

VILNIAUS UNIVERSITETAS

FIZINIŲ IR TECHNOLOGIJOS MOKSLŲ CENTRAS

Jurgita
KONCEVIČIŪTĖ

Teorinis dvigubos ir trigubos jonizacijos
elektronais tyrimas taikant kelių
žingsnių metodą

DAKTARO DISERTACIJOS SANTRAUKA

Gamtos mokslai,

Fizika (N 002)

Vilnius, 2023

Daktaro disertacija parengta 2016-2022 m. 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. Romualdas Kisielius (Vilniaus universitetas, gamtos mokslai, fizika, N 002),

dr. Duck-Hee Kwon (Korėjos atominės energijos tyrimų institutas, gamtos mokslai, fizika, N 002),

dr. Mindaugas Mačernis (Vilniaus universitetas, gamtos mokslai, fizika – N 002)),

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

Disertacija ginama viešame Gynimo tarybos posėdyje 2023 m. gruodžio mėn. 22 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

Jurgita
KONCEVIČIŪTĖ

Theoretical Study of Electron-Impact Double and Triple Ionization Using a Multi-Step Approach

SUMMARY OF DOCTORAL DISSERTATION

Natural Sciences,
Physics (N 002)

Vilnius, 2023

Doctoral Dissertation was completed during 2016-2022 at Vilnius University, Institute of Theoretical Physics and Astronomy.

Academic supervisor - Assoc. Prof. Dr. Valdas Jonauskas (Vilnius University, Natural sciences, Physics, N 002).

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

Chairman – dr. Darius Abramavičius (Vilnius University, Natural sciences, Physics, N 002)

Members:

dr. Romualdas Kisielius (Vilnius University, Natural sciences, Physics, N 002),

dr. Duck-Hee Kwon (Korea Atomic Energy Research Institute, Natural Sciences, Physics),

dr. Mindaugas Mačernis (Vilnius University, Natural sciences, Physics, N 002),

dr. Paulius Miškinis (Vilnius Gediminas Technical University, Natural Sciences, Physics, N 002).

The dissertation shall be defended at a public meeting of the Dissertation Defence Panel at 10AM on 22nd of December 2023 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

1. ĮVADAS	3
1.1. Tikslas	6
1.2. Uždaviniai	6
1.3. Mokslinis naujumas	7
1.4. Ginami teiginiai	7
1.5. Autoriaus indėlis	8
1.6. Disertacijos struktūra	8
2. TEORINIAI METODAI	10
2.1. Diraco-Focko-Slaterio artinys	10
2.2. Koreliaciniai reiškiniai	14
2.3. Iškraipytyjų bangų artinys	15
2.4. Iškraipytyjų bangų skerspjūvių transformavimas .	17
2.5. Radiaciniai šuoliai	17
2.6. Vienguba jonizacija elektronais	18
2.7. Dviguba jonizacija elektronais	20
2.7.1. Tiesioginė dviguba jonizacija elektronais .	21
2.7.2. Netiesioginė dviguba jonizacija	23
2.8. Triguba jonizacija	24
3. REZULTATAI	26
3.1. Energijų lygmenys ir jonizacijos slenksčiai	26
3.1.1. Se^{2+} jonas [A1]	26
3.1.2. Se^{3+} jonas [A2]	27
3.1.3. B^+ jonas [A3]	28
3.1.4. Išvados	29
3.2. Vienguba jonizacija elektronais	30
3.2.1. Se^{2+} jonas [A1]	30
3.2.2. B^+ jonas [A3]	31
3.2.3. Išvados	33

3.3.	Dviguba jonizacija elektronais	33
3.3.1.	Se ²⁺ jonas [A1]	33
3.3.2.	Se ³⁺ jonas [A2]	35
3.3.3.	B ⁺ jonas [A3]	37
3.3.4.	Išvados	40
3.4.	Triguba jonizacija elektronais	41
3.4.1.	Se ²⁺ jonas [A1]	41
3.4.2.	Se ³⁺ jonas [A2]	44
3.4.3.	B ⁺ jonas [A3]	45
3.4.4.	Išvados	47
4.	PAGRINDINĖS IŠVADOS	48
5.	LITERATŪRA	51
6.	PUBLIKACIJOS	57
6.1.	Straipsniai	57
6.2.	Pranešimai konferencijose	57
7.	TRUMPOS ŽINIOS APIE DISERTANTĘ	59

1. ĮVADAS

Dėl būtinybės prognozuoti ir analizuoti įvairių kosminių misijų (pvz., AXAF, SOHO, Chandra, XMM, Hubble'o kosminio teleskopo ir kt.) ir antžeminių prietaisų surinktus eksperimentinius duomenis atsirado precedento neturintis tikslių atominių duomenų poreikis. Šis poreikis ypač reikšmingas jonams, kurių gausa yra santykinai didelė, todėl reikia didesnio turimų atominių duomenų tikslumo. Be to, žvaigždėse dabar pastebėti anksčiau antžeminiiais prietaisais neaptikti elementai, ypač sunkieji elementai [1].

Taip pat dabartinėse ir būsimose branduolių sintezės mokslinių tyrimų programose, tokiose kaip ITER, lazerinė branduolių sintezė ir kt., labai reikia tikslių atominių duomenų, kad būtų galima nustatyti fizikines sąlygas, pavyzdžiui, temperatūrą, tankį ir pan. [1]. Be to, norint suprasti pagrindines sąveikas gamtoje ir koreliacinius reiškinius kvantinėse daugelio dalelių sistemose, taip pat reikia tikslių atominių duomenų.

Viengubos (SI) ir dvigubos (DI) jonizacijos elektronais procesai suteikia žinių apie taikinio elektronų dinamiką ir struktūrą, todėl šių procesų tyrimai taikomi plazmos fizikoje [2], žvaigždžių atmosferoms [3, 4] bei vėžio gydymui švitinimu [5–7].

Plazmose, kaip ir kitose aplinkose, kuriose gausu didelės energijos elektronų, daugkartinė jonizacija turi didelę įtaką krūvio būsenų pasiskirstymui [4, 8]. Daugkartinės jonizacijos procesų tyrimas yra gana sudėtingas, nes tenka spręsti bent keturių kūnų Coulombo uždavinį.

Šiame darbe tiriama B^+ , Se^{2+} ir Se^{3+} jonų SI, DI ir trigubos jonizacijos (TI) elektronais procesai. Kaip parodyta toliau šiame darbe, šių jonų SI, DI ir TI skerspūviai reikalingi ne tik teoriniams tikslams, bet ir įvairiems taikymams. Todėl B^+ , Se^{2+} ir Se^{3+} jonai buvo pasirinkti šiam tyrimui.

Boro, vieno iš trijų lengvųjų elementų (Li, Be, B), kurie negali būti veiksmingai sintetinami branduolinių reakcijų metu stabiliose žvaigždėse, Saulės sistemoje ir žvaigždėse yra palyginti nedaug, o jo paplitimas, palyginti su kitais periodinės elementų lentelės elementais, yra mažesnis [9]. Vis dėlto boras atlieka labai svarbų vaidmenį branduolių sintezės įrenginiuose. Čia boro turinčių plėvelių nusodinimas ant plazmos veikiamų paviršių, vadinamas boronizacija, pasitarnauja kaip galingas metodas labai grynai branduolių sintezės plazmai gauti [10, 11]. Norint suprasti neutralaus ir jonizuoto boro erozijos procesus tokiuose branduolių sintezės eksperimentuose, kaip ITER, būtini išsamūs elektronų susidūrimų su šiais jonais duomenys. Šie duomenys turėtų apimti ne tik susidūrimus su pagrindinės būsenos atomais ir jonais, bet ir susidūrimus su sužadintomis būsenomis.

Susijungus dviem neutroninėms žvaigždėms arba neutroninei žvaigždei su juodąja skylė, dėl greito neutronų pagavimo (r-proceso) nukleosintezės susidaro sunkesni už geležį elementai [12]. Simuliaciniai modeliai, kurie nagrinėja visą reliatyvistinę sistemą kartu su neutrinų pernaša, parodė, kad tokiomis sąlygomis gausu elementų, kurių atominės masės skaičius $A \sim 90$ [13]. Tarp elementų, susidariusių šio susijungimo proceso metu, seleno susidarymo tikimybė yra gana didelė.

Be to, selenas buvo pastebėtas įvairiuose astrofizikiniuose ūkuose ir nemetalingose žvaigždėse [14–19]. Dėl jo buvimo šiuose dangaus objektuose selenas yra vertingas elementas tyrimams, susijusiems su nukleosintetiniais žvaigždžių populiacijų modeliais.

Šiame tyrime DI ir TI elektronais procesai B^+ , Se^{2+} ir Se^{3+} jonams tiriami taikant kelių procesų metodą [20]. Šis metodas apima jonizacijos-jonizacijos (II), sužadavimo jonizacijos-jonizacijos (EII) ir jonizacijos-sužadavimo-jonizacijos (IEI) žingsnius. Darbe taip pat nagrinėjamas įvairių procesų, įskaitant jonizaciją-

autojonizaciją (IA), sužadininimą-dvigubą autojonizaciją (EDA), tiesioginę dvigubą jonizaciją (DDI) ir rezonansinį sužadininimą-trigubą autojonizaciją (RETA), poveikis DI. Tiriama DI, be šių procesų B^+ jonų atveju taip pat nagrinėjami dviejų pakopų procesai. Šie papildomi procesai apima jonizaciją-sužadininimą-autojonizaciją (IE-AI) ir sužadininimą-jonizaciją-autojonizaciją (EI-AI). TI elektronais procesas nagrinėjamas kaip tiesioginė dvigubos jonizacijos-autojonizacijos (DDI-AI) proceso ir Auger šuolių, vykstančių po pradinio jono vidinio sluoksnio SI, rezultatas.

SI, DI ir TI skerspjūvių tyrimui reikalingi atominiai duomenys, įskaitant energijos lygmenis, radiacinių ir Auger šuolių tikimybes, smūginio sužadininimo ir jonizacijos elektronais skerspjūvius apskaičiuoti naudojant Flexible Atomic Code (FAC) paketą [45], kuriame naudojamas Diraco-Focko-Slaterio (DFS) metodas. Krentančio ir išsklaidyto elektronų orbitalės įvertintos jonizuojamo ir jonizuoto jonų potencialuose, kad būtų galima palyginti su eksperimentiniais rezultatais. Elektronų smūginio sužadininimo ir jonizacijos procesai nagrinėjami taikant iškraipytųjų bangų (DW) artinį.

1.1. Tikslas

Pagrindinis šio darbo tikslas - ištirti DI ir TI elektronais taikant kelių žingsnių metodą, bei pasiūlyti veiksmingą būdą tikslams teoriniams skerspjuviamis gauti.

1.2. Uždaviniai

1. SI proceso tyrimas:

- smūginės jonizacijos elektronais tyrimas taikant DW metodą;
- smūginės jonizacijos skerspjuvių tyrimas jonizuojamo ir jonizuoto jonų potencialuose;
- koreliacijos poveikio įtakos SI skerspjuviamis tyrimas.

2. DDI proceso tyrimas:

- DDI elektronais tyrimas taikant kelių žingsnių metodą;
- elektronų, dalyvaujančių tolesniame jonizacijos ar sužadavimo procese po pradinės sąveikos, energijos pasiskirstymo analizė;
- TI proceso įtakos DI procesui vertinimas.

3. netiesioginės dvigubos jonizacijos (IDI) proceso tyrimas:

- SI-AI proceso tyrimas;
- EI-AI and IE-AI procesų įtakos tyrimas;
- RETA proceso tyrimas.

4. TI proceso tyrimas:

- TI proceso tyrimas kaip DDI proceso po kurio seka AI procesas;

- Auger kaskadų įtakos tyrimas TI procesui.
5. Transformuotų DW skerspjūvių tyrimas:
- jonizacijos elektronais skerspjūvių tyrimas;
 - sužadinimo elektronais skerspjūvių nagrinėjimas.

1.3. Mokslinis naujumas

1. Ištirti koreliaciniai reiškiniai Se^{2+} ir B^+ jonams.
2. Tyrimas pademonstravo reikšmingą trijų žingsnių procesų įtaką DDI procesui .
3. Buvo parodyta, kad ženklų įtaką B^+ DI procesui turi EI-AI ir IE-AI procesai.
4. Eksperimentiniams B^+ jonų matavimams paaiškinti buvo pritaikytos smūginio sužadinimo (CE) ir smūginės jonizacijos (CI) elektronais skerspjūvių, apskaičiuotų DW metodu, transformavimo funkcijos.
5. Parodyta TI proceso įtaka Se^{2+} , Se^{3+} ir B^+ jonų DI skerspjūviams.
6. TI procesas tirtas taikant kelių žingsnių metodą DDI daliai DDI-AI procese.

1.4. Ginami teiginiai

1. Trijų žingsnių procesų įtaka siekia iki maždaug 40% visų Se^{3+} jonų DDI skerspjūvių.
2. EI-AI ir IE-AI procesai sudaro apie 9 % visų B^+ jono DI skerspjūvių.

