

Квантовый хаос

в дискретных и автоионизационных
состояниях многоэлектронных
атомов

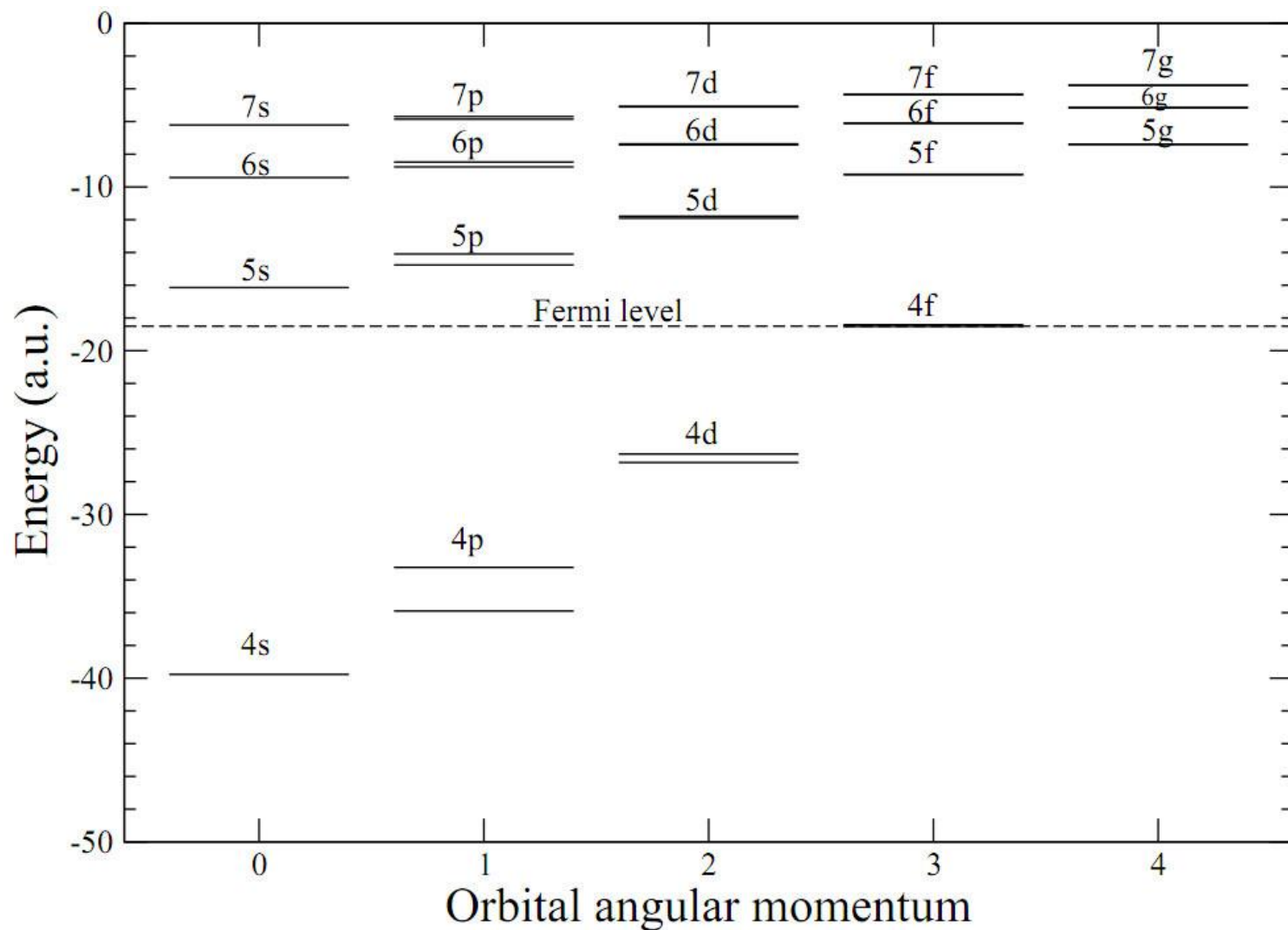


FIG. 4: Energies of the occupied and vacant single-particle orbitals of W^{19+} obtained in the Dirac-Fock calculation.

