

В.М. СИМУЛИК,¹ Т.М. ЗАЯЦЬ,² Р.В. ТИМЧИК³¹ Інститут електронної фізики НАН України, відділ теорії елементарних взаємодій
(Вул. Університетська, 21, Ужгород 88000; e-mail: vsimulik@gmail.com)² Ужгородський національний університет, кафедра електронних систем
(Вул. Капітульна, 13, Ужгород 88000)³ Інститут електронної фізики НАН України, відділ електронних процесів
(Вул. Університетська, 21, Ужгород 88000)

ВИБІР ХВИЛЬОВОЇ ФУНКЦІЇ ОСНОВНОГО СТАНУ He ДЛЯ ПРЕЦИЗІЙНИХ ОБЧИСЛЕНЬ ПАРАМЕТРІВ КВАЗІСТАЦІОНАРНИХ СТАНІВ

УДК 539.18; 539.184.3

На прикладі атома He обґрунтовано необхідність вибору багатопараметричних хвильових функцій для опису основного стану атома в задачах іонізації атомів фотонами та електронами. Обчислюються енергії, ширини і парціальні ширини найнижчого ¹P автоіонізаційного стану He, що знаходиться вище порога утворення збуджених іонів. Порівнюються результати, отримані при використанні різних хвильових функцій основного стану. Показано, що на відміну від повних ширин автоіонізаційних станів, парціальні ширини є суттєво різними для різних хвильових функцій основного стану.

Ключові слова: автоіонізаційні стани, квазістаціонарні стани, накладання конфігурацій, багатопараметричні хвильові функції.

1. Вступ

У сучасних розрахунках перерізів іонізації атомів фотонами, електронами чи іншими частинками хвильова функція початкового стану, як правило, вибирається в тому самому наближенні, що і хвильова функція кінцевого стану, як це показано в роботах Берка [1] та Люка [2]. Фано в роботі [3] аргументовано довів, що при аналізі процесів збудження двочастинкових станів у великій кількості атомів хімічних елементів в основному стані в першу чергу слід враховувати багатоелектронні кореляції зразка $n\ell^2$. Це пов'язано з тим фактом, що за наявності всього двох електронів на єдиній в атомі оболонці важливими є кореляції в основному стані. У випадку розрахунків перерізів іонізації двоелектронних систем, наприклад атома гелію вище порога утворення збуджених іонів, а саме $\text{He}^+(N=2)$, це питання набуває прин-

ципового значення, оскільки поряд з одночастинковим каналом $1s\ell$ в даній задачі слід враховувати зв'язок з двократно збудженими каналами $2s\ell$, $2p\ell(L-1)$, $2p\ell(L+1)$. Амплітуда збудження цих каналів зумовлена як їхнім зв'язком з каналом $1s\ell$ в кінцевому стані, так і багатоелектронними кореляціями в основному стані. Задача розрахунку хвильової функції основного стану, розглядуваної тут модельної системи, яка описується проекцією гамільтоніана на підпростір $1s$, $2s$, $2p$ станів іона He^+ , відповідає розв'язку задачі на зв'язок трьох закритих каналів. Система рівнянь координатного зображення методу сильного зв'язку каналів в даному випадку перетворюється до рівнянь Хартрі–Фока в багатоконфігураційному підході [4]. Розв'язок цієї системи рівнянь методом взаємодіючих конфігурацій відповідає проблемі знаходження власних значень матриці дійсного симетричного оператора нескінченного рангу. Стосовно двоелектронних систем це відповід-

атиме розв'язанню багатоконфігураційної проблеми з врахуванням $n\ell^2$ конфігурацій відповідного атома.

2. Важливість вибору функції основного стану атома в задачі іонізації атомів. Вибір хвильової функції основного стану атома He

У задачах іонізації атомів важливим є вибір функції основного стану атома. Критерієм вибору тієї чи іншої хвильової функції основного стану є значення енергії основного стану атома, яке отримуємо в розрахунках, використовуючи ту чи іншу хвильову функцію. Розраховане значення енергії основного стану не завжди збігається з експериментальним значенням енергії. А у випадку прецезійних розрахунків параметрів автоіонізаційних станів це матиме принципове значення. Тому для таких розрахунків вибирають хвильову функцію, яка точно відтворює експериментальне значення енергії основного стану. Найбільш відомим класом функцій основного стану гелієподібних систем є клас хвильових функцій, представлених у роботах Г'іллерааса [5, 6]:

$$\Psi_0 = \sum_{n,\ell,m} C_{nlm} \psi_{nlm}, \quad \psi_{nlm} = \frac{e^{-s/2} s^n t^\ell u^m}{(n + \ell + m + 2)!}, \quad (1)$$

де $\ell = 0, 2, 4, \dots$. Детальний опис і вибір параметрів див. у [5, 6].

