

ЛИЦАРЕВ Михаил Сергеевич

**ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА И ХАРАКТЕРИСТИКИ
АТОМОВ И ИОНОВ В МНОГОКОНФИГУРАЦИОННОМ
МЕТОДЕ ХАРТРИ-ФОКА**

01.04.02 – теоретическая физика

Автореферат

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Работа выполнена в Учреждении Российской академии наук Физическом институте им. П.Н. Лебедева РАН

Научный руководитель: доктор физико-математических наук,
чл.-корр. РАН,
Максимов Евгений Григорьевич
Учреждение Российской академии наук
Физический институт им. П.Н. Лебедева
РАН, г. Москва

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук,
Рубцов Алексей Николаевич
Физический Факультет, Московский
Государственный Университет
им. М.В. Ломоносова, г. Москва

кандидат физико-математических наук,
Кулатов Эркин Турабаевич
Учреждение Российской академии наук
Институт Общей Физики РАН,
г. Москва

Ведущая организация: Учреждение Российской академии наук
Институт Спектроскопии РАН,
г. Троицк

Защита состоится 20 декабря 2010 года в ___:___ч. на заседании диссертационного совета Д 002.023.02 при Физическом Институте им. П.Н. Лебедева РАН по адресу: 119991, г. Москва, Ленинский проспект, д. 53.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Физического Института им. П.Н. Лебедева РАН.

С авторефератом диссертации можно ознакомиться на сайте www.lebedev.ru/.

Автореферат разослан «___» ноября 2010 года.

Ученый секретарь Диссертационного Совета Д 002.023.02
доктор физико-математических наук

Я.Н. Истомин

Общая характеристика работы

Актуальность темы. Многоконфигурационный метод Хартри-Фока (МКХФ-метод) применяется во многих областях физики конденсированного состояния вещества, квантовой химии, атомной спектроскопии, как правило, в тех случаях, когда, исходя из “первых принципов”, необходимо достичь высокой точности расчетов электронной структуры или других характеристик атомов (ионов). Найденные в результате таких вычислений волновые функции можно использовать для расчета вероятностей радиационных переходов, эффективных сечений возбуждения, потенциалов ионизации, электронной плотности и других характеристик атома, которые представляют интерес для целого ряда приложений. По существу, именно в нахождении волновых функций в рамках квантово-механического подхода, который является “наукой о матричных элементах”, и состоит одна из главных задач по расчету свойств многоэлектронных атомов (ионов). Волновые функции используются также при построении электронной плотности, представляющей отдельный интерес для атомных процессов, протекающих в лабораторной и астрофизической плазме, а также для физики конденсированного состояния вещества.

В связи с интенсивным развитием и практическим применением метода псевдопотенциалов [1] в рамках теории функционала плотности, в настоящее время очень актуальной является задача вычисления электронной плотности атома (иона), обладающей заданной степенью гладкости, во внешнем потенциале (моделирующем кристаллическое окружение атома или иона) с высокой точностью. Под гладкостью электронной плотности понимается непрерывное изменение последней в любой фиксированной точке координатного пространства при непрерывном изменении (одного из) параметров внешнего потенциала, который входит в гамильтониан атома и описывает экранировку валентных электронов.

Наличие свойства гладкости у волновых функций позволяет наиболее точно описать валентные электроны атома и исследовать их отклик на изменение параметров внешнего потенциала. В физике конденсированного состояния эта задача особенно актуальна в связи с правильным описанием обменно-корреляционных эффектов, связанных с локализованными d - и f -электронами, которые могут быть учтены только в рамках наиболее

точных расчетных методов, относящихся к теории электронной структуры атомов и ионов.

Другой важной областью физики, где необходимы вычисленные волновые функции и электронная плотность атомов и ионов, является теория процессов многоэлектронной ионизации тяжелых (быстрых и медленных) ионов при столкновении с нейтральными атомами [2]-[4]. Теоретическое описание этих явлений актуально в настоящее время и имеет первостепенное значение для ряда бурно развивающихся приложений, таких, например, как физика ускорителей и управляемый термоядерный синтез. Например, для оценки электронных потерь ионным пучком вследствие столкновений с остаточным газом и времени его жизни в накопительном кольце, необходимы m -кратные сечения электронных потерь (m - число потерянных электронов). В физике плазмы описание процессов ионизации необходимо для правильных оценок такого эффекта, когда ионизирующиеся частицы у стенок токамака (примесные ионы Fe и Cr) из области холодной плазмы попадают в область горячей плазмы, охлаждая ее.

Интенсивные экспериментальные исследования многоэлектронной ионизации быстрых тяжелых ионов нейтральными атомами были проделаны [5]-[13] параллельно с расчетами n СТМС-методом (n -body classical trajectory Monte Carlo – классическим n -частичным методом Монте-Карло) [9]-[12], [14], [15]. Однако теоретическая модель, позволяющая рассчитывать m -кратные сечения электронных потерь многоэлектронных тяжелых ионов во всей области энергий все еще не создана.

Диссертация посвящена развитию двух важных областей физики атомов и ионов: теории электронной структуры и теории ион-атомных столкновений. А именно, разработке метода вычисления волновых функций и электронной плотности атомов и ионов (с учетом внешнего потенциала), обладающих заданной степенью гладкости, на базе имеющихся расчетных схем, и созданию теоретической модели многоэлектронной ионизации тяжелых ионов, сталкивающихся с нейтральными атомами. Эти две области тесно связаны, так как во всех проводимых вычислениях необходимы волновые функции и электронная плотность атомов (ионов), которые в диссертации рассчитываются, если это не оговорено особо, в рамках многоконфигурационного метода Хартри-Фока.

Современное состояние теории позволяет моделировать различные

квантово-механические системы, экспериментальное изучение которых на практике трудноосуществимо по ряду причин. Поэтому на первый план выходит проблема формулировки критериев достоверности получаемых результатов в рамках разрабатываемых вычислительных схем.

МКХФ-процедура [16] состоит из двух последовательных этапов. В соответствие с общепринятой схемой сначала производится построение многоэлектронного базиса или *CSF*-базиса (*CSF* – configuration state functions – функции конфигурационных состояний с заданными полным орбитальным и полным спиновым моментами). Затем решаются многоконфигурационные уравнения Хартри-Фока из которых определяются радиальные функции, входящие в состав слэтеровских детерминантов. Существующие реализации каждого из двух основных этапов МКХФ-метода все еще содержат принципиальные недостатки.

Построение *CSF*-базиса является довольно трудоемкой задачей. Она состоит из задачи отбора электронных конфигураций и для каждой конфигурации – задачи о сложении орбитальных и спиновых моментов, которая решалась с помощью техники генеалогических коэффициентов, разработанной Рака [17]. С вычислительной точки зрения такой подход плохо поддается формализации и обобщению, особенно для состоящих из нескольких оболочек и содержащих неэквивалентные электроны конфигураций, которые возникают при расширении многоэлектронного базиса даже до r -состояний. Основная идея, решающая эту проблему основана на применении техники лестничных операторов орбитального и спинового моментов и впервые была выдвинута в работах [18]-[21]. Однако до сих пор в общем виде задача прямой диагонализации в рамках МКХФ-метода не была реализована.

