенный результат.

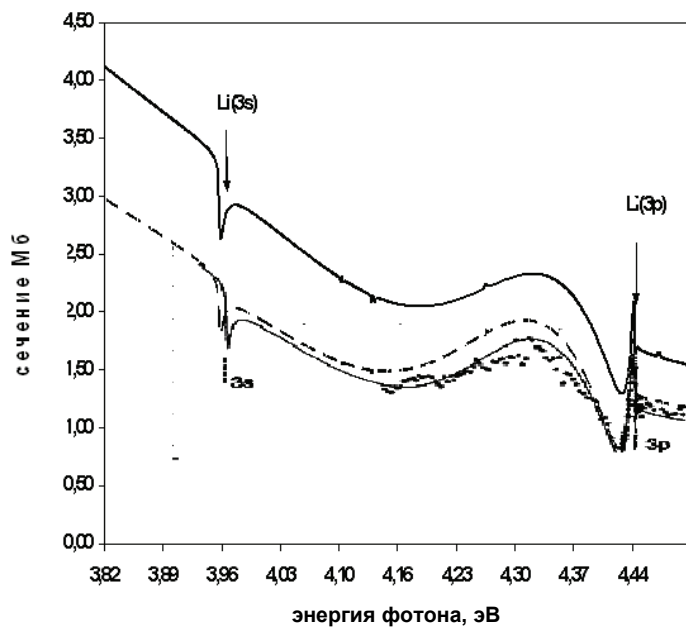


Рис. 4. Сечение фоторазвала отрицательного иона лития в области выше второго порога. Толстая сплошная линия – наш расчет по формулам скорости, штрихованная линия – наш расчет по формулам длины, тонкая сплошная – расчет [15], точки – эксперимент из [15]

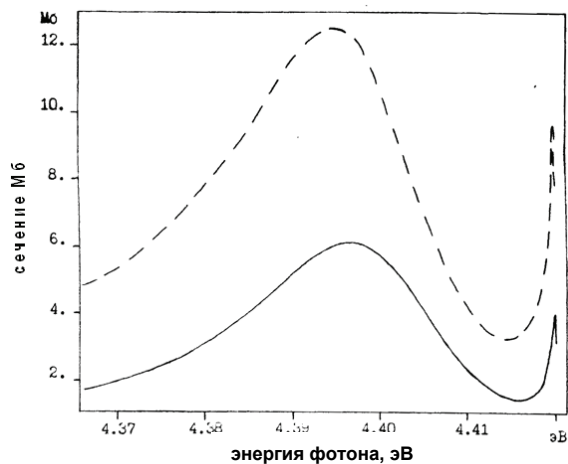


Рис. 5. Расчет сечений в окрестности автоотрывного состояния [10], сплошная линия – формула длины, штрихованная – формула скорости

Анализ автоионизационных состояний атомной системы выполняется на основе метода, разработанного в [1–2]. Суть метода состоит в следующем. Следуя Фешбаху, представим гамильтониан системы H в виде матрицы из

следующих проекций: $\mathbf{P}\mathbf{H}\mathbf{P}$, $\mathbf{Q}\mathbf{H}\mathbf{Q}$, $\mathbf{P}\mathbf{H}\mathbf{Q}$, $\mathbf{Q}\mathbf{H}\mathbf{P}$. Соответственно \mathbf{P} – оператор проектирования гамильтониана \mathbf{H} на подпространство состояний с непрерывным спектром, \mathbf{Q} – оператор проектирования на подпространство состояний с дискретным спектром, Комбинации $\mathbf{P}\mathbf{H}\mathbf{Q}$ и $\mathbf{Q}\mathbf{H}\mathbf{P}$ описывают взаимодействие этих подпространств. Если известны собственные функции проекций гамильтониана на данные подпространства, задача нахождения полной волновой функции из уравнения (2) может быть решена аналитически. Подстановка этого решения в выражение для сечения (15) приводит его к следующей формуле:

$$\sigma_{\lambda}(E) = \sigma_{\lambda}^{dir}(E) \left(1 + \sum_m (\rho_{m\lambda}^2(E) \frac{(\varepsilon_m(E) + q_{m\lambda}(E))^2}{\varepsilon_m^2(E) + 1} - \rho_{m\lambda}^2(E)) \right), \quad (16)$$

где $\sigma_{\lambda}^{dir}(E)$ – сечение прямого процесса, $\varepsilon_m(E) = \frac{2(E_m(E) - E)}{\Gamma_m(E)}$. Энергозависимые функции $E_m(E)$, $\Gamma_m(E)$, $\rho_{m\lambda}^2(E)$, $q_{m\lambda}(E)$ получаются из расчетов,

описанных в [1-2] без нарушения общности. В этом смысле по точности данный метод эквивалентен R-матричному подходу. Однако сложности с построением базиса функций, диагонализующего субматрицы гамильтониана, позволили реализовать его только для гелиеподобных систем [3]. В расчетах было показано, что функции $E_m(E)$, $\Gamma_m(E)$, $\rho_{m\lambda}^2(E)$, $q_{m\lambda}(E)$ слабо зависят от энергии. Поэтому выражение (15) может быть использовано для параметрического описания взаимодействующих резонансов. В данной работе представлен программный модуль, позволяющий рассчитывать параметры резонансов на основе данных, полученных в R-матричном подходе. Ниже приводятся параметры автоионизационного состояния под $\text{Li}(3p)$ порогом фоторазвала иона Li^+ :

