

VILNIAUS UNIVERSITETAS
FIZINIŲ IR TECHNOLOGIJOS MOKSLŲ CENTRAS

Saulius
PAKALKA

Tiesioginės ir netiesioginės
viengubos jonizacijos
elektronų smūgiais tyrimas

DAKTARO DISERTACIJOS SANTRAUKA

Gamtos mokslai,
fizika (N 002)

VILNIUS 2021

Daktaro disertacija parengta 2016-2020 Vilniaus universiteto Fizikos fakulteto Teorinės fizikos ir astronomijos institute.

Mokslinis vadovas - doc. dr. Valdas Jonauskas (Vilniaus universitetas, gamtos mokslai, fizika – N 002).

Gynimo taryba:

Pirmininkas – **dr. Darius Abramavičius** (Vilniaus universitetas, gamtos mokslai, fizika - N 002).

Nariai:

dr. Rasa Karpuškienė (Vilniaus universitetas, gamtos mokslai, fizika - N 002).

dr. Arūnas Kučinskas (Vilniaus universitetas, gamtos mokslai, fizika - N 002).

dr. Duck-Hee Kwon (Korėjos atominės energijos tyrimų institutas/Korea Atomic Energy Research Institute, gamtos mokslai, fizika).

dr. Paulius Miškinis (Vilniaus Gedimino technikos universitetas, gamtos mokslai, fizika - N 002).

Disertacija ginama viešame Gynimo tarybos posėdyje 2021 m. lapkričio mėn. 5 d. 10 val. Valstybinio mokslinių tyrimų instituto Fizinių ir technologijos mokslų centro A101 auditorijoje. Adresas: Saulėtekio al. 3, Vilnius, Lietuva, tel. +370 5 264 8884; el. paštas: office@ftmc.lt.

Disertaciją galima peržiūrėti Valstybinio mokslinių tyrimų instituto Fizinių ir technologijos mokslų centro bibliotekose ir VU interneto svetainėje adresu:

<https://www.vu.lt/naujienos/ivykiu-kalendorius/>

VILNIUS UNIVERSITY
CENTER FOR PHYSICAL SCIENCES AND
TECHNOLOGY

Saulius
PAKALKA

Theoretical study of
direct and indirect
single ionisation by
electron impact

SUMMARY OF DOCTORAL DISSERTATION

Nature Science,
Physics (N 002)

VILNIUS 2021

Doctoral Dissertation was completed during 2016-2020 at Vilnius University, Institute of Theoretical Physics and Astronomy.

Scientific supervisor - doc. dr. Valdas Jonauskas (Vilnius University, Nature Science, Physics – N 002).

This doctoral dissertation will be defended in a public meeting of the Dissertation Defence Panel:

Chairman - dr. Darius Abramavičius (Vilnius University, Nature Science, Physics - N 002).

Members:

dr. Rasa Karpuškienė (Vilnius University, Nature Science, Physics - N 002).

dr. Arūnas Kučinskas (Vilnius University, Nature Science, Physics - N 002)

dr. Duck-Hee Kwon (Korea Atomic Energy Research Institute, Nature Science, Physics).

dr. Paulius Miškinis (Vilnius Gediminas Technical University, Nature Science, Physics - N 002).

The dissertation shall be defended at a public meeting of the Dissertation Defence Panel at 10AM on 5th of November 2021 in meeting room A101 of the State research institute Center for Physical Sciences and Technology. Address: Saulėtekio al. 3, Vilnius, Lithuania. tel. +370 5 264 8884; email: office@ftmc.lt.

The text of this dissertation can be accessed at State research institute Center for Physical Sciences and Technology libraries, as well as on the website of Vilnius university:

www.vu.lt/lt/naujienos/ivykiu-kalendorius/

Turinys

Aprobacija	3
Straipsniai	3
Pranešimai konferencijose	4
ĮVADAS	5
Tikslas	8
Uždaviniai	8
Mokslinis naujumas	9
Ginamieji teiginiai	10
Autoriaus indėlis	11
Disertacijos struktūra	11
TEORIJA	13
Smūginė jonizacija elektronais	13
Banginės funkcijos	16
Radiaciniai šuoliai	17
Ožė šuoliai	17
Rezonansinio sužadavimo-dvigubos autojonizacijos procesas	18

Iškraipytųjų bangų artinys	19
Skerspjūvių proporcingumo koeficientas	20
Koreliaciniai efektai	21
Metastabilių būsenų indėlio teorinis modeliavimas	23
REZULTATAI	25
Jonizacijos skerspjūvio konvergencija	25
Volframo jonai	25
W ²⁵⁺ jonas	26
W ²⁶⁺ jonas	30
W ⁵⁺ jonas	32
Se jonas	39
Fe ³⁺ jonas	43
Koreliaciniai efektai	47
W ⁵⁺ jono atvejis	47
Fe ³⁺ jono atvejis	49
Transformuotieji skerspjūviai	51
Fe ³⁺ jonas	51
Tiesioginės dvigubos jonizacijos proceso įtaka viengubos jonizacijos skerspjūviams	54
PAGRINDINĖS IŠVADOS	57
Literatūra	61

Aprobacija

Straipsniai

- A. Kynienė, S. Pakalka, Š. Masys, and V. Jonauskas, “Electron - impact ionization of W^{25+} ,” J. Phys. B At. Mol. Opt. Phys., vol. 49, no. 18, p. 185001, Sep. 2016.
- A. Kynienė, G. Merkelis, A. Šukys, Š. Masys, S. Pakalka, R. Kisielius, V. Jonauskas, “Maxwellian rate coefficients for electron-impact ionization of W^{26+} ,” J. Phys. B At. Mol. Opt. Phys., vol. 51, no. 15, p. 155202, Aug. 2018.
- S. Pakalka, S. Kučas, Š. Masys, A. Kynienė, A. Momkauskaitė, and V. Jonauskas, “Electron-impact single ionization of the Se^{3+} ion,” Phys. Rev. A, vol. 97, no. 1, p. 012708, Jan. 2018.
- A. Kyniene, S. Kučas, S. Pakalka, Š. Masys, and V. Jonauskas, “Electron-impact single ionization of Fe^{3+} from the ground and metastable states,” Phys. Rev. A, vol. 100, no. 5, pp. 1–10, 2019.
- V. Jonauskas, A.Kynienė, S.Kučas, S.Pakalka, Š.Masys, A.Prancikevičius, A.Borovik Jr., M.F.Ghareibeh, S.Schipp-

ers, A.Müller, "Electron-impact ionization of W^{5+} ," Phys. Rev. A, vol. 100, no. 6, pp. 1–12, 2019.

Pranešimai konferencijose

- Lietuvos nacionalinė fizikos konferencija. Stendinis pranešimas: " Se^{3+} viengubos jonizacijos elektronais tyrimas", Vilnius, Lietuva, 2017.
- 31-oji fotonų, elektronų ir atomų dūžių konferencijoje (XXXIst International Conference on Photonic, Electronic, and Atomic Collisions). Stendinis pranešimas: "Inner-shell Ionization of W^{25+} ", Deauville, Prancūzija, 2019.
- 31-oji fotonų, elektronų ir atomų dūžių konferencijoje (XXXIst International Conference on Photonic, Electronic, and Atomic Collisions). Stendinis pranešimas: "Electron Impact Ionization of Fe^{3+} ", Deauville, Prancūzija, 2019.

ĮVADAS

Žvelgiant iš atomo fizikos pozicijų, plazmos tyrimai apima tris kryptis. Viena jų tyrinėja plazmos aplinkos įtaką atomo potencialui, kuris, savo ruožtu, įtakoja surišto elektrono bangines funkcijas ir atominę struktūrą. Kita sritis tyrinėja susidūrimo tarp dalelių (elektrono - jono, jono - jono) procesus plazmoje, krūvio ir sužadintų būsenų pasiskirstymą, kurį nulemia jonų sužadavimo ir jonizacijos procesai. Trečia sritis tyrinėja emisijos ir absorbcijos spektrus plazmoje.

Vienas galingiausių įrankių tyrinėjant plazmos savybes yra spektroskopija. Plazmos spektrų analizė gali suteikti informacijos apie spinduliuojančios aplinkos temperatūrą ir tankį. Todėl labai svarbu suprasti atominę fiziką, kuri aprašo spinduliuojamąjį spektrą. Spektrinių linijų intensyvumai yra nulemti krūvio pasiskirstymo plazmoje. Šis reiškinys yra aiškinamas elektrono smūginės jonizacijos ir elektrono - jono rekombinacijos procesais.

Jonizacijos skerspjūvių bei Maksvelo spartų koeficientų poreikį dažnai gali patenkinti tik teoriniai skaičiavimai dėl eksperimentinių tyrimų ribotumo. Naudojant naujausius duomenų apdorojimo įrankius dabar įmanoma pagreitinti skaičiavimus.

Elektronų susidūrimai su jonais yra vieni iš svarbiausių procesų astrofizikinėse aplinkose [1], termobranduolinėse plazmose.

Todėl šių aplinkų bei jų dinamikos tyrimams reikalingi patikimi atominiai duomenys. Šiame darbe tiriama vienguba smūginė jonizacija elektronais. Šio proceso tyrimas atliekamas studijuojant elektronų susidūrimus su trimis elementais: geležimi, selenu ir volframu. Tyrimams pasirinkti Se^{3+} ir Fe^{3+} jonai bei skirtingo jonizacijos laipsnio volframo jonai: W^{5+} , W^{25+} ir W^{26+} .

Seleno spektro linijos buvo aptiktos žvaigždžių [2,3] ir astrofizikinių ūkų [4–6] spektruose. Selenas naudojamas puslaidininkių gamyboje ir atitinkamos jo savybės yra gerai ištirtos. Neseniai seleno jonų smūginės jonizacijos elektronu skerspjuviai buvo gauti taikant dinaminį kryžminių spindulių (angl. dynamic-crossed-beams) metodą [7,8]. Ankstesni seleno jonizacijos tyrimai buvo skirti sąveikai su fotonais [9–12].

Geležis yra plačiai naudojama daugelyje ekonomikos sektorių, tokių kaip elektronika, statybos, gamyba ir automobilių pramonė. Tai labiausiai paplitęs elementas Žemės branduolyje. Stiprios geležies linijos yra aptinkamos astronominių objektų spektruose. Geležies linijos sudaro apie 30% saulės spektro linijų. Geležies jonai, kaip priemaišos, yra aptinkami branduolinės sintezės reaktorių plazmoje. Priemaišų spinduliavimas mažina plazmos energiją, o per didelis priemaišų kiekis gali nutraukti prasidedančią branduolinės sintezės reakciją. Todėl labai svarbu kontroliuoti priemaišų kiekius termobranduolinės sintezės reaktorių plazmoje.

Suvidurkintų konfigūracijų iškraipytųjų bangų (angl. configuration average distorted wave) metodas buvo naudotas tiriant Fe^{3+} jono smūginės jonizacijos elektronu skerspjuvius [13]. Sužadinimų $3p \rightarrow 3d$ skerspjuviai ir po to vykstanti autojonizacija buvo tirta šiame darbe.

Eksperimentiniai Fe^{3+} jono skerspjuviai buvo gauti naudojant kryžminių spindulių metodą (angl. animated crossed-beams) [14]. Deja, teoriškai analizuojant duomenis, sužadinimo -

autojonizacijos kanalai ir galimi sužadainimai į aukštesnius sluoksnius nebuvo įtraukti [13, 15]. Buvo iškelta idėja, kad dalis jonų pluoštelyje yra ilgai gyvuojančiose būsenose [16], tačiau tyrimas siekiant įvertinti metastabilių jonų dalį ir jų įtaką matuojamiems skerspjūviams nebuvo atliktas.

Pirmieji viengubos smūginės jonizacijos matavimai buvo aprašyti Montague ir Harrison [17]. Vėliau Stenke *et al.* [18] išmavo viengubos smūginės jonizacijos elektronais skerspjūvius volframo $W^+ - W^{10+}$ jonams, tačiau nebuvo tirtas metastabilių jonų indėlis viengubos jonizacijos skerspjūviams. Taip pat plazmoje stebima ir aukštesnės jonizacijos volframo priemaišų.

Volframo jonai taip pat yra stebimi kaip priemaišos termobranduolinės sintezės reaktorių plazmose. Šis elementas planuojamas naudoti dideliuose reaktoriuose kaip ITER ar DEMO [19–21], kurių plazmos spektrų linijų modeliavimui reikalingi jonų pasiskirstymo pagal jonizacijos laipsnius duomenys.

Gerai žinoma, kad iškraipytųjų bangų (angl. distorted wave) metodu gautos neutralių arba mažo jonizacijos laipsnio jonų skerspjūvių vertės yra padidintos lyginant su eksperimento metu gautomis vertėmis. Anksčiau sukurti tiesioginiai jonizacijos procesui tirti dvinarių susidūrimų-dipolinis (angl. BED) ir dvinarių susidūrimų-Bethe (angl. BEB) modeliai [22] buvo skirti tokiems atvejams. Transformuotų plokščiųjų bangų-Born skerspjūviai buvo naudojami sužadainimams nagrinėti [23]. Tai davė gerą sutapimą su eksperimentų rezultatais [24, 25].

Šiame darbe parodoma sužadainimų elektronų smūgiais į aukštesnius sluoksnius ir skerspjūvių konvergencijos svarba. Tiriama koreliaciniai efektai. Skerspjūvių transformacijos koeficiento metodika pirmą kartą taikoma iškraipytųjų bangų skerspjūviams. Parodoma, kad teorinis galutinis viengubos jonizacijos rezultatas gali būti sumodeliuotas kaip vieno ar kelių vienas po kito vykstančių procesų išdava.

Tikslas

Šio darbo tikslas yra ištirti viengubos jonizacijos elektronų smūgiais procesus naudojant iškraipytųjų bangų metodą ir pasiūlyti tikslus ir efektyvius būdus teoriniams jonizacijos skerspjūviams gauti.

Uždaviniai

1. Viengubos jonizacijos elektronais skerspjūvių skaičiavimo programos išplėtimas:
 - programa, skirta skaičiuoti autojonizacijos šakojimosi koeficientus lygmenims;
 - programa, skirta skaičiuoti sužadinių–autojonizacijos procesų skerspjūvius.
2. Tiesioginės jonizacijos procesų tyrimas:
 - smūginės jonizacijos elektronu tyrimas naudojant iškraipytųjų bangų metodą;
 - smūginės jonizacijos skerspjūvių tyrimas jonizuojančio ir jonizuoto jono potencialuose;
 - tiesioginės dvigubos jonizacijos proceso įtakos viengubai tiesioginei jonizacijai tyrimas.
3. Netiesioginių viengubos jonizacijos elektronų smūgiais procesų tyrimas:
 - sužadinių–autojonizacijos skerspjūvių konvergencijos tyrimas;

- sužadinių į sluoksnius su skirtingais orbitiniais kvantiniais skaičiais tyrimas;
 - autojonizacijos šakojimosi koeficiento įtakos tyrimas;
 - rezonansinio sužadavimo-dvigubos autojonizacijos proceso tyrimas.
4. Transformuotų skerspjūvių tyrimas:
- smūginės jonizacijos atvejo tyrimas;
 - sužadinių–autojonizacijos proceso atvejo tyrimas.

Mokslinis naujumas

1. Gauti nauji duomenys bus prieinami jonų pasiskirstymo pagal jonizacijos laipsnius plazmoje tyrimams.
2. Ištirti koreliaciniai efektai Fe^{3+} ir W^{5+} jonams, pristatomi nauji rezultatai.
3. Paaiškinti Se^{3+} , Fe^{3+} ir W^{5+} jonų eksperimentiniai duomenys.
4. Pritaikytos transformacijos funkcijos aiškinant Fe^{3+} eksperimentinius rezultatus.
5. Tiesioginės dvigubos jonizacijos proceso įtaka pademonstruota viengubos jonizacijos teoriniame tyrime.
6. Pirmą kartą ištirtas rezonansinio sužadavimo-dvigubos autojonizacijos procesas Se^{3+} jonui.

Ginamieji teiginiai

1. Sužadainimai į aukštesnius nl sluoksnius ($9 \leq n \leq 25$) padidina W^{25+} sužadainimų–autojonizacijos skerspjūvius $\sim 40\%$.
2. Parodyta, kad Maksvelo spartų koeficientai gauti W^{26+} jono pagrindinės konfigūracijos lygmenims skiriasi $\sim 10\%$.
3. Koreliaciniai efektai yra mažina elektrono viengubos smūginės jonizacijos skerspjūvius mažo jonizacijos laipsnio jonams: Fe^{3+} , W^{5+} .
4. Transormuoti skerspjūviai, gauti iškraipytyjų bangų metodu, paaiškina eksperimentinius duomenis Fe^{3+} jonui.
5. Tiesioginė dviguba jonizacija mažina 4% Se^{3+} viengubos jonizacijos elektronų smūgiais skerspjūvius.

Autoriaus indėlis

1. Atliko tyrimo užduotis.
2. Vykde vadovo paskirtas skaičiavimo užduotis.
3. Tobulino tyrimo komandos naudojamas programos.
4. Kūrė programas jonizacijos skerspjūviams skaičiuoti naudodamas duomenų bazių procedūras.
5. Įdiegė didžiųjų duomenų technologijas, kurios leido išplėsti jonizacijos skerspjūvių skaičiavimų apimtis.
6. Teikė idėjas ir tyrimų planus moksliniams tikslams pasiekti.
7. Teikė technologijų diegimo pasiūlymus, kurie leistų vykdyti detalius teorinius jonizacijos skaičiavimus.