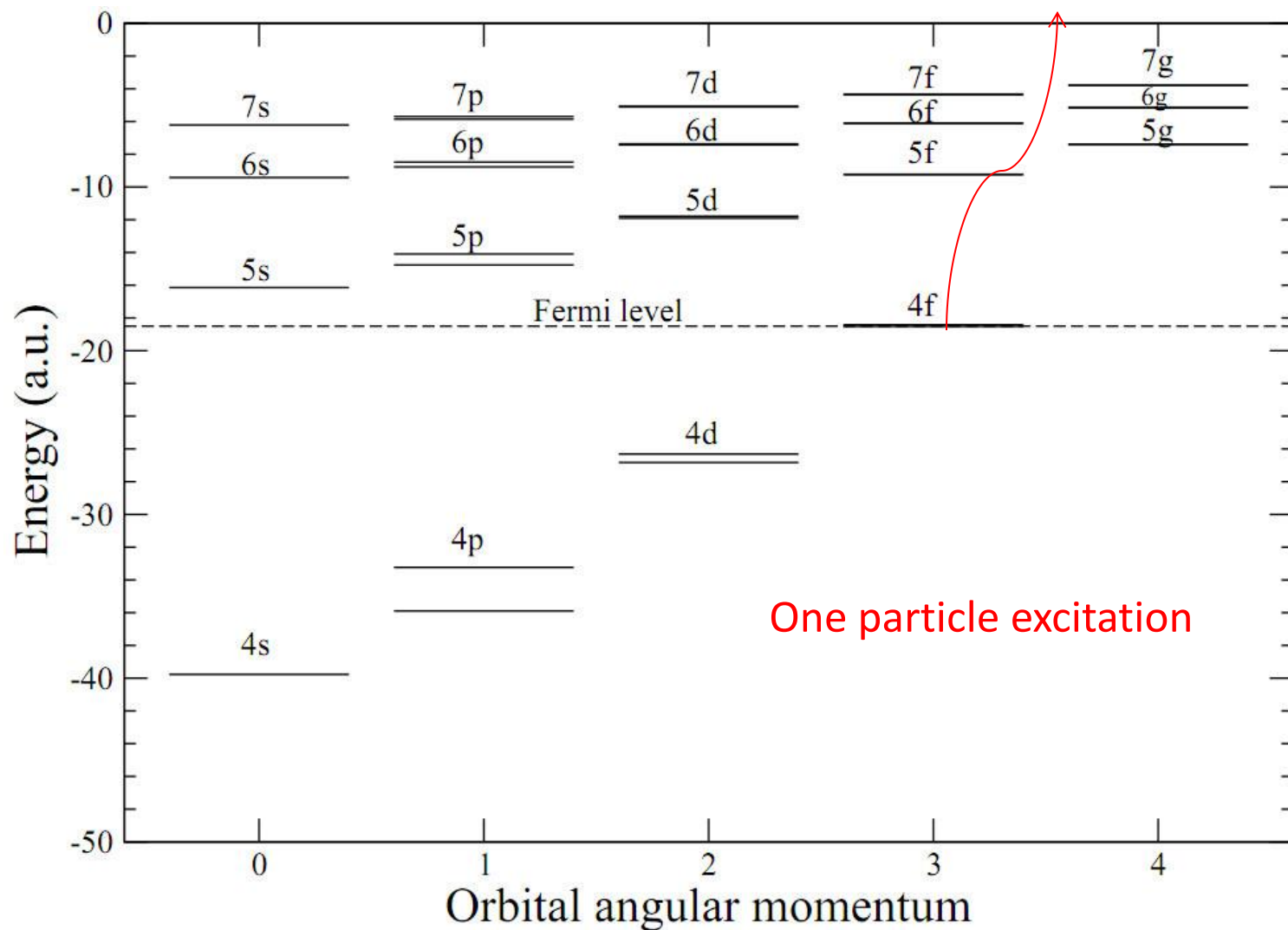


FIG. 4: Energies of the occupied and vacant single-particle orbitals of W^{19+} obtained in the Dirac-Fock calculation.