Ці функції добре описують енергію основного стану He, але їх використання в задачах іонізації в значній мірі ускладнюється методикою розрахунку амплітуд, складність обчислення яких зумовлена, в основному, знаходженням інтегралів, до яких входить множник вигляду $|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|^m$. У випадку використання координатного зображення методів сильного зв'язку каналів розрахунок амплітуд проводиться один раз у кожній точці за енергією.

Детальний аналіз розрахунку параметрів за методикою Г'іллерааса проведено в роботі [7] з врахуванням модифікації Фока [8]. У статті [7] показано, що вже у шостому наближенні

$$\Psi^6 = \Psi^4 + [c_5 u^5 r^{-2} + c_6 (5s + t^2/s) r^3] e^{-zS}, \quad (2)$$

де

$$\Psi^4 = e^{-zS} \{1 + u/2 + A + c_4 u^2 R_1 r^{-3}\}, \quad (3)$$

$$A \equiv (1 + u/2) R_1 [c_1 r^{-1} + c_2 + c_3 r].$$

Така функція основного стану дає значення енергії близьке до експериментального, а саме: $E = 2,903557$ а.о. В розрахунках використовують, як правило, багатопараметричні хвильові функції Г'іллерааса (6-ти, 8-ми, чи, навіть, 56-ти параметричних функцій). На відміну від цього типу варіаційних функцій, хвильові функції, отримані в багатоконфігураційному наближенні Хартрі–Фока, не дають близькі до експериментального значення енергії основного стану гелію, див., наприклад, [4, 9] і посилання там. Найбільш точним аналізом багатопараметричних варіаційних хвильових функцій для атома гелію вважаємо даний в роботах Пекеріса, див., наприклад, [10] і посилання там. Але використання таких функцій в серійних розрахунках є надзвичайно складним і громіздким.

В іншому підході аналіз хвильових функцій основного стану двоелектронних систем проводять за допомогою метода Монте-Карло. В роботі [11] це зроблено, наприклад, для функції вигляду

$$\Psi_{49} = (1 + P_{12}) \exp \left(\frac{\sum_{k=0} a_k r_1^k r_2^k r_{12}^k}{\sum_{k=0} b_k r_1^k r_2^k r_{12}^k} + B \right), \quad (4)$$

$$B \equiv c(r_1^2 + r_2^2 - r_{12}^2) \ln[r_1^2 + r_2^2] - \alpha r_1 - \beta r_2.$$

В цьому наближенні отримано точне значення енергії основного стану гелію. Однак повернемося до ближчих до нас підходів.

Розв'язок рівняння Шредінгера для основного стану He зручніше шукати в класі функцій зі змінними, що розділяються. Найбільш відомою функцією основного стану He в класі функцій зі змінними, які розділяються, є аналітична форма хвильової функції Хартрі–Фока в одноконфігураційному наближенні

$$\chi(r) = N_r (e^{-\xi r} + 0, 6e^{-\zeta r}) \quad (5)$$

і кореляційна функція Еккарта

$$\chi(\alpha r) = N_\alpha e^{-\alpha r}, \quad \alpha = 2/a_0, \quad (6)$$

де a_0 – радіус Бора, а літерами ξ і ζ в (5) позначено числові параметри, пояснені, наприклад, у [12], [13]. Коефіцієнти N_r та N_α в цих функціях вибираються із умови нормування хвильової функції $\Psi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ на одиницю. Але такого вигляду функції використовують тільки для грубих оцінок.

Згідно з [14] хвильова функція основного стану записується у вигляді

$$\Psi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \sum_{\ell} B_{\ell} Y_{\ell}^{00}(\mathbf{r}_{12}) F_{\ell}(r_1, r_2), \quad (7)$$

де Y_{ℓ}^{00} можна представити таким чином:

$$Y_{\ell}^{00} = \sum_{\mu} Y_{\ell\mu}(\theta_1, \varphi_1) C_{\ell\mu\ell-\mu}^{00} Y_{\ell\mu}(\theta_2, \varphi_2). \quad (8)$$