Disertacijos struktūra

Daktaro disertacija turi toliau aprašytą struktūrą. Pirmame skyriuje pristatoma tyrimo problema, aktualumas, mokslinis naujumas, pagrindinis tikslas ir tyrimo užduotys bei gynami teiginiai. Antrame skyriuje aprašomas naudotas metodas jonizacijos skerspjūviams skaičiuoti ir šis skyrius yra padalintas į keletą dalių. Pirmoje dalyje pateikiamos formulės suminiam jonizacijos skerspjūviui gauti, toliau gilinamasi į banginių funkcijų konstravimą, radiacinių bei Ožė šuolių spartų skaičiavimus. Kitos dalys skirtos pristatyti skaičiavimams naudotą iškraipytųjų bangų metodą, aprašomas rezonansinio sužadavimo-dvigubos autojonizacijos

procesas ir pristatomos transformacijos funkcijų formulės. Paskutinės dalys skirtos aptarti koreliacinius efektus ir metastabilių būsenų teorinį modeliavimą. Skyrius, kuriame pristatomi tyrimų rezultatai, padalintas atitinkamai pagal ginamus teiginius. Pateikiami sužadinių į aukštesnius nl sluoksnius tyrimų rezultatai volframo, seleno ir geležies jonams. Toliau aptariami koreliaciniai efektai, o po jų – skerspūvių transformacijos koeficiento analizės rezultatai. Pabaigoje vertinamas tiesioginės dvigubos jonizacijos proceso įtakos viengubos jonizacijos skerspūviams indėlis. Paskutiniame skyriuje pristatomos pagrindinės išvados.

TEORIJA

Smūginė jonizacija elektronais

Smūginė jonizacija elektronais yra vienas iš daugelio būdų atomui ar jonui netekti elektrono. Procesas vyksta, kai laisvasis elektronas susiduria su surištu atomu ar jono elektronu. Viena iš susidūrimo pasekmių gali būti vienguba tiesioginė jonizacija arba sužadėjimas. Vienguba tiesioginė jonizacija yra baigtinis procesas, sužadėjimas gali turėti skirtingus galutinius rezultatus.

Teorinėje dalyje pateikiamos formulės, kuriomis remiantis apskaičiuojamas elektrono smūginės jonizacijos skerspjūvis ir atsižvelgiama į daugiausiai įtakos turinčius procesus, kurie nulemia suminį jonizacijos skerspjūvio rezultatą.

Vienas pagrindinių tikslų yra suskaičiuoti jonizacijos skerspjūvius. Norint tai padaryti, reikia suprasti įvairius teorinius skerspjūvių skaičiavimo metodus.

Viengubos elektrono smūginės jonizacijos tikimybė yra išreiškiamą kaip visų jonizacijos procesų suminis skerspjūvis. Pradinė formulė yra:

$$\sigma_i(\epsilon_0) = \sum_j \sigma_{ij}(\epsilon_0). \quad (1)$$

$\sigma_i(\varepsilon_0)$ žymi suminį jonizacijos skerspjūvį esant laisvojo elektrono energijai ε_0 , o $\sigma_{ij}(\varepsilon_0)$ yra suminis jonizacijos proceso skerspjūvis atomui/jonui pereinant iš energijos lygmens i į lygmenį j , priklausantis nuo laisvojo elektrono energijos.

Elektrono perėjimo iš vieno energijos lygmens į kitą skerspjūvis gali būti išreikštas šia formule:

$$\sigma_{ij}(\varepsilon_0) = \sigma_{ij}^{\text{DI}}(\varepsilon_0) + \sigma_{ij}^{\text{II}}(\varepsilon_0), \quad (2)$$

$\sigma_{ij}^{\text{DI}}(\varepsilon_0)$ nusako tiesioginę jonizaciją iš lygmens i į lygmenį j , o σ_{ij}^{II} yra visų netiesioginių procesų, tokių kaip sužadanimų–autojonizacijos ir rezonansinio sužadavimo–dvigubos autojonizacijos, indėlis.

Tiesioginės smūginės jonizacijos elektronu skerspjūvis gali būti išreikštas smūgio stiprumu Ω [26] tokia formule:

$$\sigma_{ij}^{\text{DI}}(\varepsilon_0) = \frac{1}{k_0^2 g_i} \int_0^{\frac{\varepsilon_0 - I}{2}} \Omega_{ij}(\varepsilon_0, \varepsilon) d\varepsilon, \quad (3)$$

čia ε_0 ir k_0 yra atitinkamai atlekiančio elektrono energija ir kinetinis momentas, ε yra išlėkusio elektrono energija, I yra jonizacijos energija, g_i yra statistinis pradinės būsenos svoris. Ω yra smūgio stiprumas, kuris sumuojamas pagal visas dalines atlekiančio ir išlekiančio elektronų banginės funkcijas [26].

Ryšys tarp atlekiančio elektrono kinetinio momento ir energijos ε_0 yra parodomas šioje formulėje:

$$k_0^2 = 2\varepsilon_0 \left(1 + \frac{\alpha^2}{2} \varepsilon_0 \right), \quad (4)$$

čia α yra smulkiosios struktūros konstanta.

Šiame darbe nagrinėjamas keletas netiesioginių jonizacijos

procesų. Formulės (2) antras dėmuo gali būti išreiškiamas taip:

$$\sigma_{ij}^{\text{II}}(\epsilon_0) = \sigma_{ij}^{\text{EA}}(\epsilon_0) + \sigma_{ij}^{\text{REDA}}(\epsilon_0), \quad (5)$$

kur $\sigma_{ij}^{\text{EA}}(\epsilon_0)$ yra sužadinių–autojonizacijos proceso skersjūvis iš būsenos i į būseną j ir $\sigma_{ij}^{\text{REDA}}(\epsilon_0)$ yra rezonansinio sužadimo-dvigubos autojonizacijos proceso skerspjūvis atitinkamoms būsenoms.

Sužadinių–autojonizacijos procesas prasideda sužadiniu iš lygmens i į lygmenį k , iš kurio Ožė šuoliu pereina į lygmenį j ir pasiekia kitą jonizacijos etapą. Šio proceso skerspjūvis gali būti užrašomas taip:

$$\sigma_{ij}^{\text{EA}}(\epsilon_0) = \sum_k \sigma_{ik}^{\text{CE}}(\epsilon_0) B_{kj}^a, \quad (6)$$

čia $\sigma_{ik}^{\text{CE}}(\epsilon_0)$ atitinka CE skerspjūvį esant elektrono energijai ϵ_0 . B_{kj}^a yra auto-jonizacijos proceso šakojimosi koeficientas, kuris išreiškiamas formule:

$$B_{kj}^a = \frac{A_{kj}^a}{\sum_m A_{km}^a + \sum_n A_{kn}^r}, \quad (7)$$

kur A_{kj}^a yra Ožė šuolio tikimybė iš lygmens k į lygmenį j . A_{kn}^r yra radiacinio perėjimo tikimybė iš lygmens k į lygmenį n .

Suminis rezonansinio sužadimo-dvigubos autojonizacijos proceso skerspjūvis išreiškiamas taip:

$$\sigma_{ij}^{\text{REDA}}(\epsilon_0) = \sum_{kl} \sigma_{ik}^{\text{DC}}(\epsilon_0) B_{kl}^a B_{lj}^a, \quad (8)$$

čia $\sigma_{ik}^{\text{DC}}(\epsilon_0)$ yra $A^{(q+1)+}$ jono dielektroninio pagavimo skerspjūvis į lygmenį k [1]. B_{kl} and B_{lj} yra jono perėjimo procesų šakojimosi koeficientai, kuomet perėjimas vyksta iš lygmens k į lygmenį l ($A^{(q)+}$) ir tada į lygmenį j ($A^{(q-1)+}$).

Banginės funkcijos

Atomo/jono būsenos pradinės ir galutinės banginės funkcijos yra konstruojamos naudojantis šia išraiška [27, 28]:

$$\Psi_{\alpha} = \sum_i^{N_{\text{CSF}}} c_i(\alpha) \Phi_i, \quad (9)$$

Ψ ir Φ yra aproksimuota ir bazinė jono banginės funkcijos, taip pat jas galima vadinti, atitinkamai, atominės (ASF) ir konfiguracijos būsenos (CSF) banginėmis funkcijomis.

Šakojimosi koeficientai $c_i(\alpha)$ yra gaunami diagonalizuojant H hamiltonianą ir sprendžiant energijos būsenos lygtis:

$$E_{\alpha} = \int \Psi_{\alpha}^{\dagger} H \Psi_{\alpha} d\tau = \sum_{r,s} c_r^*(\alpha) \int \Phi_r^{\dagger} H \Phi_s d\tau c_s(\alpha) = c_{\alpha}^{\dagger} H c_{\alpha}. \quad (10)$$

Šiame darbe naudojamas Dirako-Foko-Sleiterio (angl. Dirac-Fock-Slater) hamiltonianas kuris aprašo reliatyvistinius efektus ir yra išreiškiamas taip [27]:

$$H = \sum_{i=1}^N H_D(i) + \sum_{\substack{i,j \\ i < j}}^N \frac{2}{r_{ij}}. \quad (11)$$

Čia $H_D(i)$ yra vienelektronis Dirako hamiltonianas. r_{ij} yra atstumas tarp dviejų sąveikaujančių elektronų.

Tolimesnis lygčių sprendimas atliekamas naudojant plačiai taikomas praktikas.

Radiaciniai šuoliai

Radiaciniai šuoliai tarp susietų atomo būsenų vyksta, kuomet yra sugeriamas fotonas ir elektronas pereina į aukštesnį arba sužadintą lygmenį. Taip pat, kuomet elektronas šoka į žemesnį lygmenį ir vyksta fotono emisija. Elektriniai dipoliniai šuoliai, dar vadinami leistiniais, yra stipriausi iš elektromagnetinių perėjimų [29]. Bendru atveju yra žinoma, kad dipoliniai šuoliai sudaro 98.8%, o elektriniai kvadrupoliniai šuoliai sudaro 0.6 % visų perėjimų, todėl pakankamai tikslu nagrinėti tik elektrinius dipolinius šuolius. Apibendrintas perėjimo operatorius yra [30]:

$$O_p^{(t)} = -e \sum_i r_i^t C_p^{(t)}(\theta_i, \phi_i). \quad (12)$$

Čia e yra elektrono krūvis, r_i^t yra dalelės pozicijos operatorius ir $C_p^{(t)}$ - sferinės funkcijos operatorius. Atvejis $O^{(1)}$ yra vadinamas dipoliniu operatoriumi. Indeksas i nusako visų elektronų koordinates.

Ožė šuoliai

Ožė šuoliai vyksta atomuose, kurie yra smarkiai sužadintose būsenoje ir turi vakansijų. Tai yra fundamentalus procesas vykstantis atomuose, kuriuose atsiranda elektronų vakansijos. Ožė perėjimai paprastai apibrėžiami kaip elektrostatinė dviejų elektronų sąveika. Vienas elektronas užpildo vakansiją ir abipusė sąveika perkelia energiją kitam elektronui, kuris po to palieka atomą kaip laisvasis Ožė elektronas. Tokio šuolio tikimybė priklauso

nuo lygmens pločio ir suminės būsenos suirimo tikimybės:

$$W_A(\gamma \rightarrow \gamma' \varepsilon \gamma'') = \hbar^{-1} |\langle \gamma' \varepsilon \gamma'' | H | \gamma \rangle|^2, \quad (13)$$

čia γ žymi autojonizuojančios būsenos banginės funkcijos, kuri yra diskretinio ir tolydaus spektro funkcijų superpozicijoje, kvantinius skaičius, γ' žymi atomo diskretinės būsenos banginę funkciją, ε yra laisvo elektrono energija, o γ'' žymi likusius elektrono ir atominės sistemos kvantinius skaičius. Ši formulė yra normalizuota ir sistemos hamiltonianas gali būti pasirinktas priklausomai nuo tiriamo atvejo. Energijos skirtumas ε , nusakantis dviejų atomo būsenų energijų skirtumą, išreiškiamas taip:

$$\varepsilon = E(\gamma) - E(\gamma'). \quad (14)$$

Ožė šuoliai įmanomi tik tuomet, kai suminis kampinis sistemos momentas J išlieka nepakitęs, šuolio tikimybė nepriklauso nuo jo projekcijos. Operatorius yra lyginis ir sistema išlaiko lyginumą.

Rezonansinio sužadavimo-dvigubos autojonizacijos procesas

Elektrono susidūrimas su jonu, esant didelei smūginei energijai, gali lemti vieno ar kelių elektronų netekimą. Toks procesas gali būti nagrinėjamas skaidant į atskirus žingsnius. Rezonansinio sužadavimo-dvigubos autojonizacijos procesu vadinama tokia situacija, kuomet sužadintas jonas turi pakankamai energijos dviems Ožė ar Koster-Kronig procesams [1]. Atominių duomenų tyrimų interpretacija leidžia manyti, kad rezonansinio sužadavimo-dvigubos autojonizacijos procesas gali sudaryti apie 20-30% iš visų jonizacijos procesų. Teoriniai skerspjūviai ne-

gali būti tikslūs, lyginant su eksperimentiniais rezultatais, jei neįtraukiamas rezonansinio sužadinimo-dvigubos autojonizacijos procesas [31].

Netiesioginių jonizacijos procesų modeliavimas reikalauja, kad būtų tiriami įvairūs suirimo keliai naudojant šakojimosi koeficientus. Tokie netiesioginiai, išsiskleidę procesai negali būti lengvai nusakomi teorijos dėl savo kompleksiško ir ypač tiriant daugiaelektronius jonus.

Dauguma trumpai gyvuojančių autojonizuojančių būsenų gali būti susijusios su dvigubos jonizacijos rezonansinio sužadinimo-dvigubos autojonizacijos procesais. Pakankamai lengva suprasti ir vizualizuoti tuos procesus, bet problemiška atlikti skaičiavimus, kadangi egzistuoja daug galutinių daugkartinės jonizacijos būsenų. Bendru atveju, Ožė procesai, kurie susiję su dauguma vidinių sluoksnių perėjimų, lemia ne tik elektronų išmetimus bet ir radiacines kaskadas.

Iškraipytųjų bangų artinys

Iškraipytųjų bangų artinys buvo pristatytas 1933 metais Massey ir Mohr [32] sprendžiant elektrono išsklaidymo problemą. Šis metodas nebuvo plačiai naudojamas iki praeito amžiaus septinto dešimtmečio, kuomet kiti plokštumos-bangos artiniai negalėjo tiksliai atkurti eksperimentinių duomenų [33].

Iškraipytųjų bangų idėja yra pakankamai paprasta. Svarstykite du atvejus. Pirmasis, kuomet atlekiantis elektronas yra elastiškai išsklaidomas pradinės būsenos atomo potencialo. Tuomet atlekiantis elektronas pereina į būseną, kurioje jis yra išsklaidomas galutinės būsenos atomo potencialo. Tai yra tiesioginis procesas. Antrasis atvejis, kuomet atlekiantis elektronas yra pagauamas į surištą būseną su atomu ir vienas iš surištųjų elektronų

yra elastiškai išsklaidomas. Tai yra vadinamasis apsikeitimo procesas. Abiem atvejais pradinės ir galutinės būsenos yra apskaičiuojamos naudojant perturbacijos metodus.

Vienelektronės banginės funkcijos yra naudojamos suformuoti bazinės daugiaelektronės funkcijas laisvajam elektronui ir gauti jono susidūrimo skerspjūvius.

Skerspjūvių proporcingumo koeficientas

Proporcingumo principą panaudojo Lotz savo formulėje [34] skaičiuodamas jonizacijos skerspjūvius. Vėliau tai išsiplėtė į taisykles, kurias aprašė Aichele ir kiti [35]. Buvo daugybė bandymų, bet nė viena iš pasiūlytų proporcingumo taikymo taisyklių negali patikimai modeliuoti geležies ar volframo viengubos ar daugybinės jonizacijos skerspjūvių. Neseniai išsami proporcingumo formulių apžvalga buvo padaryta nuo He iki Zn jonų [36]. Idėja naudoti proporcingumo formules nėra nauja, tačiau ji niekada nebuvo taikyta iškraipytųjų bangų metodui. Savo tyrimo metu mes pastebėjome, kad kai kurie mūsų pasirinkti ir tiriami jonų teoriniai ir eksperimentiniai skerspjūviai turi skirtumus, kurie gali būti aprašomi proporcingumo formulėmis.

Yra žinoma, kad iškraipytųjų bangų metodo pateikti skerspjūviai paprastai būna aukščiau eksperimentinių, tai paskatino gilintis toliau. Iš esmės, proporcingų pataisų naudojimas koreguoja naudojamą skaičiavimo modelį ir gali atsižvelgti į [23]: elektronų apsikeitimų efektus, plokščiųjų bangų iškraipymus, poliarizacijos efektus, branduolio krūvio ekranavimą. Taip pat įmanoma, kad proporcingumo koeficiento naudojimas koreguoja kitus fizikinius procesus, kurie vyksta jono viduje arba jo artimoje aplinkoje ir/arba eksperimentinių duomenų apdorojimo netikslumus.

Jonizacijos proceso iš lygmens i į lygmenį f skerspjūvis atveju, kai $Q^{(n)+}$ pasikeičia į $Q^{(n+1)+}$, yra išreiškiamas sumuojant visus nagrinėjamus procesus, panašiai kaip ir pilno skerspjūvio atveju (žr. 2). Jonizacijos skerspjūvių proporcijos yra keičiamos naudojant šią formulę [23]:

$$\sigma_{ij}^{CE*}(\varepsilon) = \frac{\varepsilon}{\varepsilon + \Delta E_{ij} + \varepsilon_b} \sigma_{ij}^{CE}(\varepsilon) \quad (15)$$

kur ε_b yra elektrono ryšio energija. Tiesioginės jonizacijos proporcijoms pakeisti naudojama ši formulė:

$$\sigma_{ij}^{CI*}(\varepsilon) = \frac{\varepsilon}{\varepsilon + I + \varepsilon_k} \sigma_{ij}^{CI}(\varepsilon), \quad (16)$$

čia I yra jonizacijos energija ir ε_k yra kinetinė susieto elektrono energija. Kita naudojama formulė yra:

$$\sigma_{ij}^{CI*}(\varepsilon) = \frac{\varepsilon}{\varepsilon + I} \sigma_{ij}^{CI}(\varepsilon). \quad (17)$$

Šiuo atveju kinetinė energija nėra įtraukiama į lygtį, aprašant tuos atvejus, kuomet tai yra labai mažas dydis $\varepsilon_k \ll (\varepsilon + I)$.