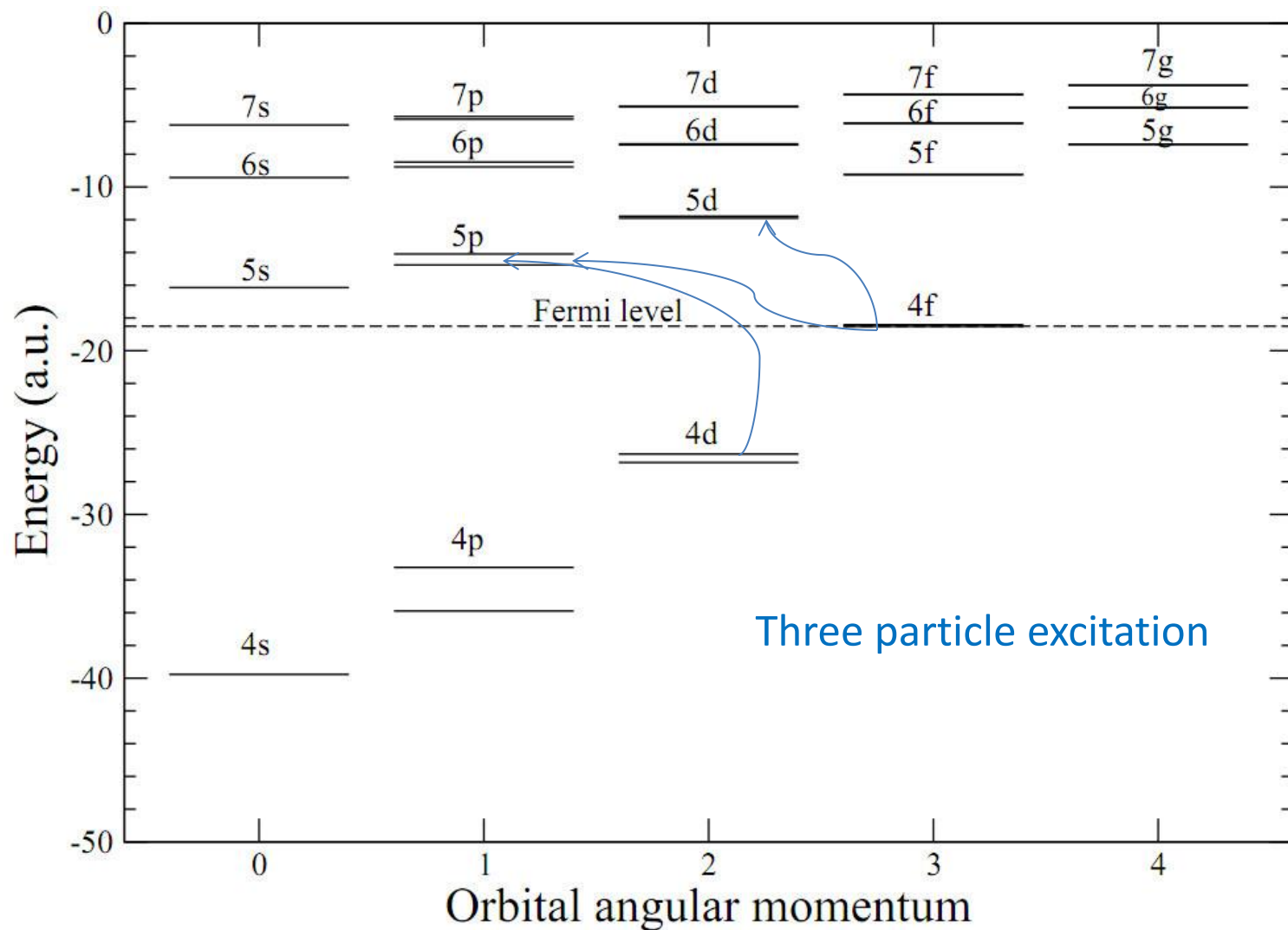
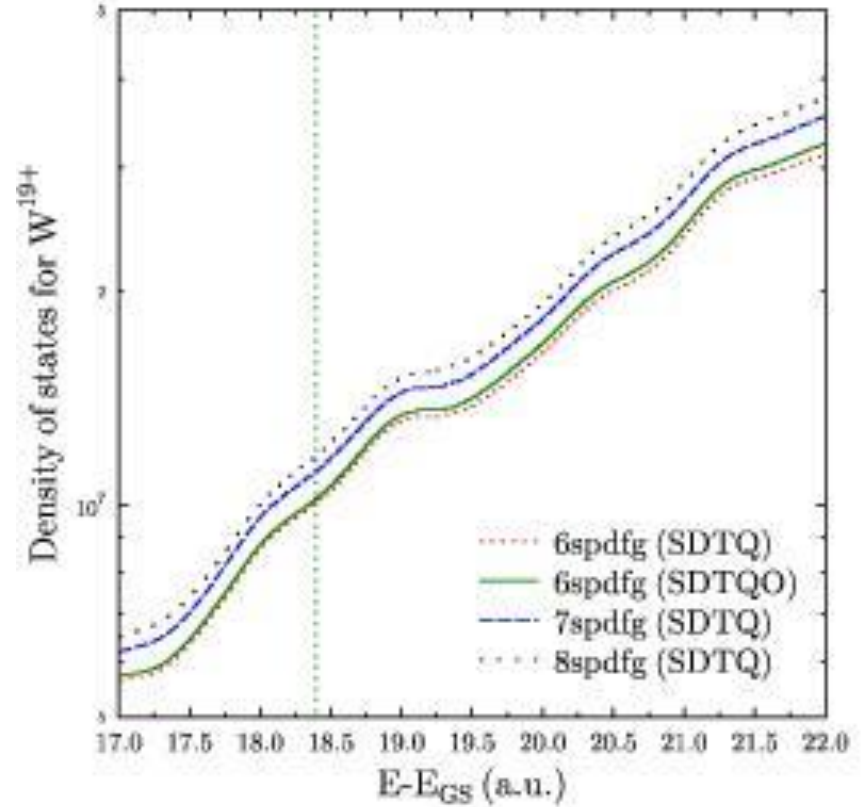
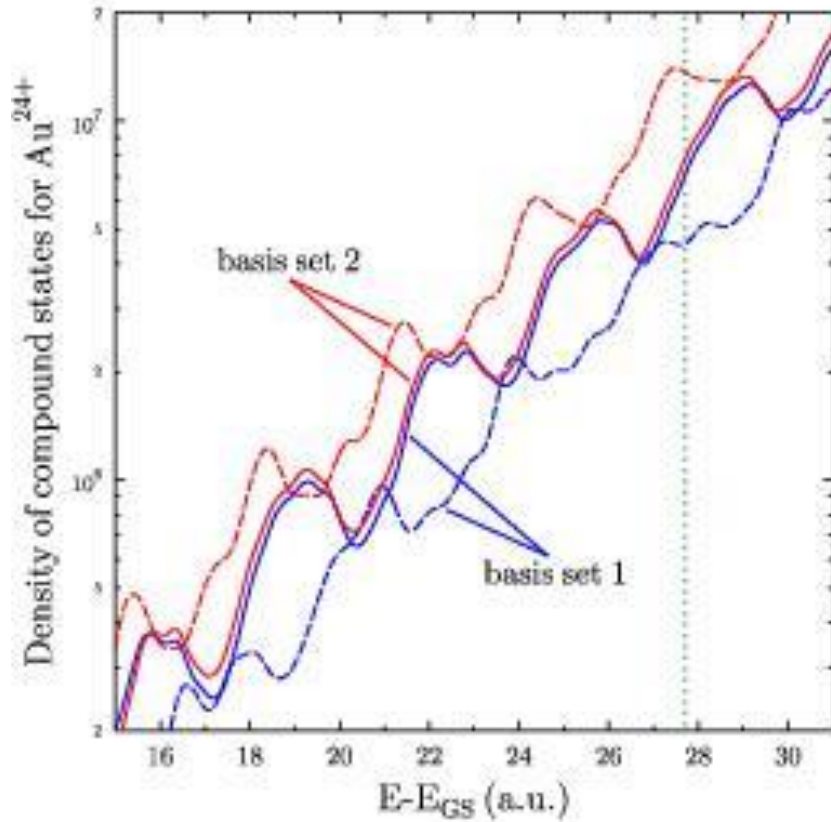
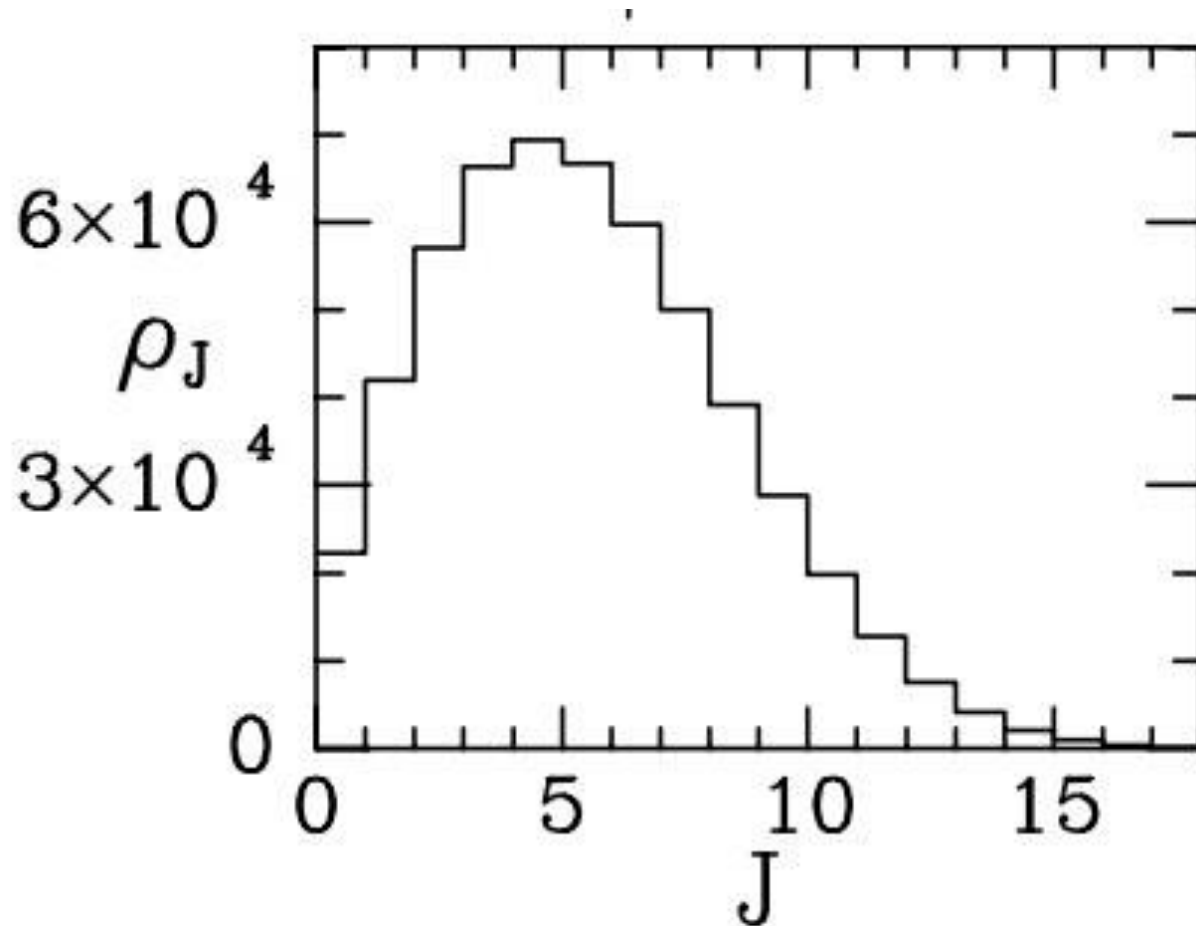