3. Koreliaciniai reiškiniai sumažina Se^{3+} ir B^+ jonų DI elektronais skerspjūvius.
4. Norint paaiškinti B^+ jonų DI eksperimentinius duomenis, reikia taikyti DW skerspjūvių transformavimo lygtis.
5. DDI-AI procesas sudaro daugiau kaip 75% visų Se^{2+} ir Se^{3+} jonų TI skerspjūvių.

1.5. Autoriaus indėlis

1. Atliko mokslinių tyrimų užduotis.
2. Atliko skaičiavimus, kurie apėmė SI, DI ir TI jonizacijos elektronais skerspjūvių skaičiavimą naudojant įvairius metodus.
3. Rinko ir analizavo teorinius bei eksperimentinius duomenis iš įvairių šaltinių, kad juos būtų galima palyginti su apskaičiuotais rezultatais.
4. Atliko suskaičiuotų duomenų analizę.
5. Parengė A1, A2 ir A3 straipsnių rankraščius, bei C1, C2 ir C5 konferencijų pranešimus.
6. Teikė idėjas ir nurodė gaires moksliniams tikslams pasiekti.
7. Paruošė ir atnaujino įvairius skriptus kompiuteriniams skaičiavimams.

1.6. Disertacijos struktūra

Daktaro disertaciją sudaro keli skyriai, kurių kiekviename aptariami konkretūs tyrimo problemos aspektai ir pateikiami rezultatai. Įvade pateikiama tyrimo problema, aptariamas mokslinis

tyrimo naujumas, nurodomas pagrindinis mokslinio tyrimo tikslas ir uždaviniai, pateikiami ginami disertacijos teiginiai. Teorinių metodų skyriuje pateikiami moksliniai metodai, naudojami tiriant SI, DI ir TI jonizacijos elektronais skerspjūvių. Rezultatų skyriuje pateikiami B^+ , Se^{2+} ir Se^{3+} jonų energijos lygmenys, jonizacijos slenksčiai ir SI, DI ir TI elektronais skerspjūviai. Darbas baigiamas išvadomis, kurios yra susietos su ginamais disertacijos teiginiais.

2. TEORINIAI METODAI

2.1. Diraco-Focko-Slaterio artinys

Nepriklausomų elektronų modelyje neatsižvelgiama į elektronų sąveiką jone. Ši sąveika įvertinama netiesiogiai, naudojant efektyvųjį potencialą. Šis potencialas priklauso tiek nuo branduolio krūvio, tiek ir nuo visų kitų elektronų sferinio krūvio pasiskirstymo laike. Vienas iš tokių modelių yra Diraco-Focko-Slaterio (DFS) artinys [21, 22].

Pagal DFS artinį, jono, turinčio N surištų elektronų ir branduolio krūvį Z , hamiltonianas H išreiškiamas taip:

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

Čia $H_D(i)$ yra vienelektronis Diraco hamiltonianas grynajam Coulombo potencialui $-2Z/r_i$ dėl jono branduolio, r_{ij} yra atstumas tarp dviejų sąveikaujančių elektronų.

Hamiltonianas H gali būti perrašytas prie centrinio potencialo $V(r_i)$ pridėdant ir atimant dvielektronės elektrostazines sąveikas $V^{ee}(r_i)$ taip:

$$H = \sum_{i=1}^N H'_D(i) - \sum_{i=1}^N V^{ee}(r_i) + \sum_{\substack{i,j \\ i < j}}^N \frac{2}{r_{ij}}, \quad (2)$$

kur

$$H'_D = H_D + V^{ee}(r_i). \quad (3)$$

Taigi, H'_D yra vienelektronis Diraco hamiltonianas, kurio lokalus centrinis potencialas aprašomas taip:

$$V(r_i) = V^N(r_i) + V^{ee}(r_i). \quad (4)$$

Šis lokalus centrinis potencialas apima branduolio krūvio $V^N(r)$ ir elektronų tarpusavio sąveikos $V^{ee}(r)$ indėlius.

Branduolio potencialą galima išreikšti taip:

$$V^N(r) = \frac{-2Z(r)}{r}, \quad (5)$$

čia naudojamas paskirstytas branduolio krūvis $Z(r)$, kuris skiriasi nuo Z tik labai mažoms r vėrtėms.

DFS artinyje naudojamas centrinis potencialas, kuris yra reliatyvistinė Hartree-Focko-Slaterio (HFS) potencialo versija [23]. Elektronų tarpusavio sąveikos potencialas $V^{ee}(r)$ apima sferiškai suvidurkintą klasikinę surištųjų elektronų potencialą ir vietinį mainų energijos artinį,

$$\begin{aligned} V^{ee}(r) &= V_c(r) - V_{ex}(r) = \\ &= \sum_{nk} \int \frac{\omega_{n\kappa}}{r_{>}} (P_{n\kappa}^2(r) + Q_{n\kappa}^2(r)) - \\ &- \left[\frac{3}{4\pi^2 r^2} \sum_{n\kappa} \omega_{n\kappa} (P_{n\kappa}^2(r) + Q_{n\kappa}^2(r)) \right] \end{aligned} \quad (6)$$

Ši išraiška apima nepageidaujamą elektronų sąveiką su savimi. Be to, jos asimptotinė elgsena yra neteisinga. Norint eliminuoti elektronų sąveiką su savimi, naudojama tokia elektronų tarpusavio sąveikos potencialo išraiška [24]:

$$\begin{aligned}
V^{ee}(r) = \frac{1}{r \sum_a \omega_a \rho_a(r)} & \left\{ \sum_{ab} \omega_a (\omega_b - \delta_{ab}) Y_{bb}^0(r) \rho_a(r) \right. \\
& + \sum_a \omega_a (\omega_a - 1) \sum_{k>0} f_k(a, a) Y_{aa}^k(r) \rho_a(r) \\
& \left. + \sum_{a \neq b} \sum_k \omega_a \omega_b g_k(a, b) Y_{ab}^k(r) \rho_{ab}(r) \right\}, \quad (7)
\end{aligned}$$

kur $\alpha = n\kappa$ ir $\alpha = n'\kappa'$ yra virtualūs indeksai, žymintys pasluoksnius, o

$$\begin{aligned}
\rho_{ab} &= P_a(r)P_b(r) + Q_a(r)Q_b(r), \\
Y_{ab}^k(r) &= r \int \frac{r_{\leq}^k}{r_{>}^{k+1}} \rho_{ab}(r') dr' \quad (8)
\end{aligned}$$

$r <$ ir $r >$ yra atitinkamai mažesnis ir didesnis iš r ir r' . f_k ir g_k yra tiesioginiai ir mainų koeficientai, apibrėžiami taip

$$\begin{aligned}
f_k(a, b) &= -\left(1 + \frac{1}{2j_a}\right) \begin{pmatrix} j_a & k & j_b \\ -\frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}^2 \\
g_k(a, b) &= \begin{pmatrix} j_a & k & j_b \\ -\frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}, \quad (9)
\end{aligned}$$

kur $\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}$ yra Wignerio $3j$ simbolis. Ši lygtis turi teisingą asimptotinę elgseną esant didelėms r reikšmėms, nes elektronų sąveikos su savimi narys yra pašalintas.

Surištosios Diraco radialinės lygtys, apibrėžiančios $P_{n\kappa}$ ir $Q_{n\kappa}$, yra:

$$\left[\frac{d}{dr} + \frac{\kappa}{r} \right] P_{n\kappa}(r) = \frac{\alpha}{2} \left[\epsilon_{n\kappa} - V(r) + \frac{4}{\alpha^2} \right] Q_{n\kappa} \quad (10)$$

ir

$$\left[\frac{d}{dr} - \frac{\kappa}{r} \right] Q_{n\kappa}(r) = \frac{\alpha}{2} [V(r) - \epsilon_{n\kappa}] P_{n\kappa}, \quad (11)$$

kur α yra smulkiosios sandaros konstanta, o $\epsilon_{n\kappa}$ yra radialinių orbitalių energijos tikrinės vertės.

Bazinės būsenos $\Phi_\nu(1, 2, \dots, N)$, kurios yra vienkonfigūracinių būsenų funkcijos (SCSF), naudojamos atominei sistemai su N surištų elektronų aprašyti. SCSF yra N vienelektonių Diraco spinorių sandaugų antisimetrinės sumos, kurių išraiška yra:

$$u_{n\kappa m}(x) = \frac{1}{r} \begin{bmatrix} P_{n\kappa} & \chi_{\kappa m}(\theta, \phi, \sigma) \\ iQ_{n\kappa} & \chi_{-\kappa m}(\theta, \phi, \sigma) \end{bmatrix}, \quad (12)$$

kur χ yra elektrono erdvinė ir sukinių koordinatės [21].

Φ_ν formuojamas laikantis standartinės jj ryšio schemos:

- Visų $n_r l_r j_r$ pasluoksnio elektronų j vertės yra surišamos, taip suformuojamas bendras pasluoksnio kampinis momentas J_r .
- Visos pasluoksnio kampinio momento vertės nuosekliai surišamos, pradedant nuo žemiausio pasluoksnio, taip sudaromas jono kampinis momentas J .

Tuomet gaunamos apytikslės smulkiosios sandaros banginės funkcijos jonui Ψ :

$$\Psi = \sum_{\nu=1}^{NSCFS} b_\nu \Phi_\nu, \quad (13)$$

kur b_ν yra maišymo koeficientai, kurie kartu su atitinkamomis tikrinėmis energijomis gaunami diagonalizuojant hamiltonianą (žr. 2 lygtį), išreikštą per Φ_ν .

2.2. Koreliaciniai reiškiniai

Elektronų būsenoms, kurių neįmanoma tinkamai išreikšti naudojant vienkonfigūracines bangines funkcijas, aprašyti buvo sukurti įvairūs konfigūracijų sąveikos metodai. Konfigūracijų sąveika įvertina elektronų konfigūracijos trikdymą dėl kaimyninių konfigūracijų [25].

Todėl tam tikros būsenos koreliacijos energija E_{corr} tai būsenai apibrėžto Hamiltoniano atžvilgiu išreiškiami kaip skirtumas tarp tikslios hamiltoniano tikrinės vertės E_{exact} ir jo tikėtinos vertės HF artinyje E_{HF} [26]:

$$E_{corr} = E_{exact} - E_{HF} \quad (14)$$

Daugelio konfigūracijų modelis yra vienas iš metodų, naudojamų elektronų koreliaciniams reiškiniams nagrinėti. Pagal šį modelį atomo banginė funkcija išplečiama ne tik jo paties konfigūracijų, bet ir kitų konfigūracijų bazinėmis funkcijomis, kurių lygiškumas sutampa [27, 28]:

$$\Phi(\Gamma J) = \sum_{K'\gamma'} C_{K'\gamma'J}^{\Gamma} \Psi(K', \gamma', J). \quad (15)$$

Čia $C_{K'\gamma'J}^{\Gamma}$ yra sklaidos koeficientas, o Ψ - vienkonfigūracinė funkcija, kuri gali būti išreikšta vienkonfigūraciniu arba daugiakonfigūraciniu artiniu. Tuo tarpu Φ yra daugiakonfigūracinė funkcija, kuri apima įvairių konfigūracijų derinį. Čia K reiškia konkrečią konfigūraciją, o Γ - daugiaelektronę būseną.

Jei funkcijos Φ išreikštos vienkonfigūraciniu artiniu, o sklaidos koeficientai apibrėžiami diagonalizuojant energijos matricą šių funkcijų pagrindu, gaunama paprastesnė daugiakonfigūracinio artinio versija, vadinamą konfigūracijų sąveikos metodu.

Konfigūracijų maišymosi lygmeniui įvertinti naudojamas konfigūracijų sąveikos stipris (CIS).

$$T(K, K') = \frac{\sum_{\gamma\gamma'} \langle K\gamma | H | K'\gamma' \rangle^2}{E_{av}(K, K')^2}. \quad (16)$$

Čia sumuojama pagal visas konfigūracijų K ir K' būsenas γ ir γ' , o $E_{av}(K, K')$ yra vidutinio atstumo tarp dviejų sąveikaujančių konfigūracijų skirtumas.

CIS $T(K, K')$, padalintas iš konfigūracijos K būsenų, sumaišytų su konfigūracijos K' būsenomis, skaičiaus $\beta(K, K')$, apytiksliai lygus konfigūracijos K' banginės funkcijos maišymo koeficiento kvadratui konfigūracijos K' banginės funkcijos skleidinyje:

$$c^2 = \frac{T(K, K')}{\beta(K, K')}. \quad (17)$$

2.3. Iškraipytųjų bangų artinys

DW artinio reliatyvistiniu atveju susidūrimo stipris Ω_{01} susijęs su susidūrimo skerspjūviu σ_{01} tokia išraiška: [29]

$$\sigma_{01}(\epsilon) = \frac{\pi a_0^2}{(2J_1 + 1)} \frac{1}{p^2} \Omega_{01}, \quad (18)$$

kur indeksai 01 žymi pradinę ir galutinę būsenas, a_0 - Boro spindulys, $2J_1 + 1$ - pradinės būsenos statistinis svoris, p - reliatyvistinis momentas, o ϵ - krentančio elektrono energija. Susidūrimo stiprio išraišką galima užrašyti taip:

$$\Omega_{01} = 2 \sum_{\kappa_0 \kappa_1} \sum_{J_T} [J_T] |\langle \psi_0 \kappa_0, J_T M_T | \sum_{i < j} \frac{1}{r_{ij}} |\psi_1 \kappa_1, J_T M_T \rangle|^2, \quad (19)$$

kur κ_0 ir κ_1 yra atitinkamai krentančio ir išsklaidyto elektronų reliatyvistiniai kampiniai kvantiniai skaičiai, J_T yra bendras kampinis momentas, kai taikinio būseną surišta su laisvojo elektrono orbitale, M_T yra suminio kampinio momento projekcija, o $[J] = 2J + 1$. Atstumas tarp dviejų elektronų žymimas r_{ij} . Surištų elektronų pradinės ir galutinės būsenos banginės funkcijos yra atitinkamai ψ_i ir ϕ_j .