Koreliaciniai efektai

Kelių elektronų tarpusavio sąveika atome yra svarbi problema. Įtraukiant įvairius koreliacinius efektus gaunamos tikslesnės vertės. Koreliacinė energija apibrėžiama taip [37]:

$$E_{corr} = E_{exact} - E_{HF}. \quad (18)$$

E_{exact} yra žinoma tiksliai arba labai dideliu tikslumu, dažnai tai eksperimentinė vertė su teorinėmis korekcijomis. E_{HF} yra Hartrio-Foko (Hartree-Fock) metodu suskaičiuota energija.

Visos nagrinėjamos atomo banginės funkcijos yra laikomos bazinių funkcijų plėtiniais tam tikrai konfigūracijai, kitos konfigūracijos turi tokį patį lygiškumą:

$$\Phi(\Gamma J) = \sum_{K'\gamma'} C_{K'\gamma'J}^{\Gamma} \Psi(K'\gamma'J). \quad (19)$$

Čia $C_{K'\gamma'J}^{\Gamma}$ yra plėtimo koeficientas, Ψ yra vienos konfigūracijos funkcija apibrėžta kaip vienos ar daugiau konfigūracijų aproksimacija, Φ yra daugybinė konfigūracijų funkcija, atitinkanti konfigūracijų maišymąsi.

Konfigūracijų sąveikos stiprumo metodologija yra naudojama sudarant sąrašą besimaišančių konfigūracijų, turinčių didžiausią įtaką nagrinėjamai konfigūracijai. Konfigūracijų sąveikos stipris aprašomas formule [30, 38]:

$$T(K, K') = \frac{\sum_{\gamma\gamma'} \langle \Phi(K\gamma) | H | \Phi(K'\gamma') \rangle^2}{\bar{E}(K, K')^2}. \quad (20)$$

Šis dydis, padalintas iš nagrinėjamos konfigūracijos K statistinio svorio $g(K)$, nusako vidutinį besimaišančių konfigūracijų K' indėlį į banginės funkcijos plėtimą. Sumavimas formulėje (20) yra atliekamas per visas konfigūracijų K ir K' būsenas γ ir γ' . Dydis $\langle \Phi(K\gamma) | H | \Phi(K'\gamma') \rangle$ yra dviejų elektronų elektrostatinis Hamiltonianas ir $\bar{E}(K, K')$ yra vidutinis konfigūracijų energijos

skirtumas:

$$\begin{aligned} \bar{E}(K, K') &= \frac{\sum_{\gamma\gamma'} [\langle \Phi(K\gamma) | H | \Phi(K\gamma) \rangle - \langle \Phi(K'\gamma') | H | \Phi(K'\gamma') \rangle]}{\sum_{\gamma\gamma'} \langle \Phi(K\gamma) | H | \Phi(K'\gamma') \rangle^2} \\ &\quad \times \langle \Phi(K\gamma) | H | \Phi(K'\gamma') \rangle^2. \end{aligned} \quad (21)$$

Metastabilių būsenų indėlio teorinis modeliavimas

Eksperimentiniai duomenys nepateikia informacijos apie jonų dalis tam tikruose lygmenyse. Tokiam experimentinės skerspjūvio funkcijos $\sigma^{exp}(E_e)$ modeliavimui naudojamos linijinės teorinių skerspjūvių $\sigma_i^{th}(E_e)$ kombinacijos, apskaičiuotos jonams esant pradiniuose lygmenyse i . Dalys λ_i ($\sum \lambda_i = 1$) yra nustatomos lyginant teorinių skerspjūvių statistines sumas su eksperimento duomenimis. Idealiu atveju eksperimento skerspjūvis aprašomas taip:

$$\sigma^{exp}(E_e) = \sum_{i=1}^m \lambda_i \sigma_i^{th}(E_e) \quad (22)$$

su tinkamomis jonų spindulio dalimis λ_i . Čia m yra kiekis lygmenų, kurie įtraukti į matavimus. Paprastai jonai yra generuojami iš plazmos ir pagrįstai galima taikyti statistinį lygmenų pasiskirstymą kiekvienai konfigūracijai. Su šia pradine sąlyga

formulė 22 modifikuojama ir sukuriamas pirmasis modelis:

$$\sigma^{exp}(E_e) = \sum_k c_k \frac{\sum_i (2 \times {}^k J_i + 1) \times {}^k \sigma_i^{th}(E_e)}{\sum_i (2 \times {}^k J_i + 1)}, \quad (23)$$

kur c_k yra proporcingumo koeficientas kiekvienai nagrinėjamai konfigūracijai, trupmena su sumavimu m yra konfigūracijos vidutinis skerspjūvis ilgai gyvuojantiems konfigūracijos k lygmenims m , ${}^k J_m$ yra konfigūracijos k lygmens m pilno kampinio momento kvantinis skaičius ir ${}^k \sigma_m^{th}(E_e)$ yra konfigūracijos k lygmens m suminis viengubos jonizacijos skerspjūvis.

Antras modelis sumažina naudojamų parametrų skaičių iki vieno. Jei pagrindinis jonų šaltinis yra plazma, tuomet galima taikyti Boltzmano pasiskirstymą ir problemą sumažinti iki tinkamos temperatūros T suradimo. Formulė 22 perrašoma taip:

$$\sigma^{exp}(E_e) = \frac{\sum_{i=1}^m (2J_i + 1) \exp[-E_i/(kT)] \sigma_i^{th}(E_e)}{\sum_{i=1}^m (2J_i + 1) \exp[-E_i/(kT)]}. \quad (24)$$

Čia J_i yra pilno kampinio momento kvantinis skaičius, o E_i yra lygmens i sužadavimo energija.

Trečiasis modelis visas dalis laiko laisvai kintančiais parametrais. Dalys λ_i parenkamos taip, kad funkcija

$$f(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_m) = (\sigma^{exp}(E_e) - \sum_{i=1}^m \lambda_i \sigma_i^{th}(E_e))^2 \quad (25)$$

pasiekia minimumą.

Visi trys modeliai pateikia skirtingus rezultatus.

REZULTATAI

Jonizacijos skerspjuvio konvergencija

Sužadinių į aukštesnius sluoksnius tyrimas yra svarbi bendro jonizacijos tyrimo dalis dėl kelių priežasčių:

- daugumoje atvejų sužadinių skerspjuviai sudaro didesniąją dalį pilno jonizacijos skerspjuvio,
- aukštesnių nl sluoksnių įtraukimas ir išplėtimas atveria daugiau įvairių procesų tyrinėjimo kelių,
- jonizacijos skerspjuvio konvergencija leidžia daryti prielaidą, kad teorinių ir eksperimentinių skerspjuvių palyginimas yra atliekamas įtraukiant visus pagrindinius jonizacijos rezultatai įtakojančius procesus.

Toliau yra aprašomi kiekvieno atskiro tyrimo atvejai.

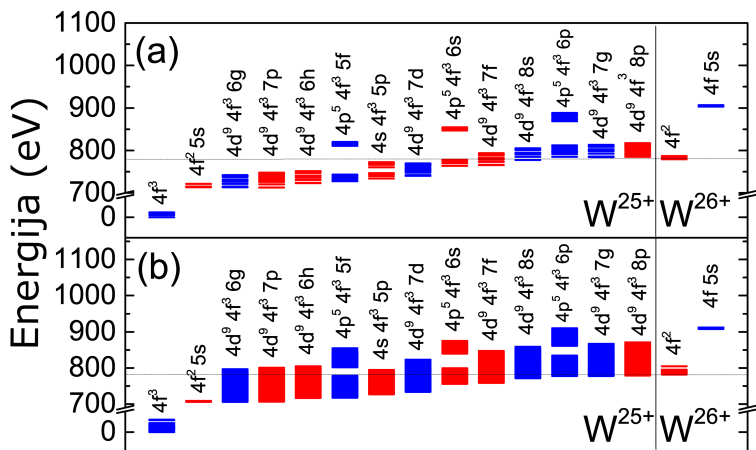
Volframo jonai

Atlikome skaičiavimus W^{5+} , W^{25+} ir W^{26+} jonams. Viršutinė n riba priklauso nuo to, ar sužadinių–autojonizacijos skerspjuviai pasiekia konvergenciją. Viršutinė n riba nustatoma

pagal tai, kad aukštesnių sužadinių indėlis, įvertintas subkonfigūracijoms, yra mažesnis nei 5%. Sužadimui į sluoksnius su orbitiniu kvantiniu skaičiumi buvo apriboti sąlyga $l \leq 6$.

W^{25+} jonas

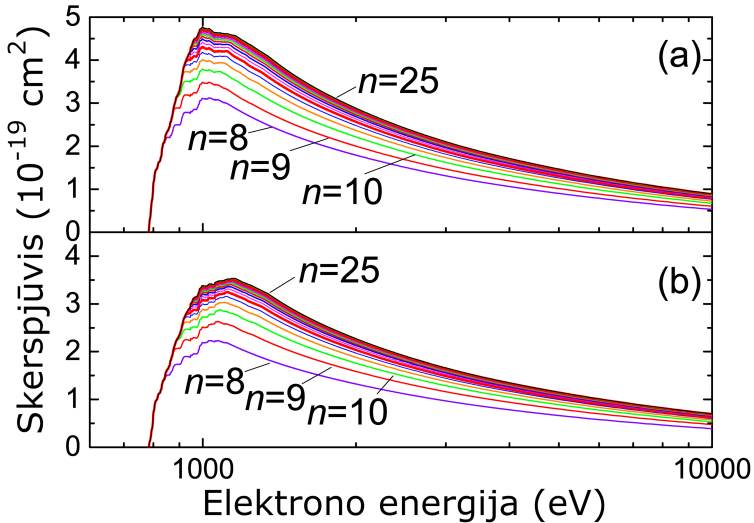
Analizė remiasi pagrindinės konfigūracijos $4f_{5/2}^3$ ($J = 4.5$) lygmenis, kuris buvo pasirinktas iš 41 lygmenis, jonizacijos tyrimu. Pirmasis sužadintas lygmuo $4f_{5/2}^2(4)5s$ ($J = 3.5$) yra panašus į pagrindinį lygmenį, išskyrus tai, kad sluoksnių $n \leq 8$ sužadinių indėlis labiau išreikštas nei tų, kurių $9 \leq n \leq 25$.



1 paveikslas: W^{25+} jono dviejų žemiausių konfigūracijų ir konfigūracijų, kurių lygmenys išsidėsto abipus jonizacijos slenksčio subkonfigūracijos (a) ir energijos lygmenys (b). Raudona – lyginės konfigūracijos, mėlyna – nelyginės konfigūracijos.

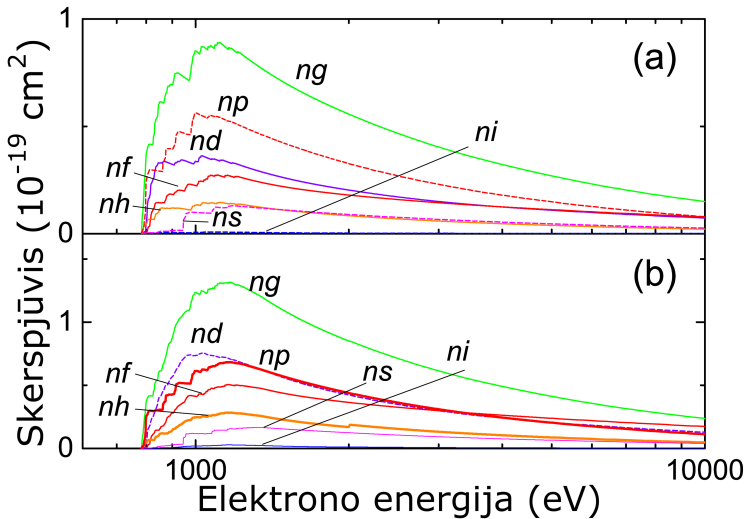
Visi nagrinėjami lygmenys yra žemiau dvigubos jonizacijos slenksčio (1612,38 eV). Pirmos dvi žemiausios jonų W^{25+} ir W^{26+} konfigūracijos turi energijos lygmenis, kurie išsidėsto abipus W^{25+} jonizacijos slenksčio (žr. 1 paveikslą). Atitinkamos konfigūracijų subkonfigūracijos yra pateiktos 1 (a) paveiksle.

Visos pavaizduotos konfigūracijos atitinka tą patį elektroninį šuolį kaip ir W^{27+} [39] ir W^{26+} [40] jonų atveju, išskyrus kelis atvejus. Konfigūracijos, kurios yra gaunamos iš pagrindinės konfigūracijos vykstant $4d \rightarrow 6g$, $4d \rightarrow 6h$, $4d \rightarrow 7p$, ir $4s \rightarrow 5p$ sužadanimams yra žemiau W^{26+} ir W^{27+} jonų jonizacijos slenksčio. Sužadanimai iš $4d$ sluoksnio į $6 \leq n \leq 8$ sluoksnius sukuria daug konfigūracijų, kurių lygmenų energija yra abipus W^{25+} jonizacijos slenksčio (žr. 1 (b) paveikslą). Visos $4s4f^35p$, $4d^94f^36g$, $4d^94f^36h$, $4d^94f^37p$ ir $4d^94f^37d$ konfigūracijų subkonfigūracijos yra žemiau jonizacijos slenksčio (1 (a) paveikslas) ir atitinkami subkonfigūracijų vidurkio iškraipytųjų bangų skaičiavimai nerodo indėlio į sužadanimų–autojonizacijos procesą. Tuo tarpu, $4p^54f^36p$ ir $4d^94f^38p$ subkonfigūracijos yra aukščiau jonizacijos slenksčio (1 (a) paveikslas).



2 paveikslas: W^{25+} jono pagrindinio lygmens sužadanimų–autojonizacijos kanalai į aukštus nl sluoksnius. Iškraipytųjų bangų lygmenų skaičiavimai: (a) be radiacinio gesinimo ir (b) su radiaciniu gesinimu.

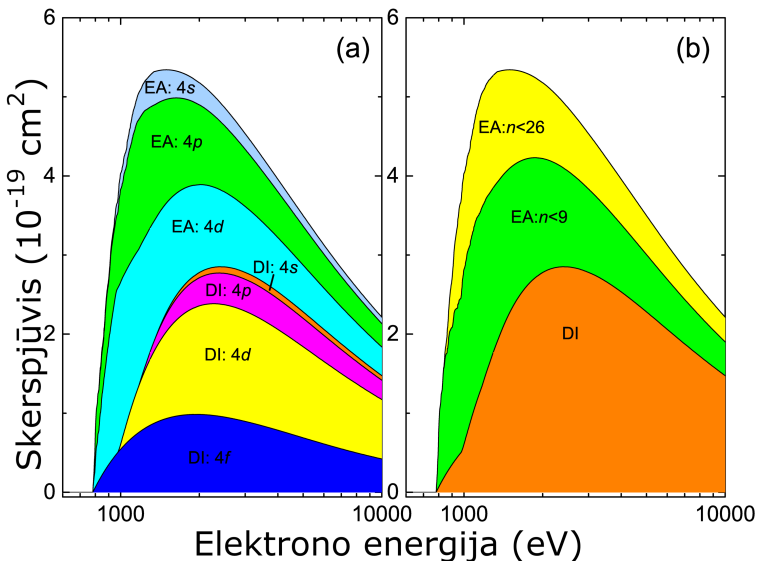
Sužadinių–autojonizacijos kanalų indėliai, atsirandantys iš aukštesnių nl sluoksnių $n \leq 25$, yra pateikti 2 paveiksle. Lyginami duomenys, gauti naudojant iškraipytųjų bangų lygmenų aproksimaciją be (2 (a) paveikslas) ir su radiaciniu gesinimu (2 (b) paveikslas). Aiškiai matyti, kad sužadinių–autojonizacijos kanalai, kylantys iš aukštesnių sluoksnių, didina skerspjūvius apytiksliai 60 %. Subkonfigūracijų vidurkių iškraipytųjų bangų metodu gauti skerspjūviai taip pat turi tokią pačią tendenciją, tačiau čia neatvaizduoti. Gauti rezultatai rodo, kad yra būtina įtraukti sužadinius į aukštesnius nl sluoksnius šiam jonui. Ši išvada koreliuoja su kitų autorių atradimais W^{26+} [40] ir W^{27+} [39] jonams. Taip pat radiacinis gesinimas mažina netiesioginio proceso skerspjūvius apie 25 %.



3 paveikslas: W^{25+} jono pagrindinio lygmens sužadinių į įvairias orbitales skerspjūviai: a) $n \leq 8$, b) $n \leq 25$. iškraipytųjų bangų lygmenų skaičiavimai su radiaciniu gesinimu.

3 paveiksle pavaizduoti iškraipytųjų bangų lygmenų resulta-

tai įvairiems nl sluoksniams su radiaciniu gesinimu. Pažymėtina, kad suminis sužadinių indėlis iš $4s$, $4p$ ir $4d$ sluoksnių į $l = 4$ orbitale yra didžiausias lyginant su kitomis. Taip pat sužadiniams į $l = 2$ orbitale yra stiprus sužadinių–autojonizacijos–sužadinių kanalas. Šiuo atveju santykinis indėlis yra stipresnis $n \leq 25$ sluoksnių (3 (b) paveikslas) lyginant su sužadiniams į $n \leq 8$ (3 (a) paveikslas). Tai galima paaiškinti tuo, kad stipriausi sužadiniams vyksta į $l = 2$ orbitale, kuri vėliau sukuria konfiguracijas su energijos lygmenimis virš jonizacijos slenksčio.