FIG. 4: Energies of the occupied and vacant single-particle orbitals of W^{19+} obtained in the Dirac-Fock calculation.

Плотность состояний вблизи порога для Au^{24+} и W^{19+}



Распределение по моментам для W^{19+}

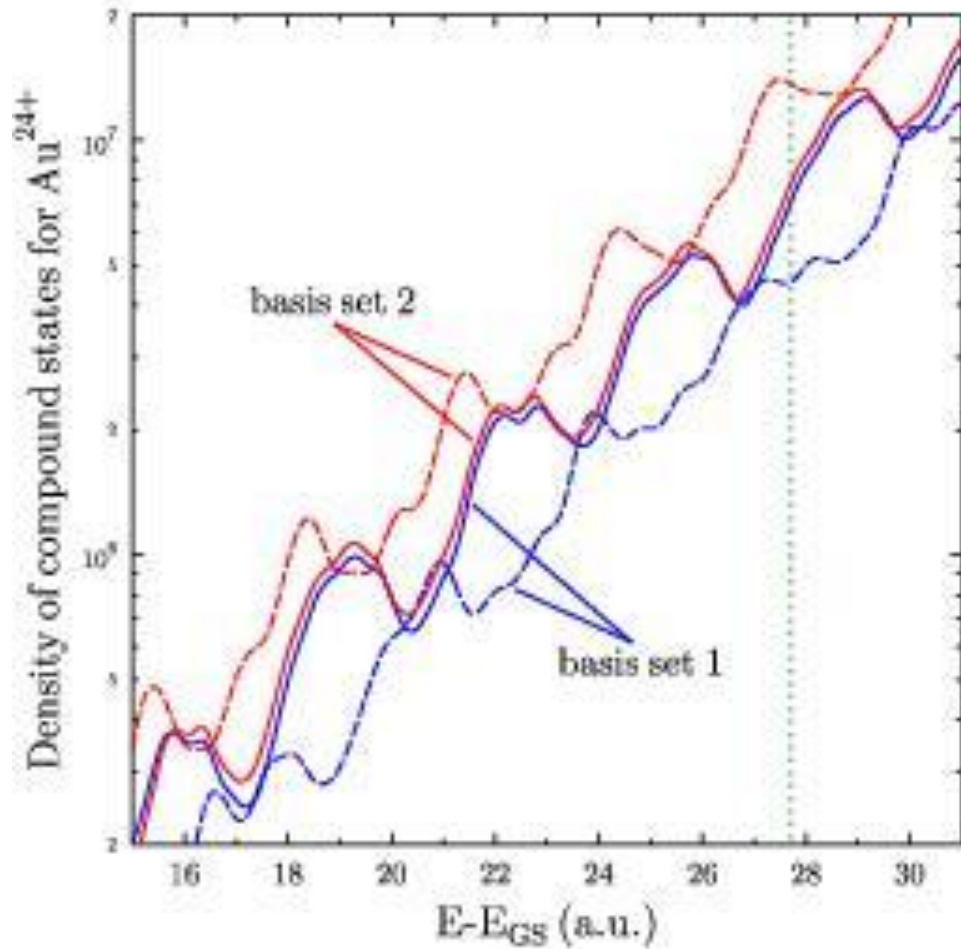


Средняя энергия конфигурации

$$E_c = E_{\text{core}} + \sum_a \varepsilon_a n_a + \sum_{a \leq b} \frac{n_a (n_b - \delta_{ab})}{1 + \delta_{ab}} U_{ab},$$

$$U_{ab} = \frac{g_a}{g_a - \delta_{ab}} \left[R_{abab}^{(0)} - \sum_{\lambda} \delta_p R_{abab}^{(\lambda)} \left(\begin{array}{ccc} j_a & j_b & \lambda \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \end{array} \right)^2 \right]$$

Плотность состояний для Au^{24+} как сумма ХФ энергий и как среднее по конфигурации