Smūginės jonizacijos elektronais skerspjūvio išraiška, diferencinė išmušto elektrono energijos atžvilgiu DW artinyje, gali būti išvesta iš elektronų smūginės jonizacijos formulės. Jonizacijos proceso metu reikia vieną galutinės būsenos surištąją orbitale pakeisti laisvąja išmušto elektrono orbitale ir susumuoti per jos kampinį momentą. Elektronų smūginės jonizacijos skerspjūvis gali būti išreikštas susidūrimo stipriu Ω taip: [24]:

$$\sigma(\epsilon_0, \epsilon) = \frac{1}{k_0^2 g_0} \Omega_{01}, \quad (20)$$

kur krentančio elektrono energija ir kinetinis momentas yra atitinkamai ϵ_0 ir k_0 , o ϵ yra išmušto elektrono energiją.

Susidūrimo stiprio išraiška Ω_{01} yra:

$$\Omega_{01} = 2 \sum_{\substack{\kappa, J_T, \\ k, \alpha_0 \beta_0}} Q^k(\alpha_0 \kappa; \beta_0 \kappa) \langle \psi_0 || Z^k(\alpha_0, \kappa) || \psi_1, \kappa; J_T \rangle, \quad (21)$$

$$\langle \psi_0 || Z^k(\beta_0, \kappa) || \psi_1, \kappa; J_T \rangle$$

kur κ žymi išmušto elektrono reliatyvistinį kampinį kvantinį skaičių, o bendrasis galutinės būsenos kampinis momentas, surištas su išmuštu elektronu, žymimas J_T . Radialinė dalis Q^k yra identiška sužadavimo proceso daliai, skiriasi tik tuo, kad laisvoji orbitale galutinėje būsenoje pakeičia vieną iš surištųjų.

2.4. Iškraipytųjų bangų skerspjūvių transformavimas

Siekiant ištirti neutralių atomų ir artimų neutraliems jonų skerspjūvius, buvo sukurti dvinario susidūrimo (BED) ir dvinario susidūrimo-Bethe modeliai (CI procesui) bei plokščiosios bangos-Borno artinys (CE procesui) [30–33]. Pritaikius šiuos transformavimo metodus plokščiųjų bangų artinio skerspjūviams, gautas geras atitikimas su eksperimentiniais duomenimis [34, 35]

Transformuotus DW skerspjūvius (σ^{CE^*}) CE procesui galima išreikšti taip:

$$\sigma_{ik}^{\text{CE}^*}(\varepsilon) = \frac{\varepsilon}{\varepsilon + E_{ik} + \varepsilon_b} \sigma_{ik}^{\text{CE}}(\varepsilon), \quad (22)$$

kur ε_b yra sužadinto elektrono ryšio energija, E_{ik} yra perėjimo energija tarp lygmens i ir lygmens k , o $\sigma^{\text{CE}_{ik}}(\varepsilon)$ smūginio sužadavimo skerspjūvis.

Artimų neutraliems jonų CI skerspjūvių (σ^{CI^*}) lygtis gali būti išreikšti taip:

$$\sigma_{if}^{\text{CI}^*}(\varepsilon) = \frac{\varepsilon}{\varepsilon + I} \sigma_{if}^{\text{CI}}(\varepsilon), \quad (23)$$

čia I yra pagrindinės būsenos jonizacijos slenkstis.

2.5. Radiaciniai šuoliai

Siekiant įvertinti radiacinių šuolių, vykstančių po jono sąveikos su atsitrengusiu elektronu, įtaką DI procesui, reikalingi AI proceso šakojimosi koeficientai. Šiems koeficientams apskaičiuoti reikalingos radiacinių šuolių spartos. Hamiltonianą, aprašantį atomo ir spinduliuotės sąveiką, galima išreikšti kaip perėjimo operatorių sumą. Elektrinio multipolio (dipolio arba kvadrupolio) perėjimo operatoriaus lygtį galima užrašyti taip: [27]

$$O_p^{(t)} = -e \sum_i r_i^t C(t)_p(\theta_i, \phi_i), \quad (24)$$

čia e yra elementarusis krūvis, dalelės padėties operatorius žymimas r_i^t , o $C(t)_p$ yra sferinės funkcijos operatorius. Visų atominės sistemos elektronų koordinatės žymimos indeksu i . $O^{(1)} \equiv D^{(1)}$ ir $^{(1)}$ yra atitinkamai elektronų sluoksnių dipolinis ir kvadrupolinis momentai.

Šiame darbe radiacinių perėjimų spartos apskaičiuojamos taikant vieno multipolio artinį. Tai reiškia, kad neatsižvelgiama į interferenciją tarp skirtingų multipolių. Esant tam tikram multipolio operatoriui O_M^L bei pradinei ir galutinei perėjimo būsenoms $\psi = \sum_\nu b_{i\nu} \psi_\nu$ ir $\psi = \sum_\mu b_{i\mu} \Phi_\mu$, perėjimo linijos stipris yra:

$$\begin{aligned} S_{fi} &= \left| \langle \psi_f || O_M^L || \psi_i \rangle \right|^2 \\ &= \left| \sum_{\mu\nu} b_{f\mu} b_{i\nu} \sum_{\alpha\beta} \langle \Phi_\mu || Z_M^L(\alpha, \beta) || \Phi_\nu \rangle \right. \\ &\quad \left. \langle \alpha || C^L || \beta \rangle M_{\alpha\beta}^L \right|^2, \end{aligned} \quad (25)$$

kur $M_{\alpha\beta}^L$ yra vienelektronio multipolio operatoriaus radialinė dalis [36].

Svertinės radiacinių perėjimų spartos gali būti išreikštos lygtimi:

$$gA_{fi} = 2\alpha^3 \omega^3 [L]^{-1} (\alpha\omega)^{2L-2} S_{fi}, \quad (26)$$

kur $\omega = E_i - E_f$ yra perėjimo energija, L yra multipolio operatoriaus, sukeliančio perėjimą, rangas, o $[L] = 2L + 1$.

2.6. Vienguba jonizacija elektronais

Elektronų smūginė SI - tai procesas, kai krentantis elektronas susiduria su jonu esant pakankamai didelei susidūrimo energijai

(t.y. viršijančiai SI slenkstį). Šio susidūrimo metu pašalinamas vienas iš jono surištų elektronų, todėl padidėja jono krūvis. Šis procesas vadinamas tiesiogine jonizacija.

Be tiesioginės jonizacijos proceso, yra ir alternatyvių jonizacijos mechanizmų. Vienas iš šių mechanizmų apima vidinio sluoksnio elektrono sužadimą, po kurio seka AI. Šis procesas paprastai vadinamas sužadimu-autojonizacija (EA).

Kai elektronas iš vidinio sluoksnio sužadimas ir pereina į aukštesnes neužimtas energijos būsenas, vidiniame sluoksnyje lieka vakansija. Ši vakansija gali būti užpildyta, kai elektronas iš aukštesnės energijos būsenos pereina į šią laisvą vidinio sluoksnio būseną. Šio perėjimo metu išskiriama energija, kuri dėl elektronų tarpusavio sąveikos gali būti tiesiogiai perduota kitam elektronui tame pačiame jone. Jei šio antrojo elektrono ryšio energija yra mažesnė už perėjimo energiją, jis gali išstrūkti iš jono, vykstant AI. Šis specifinis AI tipas vadinamas Auger efektu.

Kadangi tiek tiesioginės, tiek netiesioginės jonizacijos procesai prisideda prie smuginės SI, suminį SI skerspjūvį iš jonizuojamo jono lygmens f į jonizuoto jono lygmenį f , žymimą σ^{SI} , galima išreikšti kaip tiesioginės ir netiesioginės jonizacijos skerspjūvių sumą pagal šią lygtį:

$$\sigma_{if}^{SI}(\varepsilon) = \sigma_{if}^{CI}(\varepsilon) + \sum_j \sigma_{ij}^{CE}(\varepsilon) B_{jf}^a, \quad (27)$$

čia $\sigma_{if}^{CI}(\varepsilon)$ yra viengubos CI skerspjūvis, kur ε reiškia krentančio elektrono energiją. Netiesioginės jonizacijos skerspjūvio išraišką yra $\sum_j \sigma_{ij}^{CE}(\varepsilon) B_{jf}^a$ rodo netiesioginės jonizacijos, čia $\sigma_{ij}^{CE}(\varepsilon)$ yra CE skerspjūvis į tarpinį pradinio jono lygmenį j , o B_{jf}^a - AI iš pradinio lygmens j iki galutinio lygmens f šakojimosi koeficientas.

Šakojimosi koeficientas parodo, kokią įtaką netiesioginiam procesui daro radiacinis slopinimas, ir jį galima išreikšti taip:

$$B_{jf}^a = \frac{A_{jf}^a}{\sum_m A_{jm}^a + \sum_n A_{jn}^a}, \quad (28)$$

kur A^a yra Auger šuolio tikimybė, o A^r - radiacinio šuolio tikimybė. AI sparta gali būti išreikšta taip:

$$A_\alpha = \sum_\kappa \left| \langle \psi_{f,\kappa}; J_T M_T | \sum_{i < j} \frac{1}{r_{ij}} | \psi_i \rangle \right|^2, \quad (29)$$

kur ψ_i yra autojonizuojanti būseną, ψ_f yra galutinė būseną, turinti vienu elektronu mažiau nei ψ_i .

2.7. Dviguba jonizacija elektronais

DI elektronais - tai procesas, kurio metu iš atomo sistemos du elektronus pašalina krentantis elektronas ir taip susidaro dvigubai jonizuotas jonas. Yra įvairių kelių, kuriais gali vykti DI, įskaitant DDI ir IDI procesus. DDI metu dėl sąveikos su išoriniu elektronu vienu metu išmušami abu pradinio jono elektronus. IDI gali apimti procesų seką, pavyzdžiui, pradinę jonizaciją, po kurios seka vėlesnės sąveikos, dėl kurių pašalinamas antras elektronas.

Panašiai kaip SI atveju, pilnas DI skerspjūvis gali būti išreikštas kaip tiesioginės ir netiesioginės jonizacijos skerspjūvių suma:

$$\sigma_{if}^{\text{DI}}(\varepsilon) = \sigma_{if}^{\text{DDI}}(\varepsilon) + \sigma_{if}^{\text{IDI}}(\varepsilon), \quad (30)$$

čia $\sigma_{if}^{\text{DDI}}(\varepsilon)$ yra DDI skerspjūvis iš pradinio lygmenį i į dvigubai jonizuoto jono galutinį lygmenį f , kai krentančio elektrono energija yra ε .

2.7.1. Tiesioginė dviguba jonizacija elektronais

Pagal klasikinį dvinarių susidūrimų (BE) modelį [37], dviguba jonizacija gali vykti dviem skirtingais būdais:

- Pirmasis procesas, vadinamas TS1, apima jonizuojančios dalelės, tokios kaip elektronas ar fotonas, susidūrimą su skirtingais taikinio atomo elektronais. Šių nuoseklių susidūrimų metu jonizuojančioji dalelė perduoda energiją ir impulsą elektronams, todėl jie išmušami iš atomo. Dėl to atomas tampa daug kartų jonizuotas, o jonizuotų elektronų skaičius priklauso nuo krentančios dalelės energijos ir impulso bei konkretaus taikinio savybių.
- Antrasis procesas apima pirmojo išmušto elektrono ir likusių atomo elektronų susidūrimą. Po pradinės jonizacijos vienas elektronas iš atomo išmušamas, taip sukuriama teigiamai įkrautas jonas. Vėliau pirmasis išmuštas elektronas gali susidurti su likusiais jonizuoto atomo elektronais. Šio susidūrimo metu papildomi elektronai gali būti toliau išmušami iš atomo, dėl ko didėja pradinio atomo jonizacijos laipsnis.

Šiame darbe DDI elektronais skerspjuviamis tirti taikomas kelių žingsnių metodas [20]. Šis metodas grindžiamas klasikiniu BE modeliu, tačiau įtraukiant papildomus trijų žingsnių procesus (IEI ir EII). Dar vienas patobulinimas - DI proceso tyrimui naudojami CI ir CE skerspjuviai, kurie apskaičiuoti taikant DW metodą. Svarbu pažymėti, kad elektronų smūginio sužadavimo ir jonizacijos skerspjuvius, naudojamus taikant kelių žingsnių metodą, galima gauti naudojant bet kurį artinį. Tai padidina šio metodo lankstumą.