4 paveikslas: W^{25+} jono pagrindinio lygmens suminiai iškraipytųjų bangų lygmenų jonizacijos skerspjuviai. Indėliai iš skirtingų sluoksnių žymimi skirtingomis spalvomis. (a) sužadinių–autojonizacijos ir tiesioginės jonizacijos indėliai iš įvairių sluoksnių ir (b) sužadinių–autojonizacijos indėliai iš sužadinių į $n \leq 8$ sluoksnius ir $9 \leq n \leq 25$ sluoksnius. Iškraipytųjų bangų lygmenų skaičiavimai su radiaciniu gesinimu.

Suminiai teoriniai viengubos jonizacijos elektronais sker-

spjūviai W^{25+} jonui yra pavaizduoti 4 paveiksle. Įvairių sluoksnių indėliai tiesioginės jonizacijos ir sužadinių–autojonizacijos procesams yra pavaizduoti 4 (a) paveiksle. Aiškiai matyti, kad $4d$ sluoksnis dominuoja šitame jone ir lyginant procesų indėlius, sužadinių–autojonizacijos indėlis žymiai didesnis nei tiesioginės jonizacijos.

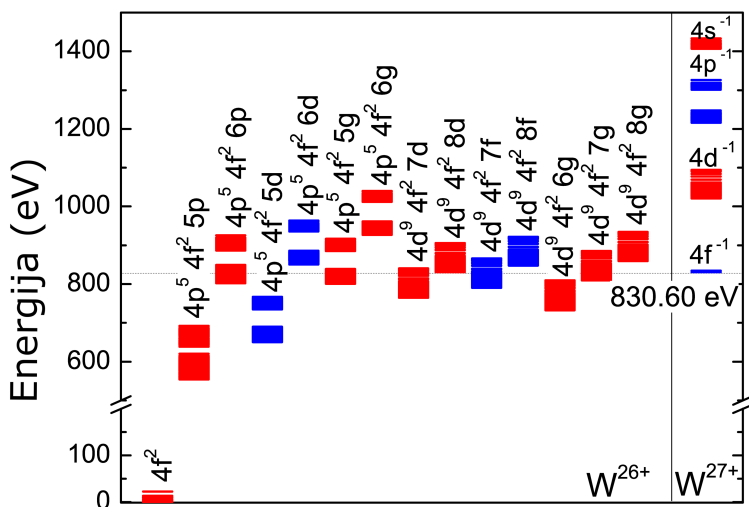
Įdomu tai, kad sužadinių–autojonizacijos procesas sudaro apie 50 % pilno jonizacijos skerspjūvio. Tyrimas, kuris rėmėsi CADW skaičiavimais, gavo santykinai mažą sužadinių–autojonizacijos indėlį jonams nuo W^{11+} iki W^{27+} [41]. Kiti autoriai [40] manė, kad konfigūracijų vidurkio aproksimacijos tyrimo metodas gali būti priežastis, dėl ko gauta sumažinta sužadinių–autojonizacijos proceso įtaka. 4 (b) paveikslas aiškiai rodo, kad naudojant iškraipytųjų bangų metodą net sužadiniai į $n \leq 8$ sluoksnius duoda nemažą indėlį į suminius W^{25+} jono jonizacijos skerspjūvius.

Darome išvadą, kad sužadiniai į aukštesnius nl sluoksnius yra svarbūs tiriant W^{25+} jono smūginę jonizaciją elektronais. Tiesioginės jonizacijos skerspjūviai, skaičiuoti naudojant jonizuojančio jono potencialą, yra maždaug 5% didesni negu gautos vertės naudojant jonizuoto jono potencialą. Sužadiniai iš $n > 25$ sluoksnių nebuvo tirti, bet vertinama, kad jie sudarytų mažiau nei 5% pilno jonizacijos skerspjūvio. Taip pat galimos papildomos paklaidos dėl neįtrauktų koreliacinių efektų.

W^{26+} jonas

Pagrindinė W^{26+} konfigūracija yra $[Ni] 4s^2 4p^6 4d^{10} 4f^2$ ir susideda iš 13 detalios struktūros lygmenų. Apskaičiuotas viengubos jonizacijos slenkstis yra ties 830,60 eV, lygmenys išsidėsto 23,08 eV energijos ruože. Pagrindinių konfigūracijų, duodančių

didžiausią indėlį sužadinių–autojonizacijos skerspjūviams, kartu su pagrindinėmis W^{26+} ir W^{27+} jonų konfigūracijomis, energijos lygmenys atvaizduoti 5 paveiksle. Gauti energijos lygmenys, lyginant su pagrindiniu lygmeniu, yra truputį aukščiau nei GRASP2K [42] energijos lygmenys [43], išskyrus aukščiau. Skirtumas aiškinamas koreliacinių efektų įtaka, kurie buvo įvertinti ankstesniuose skaičiavimuose naudojant koreliacinių efektų stiprį [38, 44–46]. Šiame darbe pristatomas vienos konfigūracijos tyrimas.



5 paveikslas: W^{26+} ir W^{27+} jonų energijos lygmenų diagrama. Vaizduojamos pagrindinės ir turinčios stipriausius sužadinių–autojonizacijos ir tiesioginės jonizacijos kanalus konfigūracijos. Papildomai, rodomos konfigūracijos, siejamos su sužadimais turinčiais mažiausią pagrindinį kvantinį skaičių.

Norėdami detaliam įvertinti tiesioginės jonizacijos ir sužadinių–autojonizacijos procesų įtaką pagrindinės konfigūracijos skerspjūviams, mes W^{26+} jono kiekvienam lygmeniui atskirai tyrėme šiuos procesus. Didžiausias indėlis tiesioginės joniza-

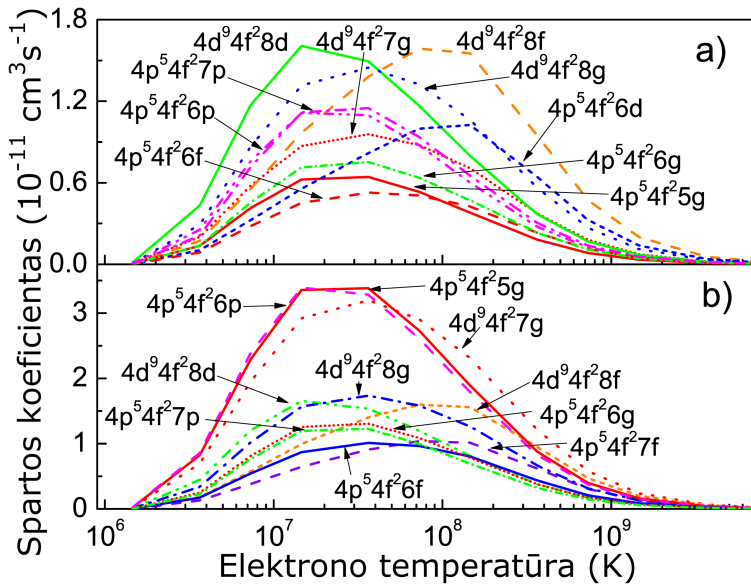
cijos procesui yra iš $4d$ sluoksnio jonizacijos, taip pat $4p$ ir $4f$ indėlis yra panašus, tačiau mažiau reikšmingas. Mažiausią indėlį duoda $4s$ sluoksnio jonizacija. Gautos pagrindinės konfigūracijos visų lygmenų tiesioginės jonizacijos spartos yra žemiau CADW verčių [41], kas jau buvo pastebėta ankstesniuose tyrimuose [40, 47–49]. Tai gali būti aiškinama skirtingų potencialų naudojimu CADW skaičiavimuose.

Sužadinių–autojonizacijos kanalai, kurie atitinka stipriausius sužadinius pavaizduoti 6 paveiksle. Žemose temperatūrose, didžiausias indėlis pagrindinio lygmens sužadinių–autojonizacijos procesui kyla iš $4d^9 4f^2 8d$, $4d^9 4f^2 8g$ ir $4p^5 4f^2 6p$ konfigūracijų (6 (a) paveikslas). Vidutinių temperatūrų ruože, dominuoja sužadiniai į $4d^9 4f^2 8d$, $4d^9 4f^2 8f$ ir $4d^9 4f^2 8g$ konfigūracijas. Aukštesiose temperatūrose sužadiniai į $4d^9 4f^2 8f$, $4p^5 4f^2 6d$ ir $4d^9 4f^2 8g$ turi didžiausią įtaką. Pastebėtina, kad silpnėsi sužadiniai į $n \leq 8$ sluoksnius duoda apie 40%.

Mūsų tyrimas aiškiai rodo, kad sužadiniai į aukštesnius nl sluoksnius yra svarbūs ir koreguoja spartos koeficientų vertes. Tyrimams reikia naudoti detalų lygmenų tyrimą, nes Maksvelo spartų koeficientai sužadinių–autojonizacijos proceso atveju gali skirtis iki 60%. Mūsų pateikti Maksvelo spartų koeficientai turi būti naudojami plazmos modeliavimo parametrams.

W⁵⁺ jonas

Nustatėme 29 lygmenis, kurie priklauso $4f^{13} 5d^2$ konfigūracijai, 8 lygmenys iš $5p^5 5d^2$ konfigūracijos ir 28 lygmenys iš $4f^{13} 5d 6s$ konfigūracijos su pakankamai ilgomis gyvavimo trukmėmis. Jie buvo nustatyti vertinant elektrinius dipolinius, kvadrupolinius ir oktopolinius, taip pat ir magnetinius dipolinius ir kvadrupolinius šuolius iš $5d$, $6s$, $4f^{13} 5d^2$, $5p^5 5d^2$ ir $4f^{13} 5d 6s$

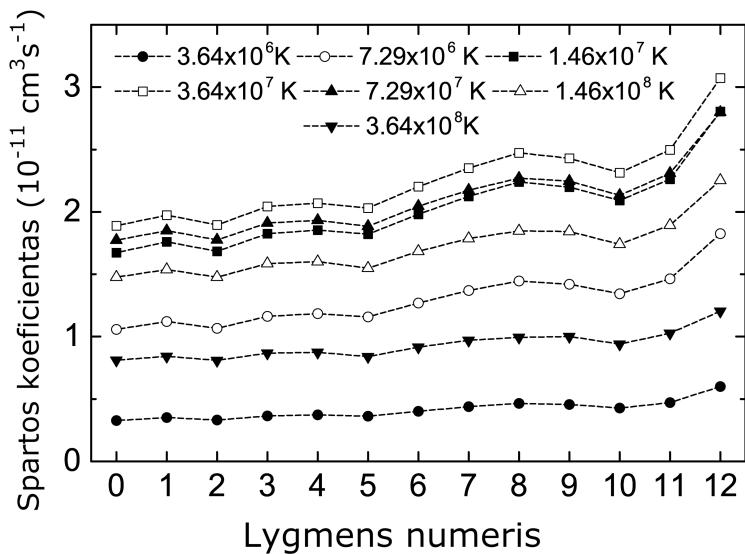


6 paveikslas: Konfigūracijų, duodančių didžiausią indėlį sužadinių–autojonizacijos spartų koeficientams, sužadiniams $i \leq 8$ sluoksnius: (a) žemiausio lygmens ir (b) aukščiausią pagrindinės konfigūracijos lygmenį.

konfigūracijų lygmenų.

W^{5+} jono pagrindinės konfigūracijos lygmenų stipriausi sužadinių–autojonizacijos kanalai yra vaizduojami 8 paveiksle. Penki perėjimai ($4f \rightarrow 5f$, $5s \rightarrow 5d$, $5p \rightarrow 6d$, $5p \rightarrow 5f$, $5p \rightarrow 6p$) duoda apytiksliai pusę visų suminių sužadinių–autojonizacijos skerspjūvių. Tik vienas ($5p \rightarrow 6d$) sužadinitas sukuria nelyginę konfigūraciją. Visos galutinės stipriausių sužadinių konfigūracijos turi energijos lygmenis aukščiau viengubos jonizacijos slenksčio, išskyrus $5p^5 5d 6p$ konfigūraciją, kurios dalis lygmenų yra žemiau slenksčio (žr. 9 paveikslą).

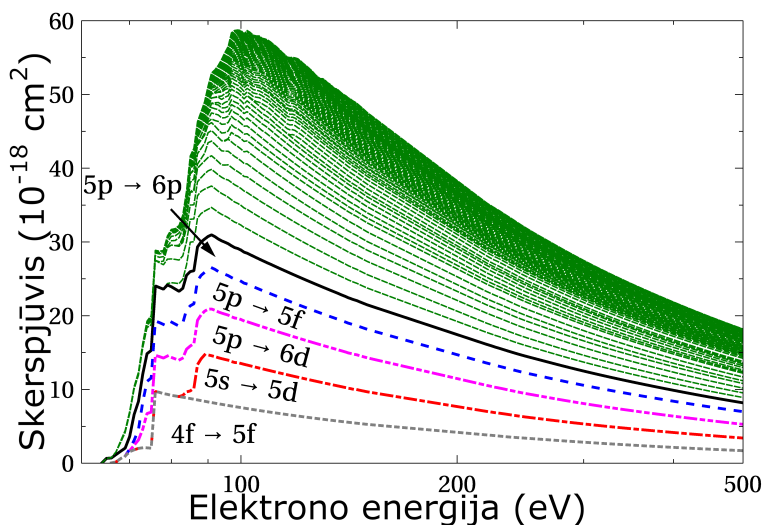
Energetiškai žemiausių konfigūracijų lygmenys ir konfigūracijos, duodančios stipriausius W^{5+} jono sužadinius iš pag-



7 paveikslas: W^{26+} jono sužadinių iš pagrindinės konfigūracijos lygmenų į $n \leq 8$ ir $l \leq 6$ sluoksnius sužadinių–autojonizacijos spartų koeficientai. Taškus jungiančios linijos nupieštos patogumo dėlei.

rindinės konfigūracijos, pavaizduotos 9 paveiksle. Papildomai pavaizduotos W^{6+} jono konfigūracijos, kurios gaunamos viengubos smūginės jonizacijos būdu iš W^{5+} jono lygmenų, esančių žemiau dvigubos jonizacijos slenksčio. Ir dar įtraukti energetiškai žemiausi W^{7+} jono lygmenys, kurie gali būti pasiekiami iš W^{5+} tiesioginės dvigubos jonizacijos būdu.

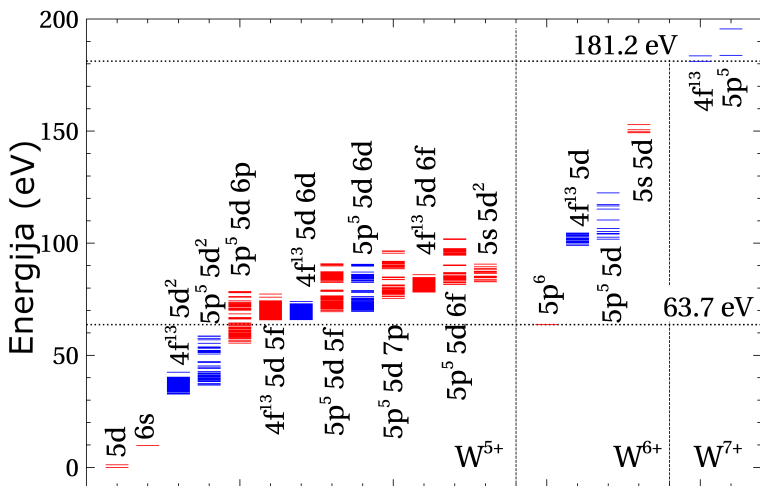
9 paveiksle matome, kad $5p^5 5d 6p$ konfigūracijos energijos lygmenys išsidėsto abipus W^{6+} jono pagrindinio lygmens. Taip pat konfigūracija $5p^5 5d 6s$ turi energijos lygmenis abipus jonizacijos slenksčio. Šios autojonizuojančios konfigūracijos gali duoti klaidingus rezultatus, jei naudojamas konfigūracijų vidurkių metodas. Tokiais atvejais būtina naudoti detalų lygmenų tyrimą.



8 paveikslas: W^{5+} jono pagrindinio lygmens suminiai sužadinių–autojonizacijos kanalų skerspjūviai. Stipriausi kanalai yra nurodyti.

Tiesioginio ir netiesioginio jonizacijos proceso indėlis iš pagrindinės konfigūracijos yra parodytas 10 paveiksle. Stipriausias tiesioginės jonizacijos indėlis yra siejamas su $4f$ sluoksniu, kuris turi daugiausiai elektronų. sužadinių–autojonizacijos procesas dominuoja žemų energijų pusėje. Didžiausias sužadinių–autojonizacijos indėlis kyla iš $5p \rightarrow 5d$ perėjimo, išskyrus $5d$ konfigūraciją. To priežastis, yra ta, kad visi sužadintos $5p^5 5d^2$ konfigūracijos lygmenys yra žemiau jonizacijos slenksčio (žr. 9 paveikslą). $5p \rightarrow 5d$ sužadinių skerspjūviai yra daug didesni nei tiesioginės jonizacijos skerspjūviai, kurie yra labai panašūs visų nagrinėjamų konfigūracijų. Tai patvirtina Stenke *et al.* anksčiau išsakytus teiginius.