Среднее по конфигурации слабо зависит от базиса

Сложные (contour) состояния

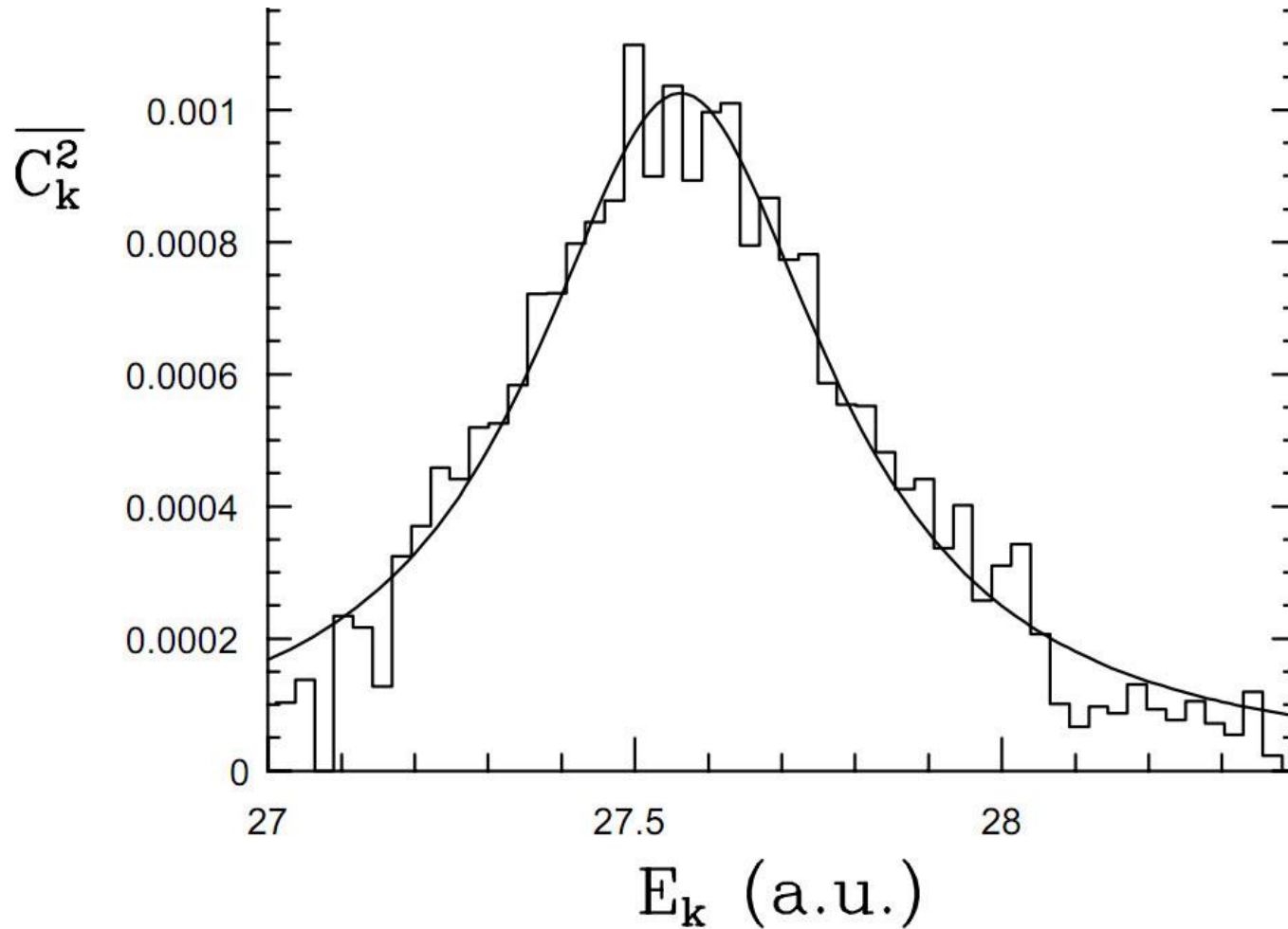
$$|\Psi_\nu\rangle = \sum_k C_k^{(\nu)} |\Phi_k\rangle.$$

$$\overline{C_k^{(\nu)}} = \overline{C_k^{(\nu)*} C_{k'}^{(i)}} = 0$$

$$\overline{|C_k^{(\nu)}|^2} = N^{-1} \frac{\Gamma_{\text{spr}}^2/4}{(E_k - E_\nu)^2 + \Gamma_{\text{spr}}^2/4}$$

$$N = \pi\Gamma_{\text{spr}}/2D$$

Численный эксперимент для W^{19+}



Смешивание близких компаунд состояний малым возмущением

$$c_k^{(v)} \sim \frac{1}{\sqrt{N}}; \quad D \sim \frac{\Delta E}{N}$$

$$\eta = \left| \frac{\langle \psi_v | M | \psi_m \rangle}{E_v - E_m} \right|$$
$$= \left| \sum_{i,k} c_i^{(v)} c_k^{(m)} \frac{\langle i | M | k \rangle}{E_v - E_m} \right|$$

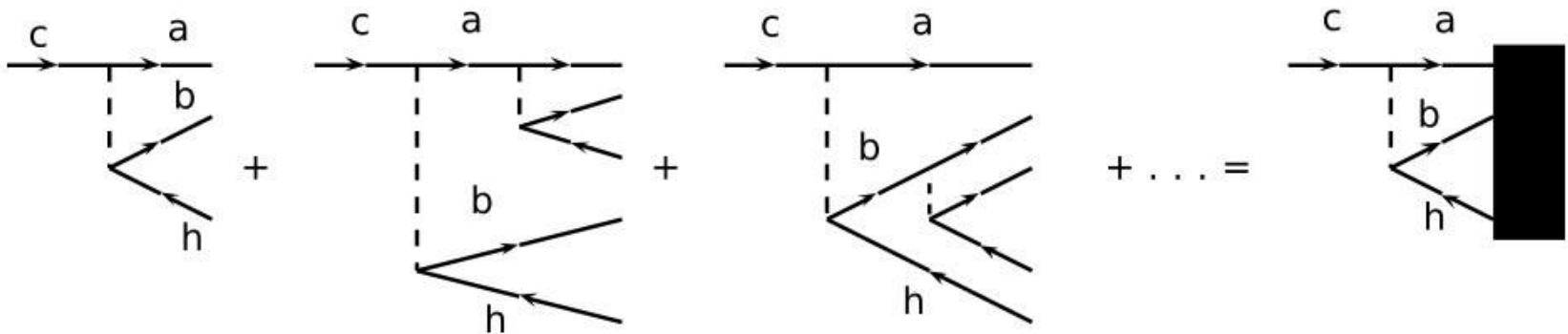
$$\sim \left| \sum_i c_i^{(v)} c_{k'}^{(m)} \frac{\langle i | M | k' \rangle}{D} \right|$$

$$\sim \frac{\langle a | M | b \rangle}{D} \sum_i c_i^{(v)} c_{k'}^{(m)} \sim \frac{\langle a | M | b \rangle}{\Delta E / N} \frac{1}{\sqrt{N}} \frac{1}{\sqrt{N}} \cdot \sqrt{N}$$

$$\boxed{\eta \sim \sqrt{N} \frac{\langle a | M | b \rangle}{\Delta E}}$$

Компаунд состояния не имеют никаких квантовых чисел кроме полного момента и четности

Электронная рекомбинация через «входные» (doorway) состояния



$$|\Phi_d\rangle = a_a^+ a_b^+ a_h |\Psi_0\rangle$$

«Входные» состояния являются нестационарными и за время $\sim 1/\Gamma_{\text{spr}}$ распадается «внутри» атома на множество компонд состояний.