На втором этапе МКХФ-процедуры радиальные части одноэлектронных орбиталей находятся из системы интегро-дифференциальных уравнений, которые могут быть решены только численно. Применение конечно-разностных схем не может гарантировать в общем случае сходимости решения на отдельном шаге итерационного МКХФ-процесса, а в отдельных случаях приводит к неустойчивой работе численных алгоритмов, реализация которых основана на сеточных схемах [16]. Поэтому, в рамках вариационной МКХФ-процедуры необходимо разработать математический аппарат, реализация которого одинаково успешно работала бы для всех

атомов периодической таблицы Д. И. Менделеева, содержала бы критерии правильности получаемого ответа, была бы устойчивой и позволяла вычислять электронную плотность во внешнем потенциале с заданной степенью гладкости.

Цели и задачи диссертации

- В рамках МКХФ-метода обобщить метод прямой диагонализации для случая *CSF*-базиса, отвечающего произвольным конфигурациям, а также разработать соответствующий универсальный вычислительный код для построения многоэлектронного базиса.
- На основе вариационного принципа сформулировать общие правила построения матрично-векторных МКХФ-уравнений, исходя из разложения одноэлектронных радиальных функций по ортонормированному базису.
- Разработать универсальную устойчивую вычислительную схему решения полученных уравнений и исследовать сходимость волновых функций в зависимости от длины базиса. Исследовать вопрос гладкости электронной плотности.
- Разработать модель передачи энергии в классическом приближении, описывающую явление ионизации многоэлектронных ионов нейтральными атомами на всем диапазоне энергий. Сформулировать критерии применимости полученного метода.
- Провести расчеты полных сечений ионизации с использованием электронной плотности, полученной из МКХФ-метода и вычисленной с помощью слэтеровских орбиталей и сравнить полученные результаты.

Научная новизна и практическая ценность результатов.

В основе разработанного метода решения многоконфигурационных уравнений Хартри-Фока лежит представление радиальных частей одноэлектронных орбиталей в виде аналитически заданного подкласса функций, представляющих собой конечное разложение по ортонормированному

базису. Такой подход позволяет ясно оценить достоверность результатов вычислений по анализу поведения коэффициентов разложения.

Разработанная программа, в которой реализован МКХФ-метод, позволяет проводить расчеты электронной структуры „из первых принципов“, и осуществлять моделирование кристаллического окружения атома (иона) с высокой точностью. Код может быть легко модифицирован практически для любого внешнего потенциала.

Разработана модель передачи энергии в ион-атомных столкновениях, описывающая в диапазоне энергий $10 \text{ кэВ/н} \leq E \leq 100 \text{ МэВ/н}$ явление одно- и многоэлектронной ионизации тяжелых ионов, сталкивающихся с нейтральными атомами. Модель не содержит подгоночных параметров и дает согласие вычисляемых значений сечений электронных потерь в сравнении с экспериментом и расчетами методом Монте-Карло в пределах фактора 2.

Создан программный код DEPOSIT, который позволяет вычислять сечение ионизации за очень малое время (одна точка по скорости v считается примерно за одну минуту), тогда как в методе Монте-Карло одна точка сечения считается около шести часов. Теоретическое моделирование позволяет исследовать различные сталкивающиеся ион-атомные системы, экспериментальное изучение которых затруднено и предсказывать их характеристики, что весьма актуально для физики ускорителей (электронные потери пучка) и для процессов управляемого термоядерного синтеза.

Публикации. По теме диссертации опубликовано 6 печатных работ в изданиях из списка рекомендованных ВАК РФ. Список публикаций приведен в конце автореферата.

Апробация работы. Результаты диссертационной работы неоднократно докладывались на семинаре теории конденсированного состояния под руководством член.-корр. РАН П.И. Арсеева, а также на следующих конференциях:

1. 19th Int. Conf. on Plasma Physics, National Institute for Fusion Science, Nagoya, Japan, 7-12 Dec., 2009, “Atomic Charge-Changing Processes in Plasmas”.

2. Int. Conf. on Heavy Ion Fusion, Darmstadt (Germany), Technical University, 1-5 September 2010, “Charge-Changing Processes in Collisions of Heavy Ions with Atoms and Molecules”.

Структура и объем диссертации. Материал диссертации изложен на 165 страницах, содержит 29 рисунков, 5 таблиц, библиография включает 127 наименований. Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения и пяти приложений.

Краткое содержание работы

Во **введении** обоснована актуальность, практическая ценность и научная новизна темы исследования, описаны решаемые проблемы и цели исследования. Также во введении описывается структура диссертации и приводятся выдвигаемые на защиту утверждения.

В **первой главе** вместе с кратким историческим обзором собраны имеющиеся в литературе и необходимые для понимания следующих глав основные определения, которые связаны с расчетами электронной структуры и характеристик атомов и ионов, приводится обзор основных методов их расчета. В отдельных случаях выводятся вспомогательные соотношения, используемые в дальнейших главах.

В этой же главе ставится основная задача, касающаяся решения нерелятивистского уравнения Шредингера для атома с зарядом Z и числом электронов N , которое в атомных единицах имеет вид

$$\left[-\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \nabla_i^2 - Z \sum_{i=1}^N \frac{1}{r_i} + \sum_{i<j}^N \frac{1}{r_{ij}} \right] \Psi(q) = E\Psi(q). \quad (1)$$

Здесь \mathbf{r}_i - радиус-вектор i -го электрона, $r_i = |\mathbf{r}_i|$, $r_{ij} = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$, $q = \{q_1, q_2, \dots, q_N\}$. Через q_i обозначена совокупность радиус-вектора \mathbf{r}_i и спиновой переменной σ_i .

В МКХФ-методе решение уравнения (1) ищется в виде конечного разложения по многоэлектронному *CSF*-базису [16]

$$\Psi(q) = \sum_{j=1}^{j_{max}} C_j \Phi_j(q). \quad (2)$$

Каждый его элемент $\Phi_j(q)$ соответствует определенной электронной конфигурации

$$[(n_1 l_1)^{w_1} (n_2 l_2)^{w_2} \dots (n_v l_v)^{w_v}]_j \quad (3)$$

с числом оболочек v и числом электронов w_i на i -ой оболочке, $\sum_{i=1}^v w_i = N$, и представляет собой линейную комбинацию слэтеровских детерминантов

$$\Phi_j(q) = \sum_{k=1}^{K_j} A_k^j |\det \alpha_1^{k,j} \dots \alpha_N^{k,j}\rangle. \quad (4)$$

Детерминант Слэтера здесь и далее обозначен через

$$|\det \alpha_1 \dots \alpha_N\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\tau} \varepsilon_{\tau} \prod_{i=1}^N \psi_{\alpha_{\tau_i}}(q_i), \quad (5)$$

суммирование ведется по всем возможным перестановкам τ , $\varepsilon_{\tau} = \pm 1$, если перестановка τ четная или нечетная соответственно. Одноэлектронное состояние

$$\psi_{\alpha}(q) = \frac{1}{r} P_{nl}(r) Y_{lm_l}(\theta, \varphi) \chi_{m_s}(\sigma) \quad (6)$$

в обозначениях Дирака записывается в виде

$$|\alpha\rangle = |nlm_l m_s\rangle, \quad (7)$$

где n – главное квантовое число, l – орбитальный угловой момент (азимутальное квантовое число), m_l – магнитное квантовое число, m_s – проекция спина на выделенную ось z . В выражении (6) переменные (r, θ, ϕ) обозначают сферические координаты, $Y_{lm_l}(\theta, \varphi)$ – сферическая функция, $\chi_{m_s}(\sigma)$ – спиновая часть одноэлектронного состояния.