Naujausi eksperimentiniai skerspjūviai yra lyginami su teoriniais dviejų pagrindinės konfigūracijos lygmenų viengubos jo-

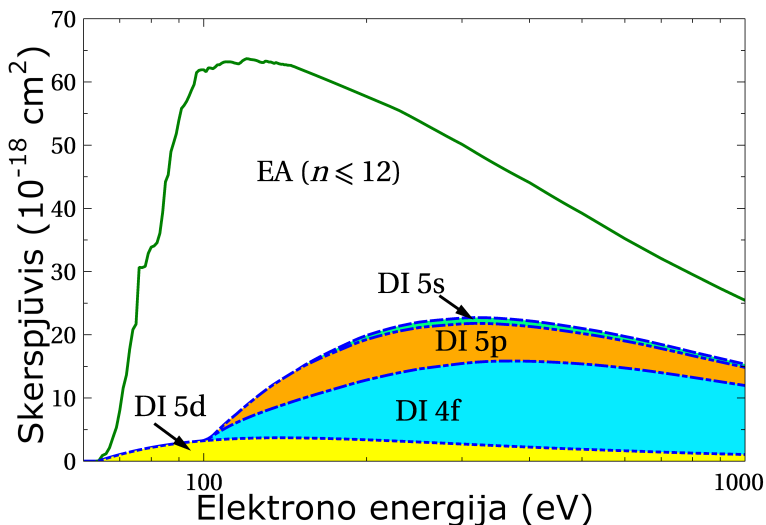


9 paveikslas: W^{5+} , W^{6+} ir W^{7+} jonų pagrindinių konfigūracijų energijų lygmenys. Lyginės konfigūracijos spalvintos raudonai, nelyginės - mėlynai. Taškuotos horizontalios linijos žymi W^{5+} jono viengubos ir dvigubos jonizacijos slenksčius.

nizacijos skerspjūviais 11 paveiksle. Demonstruojami teoriniai skerspjūviai su sužadimais į sluoksnius su pagrindiniais kvantiniais skaičiais $n = 7$ ir $n = 12$. Matomas $\sim 20\%$ skirtumas tarp $n = 7$ ir $n = 12$ rezultatų ties skerspjūvių pikais. Ankstesni labiau jonizuotų volframo jonų tyrimai: W^{18+} [47], W^{25+} [49], W^{26+} [40] ir W^{27+} [39, 52] parodo sužadimų į aukštesnius sluoksnius ($n > 12$) svarbą, tačiau W^{5+} jono atveju, aukštesnių sluoksnių indėlis yra nykstantis.

Skaičiavimai apsiribojo pagrindinės konfigūracijos ir pagrindinio lygmens tyrimu. Nepaisant to, gautas geras sutapimas su eksperimentu nuo 70 eV, o nesutapimai buvo interpretuoti kaip eksperimento metu galimai buvęs jonų mišinys su pagrindinės būsenos ir metastabiliais lygmenimis.

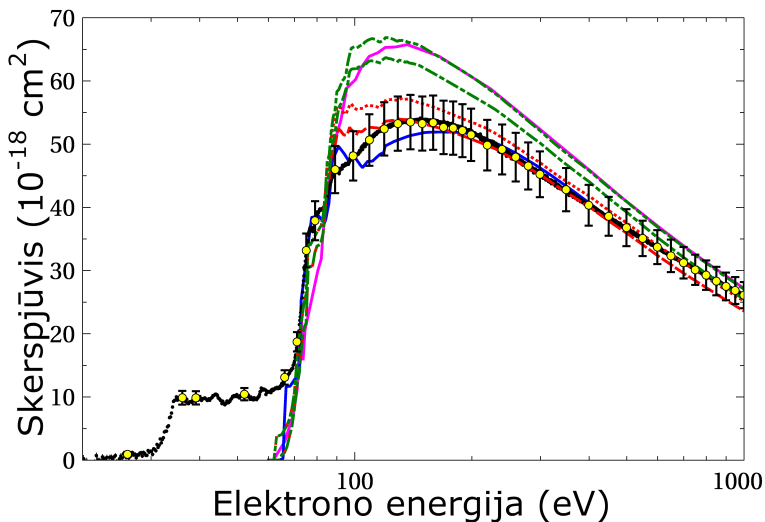
11 paveiksle taip pat lyginami mūsų duomenys su neseniai atliktais Zhang *et al.* [50] iškraipytųjų bangų lygmenų skaičia-



10 paveikslas: Suminiai elektrono smūginės viengubos jonizacijos W^{5+} pagrindinio lygmens skerspjūviai. Spalvoti plotai rodo tiesioginės jonizacijos procesų indėlį iš skirtingų sluoksnių.

vimais. Yra nežymūs gautų rezultatų skirtumai, kurie gali būti aiškinami teorinių analizės metodų skirtumais.

Sužadanimų–autojonizacijos kanalų indėlis į W^{5+} jonizacijos skerspjūvius, susidedantis iš sužadanimų į $n = 11$ sluoksnius, yra ~ 1.1 Mb ties skerspjūvio piku, o $n = 12$ sluoksniai prideda ~ 0.8 Mb. Vertinant, kad $n + 1$ ir n sluoksnio indėlio santykis yra $0.8/1.1=0.723$, likusiems $n \geq 12$ sluoksniams tas indėlis sudaro mažiau nei 5% pilno skerspjūvio. Tačiau mūsų tyrimas neįtraukia atvejų, kuomet išlekiantis elektronas išmuša papildomą elektroną ir vyksta dviguba jonizacija [53]. Papildomo elektrono išlėkimas turi mažinantį efektą viengubos jonizacijos teoriniams skerspjūviams. Tikėtina, kad šis efektas gali keisti rezultatą 5% ribose, nes dvigubos jonizacijos skerspjūviai yra



11 paveikslas: W^{5+} jono pagrindinių lygmenų viengubos jonizacijos eksperimento ir teorinių skaičiavimų palyginimas. Geltoni apskritimai su paklaidų ribų indikatoriais rodo absoliučius eksperimentinius skerspjūvius. Smulkūs juodi taškeliai su statistinės paklaidos indikatoriais yra detalaus energijos skanavimo rezultatai. Dabartiniai teoriniai rezultatai su tiesioginės jonizacijos ir sužadinių–autojonizacijos su $n \leq 7$ sužadininiais raudona brūkšniuota linija $5d^2D_{3/2}$ pagrindinis lygmuo ir taškuota raudona linija - $5d^2D_{5/2}$ lygmuo. Žalia taškas-brūkšny linija vaizduoja $5d^2D_{3/2}$ skerspjūvius ir brūkšny-taškas-taškas linija $5d^2D_{5/2}$ skerspjūvius, abiem atvejais įtraukiami sužadininiai iki $n = 12$. Viršutinė vientisa violetinė linija atvaizduoja Zhang *et al.* [50] atliktus skaičiavimus, kurie įtraukia sužadininiai iki $n = 10$. Vientisa mėlyna linija (arti eksperimentinių taškų) vaizduoja Pindzola ir Griffin [51] CADW rezultatus su $n \leq 6$ sužadininiais.

~ 3 Mb [54] ties piku, lyginant su viengubos jonizacijos ~ 60 Mb. Dvigubos jonizacijos mažinantis efektas buvo tirtas nagrinėjant Se^{3+} jono viengubą jonizaciją [55].

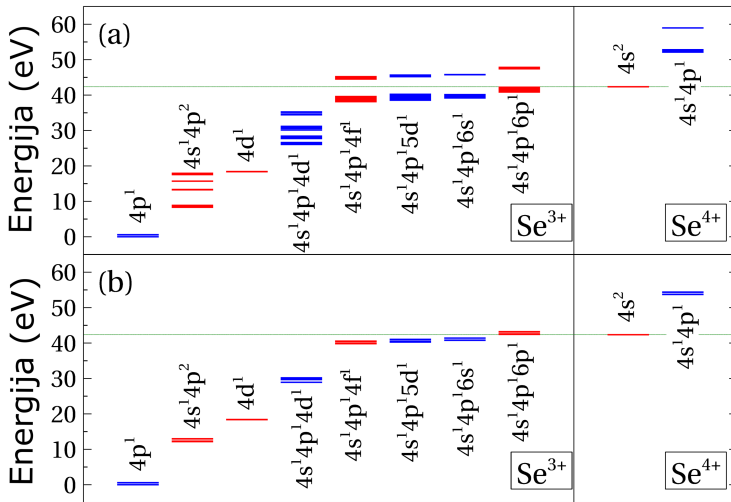
Se jonas

Gautas Se^{3+} jono teorinis jonizacijos slenkstis yra 42.35 eV. Ši vertė turi gerą sutapimą su 42.2 ± 1.8 eV nustatyta eksperimentu [7] ir 42.95 eV NIST verte [56]. 108.21 eV energijos reikia išmušti du išorinius elektronus iš pagrindinės $[\text{Ar}]3d^{10}4s^24p^1$ konfigūracijos ir pasiekti Se^{5+} jono pagrindinę konfigūraciją. Se^{3+} jonas pagrindinėje konfigūracijoje turi tik du lygmenis.

Mūsų skaičiavimai rodo, kad elektrono smūginės jonizacijos skerspjūviai ilgai gyvuojančiam $4s4p_{3/2} (J = 2) 4d J = 9/2$ lygmeniui yra maždaug tris kartus didesni nei eksperimentinės reikšmės. Taip pat skerspjūviai prasideda ties 17 eV, kai eksperimentinis viengubos jonizacijos slenkstis yra ties 42.2 ± 1.8 eV [7]. Tai rodo, kad eksperimento metu nebuvo šio lygmens indėlio.

12 paveikslas rodo konfigūracijas, kurių lygmenys išsidėsto abipus viengubos jonizacijos slenksčio. Visos keturios Se^{3+} jono konfigūracijos turi sužadinius iš $4s$ sluoksnio. Tik viena iš keturių konfigūracijų turi subkonfigūracijas, kurių energijų vidurkiai yra aukščiau jonizacijos slenksčio. Sužadintos konfigūracijos iš $3d$ sluoksnio yra aukščiau viengubos jonizacijos slenksčio. Papildomai pagrindinės ir pirmos sužadintos konfigūracijos energijos lygmenys Se^{3+} ir Se^{4+} jonams yra pavaizduotos 12 paveiksle.

Mūsų gauti elektrono smūginės jonizacijos skerspjūviai tiesioginės jonizacijos, sužadinių–autojonizacijos ir rezonansinio sužadavimo–dvigubos autojonizacijos procesų pagrindiniam lygmeniui yra lyginami su eksperimentinėmis vertėmis 13 paveiksle. Radiacinio gesinimo įtaka netiesioginiam procesui yra menka. Sužadinių–autojonizacijos proceso indėlis dominuoja mažų ir vidutinių energijų ruože. Tiesioginė jonizacija iš $3d$ sluoksnio duoda didžiausią indėlį. Ankstesni Se^{3+} tyrimai buvo atlikti naudojant CADW metodą [57]. Mūsų naudotas tyrimo meto-

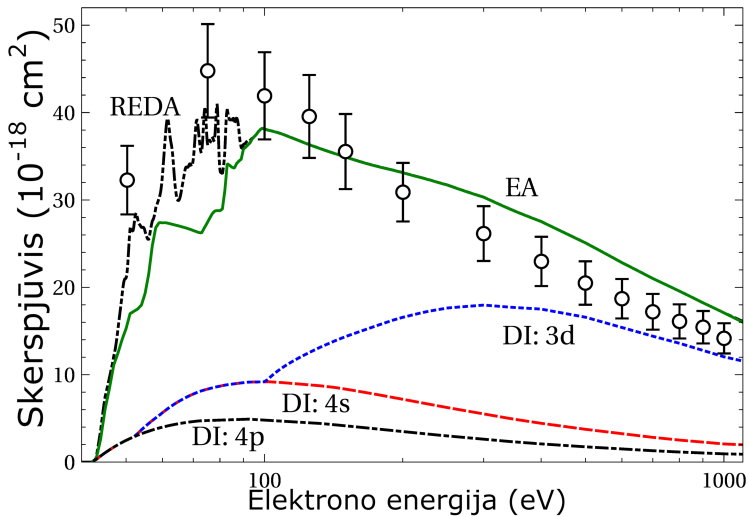


12 paveikslas: Se^{3+} jono keturių žemiausių konfigūracijų, kurių energijų lygmenys (a) išsidėsto abipus jonizacijos slenksčio ir subkonfigūracijos (b). Taip pat pavaizduota Se^{4+} jono pagrindinė ir pirma sužadinta konfigūracijos. Raudona - lyginės konfigūracijos, mėlyna - nelyginės.

das buvo iškraipytyjų bangų subkonfigūracijų vidurkiai ir gautas geras sutapimas prie visų atlekiančio elektrono energijų.

Mūsų sužadinimų–autojonizacijos duomenys įtraukia sužadinius su $n = 25$, tuo tarpu CADW vertės atitinka $n \leq 8$ sužadinius [57]. CADW skaičiavimuose mažesnis sužadinimų–autojonizacijos indėlis yra kompensuojamas didesnio tiesioginės jonizacijos proceso indėlio.

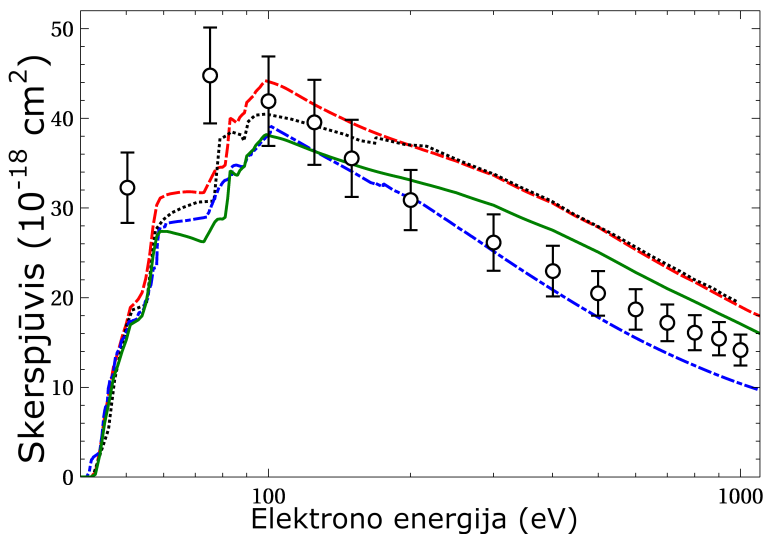
Skirtumas tarp mūsų iškraipytyjų bangų lygmenų metodu gautų verčių ir pateiktų rezultatų [58] matomas 14 paveiksle. Pagrindinė rezultatų skirtumų priežastis yra ta, kad jų skaičiavimai generuoti naudojant Se^{3+} ir Se^{4+} pagrindines konfigūracijas ir gautas surišusių ir laisvųjų elektronų potencialas. Tai duoda daug



13 paveikslas: Tiesioginės jonizacijos, sužadinių–autojonizacijos ir rezonansinio sužadavimo-dvigubos autojonizacijos procesų viengubos jonizacijos skerspjūviai. Eksperimentas: apskritimai su paklaidų ribų indikatoriais [8]. Naudojama logaritminė skalė elektronų energijoms atvaizduoti.

didesnes tiesioginės jonizacijos skerspjūvių vertes. Pavyzdžiui, 4s tiesioginės jonizacijos skerspjūviai yra apie 40 % didesni nei mūsų vertės, skaičiuotos jonizuoto jono potencialu.

Reikia pastebėti, kad sužadimams iš 3p sluoksnio prasideda ties 164 eV. Tačiau sužadimams iš 3p sluoksnio yra daug aukščiau dvigubos jonizacijos slenksčio ir Ožė kaskados gali nuvesti į aukštesnius jonizacijos laipsnius nei Se^{4+} . Pavyzdžiui, Ožė kaskada iš $3p^5 4p^2$ konfigūracijos $3p \rightarrow 4p$ sužadimams gali pusę pradinės užpildos pernešti į Se^{5+} joną. Dėl to sužadimams į aukštesnius sluoksnius duos didesnę Se^{5+} jonų ar dar aukštesnių jonizacijos laipsnių santykį. Taip pat buvo parodyta, kad koreliaci-

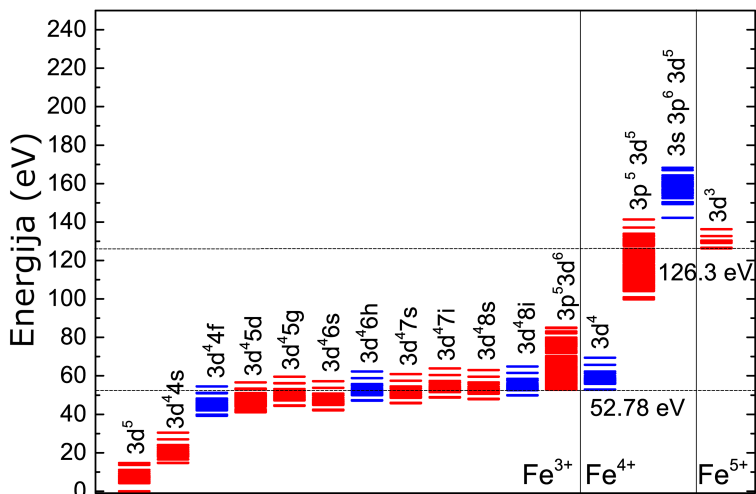


14 paveikslas: Suminių jonizacijos skerspjūvių palyginimas. Mūsų gauti iškraipytųjų bangų lygmenų duomenys naudojant jonizuoto jono potencialą - vientisa žalia linija ir jonizuojančio jono - brūkšniuota raudona. Mėlyna brūkšnys-taškas linija vaizduoja CADW vertes [57], juoda taškuota linija - iškraipytųjų bangų lygmenų [58]. Eksperimentas: apskritimai su paklaidų ribų indikatoriais [8]. Naudojama logaritminė skalė elektronų energijoms atvaizduoti.

niai efektai turi svarbią įtaką tiriant Ožė kaskadas [45,46,59]. Tik tinkamas koreliacinių efektų įtraukimas gali duoti gerą sutapimą su eksperimento rezultatais ir atskleisti realų jonų santykį. Tuo remiantis, galima daryti išvadą, kad sužadinių–autojonizacijos indėlis iš $3p$ sluoksnio, tirtas ankstesniuose tyrimuose [57], turi būti neįtrauktas. Šis sluoksnis lemia jonizaciją į aukštesnius nei vienguba jonizacija laipsnius.