У формулах (7), (8) використані позначення: B_{ℓ} – коефіцієнт розкладу, \mathbf{r}_i – радіус-вектор i -го електрона, r_i – відповідний модуль, $C_{\ell\mu\ell-\mu}^{LM} \equiv \langle \ell\mu\ell - \mu | LM \rangle$ – коефіцієнти векторного додавання, $F_{\ell}(r_1, r_2)$ – радіальні функції, що описують внесок $n\ell^2$ конфігурацій в основний стан. Вибір пробних функцій $F_{\ell}(r_1, r_2)$ у загальному випадку довільний. Вимагається тільки лінійна незалежність набору і забезпечення правильної асимптотики розв'язку. В такому разі функції $F_{\ell}(r_1, r_2)$ можуть бути записані таким чином:

$$F_{\ell}(r_1, r_2) = \sum_{m,n} A_{mn}^{\ell} [\chi_m^{\alpha}(r_1) \chi_n^{\beta}(r_2) + \chi_n^{\alpha}(r_2) \chi_m^{\beta}(r_1)], \quad (9)$$

де χ_n^{α} – довільні набори неперервних функцій однієї змінної, α, β – параметри, що вибираються з варіаційного принципу. Взагалі кажучи, варіаційний принцип при розрахунку функцій $F_{\ell}(r_1, r_2)$ можна не використовувати, а функції χ_n^{α} взяти у вигляді кулонівського базису. Але у цьому випадку розклад типу (7), (9) буде збігатися дуже повільно і для досягнення потрібної точності слід врахувати дуже велику кількість членів розкладу. А от застосування для вибору параметрів α, β варіаційного принципу значно прискорює збіжність розкладів (9). Твід в [14] сформулював однопараметричну варіаційну задачу для розкладу типу (7). Він запропонував шукати функції $\chi_n^{\alpha}(r)$ в такому вигляді:

$$\chi_n^{\alpha}(r) = r^n \exp\left(-\frac{\alpha}{2}r\right), \quad \alpha = \beta, \quad (10)$$

де α визначається із умови мінімуму енергії основного стану. Коефіцієнти A_{mn}^{ℓ} обчислюються діагоналізацією матриці відповідного гамільтоніана. В залежності від числа врахованих в розкладі

(7) мультиполів, в клас хвильових функцій Твіда входять 21-, 31- і 41-параметричні функції, які містять відповідно $(np)^2$, $(nd)^2$ та $(nf)^2$ конфігурації. Для обчислювальної процедури використовуємо таку формулу:

$$F_{\ell}(r_1, r_2) = \sum_{m,n} A_{\ell mn} (r_1^m r_2^n + r_1^n r_2^m) \exp\left[-\frac{1}{2}k(r_1 + r_2)\right], \quad (11)$$

запропоновану у роботі Твіда [14].

3. Методика розрахунку

Діагоналізаційне наближення дає можливість прослідкувати, в які саме канали і в якому співвідношенні відбувається розпад автоіонізаційних станів, що знаходяться в області вище порога утворення збуджених іонів He^+ . Це питання особливо актуальне, оскільки дає можливість виявити резонанси, які розпадаються практично в один який-небудь канал (і в такому випадку для таких станів зв'язком каналів можна знехтувати) і такі, що розпадаються в декілька каналів, – тобто ті резонанси, для яких урахування зв'язку каналів є обов'язковим. В принципі цю інформацію можна отримати з аналізу даних, порівнюючи значення положень та ширин резонансів в різних наближеннях, але без знання парціальних ширин розпаду ця інформація є однобокою.

Для розрахунку сили осцилятора переходу (або перерізу іонізації) потрібно визначити амплітуду іонізації, яка в загальному випадку може бути записана у вигляді:

$$T_{|0\rangle \rightarrow |\lambda E\rangle} = \sqrt{C(E)} \langle \Psi_{\lambda}^{E(-)} | \hat{t} | 0 \rangle, \quad (12)$$

де $|0\rangle = |n_0 L_0 S_0\rangle$ і означає хвильову функцію початкового стану атома, $C(E)$ – кінематичний множник.