Сечение электронной рекомбинации

$$\bar{\sigma}_c = \frac{\pi^2}{k^2} \frac{\Gamma_{n \rightarrow i, \varepsilon}^{(a)}}{(2J_i + 1)} \rho$$

$$\bar{\sigma}_r = \frac{\pi^2}{k^2} \frac{\Gamma_n^{(r)} \Gamma_{n \rightarrow i, \varepsilon}^{(a)}}{(2J_i + 1) \Gamma_n} \rho = \bar{\sigma}_c \omega_f$$

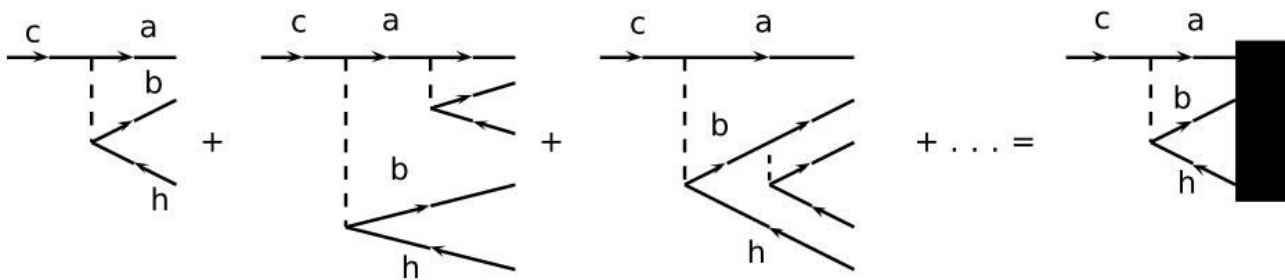
ω_f – радиационный выход

Явный вид сечения захвата

$$\bar{\sigma}_c = \frac{\pi^2}{k^2} \sum_{abh,lj} \frac{\Gamma_{\text{spr}}}{(E_{c_i} + \varepsilon - E_{c_i \rightarrow \bar{h},a,b})^2 + \Gamma_{\text{spr}}^2/4} \sum_{\lambda} \frac{\langle a, b \| V_{\lambda} \| h, \varepsilon l j \rangle}{2\lambda + 1}$$

$$\left[\langle a, b \| \hat{V}_{\lambda} \| h, \varepsilon l j \rangle - (2\lambda + 1) \sum_{\lambda'} (-1)^{\lambda + \lambda' + 1} \begin{Bmatrix} \lambda & j_a & j \\ \lambda' & j_b & j_h \end{Bmatrix} \langle b, a \| \hat{V}_{\lambda'} \| h, \varepsilon l j \rangle \right]$$

$$\frac{n_h}{2j_h + 1} \left(1 - \frac{n_a}{2j_a + 1} \right) \left(1 - \frac{n_b}{2j_b + 1} \right)$$