DDI proceso iš lygmens i į lygmenį f per II kelią, kuris apima du nuoseklius CI procesus, lygtį galima užrašyti taip

$$\sigma_{if}^{\text{DDI(II)}}(\varepsilon) = \sum_j \sigma_{ij}^{\text{CI}}(\varepsilon) \int_{E_{jf}}^{\varepsilon - E_{ij}} \rho_{ij}(\varepsilon, \varepsilon_1) \frac{\sigma_{jf}^{\text{CI}}(\varepsilon_1)}{4\pi \bar{R}_{nl}^2} d\varepsilon_1, \quad (31)$$

čia E_{ij} yra perėjimo energija, ε_1 yra išsklaidyto arba išmušto elektrono energija. Vienas iš šių elektronų tolesniame etape susiduria su vienu iš likusių surištų elektronų iš nl pasluoksnio ir jį išmuša. Energijos pasiskirstymas $\rho_{ij}(\varepsilon, \varepsilon_1)$ normalizuojamas vienetui: $\int_0^{\varepsilon - E_{ij}} \rho_{ij}(\varepsilon, \varepsilon_1) d\varepsilon_1 = 1$. Antrojo jonizacijos proceso tikimybės išraišką yra $\int_{E_{jf}}^{\varepsilon - E_{ij}} \rho_{ij}(\varepsilon, \varepsilon_1) \frac{\sigma_{jf}^{\text{CI}}(\varepsilon_1)}{4\pi \bar{R}_{nl}^2} d\varepsilon_1$; dalmeniu $\frac{\sigma_{jf}^{\text{CI}}(\varepsilon_1)}{4\pi \bar{R}_{nl}^2}$ išreiškiamą jonizacijos proceso tikimybę elektronu, kurio energija ε_1 . \bar{R}_{nl} yra vidutinis elektronų atstumas nuo branduolio. Perteklinės energijos pasiskirstymas tarp pirmojo jonizacijos proceso metu išsklaidyto ir išmušto elektronų įvertintas naudojant diferencinius skerspjūvius, gautus pagal BED modelį [30].

Kitas galimas DDI kelias - EII procesas, kurio metu vyksta smūginis sužadinimas elektronais, po kurio vyksta du CI procesai. Šio proceso skerspjūvius galima išreikšti lygtimi

$$\sigma_{if}^{\text{DDI(EII)}}(\varepsilon) = \sum_{jk} \sigma_{ij}^{\text{CE}}(\varepsilon) \frac{\sigma_{jk}^{\text{CI}}(\varepsilon - E_{ij})}{4\pi \bar{R}_{nl}^2} \int_{E_{kf}}^{\varepsilon - E_{ij} - E_{jk}} \rho_{jk}(\varepsilon - E_{ij}, \varepsilon_1) \frac{\sigma_{kf}^{\text{CI}}(\varepsilon_1)}{4\pi \bar{R}_{n'l'}^2} d\varepsilon_1. \quad (32)$$

Kitas trijų žingsnių procesas, per kurį gali vykti DDI, yra IEI. Šis procesas apima CI, po kurios seka sužadinimas su vėlesne jonizacija. Šio proceso skerspjūviai užrašomi taip

$$\sigma_{if}^{\text{DDI(IEI)}}(\varepsilon) = \sum_{jk} \sigma_{ij}^{\text{CI}}(\varepsilon) \int_{E_{jk}}^{\varepsilon - E_{ij}} \rho_{ij}(\varepsilon, \varepsilon_1) \frac{\sigma_{jk}^{\text{CE}}(\varepsilon_1)}{4\pi \bar{R}_{nl}^2} \frac{\sigma_{kf}^{\text{CI}}(\varepsilon_1 - E_{jk})}{4\pi \bar{R}_{n'l'}^2} d\varepsilon_1, \quad (33)$$

čia $\frac{\sigma_{kj}^{\text{CE}}(\varepsilon_1)}{4\pi R_{nl}^2}$ yra elektrono sužadavimo tikimybė iš nl pasluoksnio lymens k į lygmenį j išsklaidytu arba išmuštu elektronu, kurio energija yra ε_1 .

Galimos ir paprastesnės DDI(II), DDI(EII) ir DDI(IEI) išraiškos, gaunamos atsižvelgiant į du ribinius energijos pasiskirstymo tarp išsklaidyto ir išmušto elektronų atvejus: abu elektronai pasidalija perteklinę energiją po lygiai (DDI1); visa energija atitenka vienam iš elektronų (DDI2).

2.7.2. Netiesioginė dviguba jonizacija

IDI procesai apima IA, sužadavimo ir po jo sekančios dvigubos AI bei RETA procesus:

$$\sigma_{if}^{\text{IDI}}(\varepsilon) = \sigma_{if}^{\text{IA}}(\varepsilon) + \sigma_{if}^{\text{EDA}}(\varepsilon) + \sigma_{if}^{\text{RETA}}(\varepsilon). \quad (34)$$

IA procesas prasideda nuo jonizacijos elektronu iš i lygmens į tarpinį j lygmenį:

$$\sigma_{if}^{\text{IA}}(\varepsilon) = \sum_j \sigma_{ij}^{\text{CI}}(\varepsilon) B_{jf}^a, \quad (35)$$

EDA proceso metu gauti skerspjūviai yra išreiškiami taip:

$$\sigma_{if}^{\text{EDA}}(\varepsilon) = \sum_{jm} \sigma_{ij}^{\text{CE}}(\varepsilon) B_{jm}^a B_{mf}^a, \quad (36)$$

kur sumuojama pagal pradinio jono autojonizuojančius lygmenis j ir jonizuoto jono autojonizuojančius lygmenis m .

RETA procesas prasideda nuo krentančio elektrono pagavimo (DC) ir surišto elektrono perėjimo į aukštesnį lygmenį. Susiformavusi pradinio jono autojonizuojanti būsena suyra per radiacinių ir Auger šuolių metu, todėl susidaro įvairių jonizacijos laipsnių jonai. Šis procesas, kuris baigiasi dviejų pradinio jono elektronų

išmušimu, prisideda prie DI. RETA proceso skerspjūviai išreiškiami lygtimi:

$$\sigma_{if}^{\text{RETA}}(\varepsilon) = \sum_{lkj} \sigma_{il}^{\text{DC}}(\varepsilon) B_{lk}^a B_{kj}^a B_{jf}^a, \quad (37)$$

čia sumuojama pagal pradinio jono autojonizuojančius lygmenis l , dvigubai jonizuoto jono lygmenis k ir trigubai jonizuoto jono lygmenis j . $\sigma_{il}^{\text{DC}}(\varepsilon)$ yra elektrono pagavimo proceso skerspjūvis.

Be anksčiau aprašyto IDI proceso, tiriami ir kiti IDI procesai. Šie procesai apima jonizaciją-sužadalinimą, po kurių seka autojonizacija (IE-AI) ir sužadalinimą-jonizaciją su vėlesne autojonizacija (EI-AI).

Šių procesų lygtis galima užrašyti taip:

$$\sigma_{if}^{\text{DI(IE-AI)}}(\varepsilon) = \sum_{jk} \sigma_{ij}^{\text{CI}}(\varepsilon) \int_{E_{jk}}^{\varepsilon - E_{ij}} \rho_{ij}(\varepsilon, \varepsilon_1) \frac{\sigma_{jk}^{\text{CE}}(\varepsilon_1)}{4\pi R_{nl}^2} d\varepsilon_1 B_{kf}^a, \quad (38)$$

$$\sigma_{if}^{\text{DI(EI-AI)}}(\varepsilon) = \sum_{jk} \sigma_{ij}^{\text{CE}}(\varepsilon) \frac{\sigma_{jk}^{\text{CI}}(\varepsilon - E_{ij})}{4\pi R_{nl}^2} d\varepsilon_1 B_{kf}^a. \quad (39)$$

2.8. Triguba jonizacija

Kai DDI proceso metu sužadinto lygmens energija viršija TI slenkstį, šis lygmuo gali toliau suirti per AI, o toks procesas vadinamas DDI-AI. Toks DDI procesas, po kurio seka AI, galiausiai baigiasi TI. Todėl TI tyrimas apima DDI(II)-AI, DDI(IEI)-AI ir DDI(EII)-AI procesus..

Be to, reikia atsižvelgti į Auger kaskadų, kurios prasideda, kai krentantis elektronas išmuša vidinio sluoksnio elektroną, indėlį. Todėl TI elektronais procesas nagrinėjamas kaip DDI-AI procesų

ir Auger kaskadų, atsirandančių po SI iš vidinio sluoksnio, visuma.

DDI procesą, apimantį II, EII ir IEI procesus, po kurių seka AI iš pradinio jono lygmens i iki trigubai jonizuoto jono lygmens f , galima išreikšti taip:

$$\sigma_{if}^{\text{DDI(II)-AI}}(\varepsilon) = \sum_j \sigma_{ij}^{\text{DDI(II)}}(\varepsilon) B_{jf}^a, \quad (40)$$

$$\sigma_{if}^{\text{DDI(EII)-AI}}(\varepsilon) = \sum_j \sigma_{ij}^{\text{DDI(EII)}}(\varepsilon) B_{jf}^a, \quad (41)$$

$$\sigma_{if}^{\text{DDI(IEI)-AI}}(\varepsilon) = \sum_j \sigma_{ij}^{\text{DDI(IEI)}}(\varepsilon) B_{jf}^a. \quad (42)$$

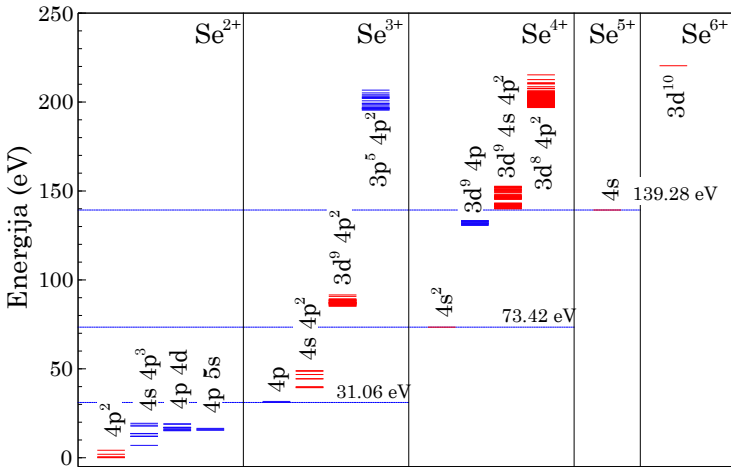
Čia DDI išreiškiama dviejų ir trijų žingsnių procesais, vykstančiais iš pradinio jono lygmens i į dvigubai jonizuoto jono lygmenį j .

3. REZULTATAI

3.1. Energijų lygmenys ir jonizacijos slenksčiai

3.1.1. Se^{2+} jonas [A1]

Se^{2+} , Se^{3+} , Se^{4+} , Se^{5+} ir Se^{6+} jonų žemiausių konfigūracijų energijos lygmenys, kartu su Se^{2+} jono SI, DI ir TI slenksčiais pateikti 1 pav. SI slenkstis Se^{2+} jono pagrindinei būsenai atitinka 31,06 eV, o tai gerai sutampa su JAV Nacionalinio standartų ir technologijų instituto (NIST) [38] pateikiama 31,7 eV verte.



1 pav. Se^{2+} , Se^{3+} , Se^{4+} , Se^{5+} ir Se^{6+} jonų žemiausių konfigūracijų energijos lygmenys. Jonizacijos slenksčiai pavaizduoti horizontaliomis linijomis su atitinkamomis vertėmis. Lyginių konfigūracijų energijos lygmenys pažymėti raudonai, o nelyginių konfigūracijų energijos lygmenys pažymėti mėlynai.

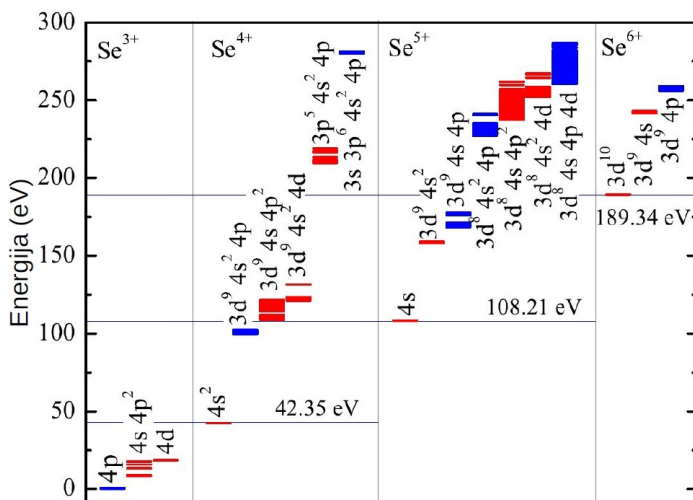
Eksperimentiniai skerspjūviai prasideda žemiau pagrindinės būsenos jonizacijos slenksčio, tai rodo metastabilių būsenų būvimą jonų pluošte [39]. Didesni neatitikimai pastebimi apskaičiuotiems DI ir TI slenksčiams, kurie atitinkamai yra 1,22 eV ir 3,66 eV mažesni nei NIST vertės.