Нехай хвильові функції $|\lambda E\rangle$ задовольняють умови відповідним асимптотичним умовам [15]. Тоді хвильову функцію $\Psi_{\lambda}^{E(-)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ запишемо наступним чином:

$$\begin{aligned} |\Psi_{\lambda}^{E(-)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\rangle &= |\lambda E\rangle + \\ &+ \sum_m \frac{\tilde{V}_{m\lambda}(E)}{E - E_m(E) + i\Gamma_m(E)/2} \left(|\tilde{\Phi}_m^E\rangle - i |\chi_m^E\rangle \right), \end{aligned} \quad (13)$$

де

$$\begin{aligned} |\tilde{\Phi}_m^E\rangle &= |\varphi_m^c\rangle + \frac{1}{\pi} \int_0^\infty \frac{|\chi_m^{E'}\rangle}{E - E'} dE', \\ |\chi_m^E\rangle &= \pi \sum_\lambda \tilde{V}_{m\lambda}(E) |\chi_m^E\rangle, \end{aligned} \quad (14)$$

а індексу λ ставимо у відповідність набір квантових чисел, що визначається співвідношенням для асимптотики, див. [16].

Підстановка виразів (13), (14) у (12) визначає парціальні амплітуди резонансної іонізації:

$$T_{|0\rangle \rightarrow |\lambda E\rangle} = t_\lambda^{\text{dir}}(E) + \sum_m \frac{H_{m\lambda}(E)}{\varepsilon_m(E) + 1}, \quad (15)$$

де

$$\varepsilon_m(E) = \frac{2[E - E_m(\tilde{E}_m)]}{\Gamma_m(\tilde{E}_m)},$$

це ширини автоіонізаційних станів. Цим переходом ми розділяємо амплітуду на два доданки: перший доданок фіксує вклад прямого процесу, а другий – резонансного. Величини, які входять в формулу (15), визначаються наступними співвідношеннями:

$$\begin{aligned} t_\lambda^{\text{dir}}(E) &= \sqrt{C(E)} \langle \lambda E | \hat{t} | 0 \rangle, \\ H_{m\lambda}(E) &= 2\tilde{V}_{m\lambda}(E) [t_m(E) - i\tau_m(E)] \Gamma_m^{-1}(E), \\ t_m(E) &= \sqrt{C(E)} \langle \tilde{\Phi}_m^E | \hat{t} | 0 \rangle, \\ \tau_m(E) &= \sqrt{C(E)} \langle \chi_m^E | \hat{t} | 0 \rangle. \end{aligned} \quad (16)$$

Парціальна диференціальна сила осцилятора переходу в канал іонізації λ пропорційна квадрату модуля виразу (15). Розрахунок повного перерізу іонізації здійснюється підсумовуванням всіх парціальних внесків по індексу λ .

Стани гелію в області неперервного спектра, де розміщені автоіонізаційні стани, що сходяться до третього порога, описувались хвильовою функцією [15], яка враховує всі міжконфігураційні взаємодії скінченного числа базисних конфігурацій, що відповідають двоелектронним збудженням в області між другим та третім порогами (закриті канали), та електрону з позитивним значення енергії над основним та першим збудженим станом іона He⁺ (відкриті канали). В розрахунках враховувались стани з повним моментом атома гелію $L \leq 3$.

Для кожного моменту L підпростір закритих каналів заповнювався двадцятьма конфігурація-

ми, а в ролі базисних функцій для їх опису використовувались кулонівські хвильові функції з зарядом $z = 2$. Далі підпростір цих станів попередньо діагоналізувався. Підпростір відкритих каналів включав три конфігурації для $L = 0$ і чотири – для інших моментів L . Це відповідає включенню в розрахунок каналів, які відповідають основному і першому збудженому стану іона He⁺: $1s\varepsilon L$, $2s\varepsilon L$, $2p\varepsilon(L - 1)$, $2p\varepsilon(L + 1)$. В задачах розрахунку диференціальних характеристик збудження автоіонізаційних станів часто буває необхідним визначити парціальні ширини розпаду квазістаціонарних станів у декілька каналів.

Введемо парціальну ширину аналогічно з діагоналізаційним наближенням через матричний елемент розпаду таким чином:

$$\tilde{\Gamma}_m(E) = 2\pi \sum_\lambda \left| \langle m | \hat{V} | \lambda \varepsilon \rangle \right|^2, \quad \lambda \in \alpha. \quad (17)$$

Повна ширина відповідає $\alpha = \Delta(\tilde{\Gamma}_m(E)) = \Gamma_{\Delta m}(E)$. Зауважимо, що розрахунок повної ширини квазістаціонарного стану перерізу іонізації здійснюється підсумовуванням всіх парціальних внесків за індексом λ , а α в цьому випадку визначає виділену групу всіх каналів, врахованих в даній задачі.