Таким образом, необходимо определить входящие в формулу (4) коэффициенты A_k^j и наборы квантовых чисел $\alpha_1^{j,k}, \dots, \alpha_N^{j,k}$ одноэлектронных состояний, формирующих слэтеровские детерминанты, $\forall j \in [1, j_{max}]$, $\forall k \in [1, K_j]$, и все неизвестные радиальные функции $P_{nl}(r)$ с различными nl , входящие в базис (4). При этом, так как волновые функции (6) ортонормированы, на радиальные функции $P_{nl}(r)$ налагаются дополнительные условия ортонормировки

$$\int_0^{\infty} P_{nl}(r) P_{n'l}(r) dr = \delta_{nn'}, \quad l = 0, 1 \dots l_{max}. \quad (8)$$

Неизвестные коэффициенты C_j разложения (2) определяются в рамках самосогласованной МКХФ-процедуры стандартным способом [16].

Вторая глава диссертации посвящена построению многоэлектронного базиса (4) в рамках метода прямой диагонализации.

Глава начинается с введения. Во втором разделе второй главы излагаются общие принципы построения многоэлектронных базисных CSF -функций и приводятся примеры их построения в простейших случаях. Описываются разработанные автором алгоритмы построения конфигураций и для каждой конфигурации алгоритмы построения детерминантных состояний, формирующих базисные CSF -функции, а также вспомогательные алгоритмы. В третьем разделе второй главы с помощью техники лестничных операторов орбитального и спинового моментов получены выражения для матричных элементов операторов квадрата полного орбитального момента и квадрата полного спинового момента для произвольных конфигураций, которые необходимо вычислять в рамках метода прямой диагонализации.

На основе полученных соотношений для вычисления CSF -состояний с заданными моментами разработан универсальный программный код (6000 строк, код написан на C++), реализующий построение многоэлектронного базиса и проведены расчеты состояний с заданными спиновым и орбитальным моментами, в том числе для конфигураций, содержащих d - и f -электроны. На основе многочисленных расчетов проанализированы достоинства и недостатки метода. Некоторые (не очень громоздкие) результаты в качестве примеров приведены в четвертом разделе второй главы. Глава заканчивается выводами.

Третья глава посвящена построению и решению системы матрично-векторных уравнений, представляющих собой основные уравнения Многоконфигурационного метода Хартри-Фока.

Глава начинается с введения. Радиальные функции $P_{nl}(r)$, одноэлектронных состояний (6), входящие в выражение (4), ищутся в виде подкласса функций, представимых в виде конечного разложения

$$P_{nl}(r) = \sum_{k=1}^{K_{max}^l} b_k^{nl} Q_{kl}^{\zeta_l}(r), \quad (9)$$

по ортонормированному базису

$$Q_{kl}^{\zeta_l}(r) = A_{kl}^{\zeta_l} \left(\frac{r}{\zeta_l} \right)^{l+1} e^{-\frac{r}{2\zeta_l}} L_k^{2l+2} \left(\frac{r}{\zeta_l} \right), \quad A_{kl}^{\zeta_l} = \sqrt{\frac{k!}{(k+2l+2)! \zeta_l}}. \quad (10)$$

Здесь ζ_l - масштабирующий множитель, $L_n^\alpha(x)$ - многочлены Чебышева-

Лагерра, $l \in [0, l_{max}]$. Подход, основанный на представлении одноэлектронных волновых функций в виде разложения по заданному набору аналитических функций, был впервые предложен в работе [22] и известен как метод молекулярных орбиталей [23]. Однако в нем в качестве базиса, выбираются слэтеровские или гауссовы орбитали, что не позволяет достигать наилучшей точности решения атомного уравнения в силу структуры этих наборов функций.

Во втором разделе третьей главы с помощью вариационных соотношений на неизвестные коэффициенты b_k^{nl}

$$\frac{\partial I_{ab} [\{b_k^{nl}\}]}{\partial b_{k_0}^{n_{i_0} l_0}} = \delta_{l_0}^{l_0} \sum_{k=1}^{K_{max}^{l_0}} \xi_{kk_0}^l (\delta_{n_a}^{n_{i_0}} b_k^{n_{i_0} l} + \delta_{n_b}^{n_{i_0}} b_k^{n_{i_0} l}), \quad (11)$$

$$\frac{\partial G [\{b_k^{nl}\}]}{\partial b_{k_0}^{n_{i_0} l_0}} = \sum_{s=1}^{N_{max}^{l_0}} \lambda_{s i_0}^{l_0} (1 + \delta_{i_0}^s) b_{k_0}^{n_{i_0} l_0}, \quad (12)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial R_{abcd}^k [\{b_k^{nl}\}]}{\partial b_{k_0}^{n_0 l_0}} &= \delta_{l_a}^{l_0} \delta_{n_a}^{n_0} \sum_{k_1=1}^{K_{max}^{l_c}} \eta_{k_0 k_1}^{l_a l_c, k, bd} b_{k_1}^{n_c l_c} + \delta_{l_b}^{l_0} \delta_{n_b}^{n_0} \sum_{k_1=1}^{K_{max}^{l_d}} \eta_{k_0 k_1}^{l_b l_d, k, ac} b_{k_1}^{n_d l_d} + \\ &+ \delta_{l_c}^{l_0} \delta_{n_c}^{n_0} \sum_{k_1=1}^{K_{max}^{l_a}} \eta_{k_0 k_1}^{l_c l_a, k, bd} b_{k_1}^{n_a l_a} + \delta_{l_d}^{l_0} \delta_{n_d}^{n_0} \sum_{k_1=1}^{K_{max}^{l_b}} \eta_{k_0 k_1}^{l_d l_b, k, ac} b_{k_1}^{n_b l_b}, \end{aligned} \quad (13)$$

сформулированы общие правила построения матрично-векторных уравнений. Здесь

$$\xi_{k_1 k_2}^l = \int_0^\infty Q_{k_1 l_1}(r) \hat{D}_l Q_{k_2 l_2}(r) dr, \quad \hat{D}_l = -\frac{d^2}{2dr^2} + \frac{l(l+1)}{2r^2} - \frac{Z}{r}, \quad (14)$$

$$\eta_{k_1 k_2}^{l_1 l_2, k, ab} = \int Q_{k_1 l_1}(r) Q_{k_2 l_2}(r) \frac{1}{r} Y_{ab}^k(r) dr, \quad (15)$$

$$Y_{ab}^k(r_1) = r_1 \int_{\frac{r_1}{k_1+1}}^{\frac{r_1}{k_1}} P_{n_a l_a}(r_2) P_{n_b l_b}(r_2) dr_2, \quad (16)$$

I_{ab} и R_{abcd}^k - соответственно, одночастичный и двухчастичный интегралы, входящие в выражение для полной энергии, λ_{ij}^l - неопределенные множители Лагранжа, входящие в функционал $G [\{b_k^{nl}\}]$, который содержит условия ортонормировки радиальных функций $P_{nl}(r)$.