Fe³⁺ jonas

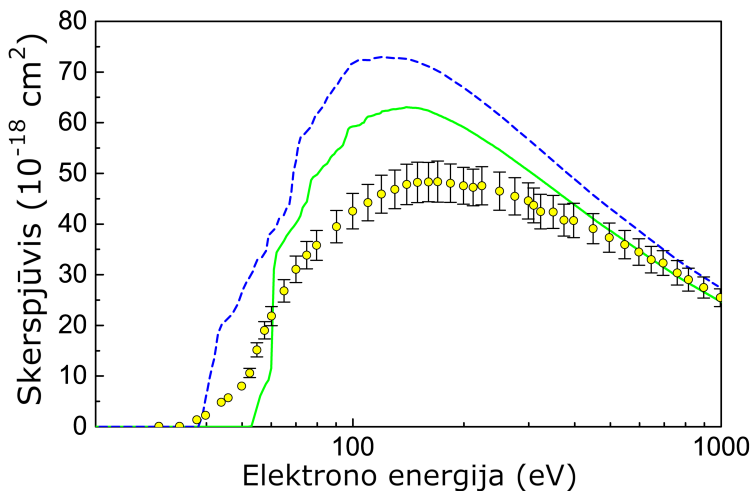
Pagrindinė [Ne] 3s²3p⁶3d⁵ konfigūracija turi 37 energijos lygmenis, o pirma sužadinta [Ne] 3s²3p⁶3d⁴4s konfigūracija - 62. Pagrindinės konfigūracijos lygmenys išsidėsto 14.69 eV energijos ruože, o sužadintos konfigūracijos - 15.86 eV. NIST pateikia kiek mažesnes vertes ir tai galima paaiškinti koreliaciniais efektais, kurie šiuo atveju nebuvo tirti.



15 paveikslas: Pavaizduota Fe³⁺, Fe⁴⁺ ir Fe⁵⁺ jonų pagrindinių konfigūracijų energijos lygmenys su konfigūracijomis, kurių lygmenys išsidėsto abipus jonizacijos slenksčio. Pirma sužadinta Fe³⁺ konfigūracija ir Fe⁴⁺ 3p⁵3d⁵ ir 3s3d⁵ konfigūracijos taip pat atvaizduotos. Fe³⁺ 3d⁴nl (n = 5 – 8) atveju atvaizduotos tik mažiausią ir didžiausią orbitinį kvantinį skaičių turinčios konfigūracijos,. Raudona spalva - lyginės konfigūracijos, mėlyna - nelyginės.

Buvo paskaičiuoti energijos lygmenys ir jų gyvavimo trukmė pagrindinei ir pirmai sužadintai konfigūracijai. Elektrinių kvadrupolinių ir magnetinių dipolinių šuolių tikimybės buvo nau-

dojamos gyvavimo trukmei gauti. Visi lygmenys turi gyvavimo trukmes didesnes nei 10^{-5} s – tiek reikia laiko jonams pasiekti sąveikos su elektronais regioną [60].

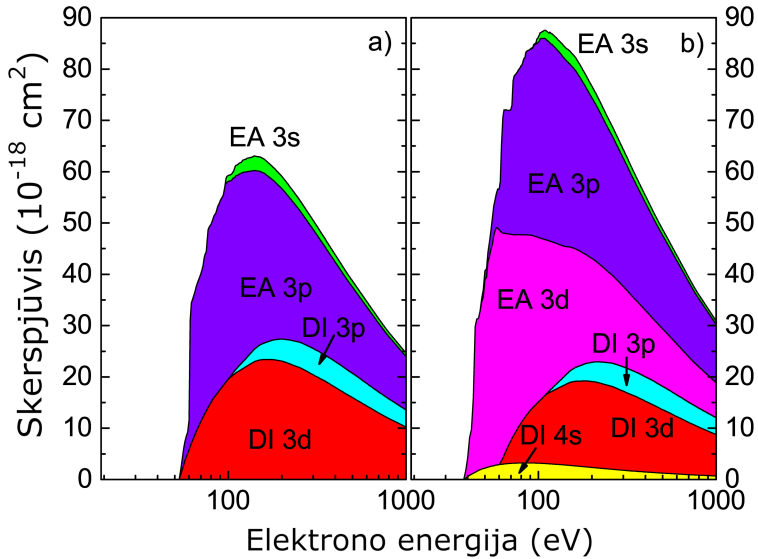


16 paveikslas: Pagrindinės konfigūracijos vienguvos jonizacijos lygmenų skerspjūviai: vientisa žalia linija vaizduoja žemiausią lygmenį, brūkšninė mėlyna - aukščiausią. Eksperimentas - apskritimai su paklaidų ribų indikatoriais [16]. Elektronų energija atvaizduoda naudojant logaritminę skalę.

Tirtas sužadinių–autojonizacijos procesas nagrinėjant sužadinius iš pagrindinės konfigūracijos $3s$, $3p$ ir $3d$ sluoksnių su sąlygomis: $n \leq 8$ ir $l \leq 6$. Iš pagrindinės konfigūracijos gaunamos 89 sužadintos konfigūracijos, kurių radiaciniai ir Ožė procesai buvo tiriama toliau. Reikia pastebėti, kad ne visos konfigūracijos yra autojonizuojančios.

Dauguma konfigūracijų turi energijos lygmenis abipus jonizacijos slenkščio (žr. 15 paveikslą). Visos jos siejamos su sužadimais iš išorinių pagrindinės ir pirmos sužadintos konfigūracijos sluoksnių. Gauti pagrindinės konfigūracijos žemiau-

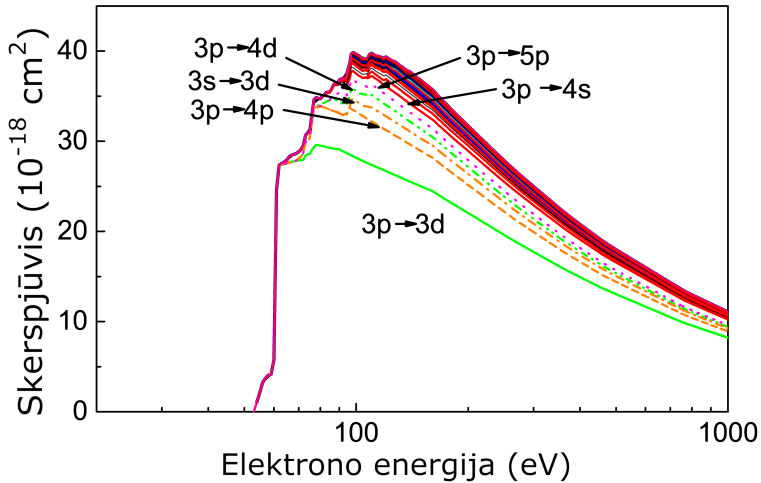
sio ir aukščiausio lygmens skerspjūviai kartu su eksperimentiniais duomenimis lyginami 16 paveiksle. Teorinės vertės ties pikais yra žymiai aukščiau eksperimentinių verčių ir gerai sutampa prie aukštų energijų. Jau anksčiau buvo pastebėta [16], kad eksperimentiniai skerspjūviai prasideda ~ 35 eV, kas rodo metastabilių jonų buvimą spindulyje.



17 paveikslas: Fe^{3+} : viengubos tiesioginės jonizacijos ir sužadinių–autojonizacijos kanalų indėlio palyginimas: a) pagrindinė konfigūracija, b) žemiausias $3d^4 4s$ konfigūracijos lygmuo. Elektronų energija pavaizduota logaritminėje skalėje.

Tiesioginio ir netiesioginio procesų indėlis iš žemiausio pagrindinio lygmens ir $3d^4 4s$ konfigūracijos žemiausio lygmens yra vaizduojami 17 paveiksle. Buvo nagrinėjami tik sužadinių–autojonizacijos kanalai, kurių pagrindinis kvantinis skaičius iki $n = 8$, nes sužadiniams į dar aukštesnius sluoksnius duoda menką indėlį. Abiem atvejais sužadinių–autojonizacijos kanalai iš $3p$

sluoksnio dominuoja nuo ~ 100 eV.



18 paveikslas: Fe^{3+} pagrindinio lygmens suminiai sužadinių–autojonizacijos kanalų skerspjūviai. Stipriausį kanalą nurodyti rodyklėmis. Elektronų energija pavaizduota logaritminėje skalėje.

Stipriausi pagrindinio lygmens sužadinių–autojonizacijos kanalai yra vaizduojami 18 paveiksle. $3p \rightarrow 3d$ sužadinimas generuoja $\sim 70\%$ pilno sužadinių–autojonizacijos skerspjūvio. Antrasis pagal skerspjūvio dydį yra $3p \rightarrow 4p$ sužadinimas, sukurta sužadinta konfigūracija yra to pačio lygiškumo kaip pagrindinė konfigūracija.

$3p \rightarrow 3d$ sužadinimas dominuoja lyginant su kitais pagrindinės konfigūracijos kanalais (žr. 18 paveikslą). Tačiau sužadiniams iš $3d$ sluoksnio duoda didžiausią indėlį prie mažų elektrono energijų. $3d \rightarrow 4d$, $3d \rightarrow 5d$ ir $3p \rightarrow 4p$ sužadiniams iš penkių stipriausių sužadinių–autojonizacijos kanalų, duoda to pačio lyginumo konfigūracijas kaip ir pradinė.

Mūsų tyrimas parodo, kad sužaditimai į aukštesnius nl ($n > 8$) sluoksnius neduoda esminio indėlio.

Koreliaciniai efektai

Koreliaciniai efektai yra svarbūs tyrinėjant beveik neutralių jonų elektronais smūginę jonizaciją. Koreliacinių efektų indėlis yra tiriamas Fe^{3+} ir W^{5+} jonams. Mes naudojame konfigūracijų sąveikos metodą ir atrenkame tas konfigūracijas, kurios gali įtakoti galutinius skerspjūvius. Teorinė konfigūracijų sąveikos metodo dalis aprašyta 21 puslapyje. Toliau mes parodome koreliacinių efektų svarbą pasinaudodami dviem atvejais iš mūsų tyrimų.

W^{5+} jono atvejis

Koreliacinių efektų įtaka buvo tiriama tiesioginiams ir netiesioginiams jonizacijos procesams $5d$ konfigūracijai, panaudojant konfigūracijų sąveikos metodą. Didžiausią įtaką rezultatams darančių besimaišančių konfigūracijų sąrašas buvo sugeneruotas panaudojant konfigūracijų sąveikos stiprio koncepciją [žr. formulę (19)]. Tas pats metodas buvo panaudotas ankstesniuose darbuose nagrinėjant elektrinius [61] ir magnetinius dipolinius perėjimus [20, 62], Ožė kaskadas [45, 46, 59] ir smūginę jonizaciją elektronais [63, 64]. Buvo nustatyta, kad koreliaciniai efektai turi esminės įtakos rezultatams.

Viengubos konfigūracijos ir konfigūracijų sąveikos metodu gauti skerspjūviai yra lyginami tarpusavyje. Matome, kad koreliacinių efektų įtraukimas mažina skerspjūvį ties maksimalia verte apie 20%. Konfigūracijų sąveikos metodu gauti skerspjūviai yra eksperimentinių paklaidų ribose ties maksimumu ir didesnių

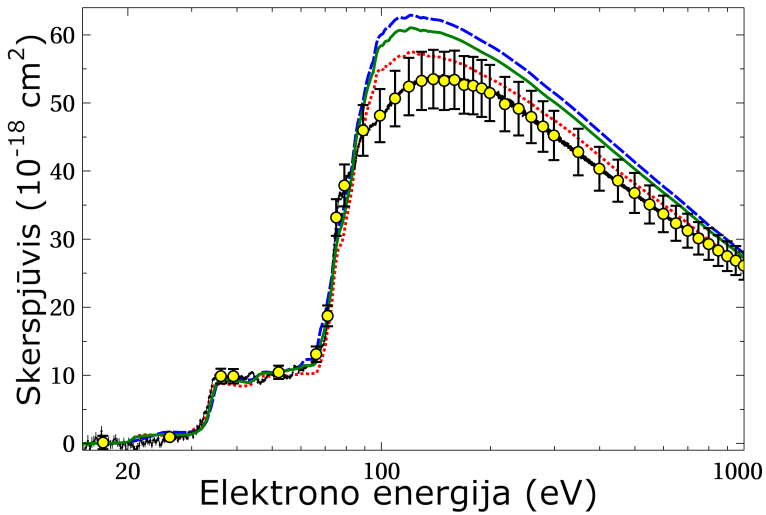
energijų pusėje. Šio palyginimo tikslas yra parodyti, jog koreliaciniai efektai yra vienas iš dviejų priešingų efektų, kuris atkartoja Pindzola and Griffin skaičiuotus skerspjuvius ir eksperimentinius duomenis.

Norint atkartoti eksperimentinius skerspjuvius ir patikrinti teorinio modelio validumą reikia nagrinėti ne tik pagrindinę W^{5+} būseną, bet ir visus kitus ilgai gyvuojančius sužadintus lygmenis, kurie eksperimento metu gali būti jonų spindulyje. Buvo apskaičiuoti suminiai jonizacijos skerspjuviai kiekvienam lygmeniui įtraukiant tiesioginės jonizacijos ir sužadinių–autojonizacijos procesus. Koreliacinių efektų įtraukimas į skaičiavimus sužadintoms konfigūracijoms būtų prailginęs juos, dėl to koreliaciniai efektai skaičiuoti tik pagrindinei konfigūracijai.

Modeliuojant skerspjuvius ir lyginant gautus rezultatus su eksperimento duomenimis buvo bandoma išsiaiškinti, kokių santykiu λ_i jonai visuose įmanomuose lygmenyse davė indėlį į eksperimento rezultata. Tas santykis nėra žinomas iš anksto ir panaši problema buvo spręsta anksčiau [65, 66]. Remiantis skaičiuotais skerspjuviais buvo pasirinkti trys modeliai, siekiant nustatyti jonų dalis.

W^{5+} jonai yra gaunami iš plazmos šaltinio, todėl pagrįstai galima taikyti statistinį lygmenų pasiskirstymą kiekvienai konfigūracijai, šiuo atveju $5d$, $6s$, $4f^{13}5d^2$, $5p^55d^2$ ir $4f^{13}5d6s$. Teoriniai modeliai aprašyti lygtimis, pradinės sąlygos aprašytos 22 lygtyje, po to modelis keičiamas ir aprašomas 23 lygtimi. Trečiasis modelis skiriasi nuo ankstesnių ir aprašomas 24 lygtimi. Gauti modeliavimo rezultatai pateikti palyginimui 19 paveiksle.

Visi trys modeliai gerai sutampa su eksperimentu žemiau pagrindinės būsenos jonizacijos slenksčio. Lyginant modelių rezultatus, tik maža dalis lygmenų yra identifikuojami kaip metastabilių jonų šaltinis. Vis dėl to, lyginant teorinius ir eksperimentinius skerspjuvius, lieka santykinai rimtų nesutapimų.

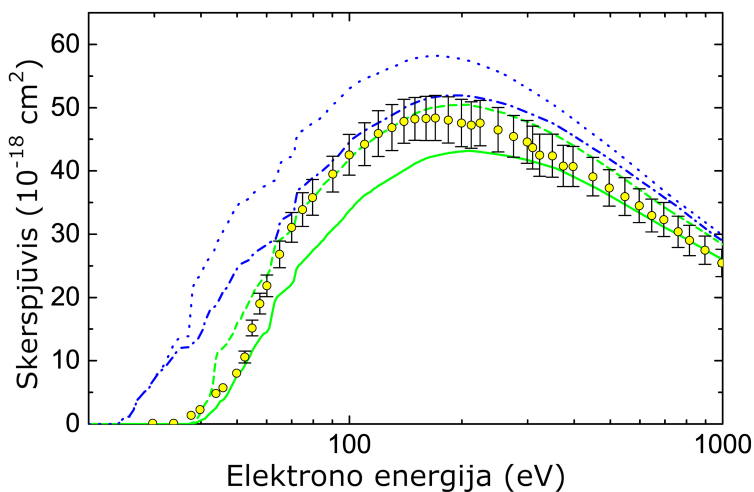


19 paveikslas: W^{5+} jono elektrono smūginės jonizacijos skerspjūviai. Apskritinimai su paklaidų ribų indikatoriais žymi absoliučius eksperimentinius skerspjūvius, vientisa juoda linija - detalaus energijos skanavimo duomenys. Žalia vientisa linija - 1 modelio rezultatas, mėlyna brūkšninė linija - 2 modelio rezultatas. Raudona taškuota linija - 3 modelio rezultatas.

Fe^{3+} jono atvejis

Buvo tirta koreliacinių efektų įtaka tiesioginei jonizacijai ir stipriausiems sužadiniams iš pagrindinės ir $3d^44s$ konfigūracijų lygmenų. Besimaišančių konfigūracijų sąrašui gauti buvo naudojamas koreliacinių efektų stiprio metodas, taip kaip ir W^{5+} jono atveju. Į sąrašą įtraukiamos konfigūracijos, turinčios viengubus ir dvigubus sužadinimus iš $n \geq 3$ iki $n = 8$ sluoksnių.

Koreliacinių efektų analizė parodė, kad tiesioginio proceso atveju įtaka skerspjūviams yra maža. Visiškai kita situacija su sužadinimų–autojonizacijos atveju. Tirti $3p \rightarrow 3d$ ir $3p \rightarrow 4p$ pagrindinės konfigūracijos sužadinimai ir $3p \rightarrow 3d$, $3d \rightarrow 4d$, $3d \rightarrow 5d$ ir $3p \rightarrow 4p$ sužadinimai iš $3d^44s$ konfigūracijos. Nusta-



20 paveikslas: Koreliacinių efektų įtakos palyginimas $3d^44s$ konfigūracijos lygmenų viengubos jonizacijos skerspjūviams: vientisa žalia linija - iškraipytųjų bangų transformuotas skerspjūvis su koreliaciniais efektais 37 lygmeniui, brūkšniuota žalia linija- iškraipytųjų bangų transformuotas skerspjūvis 37 lygmeniui. mėlyna taškas-brūkšnys linija - iškraipytųjų bangų transformuotas skerspjūvis su koreliaciniais efektais 99 lygmeniui, taškuota mėlyna linija - iškraipytųjų bangų transformuotas skerspjūvis 99 lygmeniui. Eksperimentas - apksritimai su paklaidų ribų indikatoriais [16]. Elektronų energijos pavaizduotos logaritminėje skalėje.

tyta menka koreliacinių efektų įtaka sužaditimams iš pagrindinės konfigūracijos, tačiau pirmosios sužadintos konfigūracijos lygmenims koreliaciniai efektai sumažina skerspjūvius apie 20% (žr. 20 paveikslą). Prie žemų elektrono energijų gaunamos skerspjūvių vertės yra žemiau eksperimento rezultatų.