1 pav. pateikta informacija rodo, kad Se^{3+} jono sužadintosios būsenos su vakansija $3d$ pasluoksnyje, gali suirti Auger perėjimų metu, taip sukuriant Se^{4+} jonus. Tai įmanoma dėl to, kad šių sužadintų būsenų energijos viršija Se^{2+} DI slenkstį. Be to, būsenos su vakansija $3d$ pasluoksnyje viršija Se^{2+} TI slenkstį. Todėl iš šių konfigūracijų gali vykti Auger kaskados, kurių metu pereinama į Se^{5+} joną.

3.1.2. Se^{3+} jonas [A2]

Energijos lygmenys, turintys didžiausią įtaką Se^{3+} jonų DI ir TI procesams, kartu su SI, DI ir TI slenksčiais pateikti 2 pav. Kaip matyti iš 2 paveikslo, po pradinio jonizacijos proceso keletas Se^{4+} jono sužadintų lygmenų yra aukščiau TI slenksčio. Todėl jie gali suirti per Auger šuolius ir galiausiai susidaryti Se^{6+} jonas. Tai rodo, kad tiriant Se^{3+} jonų TI svarbu įtraukti Auger šuolius.

Vykstant pradinio Se^{5+} jono DDI ir IDI procesams, susidaro keli sužadinti Se^{3+} jonų lygmenys (2 pav.). Kai kurie iš šių sužadintų lygmenų yra aukščiau TI slenksčio, todėl galima AI, kurios metu susidaro Se^{6+} jonas.



2 pav. Se³⁺, Se⁴⁺, Se⁵⁺, Se⁶⁺ ir Se⁷⁺ jonų konfigūracijų energijos lygmenys. Jonizacijos slenksčiai pavaizduoti horizontaliomis linijomis su atitinkamomis vertėmis. Lyginių konfigūracijų energijos lygmenys pažymėti raudonai, o nelyginių konfigūracijų energijos lygmenys pažymėti mėlynai.

3.1.3. B⁺ jonas [A3]

B⁺ jonų SI, DI ir TI slenksčiai palyginti su NIST pateiktomis vertėmis [38] 1 lentelėje. Apskaičiuoti jonizacijos slenksčiai yra šiek tiek mažesni už NIST vertes. Skirtumas tarp apskaičiuotų slenksčių vienkonfigūraciniame artinyje ir NIST verčių svyruoja nuo 1,9 eV SI slenksčiui iki 3,4 eV TI slenksčiui. DI slenksčio skirtumas yra maždaug 2 eV.

1 lentelė. B⁺ jono teoriniai jonizacijos slenksčiai (eV). Palyginimui pateikiamos NIST rekomenduojamos vertės. FAC1 – vienkonfigūracinio artinio duomenys, FAC2 – rezultatai, gauti taikant konfigūracijų sąveikos metodą. Paaiškinimus žr. tekste.

Slenkstis	FAC1	FAC2	NIST [38]
SI	23.3	24.9	25.2
DI	61.1	62.5	63.1
TI	319.1	320.7	322.5

Remiantis NIST duomenimis, B⁺ 2s² 1S₀ konfigūracijos būsenos funkcija tarpinės banginės funkcijos skleidinyje sudaro 93%, o B⁺ 2p² 1S₀ konfigūracijos būsenos funkcija - 7%. Taigi, tiriant SI, DI ir TI, taikant konfigūracijų sąveikos metodą, įtraukti koreliaciniai reiškiniai. Pagrindinė B⁺ jono būseną apima tokias sąveikaujančias konfigūracijas kaip 2s², 2p², 3l² (l = 0,1,2), 2p3p ir 3s3d. Įtraukus šiuos koreliacinius reiškinis, teoriniai jonizacijos slenksčiai padidėjo maždaug 1,6 eV, lyginant su vienkonfigūracinio artinio rezultatais (1 lentelė).

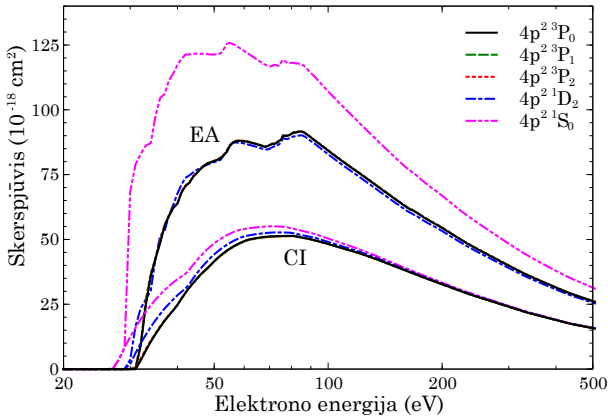
3.1.4. Išvados

Šiame tyrime, suskaičiuoti B⁺, Se²⁺ ir Se³⁺ jonų jonizacijos slenksčiai palyginti su NIST duomenimis. Pastebėti nedideli apskaičiuotų slenksčių ir NIST verčių neatitikimai, kurie rodo koreliacinių reiškinų įtraukimo svarbą. B⁺ atveju matoma didelė koreliacinių reiškinų įtaka, daugiausia atsirandančių dėl B⁺ 2s² 1S₀ ir B⁺ 2p² 1S₀ konfigūracijų. Dėl to teoriniai jonizacijos slenksčiai padidėja maždaug 1,6 eV. Ištyrus Se²⁺ ir Se³⁺ jonų energijos lygmenų struktūras, išryškėjo Auger perėjimų iš sužadintų būsenų, kurios susidaro vykstant pradinių jonų SI ir DI jonizacijos procesams, galimybė.

3.2. Vienguba jonizacija elektronais

3.2.1. Se^{2+} jonas [A1]

Išnagrinėjus Se^{2+} jono pagrindinės konfigūracijos energijos lygmenų indėlį SI procesui (3 pav.), matyti, kad šiek tiek didesni DI skerspjūviai gaunami vykstant SI iš aukščiausio $4p^2 \ ^1S_0$ lygmens.

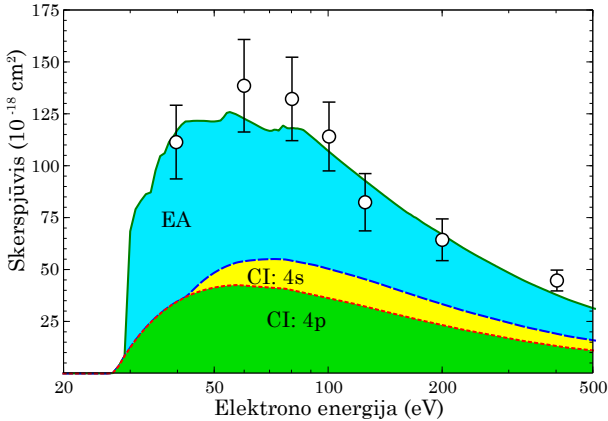


3 pav. CI ir EA procesų indėlis Se^{2+} SI procesui iš skirtingų pagrindinės konfigūracijos energijos lygmenų.

Kadangi iš šio lygmens vykstantis EA procesas įtakoja reikšmingą skerspjūvių padidėjimą visame energijos diapazone, tai įtraukus EA proceso indėlį iš $4p^2 \ ^1S_0$ lygmens, žymiai pagerėja atitikimas su eksperimentiniais rezultatais, palyginus su kitų pagrindinės konfigūracijos lygmenų įnašais. Todėl tyrime dėmesys sutelkiamas į Se^{2+} jonų SI, DI ir TI skerspjūvių tyrimą iš $4p^2 \ ^1S_0$ lygmens.

Suminiai Se^{2+} jono SI skerspjūviai palyginti su eksperimentu 4 pav. Svarbu pabrėžti, kad radiacinių šuolių įtaka yra minimali. Suminiai SI skerspjūviai gerai sutampa su eksperimento rezul-

tatais visame energijos diapazone. Pastebėtina, kad didžiausią indėlį suminiams SI skerspjūviams turi sužadanimai į Se^{2+} jono konfigūracijas su po jų vykstančia AI į Se^{3+} jono lygmenis. Be to, tiesioginės jonizacijos iš $4p$ pasluoksnio indėlis gerokai viršija $4s$ pasluoksnio indėlį.

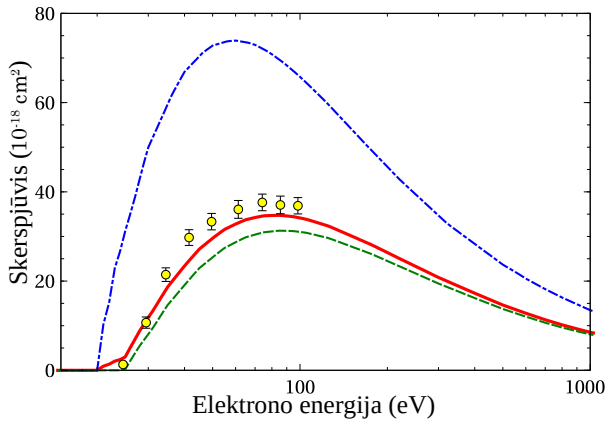


4 pav. Se^{2+} SI elektronu iš $4p^2 \ ^3P_0$ lygmns. Trumpa brūkšninė linija (raudona): $4p$ pasluoksnio SI; ilga brūkšninė linija (žalia): $4p$ ir $4s$ pasluoksnų CI; ištisinė linija (juoda): CI su EA; apskritimai: eksperimentas [39]. Apskaičiuotas CI ir EA procesų indėlis pavaizduotas skirtingai nuspalvintomis sritimis.

3.2.2. B^+ jonas [A3]

B^+ jonų pagrindinių ir metastabilių lygmenų transformuoti SI skerspjūviai palyginti su eksperimentiniais [40] 5 pav. Transformuoti DW skerspjūviai iš pagrindinio $2s^2 \ ^1S_0$ lygmens, apskaičiuoti jonizuojamo jono potenciale, išlieka mažesni už išmatuotas vertes visame energijos spektre. Skerspjūviai, apskaičiuoti jonizuoto jono potenciale, ženkliai nuvertina eksperimentinius

duomenis, todėl šie skerspjūviai čia nepateikiami.



5 pav. B^+ jono transformuoti SI elektronais skerspjūviai iš pagrindinio $2s^2\ ^1S_0$ (žalia brūkšninė linija) ir metastabilaus $2s2p\ ^3P_0$ (mėlyna taškinė linija) lygmenų. Ištisinė linija (raudona) žymi perskaičiuotus DW skerspjūvius, kurių 91% sudaro pagrindinio lygmens ir 9% metastabilaus lygmens indėlis. Geltoni apskritimai su paklaidų ribomis: eksperimento duomenys, kai jonų pluošte yra 9% metastabilių lygmenų. [40].

Metastabilaus $2s2p\ ^3P_0$ lygmens atveju teoriniai skerspjūviai, apskaičiuoti jonizuojamo jono potencialo ribose, gerokai viršija eksperimentines vertes visame energijų diapazone. Tačiau, kai vertinami teoriniai skerspjūviai, atitinkantys 9% metastabilių lygmenų dalį jonų pluošte, stebimas pakankamai geras eksperimentinių matavimų atitikimas (5 pav.).

Verta pabrėžti, kad koreliacinių reiškinių įtaka SI skerspjūviams yra palyginti nedidelė, skerspjūviai sumažėja tik apie 2%, kai kitų jonų atveju koreliaciniai reiškiniai turėjo didelę įtaką SI skerspjūviams [41]. Gauti rezultatai taip pat rodo, kad

netiesioginių SI procesų indėlis yra gerokai mažesnis ir, lyginant su suminiais SI skerspjuviais, skiriasi dviem eilėmis.

3.2.3. Išvados

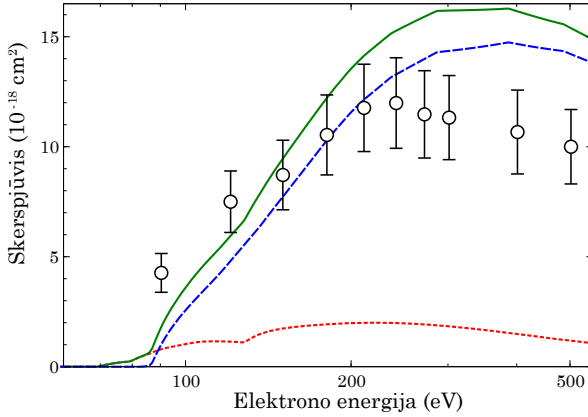
Se^{2+} atveju pagrindinė jonų dalis pluošte yra sužadintame pagrindinės konfigūracijos lygmenyje $4p^2 \ ^1S_0$. Teoriniai Se^{2+} jonų SI skerspjuviai ir eksperimentiniai matavimai gerai sutampa visame energijos diapazone, o didžiausią indėlį į SI procesą įneša EA procesas.

B^+ jono atveju geras atitikimas su eksperimentiniais SI rezultatais gautas skaičiavimams naudojant jonizuojamo jono potencialą, bei transformavus DW skerspjuvius. Šis tyrimas taip pat apima koreliacinius reiškinius pagrindinei B^+ jono konfigūracijai.