Разработан универсальный программный код, позволяющий для любого базиса проводить символьное вычисление выражения полной энергии

$E = \langle \Psi | H | \Psi \rangle$, и, на основе вариационных соотношений (11)-(13), строить систему матрично-векторных уравнений для определения коэффициентов b_k^{nl} и, таким образом, радиальных функций $P_{nl}(r)$ (9).

В третьем разделе третьей главы последовательно приводятся примеры построения матрично-векторных уравнений для различных систем, начиная с простейших, без учета электрон-электронного взаимодействия, и заканчивая системами, описываемыми уравнением (1), с d -состояниями.

В четвертом разделе третьей главы разработан универсальный метод решения матрично-векторных уравнений для произвольных атомов (ионов) в базисе (4) с произвольным числом орбиталей.

Систему матрично-векторных уравнений в общем виде можно записать следующим образом

$$\sum_{b=1}^n T_{ab} \mathbf{x}_b = \sum_{k=s(a)}^{p(a)} \lambda_{ak} \mathbf{x}_k, \quad a \in [1, n]. \quad (17)$$

Здесь T_{ab} - матрицы действительных чисел, получающиеся в результате вариационной процедуры. Каждому вектору \mathbf{x}_j сопоставляется вектор \mathbf{b}^{nl} так, что все их соответствующие компоненты тождественно равны: $\mathbf{x}_j \leftrightarrow \mathbf{b}^{nl}$, $(\mathbf{x}_j)_i = (\mathbf{b}^{nl})_i$, $\forall i$. Число уравнений системы n равно числу различных оболочек в базисе. Диапазон натуральных чисел $[s(a), p(a)]$ нумерует векторы \mathbf{x}_j отвечающие одному и тому же l . То есть $(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \delta_{ij}$ и $l_i = l_j$, $\forall i, j \in [s(a), p(a)]$. При этом $s(1) = 1$, $p(n) = n$, $p(a) = s(a) - 1 +$ число оболочек с $l = l_a$, $s(a + 1) = s(a) + 1$, если для данного a выполнено условие $l_a < l_{a+1}$.

Система (17) представляет собой задачу на собственные значения в некотором обобщенном смысле. А именно, требуется найти такие попарно для каждого l ортонормированные векторы \mathbf{x}_i и отвечающие им числа λ_{ij} , чтобы выполнялись все равенства системы (17). На практике, размерности каждой из, вообще говоря, прямоугольных матриц T_{ab} равны приблизительно 100. Это означает, что необходимо решать систему нелинейных уравнений с числом переменных от 100 до 1000, что практически осуществимо только численно с использованием ЭВМ.

Для системы уравнений (17) разработан следующий метод ее решения.

Введем величины

$$\mathbf{q}_a = \sum_{b=1}^n T_{ab} \mathbf{x}_b, \quad a \in [1, n] \quad (18)$$

$$\mathbf{d}\mathbf{q}_a = \mathbf{q}_a - \sum_{k=s(a)}^{p(a)} (\mathbf{q}_a, \mathbf{x}_k) \mathbf{x}_k. \quad (19)$$

Геометрический смысл невязки $\mathbf{d}\mathbf{q}_a$ заключается в том, что она представляет собой вектор, ортогональный подпространству $Span(\mathbf{x}_k)$, определяемому базисом, состоящим из векторов \mathbf{x}_k , $k \in [s(a), p(a)]$. Тогда, если набор $\{\mathbf{x}_j\}_{j=1}^n$ – решение системы (17), то каждый вектор \mathbf{q}_a лежит только в подпространстве $Span(\mathbf{x}_k)$, как это следует из (17), и, следовательно, $\mathbf{d}\mathbf{q}_a = 0$. Таким образом, решение системы (17) сводится к минимизации ортогональной невязки (19), что в свою очередь приводит к системе уравнений

$$\mathbf{d}\mathbf{q}_a (\{\mathbf{x}_j\}_{j=1}^n) = 0, \quad a = 1, 2, \dots, n. \quad (20)$$

Для системы уравнений (20) разработан следующий итерационный сходящийся процесс.

Пусть имеется некоторое начальное приближение $\{\mathbf{x}_j^0\}_{j=1}^n$. Будем вычислять последующее приближение по правилу

$$\begin{aligned} \mathbf{z}_j^{k+1} &= \mathbf{x}_j^k - \alpha_j \mathbf{d}\mathbf{q}_j^k, \\ \mathbf{x}_j^{k+1} &= \mathbf{z}_j^{k+1} / |\mathbf{z}_j^{k+1}|, \\ j &= 1, 2, \dots, n, \end{aligned} \quad (21)$$

пока процесс не сойдется. Здесь α_j – некоторая малая постоянная ($\sim 10^{-2} \div 10^{-5}$), которая для одних и тех же l одинакова, $|\mathbf{x}|$ – квадратичная норма. В результате, получающиеся по схеме (21) решения \mathbf{x}_i попарно для каждого l ортонормированны, а отвечающие им числа λ_{ij} – симметричны по i, j .

В качестве начальных значений $\{\mathbf{x}_j^0\}_{j=1}^n$ следует выбирать ортонормированные собственные векторы, отвечающие радиальным функциям с $n_j - l_j - 1$ числом нулей. На m -м шаге итерационной МКХФ-процедуры следует брать начальные значения векторов $(\{\mathbf{x}_j^0\}_{j=1}^n)^m$ равными $n_j - l_j - 1$ -м собственным значениям диагональных матриц T_{aa} . Такой выбор объясняется следующими соображениями. Если решать задачу не в многоконфигурационном приближении Хартри-Фока, и не учитывать электрон-

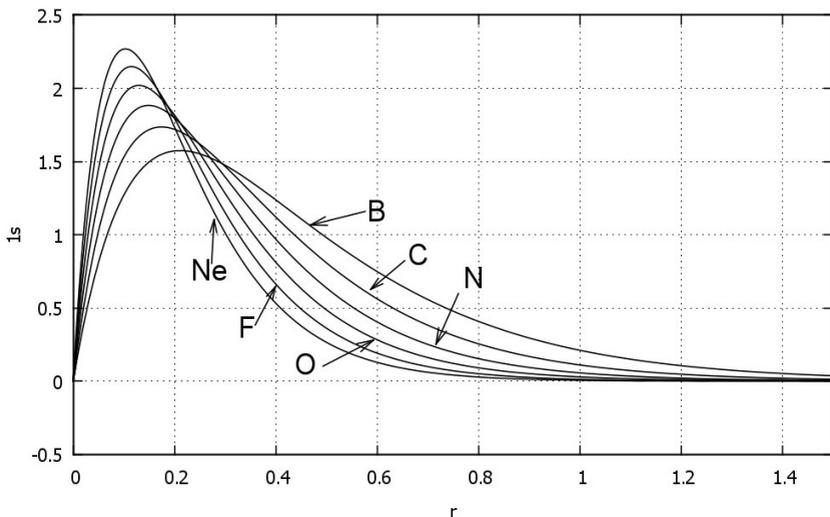


Рис. 1: Волновые $1s$ -функции для p -элементов второго ряда – атомов бора, углерода, азота, кислорода, фтора, неона в основном состоянии.