Buvo parodyta, kad koreliaciniai efektai yra svarbūs ir gali ženkliai sumažinti Fe^{3+} jono $3d^44s$ konfigūracijos jonizacijos

skerspjūvius. Koreliaciniai efektai šiuo atveju mažina Fe^{3+} jono pagrindinės konfigūracijos skerspjūvius $\sim 20\%$. Teorinių ir eksperimentinių verčių nesutapimas gali būti siejamas su koreliaciniais efektais, kurie nėra įtraukti į sužadintų konfigūracijų skaičiavimus dėl ribotų kompiuterinių resursų.

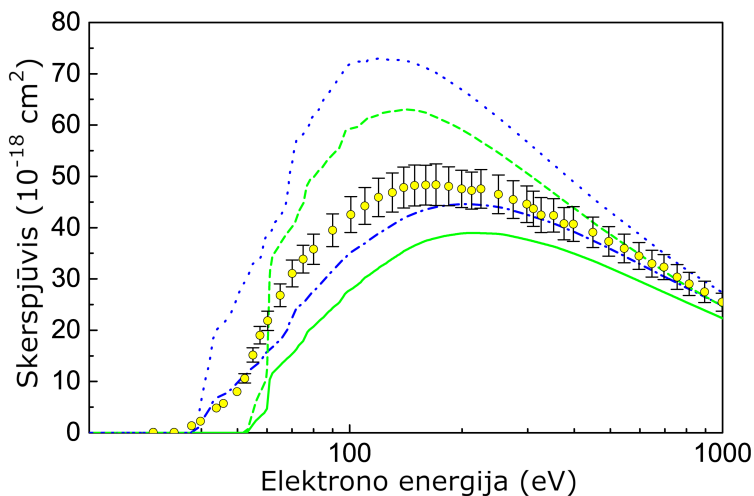
Transformuotieji skerspjūviai

Šioje dalyje aptariami skerspjūvių transformacijos metodai, kuriuos taikant teoriniai skerspjūviai sulyginami su eksperimentiniais duomenimis. Šie metodai suteikia informacijos ir užuominų, jog reikia ieškoti ir tirti papildomus jonizacijos procesus modeliuojant jonizacijos skerspjūvius.

Fe^{3+} jonas

Ankstesni neutralių atomų ar mažo jonizacijos laipsnio jonų jonizacijos elektronais tyrimai [22] su transformuotais skerspjūviais [23] parodė gerą sutapimą su eksperimentiniais duomenimis [23, 25, 67, 68]. Neseniai buvo parodyta, kad transformuoti iškraipytųjų bangų skerspjūviai gali paaiškinti eksperimentinius anglies atomo ir C^+ jono duomenis [69]. Tas pats principas buvo taikytas ir iškraipytųjų bangų metodu gautiems skerspjūviams Fe^{3+} jono pagrindinės konfigūracijos žemiausiam ir pirmam sužadintam lygmenims (žr. 21 paveikslą). Didžiausia transformacijos koeficiento įtaka matoma prie žemų atlekiančio elektrono energijų.

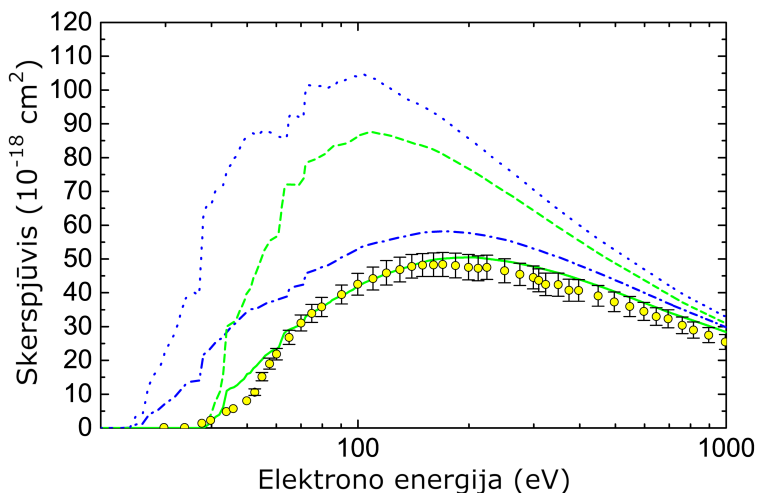
Transformuoti iškraipytųjų bangų skerspjūviai pirmos sužadintos $3d^4s$ konfigūracijos žemiausiam ir aukščiausiam lygmenims demonstruojami 22 paveiksle. Gautas geras sutapimas su matavimais prasideda nuo 60 eV. Aukščiausio lygmens sker-



21 paveikslas: Pagrindinės konfigūracijos lygmenų viengubos jonizacijos skerspjūviai: vientisa žalia linija - gauti naudojant iškraipytųjų bangų ir transformacijos funkciją lygmeniui su indeksu 0, brūkšniuota žalia linija - iškraipytųjų bangų lygmenys su indeksu 0 skerspjūvis, brūkšnys-taškas mėlyna linija - iškraipytųjų bangų 36 lygmenys jonizacijos skerspjūvis su pritaikyta transformacijos funkcija, taškuota mėlyna linija - 36 lygmenys iškraipytųjų bangų jonizacijos skerspjūvis. Eksperimentas: apskritimai su paklaidų ribų indikatoriais [16]. Elektronų energijos naudojama logaritminė skalė.

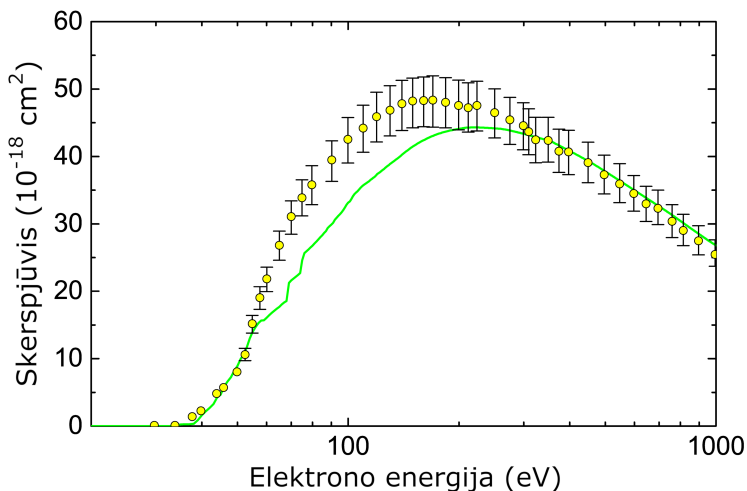
spjūviai yra aukščiau matavimų rezultatų. Tai rodo, kad, norint paaiškinti matavimų rezultatus, į teorinį tyrimą reikia įtraukti papildomus efektus.

Lygmenys, kurio numeris yra 67, palyginimas su matavimais yra vaizduojamas 23 paveiksle. Šis ir numeriu 49 identifikuojamas lygmuo iš $3d^44s$ konfigūracijos, turi didžiausią suminę kampinio momento kvantinio skaičiaus J vertę. Lygmenys, turintys didžiausius statistinius svorius, turi didžiausią tikimybę būti jonų spindulyje eksperimento metu. Tačiau Boltzma-



22 paveikslas: $3d^4s$ konfigūracijos lygmenų viengubos jonizacijos skerspjūviai: vientisa žalia linija - gauti naudojant iškraipytųjų bangų ir transformacijos funkciją lygmeniui su indeksu 37, brūkšniuota žalia linija - iškraipytųjų bangų lygmens su indeksu 37 skerspjūvis, brūkšnys-taškas mėlyna linija - iškraipytųjų bangų 99 lygmens jonizacijos skerspjūvis su pritaikyta transformacijos funkcija, taškuota mėlyna linija - 99 lygmens iškraipytųjų bangų jonizacijos skerspjūvis. Eksperimentas: apskritimai su paklaidų ribų indikatoriais [16]. Elektronų energijoms naudojama logaritminė skalė.

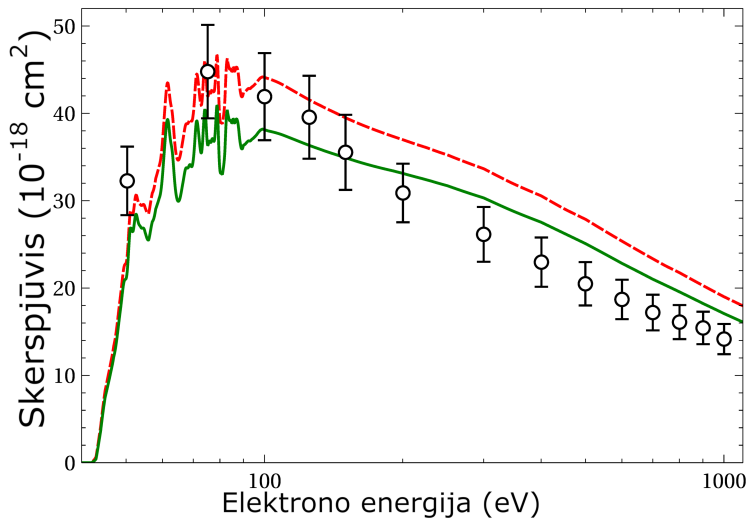
no pasiskirstymas ar net susidūrimo radiacinis modeliavimas su radiacinėmis kaskadomis turi būti naudojamas norint teisingai nustatyti lygmenų pasiskirstymą. Šiuo atveju teorinių ir eksperimentinių rezultatų nesutapimas gali būti paaiškintas rezonansinio sužadavimo-dvigubos autojonizacijos procesu, kuris Fe^{3+} jonui netirtas.



23 paveikslas: Fe^{3+} lygmens ($J = 13/2$) su indeksu 67 viengubos jonizacijos skerspjūviai. Eksperimentas: apskritimai su paklaidų ribų indikatoriais [8]. Elektronų energijoms naudojama logaritminė skalė.

Tiesioginės dvigubos jonizacijos proceso įtaka viengubos jonizacijos skerspjūviams

Tiesioginės dvigubos jonizacijos procesas gali būti įsivaizduojamas kaip tam tikra jonizacijos procesų seka, kurių metu dalis jonų lygmenų užpildos pereina į kitą procesą. 24 paveiksle pavaizduoti teoriniai skerspjūviai yra žemiau matavimų prie žemų energijų ir virš matavimų prie aukštesnių. Tai galima aiškinti faktu, kad dalis gautų Se^{4+} jonų pereina į aukštesnius jonizacijos laipsnius, pavyzdžiui, dėl išmušamo papildomo elektrono [53, 70, 71]. Toks procesas mažina jonizacijos skerspjūvius. Vertinant situaciją, teoriniai dvigubos jonizacijos skerspjūviai yra atimami iš teorinių tiesioginės viengubos jonizacijos sker-



24 paveikslas: Se^{3+} viengubos jonizacijos skerspjūviai gauti jonizuoto jono potenciale (žalia linija) ir jonizuojančio jono (raudona brūkšniuota linija) potenciale. Eksperimentas: apskritimai su paklaidų ribų indikatoriais [8]. Elektronų energijoms naudojama logaritminė skalė. .

spjūvių [57] gautų verčių naudojant jonizuoto jono potencialą.

Ankstesnės studijos parodė gerą sutapimą su matavimais prie aukštesnių energijų, kuomet išmuštas ir išsklaidytas elektronai pasidalina energiją po lygiai [53]. Teoriniai skerspjūviai prie aukštesnių energijų yra vos aukščiau eksperimento apatinės paklaidos ribos, kuomet jonizacijos-jonizacijos proceso indėlis yra atimamas. Tai leidžia manyti, kad dviguba Se^{2+} jono jonizacija yra nulemta jonizacijos-jonizacijos ir jonizacijos-sužadinimo-jonizacijos procesų.

Buvo vertinamas skerspjūvių mažinantis tiesioginės dvigubos jonizacijos indėlis tiriant viengubos jonizacijos procesą Se^{3+}

jonui. Viengubos jonizacijos skerspjūviai buvo sumažinti $\sim 1Mb$ (4%) ties 500 eV elektrono energija. Tai davė gera sutapimą su matavimais pradedant ties 300 eV energija viengubos jonizacijos skerspjūviams taikant jonizuoto jono potencialą.

PAGRINDINĖS IŠVADOS

Viengubos smūginės jonizacijos elektronais skerspjūviai yra tiriami naudojant Dirako-Foko-Sleiterio metodą ir naudojant FAC (angl. flexible atomic code) [26]. Vertinami tiesioginės ir netiesioginės jonizacijos procesai. Sužadinimai ir smūginė jonizacija elektronais yra tiriami naudojant iškraipytųjų bangų artinį.

1. Tiriant sužadinimų–autojonizacijos kanalų skerspjūvių konvergenciją nustatyta sužadinimų į aukštus nl sluoksnius ($n > 8$, $l > 3$) svarba. Šie sužadinimai yra ypač išreikšti volframo jonuose su atviru $4f$ sluoksniu pagrindinėje konfigūracijoje.
 - 1.1. Sužadinimai į aukštesnius sluoksnius ($n > 8$) padidina sužadinimų–autojonizacijos skerspjūvius iki $\sim 60\%$ W^{25+} jono pagrindiniam lygmeniui. Sužadinimai į sluoksnius su orbitiniu kvantiniu skaičiumi $l = 4$ duoda $\sim 40\%$ pilno sužadinimų–autojonizacijos skerspjūvio. Net ir sužadinimai į $l = 5$ sudaro $\sim 7\%$ pilno sužadinimų–autojonizacijos skerspjūvio.
 - 1.2. Sužadinimai į aukštesnius sluoksnius ($n > 8$) duoda $\sim 45\%$ W^{26+} jono pagrindinės konfigūracijos lygmenų bendros Maksvelo spartos koeficiento vertės.

- 1.3. W^{5+} jono atveju sužaditimai į aukštesnius sluoksnius ($n > 8$) yra mažiau svarbūs, lyginant su W^{25+} ar W^{26+} . Šie sužaditimai padidina suminį W^{5+} jono pagrindinės konfigūracijos jonizacijos skerspjūvį apie 15%.
 - 1.4. Darbe nustatyta, kad sužaditimai į $n \leq 12$ sluoksnius turi būti tiriami norint tiksliai įvertinti W^{5+} jono sužaditimų–autojonizacijos skerspjūvius. Sužaditimai į aukštesnius sluoksnius ($n > 12$) duoda mažiau nei 5% pilno jonizacijos skerspjūvio.
 - 1.5. Fe^{3+} atveju sužaditimų indėlis į sluoksnius $n > 8$ yra minimalus.
2. W^{26+} jono pagrindinės konfigūracijos lygmenims sužaditimų–autojonizacijos Maksvelo spartų koeficientai skiriasi apie 60%. Sužaditimų–autojonizacijos Maksvelo spartų koeficientų vertės aukščiausiam lygmeniui yra ~40% didesnės, lyginant su sužaditimais iš žemiausio lygmens. Sužaditimai į $9 \leq n \leq 25$ sluoksnius yra mažiau priklausomi nuo pradinio lygmens. Tai galima aiškinti tuo, kad daug svarbių sužadintų konfigūracijų, kurių energijos lygmenys išsidėsto abipus viengubos jonizacijos slenksčio, atsiranda iš sužaditimų į $n \leq 8$ sluoksnius.
 3. Tiriant koreliacinių efektų įtaką viengubai jonizacijai W^{5+} ir Fe^{3+} jonuose nustatyta, kad koreliaciniai efektai mažina jonizacijos skerspjūvius. Koreliaciniai efektai sumažina jonizacijos iš W^{5+} jono pagrindinės konfigūracijos lygmenų skerspjūvius ~20%. Panašus rezultatas gautas ir Fe^{3+} jono sužadintos $3d^44s$ konfigūracijos lygmenims.
 4. Transformacijos funkcijos yra naudojamos paaiškinti Fe^{3+} jono eksperimento rezultatus. Transformacijos funkcijos

jos sumažina Fe^{3+} jono iškraipytųjų bangų skerspjūvius $\sim 40\%$ pagrindinės ir sužadintos $3d^44s$ konfigūracijos lygmenims. Papildomai skerspjūvių pikai pasislenka į didesnių energijų sritį apie 50 – 100 eV. Didžiausią efektą transformacijos funkcijų taikymas duoda prie mažų elektrono energijų.

5. Viengubos jonizacijos Se^{3+} jono skerspjūvių analizė rodo, kad būtina atsižvelgti į tiesioginės dvigubos jonizacijos procesą, kuris taip pat mažina skerspjūvius. Viengubos jonizacijos skerspjūviai yra sumažinami ~ 1 Mb (4%) ties 500 eV elektrono energija. Tai duoda geresnį sutapimą su eksperimentu Se^{3+} jono viengubos jonizacijos skerspjūviams, pradedant nuo 300 eV.
6. Se^{3+} jono atveju rezonansinio sužadinimo-dvigubos autojonizacijos procesas yra svarbus viengubos jonizacijos skerspjūviams prie mažų elektrono energijų. Viengubos jonizacijos skerspjūviai yra padidinami iki ~ 14 Mb prie mažų energijų. Tai duoda gerą sutapimą su matavimo rezultatais pagrindinei Se^{3+} jono konfigūracijai.