3.3. Dviguba jonizacija elektronais

3.3.1. Se^{2+} jonas [A1]

Se^{2+} jono DI elektronais skerspjuviai pavaizduoti 6 pav. Kaip jau minėta, šiame tyrime daugiausia dėmesio skiriama DI iš sužadinto $4p^2 \ ^1S_0$ lygmens. Tačiau panašūs rezultatai pastebimi ir kituose pagrindinės konfigūracijos lygmenyse. DDI-AI (II, IEI) procesų skerspjuviai, atsirandantys dėl tiesioginio $3d$ elektrono SI, prisideda prie TI, todėl šie skerspjuviai atimami iš IA verčių. Kaip matyti iš 6 pav., pagrindinis indėlis į suminį DI skerspjuvį atsiranda dėl IDI proceso, apimančio CI iš $3d$ pasluoksnio su vėlesne AI. Tiesioginės jonizacijos proceso indėlis sudaro maždaug 10%.



6 pav. Se^{2+} DI elektronais. Punkttyrinė linija (raudona): DDI skerspjūviai, kai vienas iš elektronų pasiima visą perteklinę energiją; brūkšninė linija (mėlyna): IDI skerspjūviai; ištisinė linija (žalia): suminiai DI skerspjūviai; apskritimai su paklaidų ribomis: eksperimento duomenys [39].

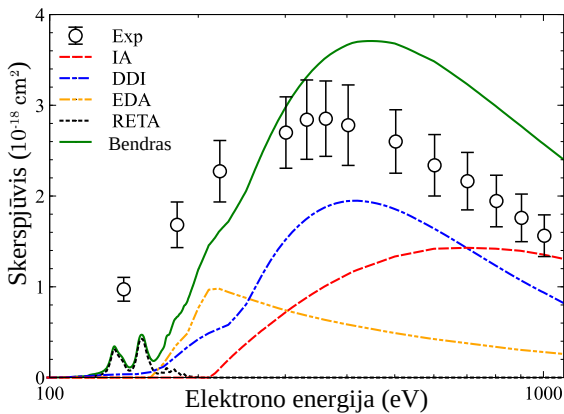
Suminiai DI skerspjūviai gerai sutampa su eksperimentinėmis vertėmis netoli eksperimentinių skerspjūvių maksimumo. Tačiau esant mažesnėms energijoms, teoriniai skerspjūviai yra mažesni už eksperimentinius. Kita vertus, kai energijos yra už maksimumo, teoriniai skerspjūviai stipriai viršija eksperimentinius. Šie neatitikimai sutampa su gautais taikant suvidurkintų konfigūracijų iškraipytųjų bangų (CADW) metodą [42].

Šiame tyrime taip pat buvo tiriama koreliacinių reiškinių įtaka DI proceso skerspjūviams. Sumaišytos konfigūracijos, kurios daro didžiausią įtaką Se^{2+} ir Se^{3+} jonų pagrindinėms konfigūracijoms, bei Se^{3+} $3d^9 4s^2 4p^2$ konfigūracijai buvo nustatytos naudojant CIS. Deja, šis tyrimas parodė, kad net ir įtraukus sąveikaujančias konfigūracijas, koreliaciniai reiškiniai neturi didelės įtakos DI proceso skerspjūviams. Todėl teorinių ir

eksperimentinių verčių neatitikimo priežastis lieka neaiški.

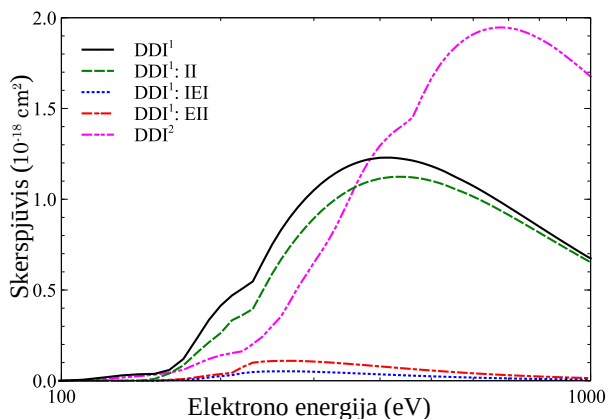
3.3.2. Se^{3+} jonas [A2]

Skirtingų procesų indėlis Se^{3+} jono DI procesui pateiktas 7 pav. Čia visi skaičiavimai pagrįsti duomenimis, gautais taikant vienkonfigūracinį artinį. Kaip matyti iš 7 pav., DDI yra dominuojantis procesas ties DI skerspjūvių maksimalia reikšme. Norint parodyti DDI-AI proceso įtaką, DDI indėlis lieka nekoreguotas dėl galimo Se^{5+} lygmenų suirimo Auger šuolių į Se^{6+} joną metu. Tyrimas apima ir dviejų bei trijų žingsnių procesus. Anksčiau, taikant CADW metodą, buvo analizuojamas tik dviejų žingsnių Se^{3+} DI procesas [42].



7 pav. Se^{3+} jono DI elektronais skerspjūviai. Brūkšninė linija (raudona): IA iš $3p$ pasluoksnių; punktyrinė linija (mėlyna): DDI be DDI-AI įtakos; punktyrinė linija (oranžinė): EDA iš $3p$ pasluoksnių; punktyrinė linija (juoda): RETA sužadavinimui iš $3p$ pasluoksnių; ištisinė linija (žalia): suminiai DI skerspjūviai; apskritimai: eksperimento duomenys [43].

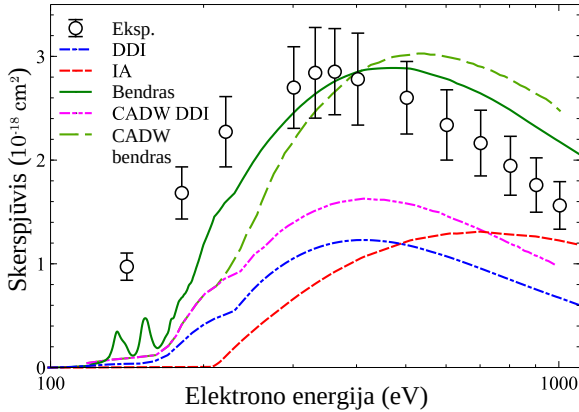
8 pav. pavaizduoti DDI skerspjūviai, kai įtraukiami Auger šuoliai iš Se^{5+} sužadintų lygmenų į kitą jonizacijos laipsnį. Šiuo atveju skirtingų DDI procesų indėlis labai pasikeičia, lyginant su atveju, kai į Auger šuolius neatsižvelgiama. II proceso metu gauti skerspjūviai sudaro maždaug 91% suminių skersmenų. EII proceso indėlis smarkiai sumažėja, nes dauguma susidariusių sužadintų Se^{5+} jonų lygmenų suyra iki Se^{6+} .



8 pav. Se^{3+} jono DDI elektronais skerspjūviai, atsižvelgiant į DDI-AI įtaką. Brūkšninė linija (žalia): II dalis DDI procese; punktyrinė linija (raudona): EII dalis DDI procese; punktyrinė linija (mėlyna): IEI dalis DDI procese. Indeksas 1: DDI skerspjūviai, kai vienas iš elektronų perima visą perteklinę energiją DDI procese; indeksas 2: DDI skerspjūviai, kai išsklaidytas ir išmušyas elektronai perteklinę energiją dalijasi po lygiai.

Suminiai DI skerspjūviai su pakoreguotomis DDI ir IA vertėmis (įtraukus koreliacinius reiškinius IA procesui bei atsižvelgus į DDI-AI įtaką DDI procesui) pateikti 9 pav. Šiuo atveju suminiai DI skerspjūviai geriau atitinka eksperimentinius

duomenis ties skerspjūvių maksimumu ir tik nežymiai viršija eksperimentines paklaidas esant didesnėms energijoms.



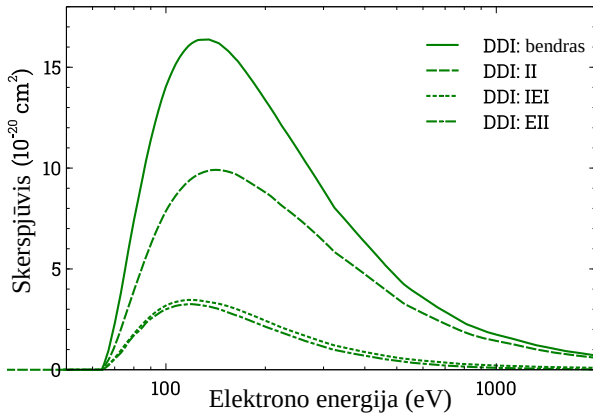
9 pav. Tas pats kaip ir 7 pav., tačiau IA skerspjūviai apima koreliacinius reiškinius, o DDI sumažėja dėl DDI-AI įtakos. Brūkšninė-taškuota linija (violetinė): CADW DDI [42] II dalis; brūkšninė-plona linija (šviesiai žalia): CADW suminiai skerspjūviai, apimantys CADW DDI ir IA iš $3p$ pasluoksnio.

Deja, esant mažesnėms krentančio elektrono energijoms, teorinės vertės išlieka gerokai mažesnės už eksperimentines, kas atitinka ankstesnių tyrimų rezultatus [42]. Pagrindinė šių neatitikimų priežastis išlieka neaiški.

3.3.3. B^+ jonas [A3]

B^+ jono DI elektronais skerspjūvių skaičiavimai atlikti pagrindiniam lygmeniui, naudojant transformuotus DW skerspjūvius. Nagrinėjant suminius DI skerspjūvius, įtraukti ir DDI bei AI procesai. Įvairių procesų indėlis B^+ jono DDI procesui pavaizduotas 10 pav. Akivaizdu, kad II kelias dominuoja prieš IEI ir EII. II

kelias sudaro apie 70% visų DDI skerspjūvių, o IEI indėlis yra šiek tiek didesnis, bet panašus į EII.

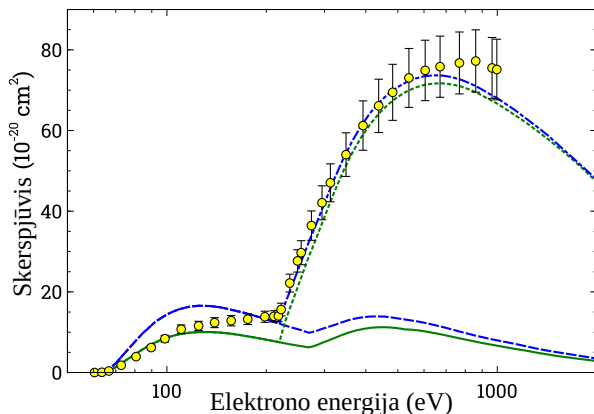


10 pav. Kelių žingsnių procesų indėlis į suminį B^+ jono DDI procesą. Nurodytų procesų paaiškinimus žr. tekste.

Išplėtus DDI tyrimą įtraukiant jonizaciją iš B^{2+} jono konfigūracijų $1s$ pasluoksniu, gautos B^{3+} jonų konfigūracijos, kuriose yra viena vakansija $1s$ pasluoksnyje, yra žemiau nei TI slenkstis (11 pav.). Akivaizdu, kad dėl jonizacijos iš B^{2+} jono $1s$ pasluoksniu įtraukimo padidėjus DDI skerspjūviams, suminių teorinių DI skerspjūvių ir eksperimentinių rezultatų atitikimas pagerėja.

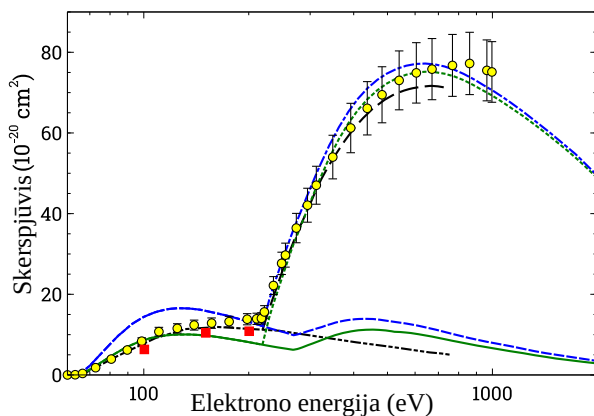
Papildomų EI-AI ir IE-AI procesų indėlis dar labiau pagerina atitikimą su eksperimentiniais skerspjūviais, kai krentančio elektrono energijos yra didesnės (12 pav.). Palyginimas su ankstesniais skaičiavimais [44], kuriuose DDI procesui naudotas TDCC metodas, o netiesioginiam DI procesui - CADW metodas, taip pat pateiktas 12 pav. Dabartinės vertės šiek tiek viršija ankstesnius skaičiavimus. Šį neatitikimą galima paaiškinti DDI skerspjūvių ekstrapoliavimu už $1s$ pasluoksniu jonizacijos slenkščio, dėl kurio ankstesnių tyrimų DDI vertėse galėjo atsirasti netikslumų. Be to, DDI skaičiavimuose nebuvo atsižvelgta į $1s$ pasluoksni. Tai

pabrėžia EI-AI ir IE-AI procesų svarbą B^+ DI, kadangi šie procesai susiję su sužadinimais iš $1s$ pasluoksnio.