электронное взаимодействие, то недиагональные матрицы будут равны нулю, а диагональные матрицы будут совпадать при одних и тех же l , что и обуславливает выбор решений по числу нулей как в методе функционала плотности. В качестве примера, на рис. 1 приведены вычисленные радиальные части $P_{10}(r)$ для p -элементов второго ряда таблицы Д.И. Менделеева.

Далее, сходимость полученной схемы (21) решения уравнений (17) была ускорена с помощью DIIS-метода [24], [25] (DIIS – direct inversion of iterative subspace – метод прямого обращения итерированного подпространства). Как известно, этот метод позволяет ускорить сходимость итерационного процесса в $O(\sqrt{n})$ раз, где n - число итераций до применения DIIS-метода.

В пятом разделе третьей главы для различных систем приводятся результаты расчетов полной энергии и электронной плотности (вычисляемой по многоэлектронной волновой функции (2)), и, на основе критерия

$$\langle \Psi | \frac{\partial V_{ext}(r, \alpha)}{\partial \alpha} | \Psi \rangle = \frac{\partial E}{\partial \alpha}, \quad (22)$$

исследуется вопрос гладкости получаемых решений во внешнем поле, име-

ющим вид

$$V_{ext}(r, \alpha) = -\frac{Z_{ion}}{r} \operatorname{Erf}\left(\frac{r}{\sqrt{2}\alpha}\right). \quad (23)$$

Здесь Z_{ion} - заряд иона, равный заряду атома минус число электронов кора, $\operatorname{Erf}(z)$ - интеграл вероятности, параметр α характеризует так называемую жесткость потенциала (см., например, работу [1]).

В качестве проверки схемы был взят атом кислорода в основном состоянии и, соответственно, ион атома углерода C^{2-} во внешнем потенциале (23) с $Z_{ion} = 2$ (для выполнения условия электронейтральности атома на бесконечности). Левая часть равенства (22) вычислялась по волновым функциям уравнения (1) с внешним потенциалом (23), правая часть - численным дифференцированием энергии $E(\alpha)$ по формуле

$$\left. \frac{\partial E(\alpha)}{\partial \alpha} \right|_{\alpha=\alpha_0} = \frac{1}{2h} (E(\alpha_0 + h) - E(\alpha_0 - h)) + O(h^2). \quad (24)$$

Для шага $h = 0.002$ получено совпадение левой и правой частей выражения (22) с точностью до четвертого знака. На рис. 2 приводятся резуль-

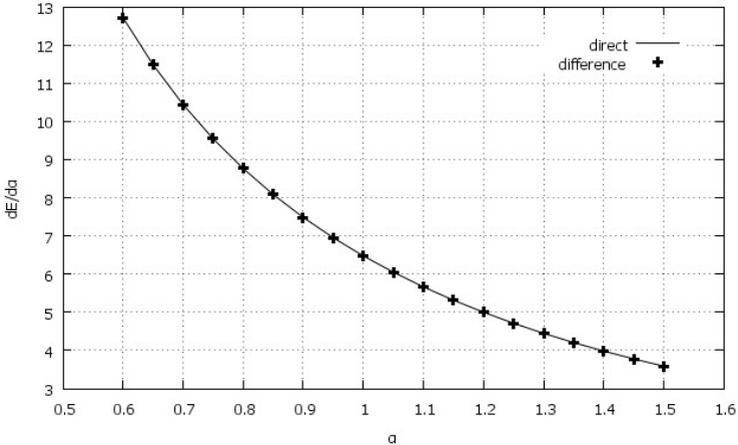


Рис. 2: Производная полной энергии $E(\alpha)$ по параметру α для иона C^{2-} в поле (23) с $Z_{ion} = 2$. Сплошная кривая - матричный элемент (22) производной потенциала (23), крестики - численное дифференцирование $E(\alpha)$ по формуле (24) с шагом $h = 0.002$.

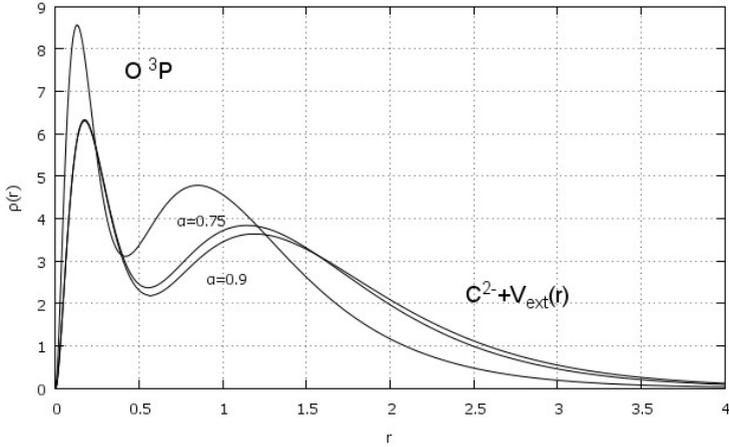


Рис. 3: Электронная плотность атома кислорода O в основном состоянии и иона C^{2-} во внешнем поле (23) при значениях $\alpha = 0.75$ и $\alpha = 0.9$. Видно малое изменение электронной плотности, относящейся к валентным электронам, при малом изменении значений параметра α , характеризующего так называемую жесткость потенциала. Валентные электроны тем больше локализованы, чем меньше значение α .

таты расчета, демонстрирующие гладкость получаемых решений. На рис. 3 представлена электронная плотность атома кислорода в основном состоянии и, соответственно, иона атома углерода C^{2-} во внешнем потенциале (23) с $Z_{ion} = 2$ при различных значениях параметра α . Глава заканчивается выводами.

В четвертой главе строится теоретическая модель, описывающая процессы многоэлектронной ионизации атомов и ионов сталкивающихся с нейтральными атомами.

Глава начинается с введения. Во втором разделе четвертой главы на основе классического приближения, разработанного Н. Бором [26], выводится выражение для переданной электронам налетающего иона энергии $T(b)$ в зависимости от прицельного параметра (или параметра удара) b .

Энергия, переданная электрону налетающего иона и принадлежащему

γ -оболочке, определяется как

$$\Delta E_\gamma = \frac{1}{2}(u_\gamma + \Delta u_\gamma)^2 - \frac{1}{2}u_\gamma^2 = u_\gamma \Delta u_\gamma + \frac{1}{2}(\Delta u_\gamma)^2, \quad (25)$$

где через u_γ и Δu_γ обозначены, соответственно, средняя орбитальная скорость и ее приращение, вследствие столкновения с нейтральным атомом. Величины u_γ и Δu_γ вычисляются из уравнений

$$u_\gamma = \sqrt{2I_\gamma}, \quad (26)$$

$$\Delta u_\gamma = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dU(R)}{dp} dt = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dU(R)}{dR} \frac{dR}{dp} dt. \quad (27)$$

Здесь I_γ - потенциал ионизации для γ -оболочки, $U(R)$ - поле нейтрального атома на расстоянии R от его центра, $R^2 = p^2 + v_r^2 t^2$, p - прицельный параметр (электрона) относительно атома, v - начальная скорость налетающего иона на бесконечности, t - время, $v_r = \sqrt{v^2 + u_\gamma^2}$. Поле нейтрального атома $U(R)$ на расстоянии R от ядра приближенно выражается как сумма трех потенциалов Юкавы с шестью параметрами

$$U(R) = -\frac{Z}{R} \sum_{i=1}^3 A_i e^{-\alpha_i R}, \quad \sum_{i=1}^3 A_i = 1, \quad (28)$$

где Z - заряд нейтрального атома, A_i и α_i - численные параметры, которые определены из метода Дирака-Хартри-Фока-Слэтера [27] расчетным путем.