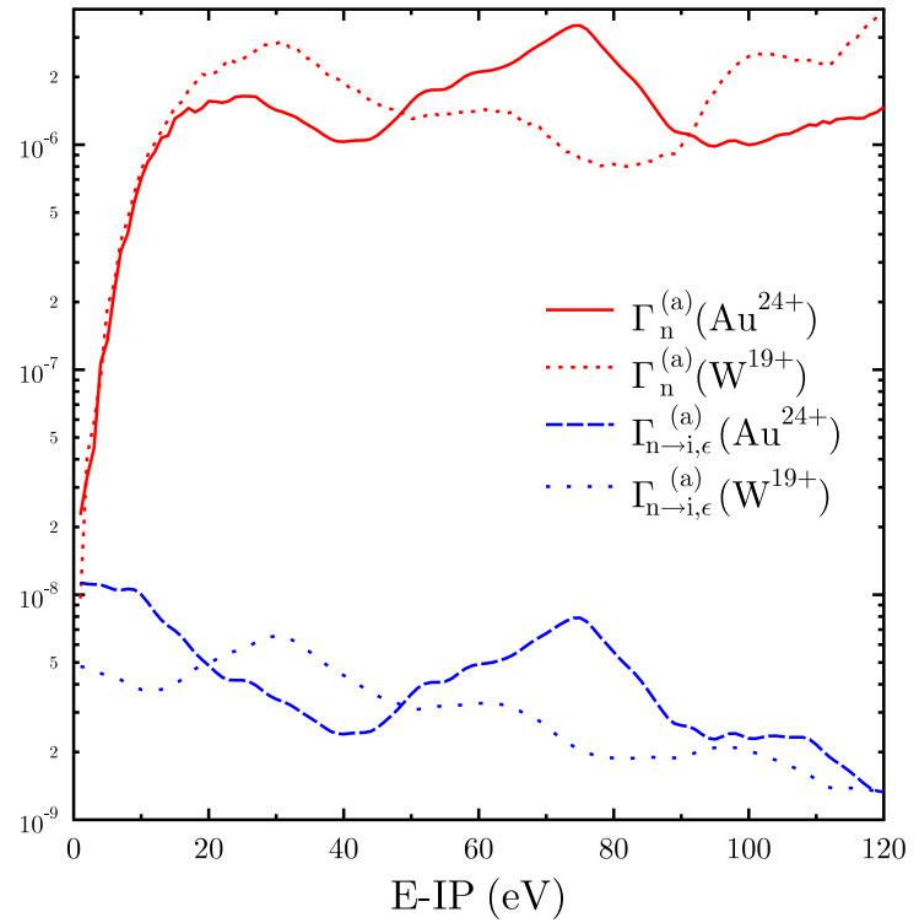
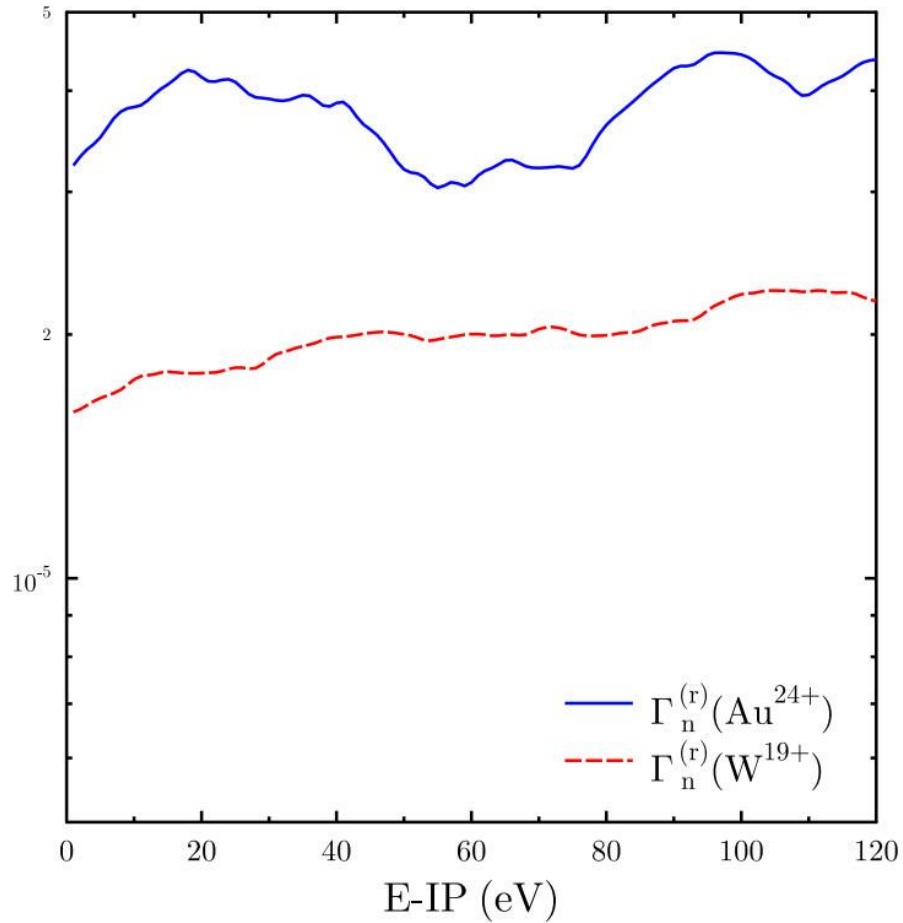
Вычисление радиационного выхода ω_f

$$\omega_f = \Gamma_n^{(r)} / \left(\Gamma_n^{(r)} + \Gamma_n^{(a)} \right)$$

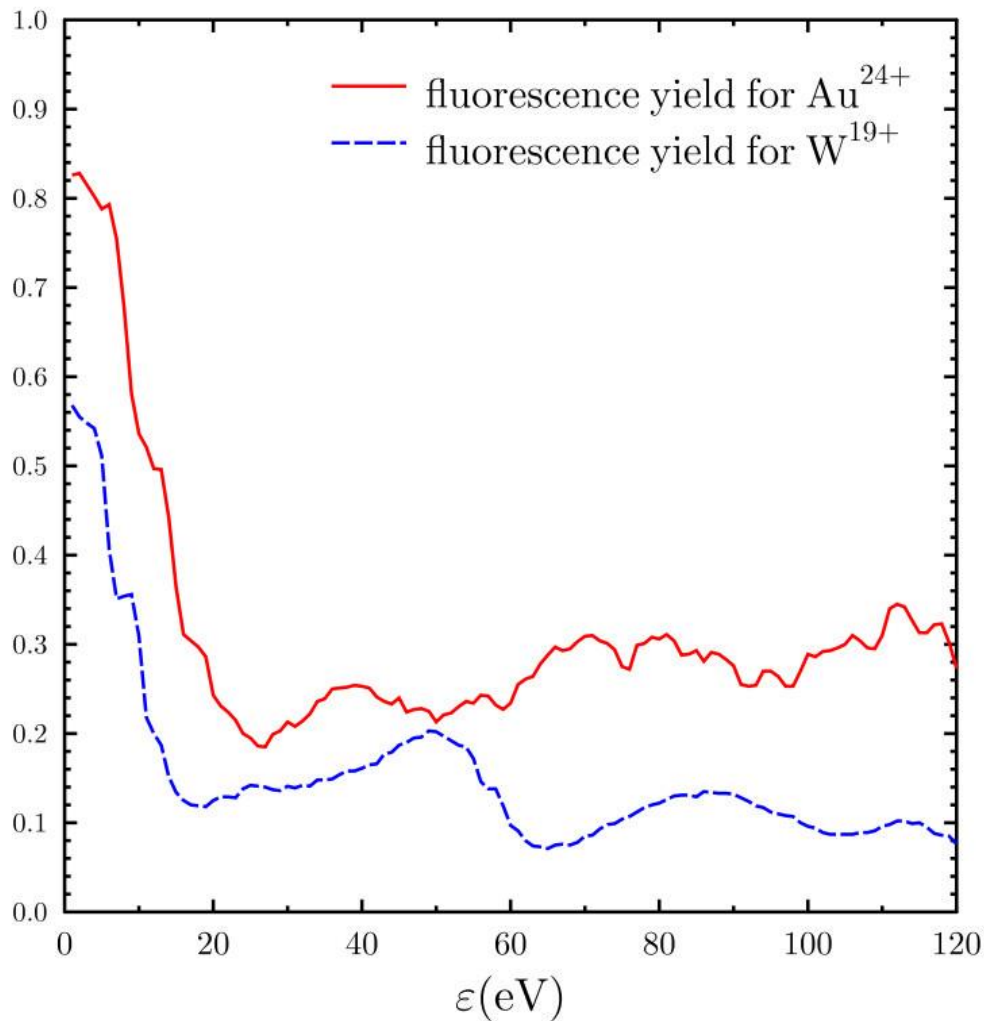
$$\Gamma_n^{(a)} = \frac{D}{2\pi} \sum_d \frac{\Gamma_d^{(a)} \Gamma_{\text{spr}}}{(E_n - E_d)^2 + \frac{\Gamma_{\text{spr}}^2}{4}}$$

$$\Gamma_n^{(r)} = \frac{D}{2\pi} \sum_d \frac{\Gamma_d^{(r)} \Gamma_{\text{spr}}}{(E_n - E_d)^2 + \frac{\Gamma_{\text{spr}}^2}{4}}$$