11 pav. B^+ jono pagrindinio lygmens DI elektronais skerspjūviai, kai į DDI procesą įtraukta jonizacija iš B^{2+} jono $1s$ pasluoksnio. DDI^1 : CI skerspjūviai, gauti jonizuojamos jono potenciale; DDI^2 : $B^+ \rightarrow B^{2+}$ CI skerspjūviai, gauti jonizuojamo jono potenciale, bet $B^{2+} \rightarrow B^{3+}$ CI skerspjūviai, gauti jonizuoto jono potenciale; $DDI^1 - IA$: DDI^1 ir IA skerspjūvių suma; $DDI^2 - IA$: DDI^2 ir IA skerspjūvių suma. TDCC: ankstesni skaičiavimai [44]. Geltoni apskritimai su paklaidų ribomis: eksperimentas su 9% metastabilių lygmenų jonų pluošte [45]. Paaiškinimus žr. tekste.

Analizuojant susidariusias autojonizuojančias būsenas nagrinėjami tik Auger perėjimai, nes taip užtikrinamas visiškas užpildos perkėlimas į B^{3+} joną. Apsiribojus tik DDI procesu, apimančiu autojonizuojančias būsenas, būtų gauti mažesni skerspjūviai, palyginti su IE-AI, EI-AI ir IA procesais.



12 pav. Tas pats kaip 11 pav., tačiau įtraukti EI-AI ir IE-AI procesai. Kvadratėliai (raudoni): TDCC skaičiavimai [44]; brūkšninė plona linija (juoda): pagrindinės konfigūracijos $1s$ pasluoksnio SI skaičiavimai CADW metodu, pridėti prie ekstrapoliuotų TDCC duomenų (juoda brūkšninė-taškinė linija). Paaiškinimus žr. tekste.

3.3.4. Išvados

Se^{2+} jonų DI skerspjūviai, gerai sutampa su eksperimentiniais duomenimis ties eksperimentinių skerspjūvių maksimumu. Tačiau teoriniai skerspjūviai yra linkę pervertinti eksperimentinius skerspjūvius esant didesnėms krentančių elektronų energijoms ir nepakankamai įvertinti eksperimentines vertes esant mažesnėms energijoms. Tikslios šių skirtumų priežastys lieka neaiškios, todėl gali prireikti tolesnių eksperimentų, kad šis neatitikimas būtų pašalintas.

Se^{3+} jono DI atveju, sužadimas iš $3p$ pasluoksnio, po kurio seka dviguba AI, ženkliai prisideda prie Se^{5+} jonų susidarymo. Priešingai, DC, kuris apima sužadimą iš $3p$ pasluoksnio, duoda mažiausią indėlį iš visų nagrinėjamų procesų. Šis procesas yra

svarbesnis, kai krentančių elektronų energijos yra mažesnės.

Tiriamieji B^+ jonų DI, buvo įtraukti EI-AI ir IE-AI procesai, apimantys sužadėjimą iš $1s$ pasluoksnio. Papildomas šių procesų indėlis pagerina atitikimą su eksperimentiniais matavimais, ypač aukštesnių energijų atveju. Tik DDI procesas yra atsakingas už B^{3+} jonų būsenų susidarymą energijos intervale nuo DI slenksčio iki $1s$ pasluoksnio SI slenksčio. DDI procese II kelias dominuoja prieš IEI ir EII kelius.

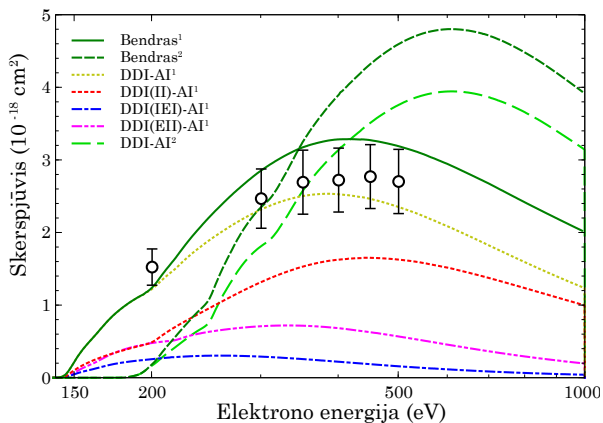
3.4. Triguba jonizacija elektronais

3.4.1. Se^{2+} jonas [A1]

Se^{2+} jonų TI elektronais skerspjūviai pateikti 13 pav. TI tiriamą pradėdant nuo aukščiausio $4p^2\ ^1S_0$ pagrindinės konfigūracijos lygmens. Šiame tyrime atsižvelgiama į DDI-AI proceso ir Auger šuolių, vykstančių po $3p$ pasluoksnio jonizacijos, indėlį.

Teorinės vertės yra šiek tiek didesnės už eksperimentinius duomenis ties maksimalia skerspjūvių verte, kai vienas iš elektronų DDI metu sugeria visą perteklinę energiją. Svarbu pažymėti, kad tyrimai, kuriuose Auger šuoliams tirti įtraukiami koreliaciniai reiškiniai, lemia aukštesnių jonizacijos laipsnių jonų susidarymą [46, 47], o tai, tikėtina, lemtų geresnį TI skerspjūvių atitikimą.

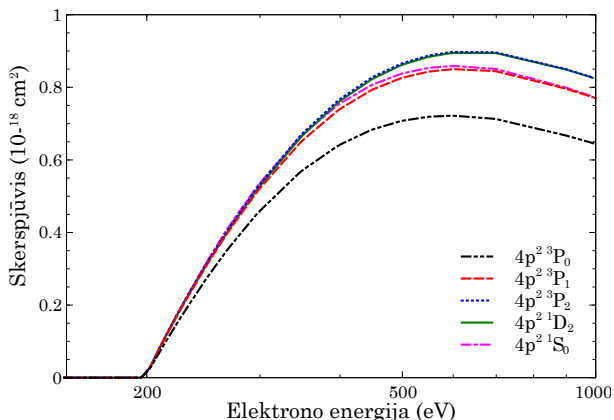
Atlikus skaičiavimus jonizuojamo jono potenciale gaunami maždaug 20% mažesni skerspjūviai ties skerspjūvių maksimumu. Šie gauti TI skerspjūviai yra mažesni už eksperimentinius, kai energijos yra mažesnės, ir didesni, kai krentančio elektrono energijos yra didesnės. Tai galioja atvejui, kai perteklinė energija tarp elektronų pasiskirsto po lygiai.



13 pav. Įvairių procesų indėlis į Se^{2+} jono TI elektronais. indeksas 1: TI skerspjūviai, kai vienas iš elektronų sugeria visą perteklinę energiją DDI procese; indeksas 2: TI skerspjūviai, kai išsklaidytas ir išmuštas elektronai vienodai dalijasi perteklinę energiją DDI procese; apskritimai su paklaidų ribomis: eksperimento duomenys [39] Žr. tekste pateiktus DDI-AI, DDI(II)-AI, DDI(IEI)-AI ir DDI(EII)-AI procesų paaiškinimus.

Didžiausią indėlį į suminius TI skerspjūvius įneša DDI-AI procesas, sudarantis daugiau kaip 75% visų TI skerspjūvių ties maksimalia jų verte (13 pav.). Įdomu tai, kad DDI(II)-AI procesas sudaro apie 70% visų DDI-AI skerspjūvių, o DDI(II)-AI ir DDI(IEI)-AI procesų indėlis yra mažesnis. Verta pažymėti, kad II procesas daro didžiausią įtaką TI procesui ties skerspjūvių maksimumu. Tačiau esant mažesnėms krentančio elektrono energijoms trijų žingsnių procesų indėlis yra didesnis, lyginant su dviejų žingsnių procesu. Be to EII procesas dominuoja prieš IEI procesą. Tai galima paaiškinti tuo, kad tokie sužadainimai kaip $4s \rightarrow 4p$ ir $4p \rightarrow 4d$ turi didesnius skerspjūvius, palyginti su

jonizacija iš $3d$, $4s$ ir $4p$ pasluoksnių.



14 pav. Se^{2+} jono $3p$ pasluoksniu SI elektronais pagrindinės konfigūracijos energijos lygmenims.

Be to, Auger šuoliai, vykstantys po DDI, prisideda prie Se^{6+} jonų susidarymo. Tačiau keturgubos jonizacijos skerspjūviai yra maždaug viena eile mažesni, lyginant su TI skerspjūviais.

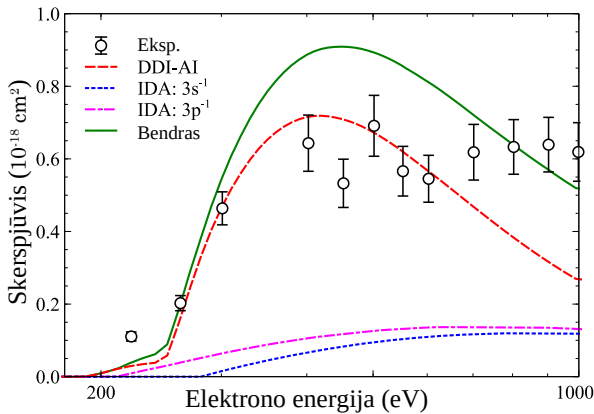
Auger šuolių, vykstančių po Se^{2+} jono $3p$ pasluoksniu SI, indėlis sudaro maždaug 25% viso TI skerspjūvio. $3s$ ir gilesnių pasluoksnių jonizacija, po kurios seka Auger šuoliai, nebuvo analizuojama dėl daug mažesnių SI skerspjūvių, lyginant su $3p$ pasluoksniu jonizacija.

Be to, skerspjūviai iš sužadinto $4p^2 \ ^1S_0$ lygmens, atsirandančio dėl Se^{2+} jono $3p$ pasluoksniu SI (14 pav.), gerokai padidėja visame energijos diapazone, priešingai nei pagrindinio $4p^2 \ ^3P_0$ lygmens indėlis.

3.4.2. Se^{3+} jonas [A2]

Se^{3+} jonų suminiai TI skerspjuviai, kartu su atskirų procesų įnašais, pavaizduoti 15 pav. Kaip parodyta šiame pav., suminiai TI skerspjuviai pasiekia didžiausią vertę, kai krentančio elektrono energija yra 440 eV.

DDI-AI proceso indėlis į TI skerspjuvius yra didžiausias, jis sudaro 79% visų TI skerspjuvių ties maksimumo verte. Nors DDI-AI proceso įtaka mažėja esant didesnėms energijoms, jo įtaka vis tiek išlieka reikšminga visame nagrinėjamų energijų diapazone.

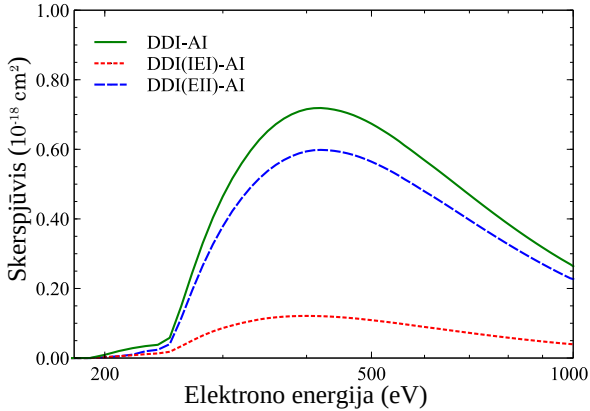


15 pav. Se^{2+} jono DI elektronais. Punktyrinė linija (raudona): DDI skerspjuviai, kai vienas iš elektronų pasiima visą perteklinę energiją; brūkšninė linija (mėlyna): IDI skerspjuviai; ištisinė linija (žalia): suminiai DI skerspjuviai; apskritimai su paklaidų ribomis: eksperimento duomenys

Trijų žingsnių DDI procesų indėlis į TI skerspjuvius pavaizduotas 16 pav. Tarp DDI-AI proceso atšakų EII procesas su vėlesne AI iš sužadintų lygmenų atlieka pagrindinį vaidmenį formuojant TI skerspjuvius, šio proceso indėlis sudaro apie 83%

DDI-AI ties skerspjūvių maksimumu, kai vienas iš elektronų sugeria visą perteklinę energiją po pradinio jonizacijos proceso.

Esant maksimaliai suminio TI skerspjūvio vertei, $3s$ ir $3p$ pasluoksnių jonizacijos įnašai sudaro atitinkamai apie 12% ir 9%. Šių procesų indėlis į suminių TI skerspjūvių didėja didėjant krentančio elektrono energijai.



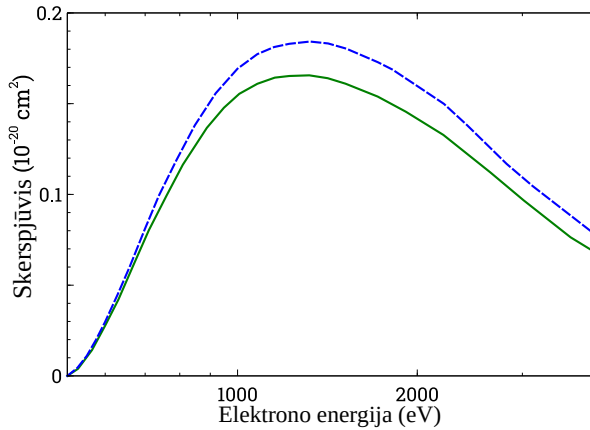
16 pav. Se^{3+} jono DDI-AI skerspjūviai.