В случае больших скоростей $v \gg u_\gamma$, приращение скорости $\Delta u_\gamma \sim 2v$ [28], и линейное по Δu_γ слагаемое в выражении (25) можно отбросить. В противоположном случае малых скоростей $v \ll u_\gamma$ основной вклад в энергию дает первое слагаемое. Таким образом,

$$\Delta E_\gamma(p) = \frac{2N_{eff}^\gamma u_\gamma}{v_r(p + 4u_\gamma/v_r v^2)} \sum_{i=1}^3 A_i F(\alpha_i p), \quad u_\gamma \geq v \quad (29)$$

$$\Delta E_\gamma(p) = \frac{2Z^2}{v^2(p^2 + \frac{Z^2}{v^4})} \left[\sum_{i=1}^3 A_i F(\alpha_i p) \right]^2, \quad u_\gamma < v. \quad (30)$$

Здесь

$$p^2 = (b - r \cos \theta)^2 + (r \sin \theta \cos \varphi)^2, \quad 0 \leq \theta \leq \pi, \quad 0 \leq \varphi < 2\pi, \quad (31)$$

и функция

$$F(k) = \int_0^\infty dy k^2 e^{-\sqrt{k^2+y^2}} \left[\frac{1}{(k^2+y^2)^{3/2}} + \frac{1}{k^2+y^2} \right], \quad (32)$$

заменяется ее приближенным выражением

$$F(k) \approx e^{-0.90k} (1.809\,083\,77 - 2e^{-0.905(k+1)}). \quad (33)$$

Переданная энергия $\Delta E_\gamma(p)$ нормируется следующим образом. В случае больших скоростей (30), при $p \rightarrow 0$, максимальная переданная энергия равна величине $\Delta E_{high}^{max} = 2v^2$, которая может быть передана электрону при лобовом столкновении с атомным ядром. В случае малых скоростей (29), при $p \rightarrow 0$, максимальная переданная энергия вычисляется, исходя из предположения, что электрон налетающего иона получает энергию вследствие столкновений с электронами атома-мишени, которую можно посчитать, введя средний радиус оболочки налетающего иона r_γ как $\Delta E_{slow}^{max} = N_{eff}^{(\gamma)} v^2/2$, где $N_{eff}^{(\gamma)} \approx Zr_\gamma^2/R_a^2$, если $r_\gamma < R_A$ и $N_{eff}^{(\gamma)} \approx Z$ если $r_\gamma > R_A$, где R_A - радиус атома.

Полная энергия $T(b)$, переданная электронам налетающего иона рассчитывается как

$$T(b) = \sum_\gamma \int \rho(r) \Delta E_\gamma(p) d\mathbf{r}, \quad (34)$$

где $\rho(r)$ электронная плотность налетающего иона. Функция $\rho(r)$ нормирована на полное число электронов

$$\int_0^\infty \rho(r) dr = N. \quad (35)$$

Далее в этом же разделе следует изложение вычислительной схемы взятия трехмерного интеграла (34), основанной на квадратурах Гаусса наивысшей степени точности (по угловым переменным) и шестиинтервальной формуле Ньютона-Котеса на семиточечном шаблоне, для каждого отрезка логарифмической сетки по радиальной переменной.

В заключительной части второго раздела четвертой главы формулируются критерии применимости разработанной модели. Для случая больших скоростей условие применимости записывается как

$$\sqrt{2I_1/n} \ll v \ll Z_A, \quad (36)$$

n - главное квантовое число соответствующее внешней электронной оболочке налетающего иона. Для случая малых скоростей критерий применимости имеет вид

$$\frac{R_A}{\left(\sum_{\gamma} N_{\gamma} r_{\gamma}^2\right)^{1/2}} \left(\frac{2I_1}{Z}\right)^{1/2} \leq v \ll \frac{2R_A}{R_{ion}} \left(\frac{2I_1}{Z}\right)^{1/2}, \quad (37)$$

где суммирование проводится по всем оболочкам γ и R_{ion} - радиус налетающего иона.

Третий раздел четвертой главы посвящен расчетам полного и m -кратных сечений электронных потерь для большого числа сталкивающихся систем в соответствие с формулами

$$\sigma_{tot}(v) = \sum_{m=1}^N \sigma_m(v) = \pi b_{max}^2, \quad (38)$$

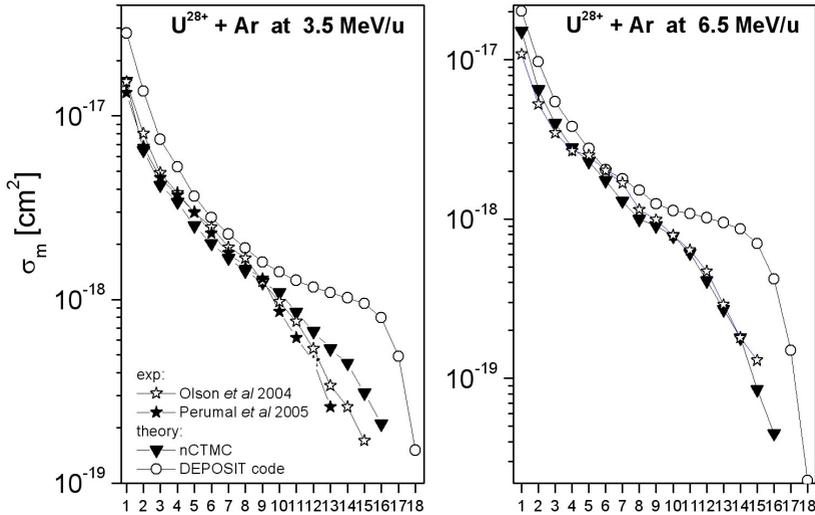


Рис. 4: Представлены m -кратные сечения электронных потерь для ионов U^{28+} , сталкивающихся с атомами Ar как функции m . Эксперимент: открытые звездочки - [12], черные звездочки - [30], треугольники - расчет методом Монте-Карло [12], открытые круги - расчет в классическом приближении, код DEPOSIT.

$$\sigma_m(v) = 2\pi \int_0^\infty P_m(b)b db, \quad (39)$$

где вероятности ионизации $P_m(b)$ вычисляются в рамках статистической модели Рассека-Мели [29]. Значение b_{max} определяется из уравнения

$$T(b_{max}) = I_1. \quad (40)$$

Полученные результаты сравниваются с экспериментальными данными и расчетами методом Монте-Карло.