Literatūra

- [1] A. Müller, “Electron–ion collisions: Fundamental processes in the focus of applied research,” in *Advances in Atomic, Molecular and Optical Physics*, vol. 55, pp. 293–417, 2008.
- [2] I. Roederer, “Germanium, arsenic, and selenium abundances in metal-poor stars,” *The Astrophysical Journal*, vol. 756, no. 1, p. 36, 2012.
- [3] I. U. Roederer, J. J. Cowan, G. W. Preston, S. A. Shectman, C. Sneden, and I. B. Thompson, “Nine new metal-poor stars on the subgiant and red horizontal branches with high levels of r-process enhancement,” *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, vol. 445, no. 3, pp. 2946–2960, 2014.
- [4] N. C. Sterling and H. L. Dinerstein, “The Abundances of Light Neutron-Capture Elements in Planetary Nebulae. II. *s*-Process Enrichments and Interpretation,” *The Astrophysical Journal Supplement Series*, vol. 174, no. 1, pp. 158–201, 2008.
- [5] R. D. Blum and P. J. McGregor, “The ionizing stars of the galactic ultra-compact H_{II} region G45.45+0.06,” *Astronomical Journal*, vol. 135, no. 5, pp. 1708–1717, 2008.

- [6] J. García-Rojas, S. Madonna, V. Luridiana, N. C. Sterling, C. Morisset, G. Delgado-Inglada, and L. Toribio San Cipriano, “s-process enrichment in the planetary nebula NGC 3918. Results from deep echelle spectrophotometry,” *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, vol. 452, no. 3, pp. 2606–2640, 2015.
- [7] G. A. Alna’washi, N. B. Aryal, K. K. Baral, D. A. Esteves, A. Aguilar, R. C. Bilodeau, A. Borovik Jr, C. Brandau, J. Jacobi, J. Rausch, A. Becker, K. Spruck, K. Aichele, M. Steidl, U. Hartenfeller, C. M. Thomas, and R. A. Phaneuf, “Electron-impact ionization of Se^{3+} ,” *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, vol. 47, no. 47, pp. 105201–7, 2014.
- [8] G. A. Alna’washi, N. B. Aryal, K. K. Baral, C. M. Thomas, and R. A. Phaneuf, “Electron-impact ionization of Se^{2+} ,” *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, vol. 47, no. 13, p. 135203, 2014.
- [9] D. A. Esteves, R. C. Bilodeau, N. C. Sterling, R. A. Phaneuf, A. L. D. Kilcoyne, E. C. Red, and A. Aguilar, “Absolute high-resolution Se^+ photoionization cross-section measurements with Rydberg-series analysis,” *Physical Review A*, vol. 84, no. 1, p. 013406, 2011.
- [10] N. C. Sterling, D. A. Esteves, R. C. Bilodeau, A. L. D. Kilcoyne, E. C. Red, R. A. Phaneuf, and A. Aguilar, “Experimental photoionization cross-section measurements in the ground and metastable state threshold region of Se^+ ,” *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, vol. 44, no. 2, p. 025701, 2011.

- [11] D. A. Esteves, A. Aguilar, R. C. Bilodeau, R. A. Phaneuf, A. L. D. Kilcoyne, E. C. Red, and N. C. Sterling, “Absolute single photoionization cross-section measurements of Se^{3+} and Se^{5+} ,” *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, vol. 45, no. 11, p. 115201, 2012.
- [12] D. A. Macaluso, A. Aguilar, A. L. D. Kilcoyne, E. C. Red, R. C. Bilodeau, R. A. Phaneuf, N. C. Sterling, and B. M. McLaughlin, “Absolute single-photoionization cross sections of Se^{2+} : Experiment and theory,” *Physical Review A*, vol. 92, no. 6, p. 063424, 2015.
- [13] D. C. Griffin, C. Bottcher, and M. S. Pindzola, “Theoretical calculations of the contributions of excitation autoionization to electron-impact ionization in ions of the transition series of elements,” *Physical Review A*, vol. 25, no. 3, pp. 1374–1382, 1982.
- [14] A. Müller, K. Tinschert, C. Achenbach, E. Salzborn, and R. Becker, “A new technique for the measurement of ionization cross sections with crossed electron and ion beams,” *Nuclear Inst. and Methods in Physics Research, B*, vol. 10–11, pp. 204–206, 1985.
- [15] M. S. Pindzola, D. C. Griffin, C. Bottcher, S. M. Younger, and H. T. Hunter, “Electron impact ionization data for the iron isonuclear sequence,” *Nuclear Fusion*, vol. 27, pp. 21–41, 1987.
- [16] M. Stenke, U. Hartenfeller, K. Aichele, D. Hathiramani, M. Steidl, and E. Salzborn, “Electron impact double ionization of multiply charged iron ions,” *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, vol. 32, pp. 3641–3649, 1999.

- [17] R. Montague and M. Harrison, “A measurement of the cross section for electron impact ionisation of singly charged tungsten ions,” *Journal of Physics B: Atomic and Molecular Physics*, vol. 17, no. 13, pp. 2707–2711, 1984.
- [18] M. Stenke, K. Aichele, D. Harthiramani, G. Hofmann, M. Steidl, R. Völpel, and E. Salzborn, “Electron-impact single-ionization of singly and multiply charged tungsten ions,” *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, vol. 28, no. 13, pp. 2711–2721, 1995.
- [19] R. Neu, *Tungsten as a Plasma-Facing Material in Fusion Devices*. PhD thesis, Max-Planck-Institut für Plasmaphysik, 2003.
- [20] V. Jonauskas, G. Gaigalas, and S. Kučas, “Relativistic calculations for M1-type transitions in 4dN configurations of W^{29+} - W^{37+} ions,” *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, vol. 98, no. 1, pp. 19–42, 2012.
- [21] A. Müller, “Fusion-Related Ionization and Recombination Data for Tungsten Ions in Low to Moderately High Charge States,” *Atoms*, vol. 3, no. 2, pp. 120–161, 2015.
- [22] Y. K. Kim and M. E. Rudd, “Binary-encounter-dipole model for electron-impact ionization,” *Physical Review A*, vol. 50, no. 5, pp. 3954–3967, 1994.
- [23] Y. K. Kim, “Scaling of plane-wave Born cross sections for electron-impact excitation of neutral atoms,” *Physical Review A*, vol. 64, no. 3, p. 10, 2001.
- [24] Y. K. Kim and P. M. Stone, “Ionization of boron, aluminum, gallium, and indium by electron impact,” *Physical Review A*, vol. 64, no. 5, p. 11, 2001.

- [25] Y. K. Kim and J. Desclaux, "Ionization of carbon, nitrogen, and oxygen by electron impact," *Physical Review A*, vol. 66, no. 1, pp. 127081–1270812, 2002.
- [26] M. Gu, "The flexible atomic code," *Canadian Journal of Physics*, vol. 86, no. 5, pp. 675–689, 2008.
- [27] D. H. Sampson, H. L. Zhang, A. K. Mohanty, and R. E. Clark, "A Dirac-Fock-Slater approach to atomic structure for highly charged ions," *Physical Review A*, vol. 40, no. 2, pp. 604–615, 1989.
- [28] I. P. Grant, B. J. McKenzie, P. H. Norrington, D. F. Mayers, and N. C. Pyper, "An atomic multiconfigurational Dirac-Fock package," *Computer Physics Communications*, vol. 21, no. 2, pp. 207–231, 1980.
- [29] A. K. Pradhan and S. N. Nahar, "Atomic Spectroscopy and Astrophysics," *Physics Today*, vol. 41, no. 8, pp. 38–45, 1988.
- [30] R. Karazija, *Introduction to the Theory of X-Ray and Electronic Spectra of Free Atoms*. Springer Science+Business Media, 1996.
- [31] T. R. Kallman and P. Palmeri, "Atomic data for x-ray astrophysics," *Reviews of Modern Physics*, vol. 79, no. 1, pp. 79–133, 2007.
- [32] H. S. Massey and C. B. Mohr, "The collision of slow electrons with atoms. II.—General theory and inelastic collisions," *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character*, vol. 139, no. 837, pp. 187–201, 1933.

- [33] D. H. Madison and W. N. Shelton, “Distorted-wave approximation and its application to the differential and integrated cross sections for electron-impact excitation of the 2P1 state of helium,” *Physical Review A*, vol. 7, no. 2, pp. 499–513, 1973.
- [34] W. Lotz, “Electron-impact ionization cross-sections and ionization rate coefficients for atoms and ions from hydrogen to calcium,” *Zeitschrift für Physik*, vol. 216, no. 3, pp. 241–247, 1968.
- [35] K. Aichele, U. Hartenfeller, D. Hathiramani, G. Hofmann, F. Melchert, V. Schäfer, M. Steidl, M. Stenke, R. Völpel, and E. Salzborn, “Electron impact ionization of the hydrogen-like ions: B^{4+} , C^{5+} , N^{6+} and O^{7+} ,” *Physica Scripta T*, vol. 73, pp. 125–126, 1997.
- [36] M. Hahn, A. Müller, and D. W. Savin, “Electron-impact Multiple-ionization Cross Sections for Atoms and Ions of Helium through Zinc,” *The Astrophysical Journal*, vol. 850, no. 2, p. 122, 2017.
- [37] H. Yoshizumi, *Advances in Chemical Physics*, vol. II of *Advances in Chemical Physics*. Hoboken, NJ, USA: John Wiley and Sons, Inc., 1958.
- [38] R. Karazija and S. Kučas, “Average characteristics of the configuration interaction in atoms and their applications,” *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, vol. 129, no. 6, pp. 131–144, 2013.
- [39] V. Jonauskas, A. Kynienė, G. Merkelis, G. Gaigalas, R. Kisielius, S. Kučas, Š. Masys, L. Radžiūtė, and P. Rynkun, “Contribution of high- nl shells to electron-impact ionization

- processes,” *Physical Review A*, vol. 91, no. 1, p. 012715, 2015.
- [40] A. Kynienė, Š. Masys, and V. Jonauskas, “Influence of excitations to high- nl shells for the ionization process in the W^{26+} ion,” *Physical Review A*, vol. 91, no. 6, p. 062707, 2015.
- [41] S. Loch, J. Ludlow, M. Pindzola, A. Whiteford, and D. Griffin, “Electron-impact ionization of atomic ions in the W isonuclear sequence,” *Phys. Rev. A*, vol. 72, no. 5, p. 052716, 2005.
- [42] P. Jönsson, G. Gaigalas, J. Bieroń, C. Froese Fischer, and I. Grant, “New version: Grasp2k relativistic atomic structure package,” *Computer Physics Communications*, vol. 184, no. 9, pp. 2197 – 2203, 2013.
- [43] V. Jonauskas, A. Kynienė, P. Rynkun, S. Kučas, G. Gaigalas, R. Kisielius, Š. Masys, G. Merkelis, and L. Radžiūtė, “Theoretical investigation of spectroscopic properties of W^{26+} in EBIT plasma,” *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, vol. 48, no. 13, p. 135003, 2015.
- [44] S. Kučas, V. Jonauskas, and R. Karazija, “Global characteristics of atomic spectra and their use for the analysis of spectra. IV. Configuration interaction effects,” *Physica Scripta*, vol. 55, no. 6, pp. 667–675, 1997.
- [45] V. Jonauskas, R. Karazija, and S. Kučas, “The essential role of many-electron Auger transitions in the cascades following the photoionization of 3p and 3d shells of Kr,” *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, vol. 41, no. 21, 2008.

- [46] V. Jonauskas, S. Kučas, and R. Karazija, “Auger decay of 3p-ionized krypton,” *Physical Review A*, vol. 84, no. 5, 2011.
- [47] D. Zhang and D. H. Kwon, “Theoretical electron-impact ionization of W^{17+} forming W^{18+} ,” *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, vol. 47, no. 7, 2014.
- [48] A. Borovik, B. Ebinger, D. Schury, S. Schippers, and A. Müller, “Electron-impact single ionization of W^{19+} ions,” *Phys. Rev. A*, vol. 93, p. 012708, 2016.
- [49] A. Kynienė, S. Pakalka, Š. Masys, and V. Jonauskas, “Electron-impact ionization of W^{25+} ,” *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, vol. 49, no. 18, p. 185001, 2016.
- [50] D. Zhang, L. Xie, J. Jiang, Z. Wu, C. Dong, Y. Shi, and Y. Qu, “Electron-impact single ionization for W^{4+} and W^{5+} ,” *Chinese Physics B*, vol. 27, no. 5, 2018.
- [51] M. S. Pindzola and D. C. Griffin, “Electron-impact ionization of tungsten ions in the configuration-average distorted-wave approximation,” *Physical Review A*, vol. 56, no. 2, pp. 1654–1657, 1997.
- [52] M. S. Pindzola and S. D. Loch, “Electron-impact ionization of W^{27+} ,” *Physical Review A*, vol. 93, no. 6, pp. 1–5, 2016.
- [53] V. Jonauskas, A. Prancikevičius, Š. Masys, and A. Kynienė, “Electron-impact direct double ionization as a sequence of processes,” *Physical Review A*, vol. 89, no. 5, pp. 1–5, 2014.
- [54] M. Stenke, K. Aichele, D. Hathiramani, G. Hofmann, M. Steidl, R. Völpel, V. P. Shevelko, H. Tawara, and E. Salz-

- born, “Electron-impact multiple ionization of singly and multiply charged tungsten ions,” *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, vol. 28, no. 22, pp. 4853–4859, 1995.
- [55] S. Pakalka, S. Kučas, Š. Masys, A. Kynienė, A. Momkauskaitė, and V. Jonauskas, “Electron-impact single ionization of the Se^{3+} ion,” *Physical Review A*, vol. 97, no. 1, p. 012708, 2018.
- [56] A. Kramida, Y. Ralchenko, J. Reader, and NIST ASD Team. NIST Atomic Spectra Database (ver. 5.8), [Online]. Available: <https://physics.nist.gov/asd> [2021, January 2021]. National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD., 2021.
- [57] M. S. Pindzola and S. D. Loch, “Electron-impact ionization of Se^{2+} and Se^{3+} ,” *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, vol. 49, no. 12, 2016.
- [58] L. Liu, P. Liu, and J. Zeng, “Electron impact ionization cross sections of the ground and excited levels of Se^{3+} ,” *Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena*, vol. 209, pp. 9–13, 2016.
- [59] J. Palaudoux, P. Lablanquie, L. Andric, K. Ito, E. Shigemasa, J. H. Eland, V. Jonauskas, S. Kučas, R. Karazija, and F. Penent, “Multielectron spectroscopy: Auger decays of the krypton 3d hole,” *Physical Review A*, vol. 82, no. 4, 2010.
- [60] A. Borovik, C. Brandau, J. Jacobi, S. Schippers, and A. Müller, “Electron-impact single ionization of Xe^{10+} ions,” *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, vol. 44, no. 20, p. 205205, 2011.

- [61] A. Kynienė, V. Jonauskas, S. Kučas, and R. Karazija, “On the existence of dipole satellites in the region of $M_{2,3}$ - $L_{2,3}$ non-dipole emission lines for transition elements,” *Lithuanian Journal of Physics*, vol. 48, p. 219, 2008.
- [62] V. Jonauskas, R. Kisielius, A. Kynienė, S. Kučas, and P. H. Norrington, “Magnetic dipole transitions in $4d^N$ configurations of tungsten ions,” *Physical Review A*, vol. 81, no. 1, pp. 1–9, 2010.
- [63] J. Koncevičiūtė, S. Kučas, Š. Masys, A. Kynienė, and V. Jonauskas, “Electron-impact triple ionization of Se^{2+} ,” *Physical Review A*, vol. 97, no. 1, pp. 1–6, 2018.
- [64] J. Koncevičiūtė, S. Kučas, A. Kynienė, Š. Masys, and V. Jonauskas, “Electron-impact double and triple ionization of Se^{3+} ,” *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, vol. 52, no. 2, p. 025203, 2019.
- [65] K. Spruck, N. R. Badnell, C. Krantz, O. Novotný, A. Becker, D. Bernhardt, M. Grieser, M. Hahn, R. Repnow, D. W. Savin, A. Wolf, A. Müller, and S. Schippers, “Recombination of W^{18+} ions with electrons: Absolute rate coefficients from a storage-ring experiment and from theoretical calculations,” *Physical Review A*, vol. 90, no. 3, p. 032715, 2014.
- [66] N. R. Badnell, K. Spruck, C. Krantz, O. Novotný, A. Becker, D. Bernhardt, M. Grieser, M. Hahn, R. Repnow, D. W. Savin, A. Wolf, A. Müller, and S. Schippers, “Recombination of W^{19+} ions with electrons: Absolute rate coefficients from a storage-ring experiment and from theoretical calculations,” *Physical Review A*, vol. 93, no. 5, pp. 1–6, 2016.

- [67] D. H. Kwon, Y. J. Rhee, and Y. K. Kim, “Cross sections for ionization of Mo and Mo⁺ by electron impact,” *International Journal of Mass Spectrometry*, vol. 245, no. 1-3, pp. 26–35, 2005.
- [68] D. H. Kwon, Y. J. Rhee, and Y. K. Kim, “Ionization of W and W⁺ by electron impact,” *International Journal of Mass Spectrometry*, vol. 252, no. 3, pp. 213–221, 2006.
- [69] V. Jonauskas, “Electron-impact double ionization of the carbon atom,” *Astronomy and Astrophysics*, vol. 620, pp. 4–9, 2018.
- [70] M. Gryziński, “Classical theory of atomic collisions. I. Theory of inelastic collisions,” *Physical Review*, vol. 138, no. 2A, 1965.
- [71] J. Koncevičiūtė and V. Jonauskas, “Electron-impact double ionization of Li⁺,” *Physical Review A*, vol. 93, no. 2, pp. 1–5, 2016.

Vilniaus universiteto leidykla
Saulėtekio al. 9, III rūmai, LT-10222 Vilnius
El. p.: info@leidykla.vu.lt, www.leidykla.vu.lt
Tiražas 15 egz.