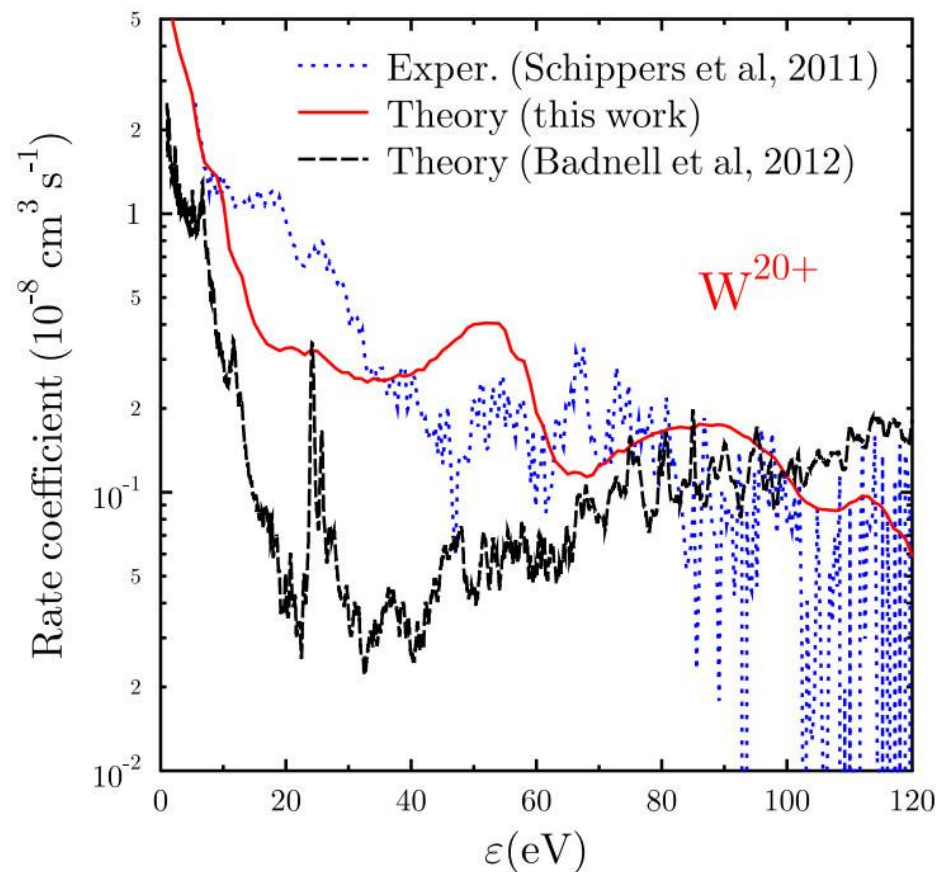
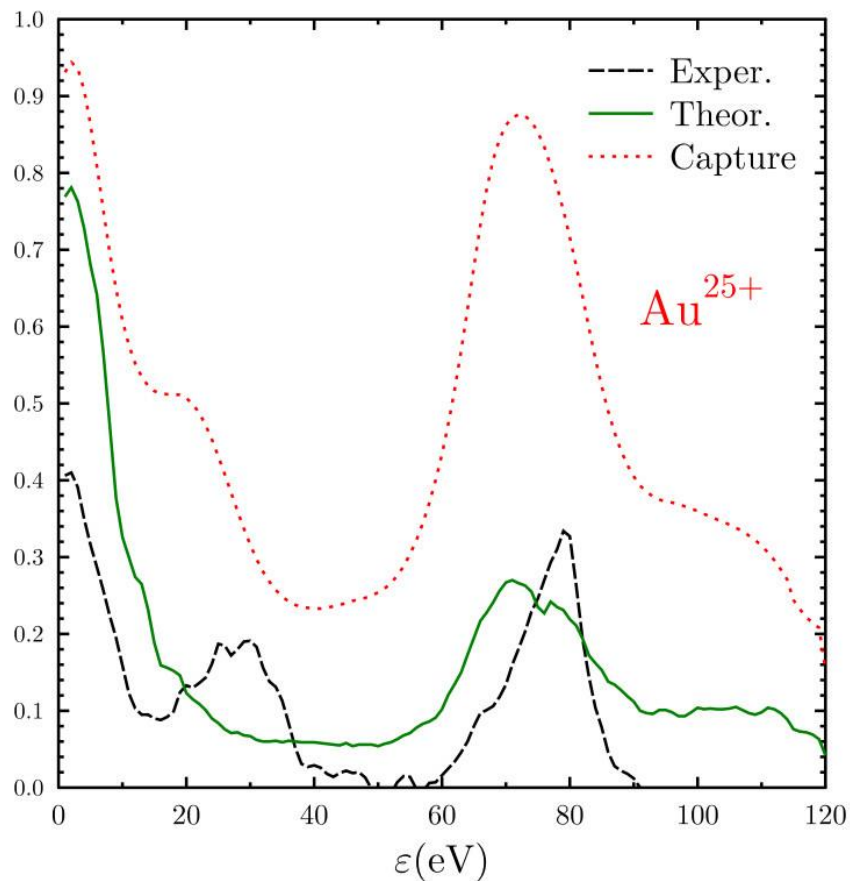
Радиационная и автоионизационная ширины для Au^{24+} и W^{19+}



Радиационный выход для Au^{24+} и W^{19+}



Электронная рекомбинация для Au^{24+} и W^{19+}



Соавторы:

- Джелал Харабати (Celal Harabati)
- Виктор Фламбаум
- Глеб Грибакин
- Владимир Дзюба