В первой части третьего раздела проводятся расчеты полного и m -кратных сечений электронных потерь для ионов Ar^{1+} , Ar^{2+} , Kr^{7+} , Xe^{3+} , Ar^{18+} , Pb^{25+} и U^{q+} ($q = 10, 28, 39, 62$), сталкивающихся с атомами H , N , Ne , Ar , Kr , Xe и U в диапазоне больших скоростей. Сравнение с экспериментом и расчетами методом Монте-Карло показало, что предложенная модель дает совпадение одно- и многоэлектронных сечений электронных потерь в пределах фактора 2.

Во второй части третьего раздела сравниваются результаты расчетов переданной энергии $T(b)$ (выражение (34)) и вычисленных сечений (38) для случая слэтеровской и МКХФ-плотностей на примере столкновений $Xe^{18+} + Xe$ при энергии 6 МэВ/н и $U^{28+} + Ar$ при энергии 6.5 МэВ/н.

Значения сечений электронных потерь для ионов Xe^{18+} составляют $\sigma_{tot}^{sl} = 11.2 \times 10^{-17} \text{ см}^2$, $\sigma_{tot}^{mchf} = 12.6 \times 10^{-17} \text{ см}^2$ (в соответствии с работой [10], экспериментальное значение $\sigma_{tot} = (9.5 \pm 0.4) \times 10^{-17} \text{ см}^2$, значение, вычисленное с помощью метода Монте-Карло, $\sigma_{tot} = 8.6 \times 10^{-17} \text{ см}^2$). Относительная разница сечений для МКХФ- и слэтеровского приближений составляет $(12.6 - 11.2)/12.6 = 0.11 = 11\%$. Похожая ситуация имеет место и для столкновений $U^{28+} + Ar$, для которых относительная разница сечений МКХФ- и слэтеровского приближений составляет $(6.6 - 5.7)/6.6 = 0.136 = 14\%$.

Модель передачи энергии дает наилучшее приближение для электронов внешних оболочек. Как видно из рисунка 5, МКХФ-плотность для внешних оболочек менее локализована по сравнению со слэтеровской плотностью, и, следовательно, значения прицельного параметра b_{max} должны для нее быть больше, как это и получается из расчетов. Однако, несмотря на то, что МКХФ-подход дает более точные значения прицельных параметров, они не сильно отличаются от слэтеровского подхода. Учитывая, что

расчеты со слэтеровскими волновыми функциями гораздо проще, в разработанной модели целесообразно использовать плотность, вычисленную с помощью слэтеровских волновых функций.

В заключительной части третьего раздела четвертой главы проводятся расчеты полного и m -кратных сечений электронных потерь для ионов N^+ , Ar^+ , Ge^- , Au^- , U^+ , U^{28+} , W , W^+ , сталкивающихся с нейтральными атомами (He , Ne , Ar , W) при энергиях $E > 10$ кэВ/н. Результаты расчетов сравниваются с экспериментом и расчетами методом Монте-Карло.

В диапазоне высоких энергий приводятся также результаты для сечений электронных потерь в релятивистском борновском приближении (код LOSS-R [32]). В качестве окончательного варианта сечений электронных потерь предлагается величина σ_{rec} , которая определяется из выражения

$$\frac{1}{\sigma_{rec}} = \frac{1}{\sigma_{low}} + \frac{1}{\sigma_{high}}. \quad (41)$$

Здесь через σ_{low} и σ_{high} обозначены сечения, вычисленные с помощью кода DEPOSIT и кода LOSS-R, соответственно. Для проведенных расчетов по-

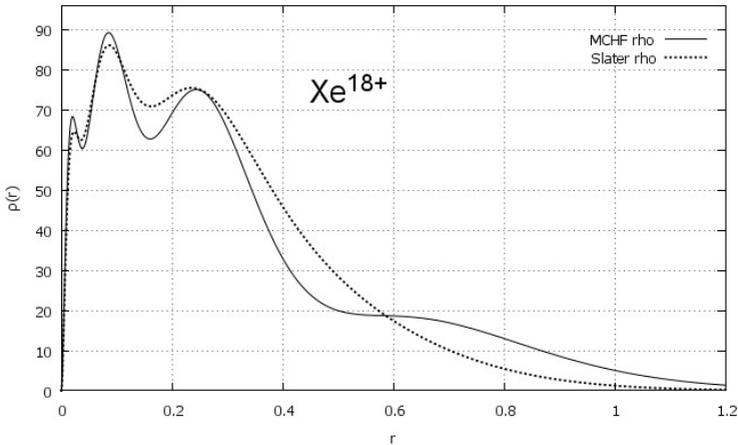


Рис. 5: Радиальная электронная плотность Xe^{18+} . Сплошная линия - расчет в рамках многоконфигурационного приближения, пунктирная линия - вычисление по слэтеровским функциям. Обе плотности нормированы на полное число электронов $N = 36$.

лучено согласие с имеющимися экспериментальными данными в пределах фактора 2. Глава заканчивается выводами.

В заключении приведены основные результаты диссертации.

В приложениях собраны различные математические соотношения и некоторые громоздкие для оформления результаты, полученные автором.

Основные результаты, выносимые на защиту

1. В рамках многоконфигурационной процедуры Хартри-Фока предложен метод построения многоэлектронного базиса, основанный на прямой диагонализации базисных состояний. С помощью техники лестничных опера-

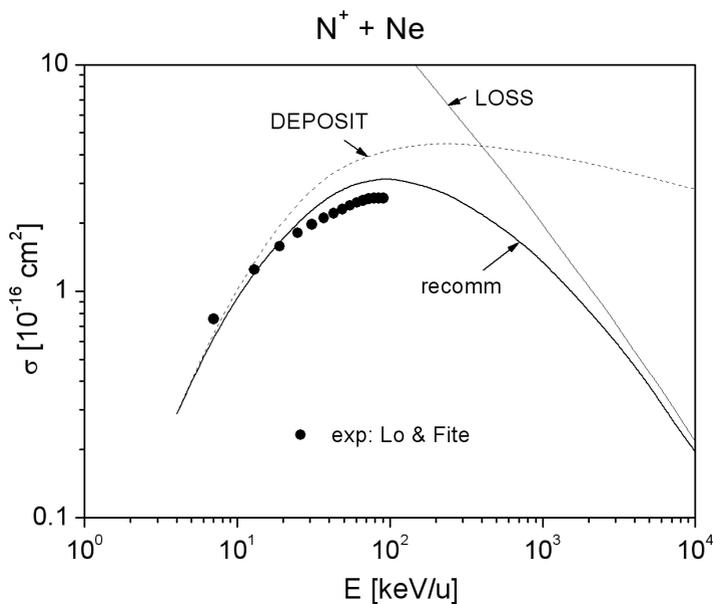


Рис. 6: Представлены полные сечения электронных потерь для ионов N^+ , сталкивающихся с атомами Ne , как функции энергии ионов. Эксперимент: закрашенные кружки полученные из [31], теория: пунктирная кривая - код DEPOSIT, тонкая кривая - код LOSS-R, толстая кривая - σ_{rec} , уравнение (41).

торов углового и спинового моментов этот метод обобщен на случай произвольных электронных конфигураций. На основе полученных соотношений для метода прямой диагонализации разработан универсальный программный код (6000 строк, код написан на C++), реализующий построение многоэлектронного базиса и проведены многочисленные расчеты состояний с заданными спиновым и орбитальным моментами. Результаты опубликованы в {1}.