	Положение (эв.)	Ширина (эв.)	q-индекс
1. Настоящий расчет	4,41	0,18	-1,7
2. Расчет [10]	4,399	0,243	-1,937
3, Расчет [15]	4,42	0,16	-1,32

Все приведенные выше данные находятся в хорошем согласии между собой. Вместе с тем следует отметить, что абсолютные данные по сечениям фоторазвала, приведенные на рис. 4 из расчета [15], отличаются от полученных нами результатов в настоящем расчете и в [10]. Так, экспериментальное значение сечения на максимуме резонанса составляет 1,5–1,6 Мб. Наши дан-



ные составляют 1,9–2,4 Мб, в зависимости от используемого оператора перехода. Ближе к эксперименту данные, полученные по формуле длины. Со всем плохо согласуются с экспериментом результаты [10]. Здесь расчет по формулам длины дает значение около 4 Мб, по формуле скорости – 12 Мб. Это связано с качеством атомных волновых функций, использованных в [10], которые брались из таблиц.

Заключение

Выше был рассмотрен пример использования комплекса программ на ранее выполненной задаче фоторазвала отрицательного иона лития. Показано, что с его помощью можно выполнять исследования характеристик атомных систем на высоком уровне точности. Программное обеспечение можно использовать не только для анализа процессов фоторазвала отрицательных ионов. В рамках данного комплекса возможны расчеты процессов неупругого рассеяния электронов на атомах и ионах, процессов фотоионизации и фоторекомбинации. Программное обеспечение производит расчет в большом диапазоне атомных систем. Область применения данного программного комплекса ограничена приближением LS-связи, таблицами генеалогических коэффициентов, нерелятивистским подходом и размерностью матриц гамилтониана. Ограничения по размерности матриц связаны с использованным в пакете алгоритмом диагонализации. Увеличение размерности приводит к росту числа численных ошибок из-за ограниченного размера мантиссы.

Таким образом, данный пакет может рассматриваться как сетевой ресурс для использования в учебном процессе и научных исследованиях.

Библиографические ссылки

1. Бурков С. М., Страхова С. И. Автоионизационные явления в атомах // Труды II научного семинара. М., 1981.
2. Бурков С. М., Страхова С. И. Резонансная фотоионизация гелия в области между вторым и третьим порогами // Вестник МГУ. Сер. 3. Физика. Астрономия. 1984. Т. 25. № 3.
3. Бурков С. М., Страхова С. И. Прямая фотоионизация и структура непрерывного спектра гелия // Вестник МГУ. Сер. 3. Физика. Астрономия. 1984. Т. 25. № 4.
4. Проявление автоионизационных состояний в процессах ионизации гелия и гелиеподобного лития фотонами и электронами в области выше порога образования возбужденных ионов / С. М. Бурков, Т. М. Заяц, Н. А. Летяев, С. И. Страхова // Изв. АН СССР. Серия физическая. 1986. Т. 50. № 7.
5. Photon and electron ionization of helium to the $n=2$ state of He. / S. M. Burkov,



- T. M. Zajac, N. A. Letyaev, S. I. Strakhova* // J. Phys. B: At. Mol. Phys. 1988. V. 21.
6. Бурков С. М., Заяц Т. М., Страхова С. И. Ионизация гелия быстрыми электронами в области выше порогов образования возбужденных ионов // Опт. и спектроскопия. 1988. Т. 65.
7. *Burkov S. M., Strakhova S. I., Zajac T. M.* Total and partial generalized oscillator strengths for transitions to continuum of He. // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 1990. V. 23.
8. Spectroscopy of the auto ionization states of He under ionization by fast electrons between the second and third threshold. / *S. M. Burkov, T. M. Zajac, N. A. Letyaev, S. I. Strakhova* // Abstr. of papers XVI ICPEAC. New-York. USA, 1989.
9. Бурков С. М., Летяев Н. А., Страхова С. И. Фоторазвал гелиеподобного иона водорода // Вестник МГУ. Сер. 3. Физика. Астрономия. 1990. Т. 31. № 4.
- 10 Бурков С. М., Летяев Н. А., Страхова С. И. Резонансный фотоотрыв электронов в легких отрицательных ионах // Ядерная физика, физика космических излучений, астрономия. М., 1993.
11. *Математическое обеспечение задачи теоретического практикума «Автоионизационные явления в атомах»* / С. М. Бурков, Н. А. Летяев, А. Н. Рыбалко, С. И. Страхова // Краткое описание программных средств ЭВМ НИИЯФ МГУ / Под ред. В. И. Саврина, Е. А. Романовского. М., 1988.
12. *Реализация метода взаимодействий конфигураций* в представлении комплексных чисел для задач резонансной фотоионизации гелиеподобных систем. / Бурков С. М., Летяев Н. А., Мирошниченко И. В., Страхова С. И. // Краткое описание программных средств ЭВМ НИИЯФ МГУ / Под ред. В. И. Саврина, Е. А. Романовского М., 1989.
13. *Froese-Fischer C.* Multiconfiguration Hartree-Fock program // Comput. Phys. Commun., 1978. V. 14.
14. *Crees M.A.* Asymptotic solution of the Coulomb equations // Comput. Phys. Commun. 1981. V. 23.
15. *Berzins U, Haeffler G.* Resonance structure in the Li^{-} photodetachment cross section // Phys. Rev. Lett., 1995. V. 74.