У випадку взаємодіючих квазістаціонарних станів парціальні ширини вводимо аналогічно:

$$\tilde{\Gamma}_j(E) = 2\pi \sum_\lambda \tilde{V}_{m\alpha}(E) \tilde{V}_{m\lambda}^*(E), \quad (18)$$

де j – індекс парціального каналу. Але, в даному випадку, повна ширина $\Gamma_m(E)$, визначена діагоналізацією комплексної матриці, не співпадає з сумою парціальних ширин, як це було у випадку (17).

4. Результати розрахунків

Для опису основного стану атома He один із співавторів даної статті та наші колеги в роботах [15, 16] використали 41-параметричну хвильову функцію Твіда [14] і отримали точні значення параметрів автоіонізаційних станів атома гелію, що знаходяться в області вище порога утворення збуджених іонів. Цікавим є аналіз впливу вибору функції основного стану на парціальні характеристики автоіонізаційних станів. Розрахунок парціальних ширин автоіонізаційних станів у задачі фо-

Параметри найнижчого 1P автоіонізаційного стану He в області енергій вище порога утворення збуджених іонів

	E , eV	Γ , eV	$1ses$, eV	$2sep$, eV	$2per$, eV	$2ped$, eV
Робота [17], 6-ти параметр. функція Г'іллерааса	69,89	0,150	0,893(-3)	0,918(-1)	0,313(-1)	0,257(-1)
41-параметр. функція Твіда	69,92	0,165	0,312(-3)	0,945(-1)	0,320(-1)	0,389(-1)
6-ти параметр. функція Г'іллерааса	69,90	0,154	0,871(-3)	0,814(-1)	0,315(-1)	0,407(-1)
8-ми параметр. функція Г'іллерааса	69,81	0,158	0,852(-3)	0,836(-1)	0,310(-1)	0,425(-1)
Робота [11], функція Монте-Карло	69,91	0,159	0,476(-3)	0,991(-1)	0,235(-1)	0,359(-1)

тоіонізації гелію проведено в роботі [17] з використанням 6-ти параметричної функції Г'іллерааса в діагоналізаційному наближенні. В роботах [15, 16], окрім діагоналізаційного наближення, використано метод взаємодіючих конфігурацій в зображенні комплексних чисел і результати приведені у всіх наближеннях, які з нього випливають, але у всіх варіантах розрахунків в ролі функції основного стану атома гелію використовувалась 41-параметрична функція Твіда [14]. З іншого боку, тільки в діагоналізаційному наближенні можна надати змісту поняттю парціальних ширин, тому ми також приводимо розрахунки у діагоналізаційному наближенні [15, 16], але при цьому використовуємо різні хвильові функції основного стану атома гелію.

В таблиці приводимо параметри найнижчого 1P стану в задачі фотоіонізації атома гелію вище порога утворення збуджених іонів. Аналіз показує, що параметри квазістаціонарних станів залежать від вибору хвильової функції основного стану.

5. Висновки

1. Теоретичні розрахунки резонансних перерізів у задачах фотоіонізації та аналіз резонансних профілів є джерелом відомостей про структуру атомних систем і дозволяють більш адекватно відбрати теоретичні моделі, а вибір хвильової функції основного стану впливає на значення відповідних параметрів резонансів.

2. Дослідження в області енергій збудження вище другого порога іонізації, або вище порогу утворення збуджених іонів He⁺, в багатьох аспектах подібні до більш ранніх досліджень, які проводились в області енергій між першим та другим порогами іонізації, але в цих дослідженнях відкриваються значно ширші можливості. Більш багатим

є спектр розглядуваних характеристик. Це визначається можливістю заселення в процесах прямої, а також резонансної, іонізації фотонами та електронами як основного, так і збудженого станів залишкових іонів, які потім переходять в основний стан шляхом випромінювання фотона. Таким чином відкривається можливість дослідження профілів резонансів, які збігаються до порога $N = 3$ атома He як у повних, так і у парціальних перерізах іонізації, а врахування зв'язку каналів у цих процесах є обов'язковим. Вибір хвильової функції основного стану прямо впливає на значення відповідних матричних елементів, що входять в перерізи іонізації.

3. Результати розрахунків показують, що, на відміну від повних ширин автоіонізаційних станів, парціальні ширини є суттєво різними для різних хвильових функцій основного стану. З таблиці видно, що повні ширини також відрізняються одні від інших, коли вони обчислені на основі різних хвильових функцій в рамках одного й того самого підходу, але парціальні ширини при цьому різняться між собою сильніше. Це пояснюється зв'язком каналів, врахування впливу якого може відрізнитися. Вияснення причин цього потребує подальших досліджень.

Автори вдячні рецензенту за слушні зауваження, врахування яких дозволило покращити вигляд матеріалу статті.