2. Решение многоконфигурационных уравнений Хартри-Фока, за счет аналитического разложения радиальных частей одноэлектронных волновых функций, входящих в состав слэтеровских детерминантов, по ортонормированному базису, сведено к решению системы матрично-векторных уравнений. Сформулированы правила построения этих уравнений и найдена устойчивая численная схема их решения. Разработан программный код (9400 строк, код написан на C++), реализующий символьное получение и варьирование выражения полной энергии, строящий систему матрично-векторных уравнений и решающий эту систему с линейной скоростью сходимости. С его помощью проведены расчеты полной энергии, волновых функций и электронной плотности для элементов, содержащих в том числе d - и f - электроны. Результаты опубликованы в {2}.

3. В классическом приближении разработана модель передачи энергии в ион-атомных столкновениях, описывающая в диапазоне энергий $E > 1$ МэВ/н явление одно- и многоэлектронной ионизации тяжелых ионов, сталкивающихся с нейтральными атомами, не содержащая подгоночных параметров. Для вычисления переданной электронам энергии разработан программный код DEPOSIT (на C++), с помощью которого проведены вычисления для ионов Ar^{1+} , Ar^{2+} , Kr^{7+} , Xe^{3+} , Ar^{18+} , Pb^{25+} и U^{q+} ($q = 10, 28, 39, 62$), сталкивающихся с атомами H , N , Ne , Ar , Kr , Xe и U . Сравнение с экспериментом и расчетами методом Монте-Карло показало, что предложенная модель дает совпадение одно- и многоэлектронных сечений электронных потерь в пределах фактора 2. Результаты опубликованы в {3}, {4}.

4. Разработанная модель передачи энергии обобщена на случай низких и средних диапазонов энергий. Сформулированы критерии применимости разработанной модели. Для расчета полного и m -кратных сечений электронных потерь получены основные формулы, не содержащие подгоноч-

ных параметров. Возможности компьютерного кода DEPOSIT расширены на весь диапазон энергий $10 \text{ кэВ/н} \leq E \leq 100 \text{ МэВ/н}$. Получено согласие проведенных расчетов для ионов Ar^+ , Ge^- , Au^- , U^+ , U^{28+} , W , W^+ , сталкивающихся с нейтральными атомами (He , Ne , Ar , W) при энергиях $E > 10 \text{ кэВ/н}$, с имеющимися экспериментальными данными в пределах фактора 2. Результаты опубликованы в {5}, {6}.

Публикации по теме диссертации

{1} М. С. Лицарев, О. В. Иванов. “Многоконfigurационный метод Хартри-Фока: прямая дигонализация при построении многоэлектронного базиса” // *ЖЭТФ*, 138, 28 (2010).

{2} М. С. Лицарев, О. В. Иванов. “Система матрично-векторных уравнений в Многоконfigurационном методе Хартри-Фока” // *Кратк. сообщ. физ.*, 37, 37 (2010).

{3} V. P. Shevelko, M. S. Litsarev and H. Tawara. “Multiple ionization of fast heavy ions by neutral atoms in the energy deposition model” // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, 41, 115204 (2008).

{4} M.-Y. Song, M. S. Litsarev, V. P. Shevelko, H. Tawara, J.-S. Yoon. “Single and multiple-electron loss cross-sections for fast heavy ions colliding with neutrals: Semi-classical calculations” // *Nucl. Instr. Meth. B*, 267, 2369 (2009).

{5} V. P. Shevelko, M. S. Litsarev, M.-Y. Song, H. Tawara, J.-S. Yoon. “Electron loss of fast many-electron ions colliding with neutral atoms: possible scaling rules for the total cross sections” // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, 42, 065202 (2009).

{6} V. P. Shevelko, D. Kato, M. S. Litsarev, H. Tawara. “The energy-deposition model: electron loss of heavy ions in collisions with neutral atoms at low and intermediate energies” // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, 43, 215202 (2010).

Цитируемая литература

- [1] C. Hartwigsen, S. Goedecker, J. Hutter, *Phys. Rev. B* **58**, 3641 (1998).
- [2] J. H. McGuire. Introduction to dynamic correlation: multiple electron transitions in atomic collisions. New Orleans, LA; Tulane University Press (1997).
- [3] N. Stolterfoht, R. D. DuBois, R. D. Rivarola. Electron emission in heavy ion-atom collisions. Berlin, Springer (1997).

- [4] V. P. Shevelko, H. Tawara. Atomic multielectron processes. Springer (1998).
- [5] W. Erb. GSI Report GSI-P-78 (Darmstadt: GSI) (1978).
- [6] B. Franzke. IEEE Trans. Nucl. Sci. **28** 2116 (1981).
- [7] D. Mueller et al, Phys. Plasmas **8** 1753 (2001).
- [8] D. Mueller et al, Laser Part. Beams **20** 551 (2002).
- [9] R. E. Olson, R. L. Watson, V. Horvat and K. E. Zaharakis, J. Phys. B **35** 1893 (2002).
- [10] R. L. Watson, Y. Peng, V. Horvat, G. J. Kim and R. E. Olson, Phys. Rev. A **67** 022706 (2003).
- [11] R. D. DuBois et al, Phys. Rev. A **68** 042701 (2003).
- [12] R. E. Olson, R. L. Watson, V. Horvat et al, J. Phys. B. **37** 4539 (2004).
- [13] A. C. F. Santos and R. D. DuBois, Phys. Rev. A **69** 042709 (2004).
- [14] R. E. Olson et al, Nucl. Instrum. Methods A **544** 333 (2005).
- [15] R. E. Olson, Nucl. Instrum. Methods A **464** 93 (2001).
- [16] C. Froese Fisher, T. Brage, P. Jonsson. Computational atomic structure; An MCHF approach. Institute of physics publishing, Bristol and Philadelphia (2003).
- [17] G. Racah, Phys. Rev. **76**, 1352 (1949).
- [18] J. H. Barlett Jr., Phys. Rev. **38**, 1623 (1931).
- [19] N.M. Gray and L.A. Wills, Phys. Rev. **38**, 248 (1931).
- [20] M.H. Johnson Jr., Phys. Rev. **38**, 1628 (1931).
- [21] M.H. Johnson Jr., Phys. Rev. **39**, 197 (1932).
- [22] C. C. J. Roothaan, Rev. Mod. Phys. **32**, 179 (1960).
- [23] С. Фудзинага. Метод молекулярных орбиталей. Мир, Москва (1983).
- [24] E. R. Davidson, J. Comp. Phys. **17**, 87 (1975).
- [25] P. Pulay, Chem. Phys. Lett. **73**, 393 (1980).
- [26] N. Bohr, Phil. Mag. **30**, 581 (1915).
- [27] F. Salvat Parelada, Phys. Rev. A **36**, 467 (1987).
- [28] Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшиц, Механика, том I. Физматлит, Москва (2001).
- [29] A. Russek, J. Meli, Physica **46**, 222 (1970).
- [30] A. N. Pirumal, V. Horvat, R. L. Watson, et al., Nucl. Inst. Meth. B **227** 251 (2005).
- [31] H. H. Lo and W. L. Fite, At. Data **1** 305 (1970).
- [32] I. L. Beigman, I. Yu. Tolstikhina, V. P. Shevelko, Tech. Phys. **53** 546 (2008).