1. P.G. Burke. Effects of configuration interaction on electron and photon interactions with atoms. In *Electron and photon interactions with atoms* (Plenum Press, 1976) [ISBN 978-1-4899-5024-6].
2. T.M. Luke. Calculation of doubly excited resonances in neon. *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **8**, 1501 (1975) [DOI: 10.1088/0022-3700/8/9/016].

3. U. Fano. Effects of configuration interaction on intensities and phase shifts. *Phys. Rev.* **124**, 1866 (1961) [DOI: 10.1103/PhysRev.124.1866].
4. C. Froese Fischer. *The Hartree-Fock method for atoms – a numerical approach* (Wiley, 1977) [ISBN 0-471-25990-X].
5. E.A. Hylleraas. Neue Berechnung der Energie des Heliums im Grundzustande, sowie des tiefsten Terms von Ortho-Helium. *Z. Phys.* **54**, 347 (1929) [DOI: 10.1007/BF01375457].
6. E.A. Hylleraas. Über den Grundterm der Zweielektronenprobleme von H^- , He, Li^+ , Be^{++} usw. *Z. Phys.* **65**, 209 (1930) [DOI: 10.1007/BF01397032].
7. В.И. Решетняк, Ф.И. Федоров. О пробных функциях основного состояния атома гелия. *ДАН СССР* **263**, 1356 (1982).
8. В.А. Фок. Об уравнении Шредингера для атома гелия. *Изв. АН СССР* **18**, 161 (1954).
9. C. Froese Fischer. The MCHF atomic-structure package. *Comput. Phys. Commun.* **128**, 635 (2000) [DOI: 10.1016/S0010-4655(00)00009-6].
10. C.L. Pekeris. Excited S states of helium. *Phys. Rev.* **127**, 509 (1962) [DOI: 10.1103/PhysRev.127.509].
11. S.A. Alexander, R.L. Coldwell. Atomic wave function forms. *Int. J. Quant. Chem.* **63**, 1001 (1997) [DOI: 10.1002/(SICI)1097-461X(1997)63:5<1001::AID-QUA9>3.0.CO;2-1].
12. П.А. Головинский, И.Ю. Киян. Отрицательный ион в сильном световом поле. *УФН* **160**, 97 (1990) [DOI: 10.3367/UFNr.0160.199006c.0097].
13. М.К. Евсеев, В.И. Матвеев. Исследование аналитических волновых функций двухэлектронных систем в динамических взаимодействиях с многозарядными ионами и ультракороткими импульсами электромагнитного поля. *ЖТФ* **78**, 28 (2008) [DOI: journals.ioffe.ru/articles/viewPDF/9477].
14. R.J. Tweed. Correlated wavefunctions for helium-like atomic systems. *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **5**, 810 (1972) [DOI: 10.1088/0022-3700/5/4/015].
15. S.M. Burkov, N.A. Letyaev, S.I. Strakhova, T.M. Zajac. Photon and electron ionization of helium to the $n = 2$ state of He^+ . *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **21**, 1195 (1988) [DOI: 10.1088/0953-4075/21/7/014].
16. Т.М. Заяць. Метод взаємодіючих конфігурацій у зображенні комплексних чисел в задачі іонізації атомів електронним ударом в області вище порогу утворення збуджених іонів. *Наук. Вісн. УжНУ: сер. Фізика* **11**, 72 (2002) [DOI: http://nbuv.gov.ua/UJRN/Nvuufiz].
17. V.S. Senashenko, A. Vague. Resonance photoabsorption of the helium atom in the vicinity of the $(3s3p) \ ^1P$ resonance. *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **12**, L269 (1979) [DOI: 10.1088/0022-3700/12/8/002].

Одержано 15.09.15

V.M. Simulik, T.M. Zajac, R.V. Tymchuk

CHOICE OF THE WAVE FUNCTION
FOR THE HELIUM GROUND STATE FOR PRECISION
CALCULATIONS OF QUASISTATIONARY
STATE PARAMETERS

S u m m a r y

In the problems of ionization of atoms by photons and electrons, the necessity of choosing the multiparametric wave functions for the description of an atom in the ground state has been substantiated. The helium atom is taken as an example. The energies, widths, and partial widths of the lowest 1P autoionizing state of helium, located above the excited ions formation threshold, are calculated. The results obtained with the use of different ground-state wave functions are compared. It is shown that, contrary to the total widths of autoionizing states, the partial widths are substantially different for different ground-state wave functions.