Teorinės vertės viršija eksperimentiniu matavimus ties suminių skerspjūvių maksimumu. Eksperimentiniai duomenys šiek tiek viršija teorines reikšmes esant mažesnėms ir didesnėms krentančio elektrono energijoms. Teorinių ir eksperimentinių verčių skirtumai gali būti susiję su koreliaciniais reiškiniais, kurie gali būti svarbūs DDI procese. Vis dėlto, norint išsamiai išnagrinėti šiuos efektus, reikėtų atlikti atskirą tyrimą.

3.4.3. B^+ jonas [A3]

B^+ jono TI procesas tiriamas atsižvelgiant į DDI su vėlesne AI. Jonizacija iš B^+ jono $1s$ pasluoksnio veda į $\text{B}^{3+} 2s^2$ konfigūraciją, kuri suyra į B^{4+} . Kadangi, mūsų žiniomis, eksperimentinių TI

duomenų B^+ jonui nėra, 17 pav. pateikti tik teoriniai TI skerspjūviai.



17 pav. B^+ jonų TI elektronai (DDI-AI) skerspjūviai. Paaiškinimus žr. tekste.

Nagrinėjami du skirtingi TI skerspjūvių potencialai. Pažymėtina, kad TI skerspjūviai yra dviem eilėmis mažesni už DI skerspjūvius. Didžiausia skerspjūvių vertė yra stebima ties maždaug ~ 1300 eV. Ši vertė yra $0,18 \cdot 10^{-20} \text{ cm}^2$, jei skerspjūviai įvertinti jonizuojamo jono potencialu. Atlikus skaičiavimus jonizuojamo ir jonizuoto jonų potencialuose, gautas rezultatas yra maždaug 0,6% mažesnis, lyginant su tyrimu jonizuojamo jono potencialu. Verta pažymėti, kad norint nustatyti, kuris atvejis tiksliau apibūdina TI procesą, reikia eksperimentinių rezultatų.

Galiausiai didžiausias eksperimentinių ir teorinių verčių skirtumas pastebimas DDI skerspjūviams, esantiems žemiau $1s$ pasluoksniu jonizacijos slenksčio, o nesutapimas šiame energijos diapazone yra maždaug 50%. Panašus nesutapimo lygis nustatytas tarp teorinių skerspjūvių, suskaičiuotų esant skirtingiems

potencialams (12 pav.). Žymiai geresnis atitikimas su eksperimento duomenimis gautas energijoms, esančioms už $1s$ pasluoksniu jonizacijos slenksčio. Apskaičiuoti DI ir TI skerspjūviai skirtingiems potencialams sutampa maždaug 10% ties maksimalia skerspjūvių verte.

3.4.4. Išvados

Se^{2+} jonų atveju TI procesas pirmiausia susidaro per DDI su vėlesne AI ir Auger šuoliais, vykstančiais po elektronų smūginės jonizacijos iš $3p$ pasluoksniu. Rezultatai rodo, kad elektrono išmušimo iš vidinio sluoksniu su sekančia AI modelis vyrauja prieš Auger šuolius TI procese. Geras Se^{2+} jono TI skerspjūvių atitikimas su eksperimento duomenimis gautas darant prielaidą, kad visą perteklinę energiją po pradinės sąveikos su jonu DDI metu sugeria vienas iš elektronų. DDI-AI proceso indėlis į suminį TI skerspjūvį viršija 75%.

Se^{3+} jono atveju, sužadınimas iš $3p$ pasluoksniu, po kurio seka dviguba autojonizacija, ženkliai prisideda prie Se^{5+} jonų susidarymo. Priešingai, DC procesas, apimantis $3p$ pasluoksniu, pasižymi mažiausiu indėliu iš visų nagrinėtų procesų. Šis proceso reikšmė padidėja esant mažesnėms krintančio elektrono energijoms. Nepaisant to, teorinės vertės ir eksperimentiniai DI skerspjūvių matavimai šiame energijos intervale vis dar skiriasi. Galimi ateities eksperimentai gali padėti išspręsti šią problemą.

DDI procesas, apimantis II iš $1s$ pasluoksniu, sukuria B^{3+} jono autojonizuojančią $2s^2$ konfigūraciją, kuri vėliau pereina į B^{4+} joną. Pažymėtina, kad B^+ jono TI skerspjūviai yra maždaug dviem eilėmis mažesni už DI skerspjūvius.

4. PAGRINDINĖS IŠVADOS

DI ir TI elektronais nagrinėjama taikant kelių žingsnių metodą, pagal kurį tiesioginė DI suskirstoma į atskirus dviejų ir trijų etapų procesus (II, EII, IEI). Be to, analizuojant netiesioginę DI ir TI, tyrimas apima papildomus dviejų žingsnių procesus (EI-AI ir IE-AI). Skaičiavimams reikalingi atominiai parametrai gauti naudojant FAC [24], kuriame taikomas DFS metodas. Elektronų smūginio sužadavimo ir jonizacijos procesai tiriami taikant DW artinį.

1. DDI tyrimas rodo, kad trijų žingsnių procesai reikšmingai prisideda prie DI ir TI. Didžiausias indėlis pastebimas Se^{3+} jonų atveju, kur trijų žingsnių procesai sudaro apie 40% suminių DDI skerspjūvių netoli didžiausios jų vertės:
 - 1.1 B^+ jonų atveju II kelias dominuoja prieš IEI ir EII. Tačiau IEI ir EII procesai kartu sudaro apie 30% DDI skerspjūvių ties maksimalia jų verte. IEI indėlis yra šiek tiek didesnis, bet panašus į EII indėlį.
 - 1.2 Se^{2+} jonų atveju DDI(II)-AI procesas sudaro apie 70% visų DDI-AI skerspjūvių ties skerspjūvių maksimumu, o DDI(EII)-AI ir DDI(IEI)-AI indėlis yra mažesnis, tačiau esant mažesnėms krintančių elektronų energijoms, trijų žingsnių procesų indėlis yra didžiausias, lyginant su dviejų žingsnių procesais. Esant 200 eV energijai, DDI(EII)-AI ir DDI(IEI)-AI procesai kartu sudaro apie 60% visų DDI-AI skerspjūvių, o trijų pakopų EII procesas dominuoja prieš IEI procesą.
 - 1.3 Se^{3+} jonų atveju IEI ir EII keliai sudaro apie 40% visų skerspjūvių ties maksimalia jų verte. EII proceso vaidmuo formuojant DDI skerspjūvius taip pat ženklus - jis

sudaro apie 34% visų DDI skerspjūvių ties didžiausia verte. IEI proceso indėlis siekia 8%.

2. B⁺ jono atveju įtraukti papildomi EI-AI ir IE-AI procesai, apimantys sužadinius iš 1s pasluoksnio. Šie procesai sudaro iki 9% visų DI skerspjūvių. Papildomas šių procesų indėlis pagerina atitikimą su eksperimentiniais matavimais esant didesnėms krentančio elektrono energijoms.
3. Koreliaciniai reiškiniai sumažina teorinius B⁺ ir Se³⁺ jonų DI elektronais skerspjūvius:
 - 3.1 B⁺ jonui koreliaciniai reiškiniai padidina teorinius jonizacijos slenksčius. Viengubos jonizacijos slenkstis padidėja apie 1,6 eV, tačiau SI skerspjūviai, atsižvelgus į koreliacinius reiškinius, sumažėja tik maždaug 2%.
 - 3.2 Se³⁺ jono atveju, kai atsižvelgiama į koreliacinius reiškinius, CI iš 3p pasluoksnio su vėlesne dviguba AI prisideda prie TI skerspjūvių. Dėl to sumažėja DI skerspjūviai, kuriuos atsiranda dėl CI su ja sekancia dviguba AI iš 3p pasluoksnio ties skerspjūvių maksimumu ir aukštesnių energijų pusėje. Ties maksimumu skerspjūviai pasikeičia maždaug 9%.
4. B⁺ jonų atveju dėl pritaikytų transformavimo koeficientų teoriniai SI skerspjūviai labiau sumažėja esant energijoms, artimoms jonizacijos slenksčiui, nei esant didesnėms energijoms. Dėl šio sumažėjimo gautas geresnis sutapimas su eksperimentiniais duomenimis. Naudojant transformuotus CI ir CE skerspjūvius, DI skerspjūviai gerai sutampa su eksperimentiniais duomenimis.
5. DDI-AI procesas sudaro didžiąją dalį suminių TI skerspjūvių Se²⁺ ir Se³⁺ jonų atveju:

- 5.1 Se^{2+} jono atveju didžiausią indėlį į suminį TI skerspjūvį įneša DDI-AI procesas, sudarantis daugiau kaip 75% viso TI skerspjūvio ties skerspjūvių maksimalia verte. Be to, DDI(II)-AI procesas sudaro apie 70% visų DDI-AI skerspjūvių.
- 5.2 Se^{3+} jonų atveju DDI-AI procesas sudaro didžiąją dalį (apie 80%) TI skerspjūvių. Pagrindinis vaidmuo formuojant TI skerspjūvius tenka EII procesui, po kurio seka AI iš sužadintų lygmenų, kurio indėlis siekia apie 83% DDI-AI didžiausios vertės tuo atveju, kai vienas iš elektronų po pirmojo jonizacijos proceso pasiima visą perteklinę energiją.

5. LITERATŪRA

- [1] M. Mohan, *New Trends in Atomic and Molecular Physics*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2013 m.
- [2] K. Bartschat ir M. J. Kushner, "Electron collisions with atoms, ions, molecules, and surfaces: Fundamental science empowering advances in technology," *Proceedings of the National Academy of Sciences*, t. 113, Nr. 26, p. 7026, 2016 m.
- [3] R. K. Smith ir N. S. Brickhouse, "Chapter Four - Atomic Data Needs for Understanding X-ray Astrophysical Plasmas," *Advances in Atomic Molecular and Optical Physics*, t. 63, p. 271, 2014 m.
- [4] M. Hahn ir D. W. Savin, "Influence of Electron-Impact multiple Ionization on Equilibrium and Dynamic Charge State Distributions: a Case Study Using Iron," *The Astrophysical Journal*, t. 800, Nr. 1, p. 68, 2015 m.
- [5] E. J. H. J. Bernier ir A. Giaccia, "Radiation oncology: a century of achievements," *Nature Reviews Cancer*, t. 4, Nr. 9, p. 737, 2004 m.
- [6] Y. Zheng, D. J. Hunting, P. Ayotte ir L. Sanche, "Role of Secondary Low-Energy Electrons in the Concomitant Chemoradiation Therapy of Cancer," *Phys. Rev. Lett.*, t. 100, Nr. 19, p. 198 101, 2008 m.
- [7] O. Rigaud ir kt., "Exploring ultrashort high-energy electron-induced damage in human carcinoma cells," *Cell Death & Disease*, t. 1, e73, 2010 m.
- [8] A. Müller, "Multiple ionization and the charge state evolution of ions exposed to electron impact," *Physics Letters A*, t. 113, Nr. 8, p. 415, 1986 m.

- [9] M. C. E. Vangioni-Flam ir J. Audouze, "Lithium-beryllium-boron: origin and evolution," *Physics Reports*, t. 333-334, p. 365, 2000 m.
- [10] R. Lunsford ir kt., "Active conditioning of ASDEX Upgrade tungsten plasma-facing components and discharge enhancement through boron and boron nitride particulate injection," *Nuclear Fusion*, t. 59, 2019 m.
- [11] J. Li ir kt., "ICRF boronization - A new technique towards high efficiency wall coating for superconducting tokamak reactors," *Nuclear Fusion*, t. 39, Nr. 8, p. 973, 1999 m.
- [12] J. M. Lattimer ir D. N. Schramm, "Black-Hole-Neutron-Star Collisions," *Astrophysical Journal*, t. 192, p. L145, 1974 m.
- [13] S. Wanajo, Y. Sekiguchi, N. Nishimura, K. Kiuchi, K. Kyutoku ir M. Shibata, "Production of All the r-Process Nuclides in the Dynamical Ejecta of Neutron Star Mergers," *The Astrophysical Journal Letters*, t. 789, Nr. 2, p. L39, 2014 m.
- [14] I. U. Roederer ir kt., "New Detections of Arsenic, Selenium, and Other Heavy Elements in Two Metal-Poor Stars," *The Astrophysical Journal*, t. 791, Nr. 1, p. 32, 2014 m.
- [15] A. L. Mashburn, N. C. Sterling, S. Madonna, H. L. Dinerstein, I. U. Roederer ir T. R. Geballe, "Neutron-Capture Element Abundances in Magellanic Cloud Planetary Nebulae," *The Astrophysical Journal Letters*, t. 831, Nr. 1, p. L3, 2016 m.
- [16] N. C. Sterling ir kt., "Identification of Near-infrared Se III and Kr VI Emission Lines in Planetary Nebulae," *The Astrophysical Journal*, t. 840, Nr. 2, p. 80, 2017 m.
- [17] B. Sharpee ir kt., "s-Process Abundances in Planetary Nebulae," *The Astrophysical Journal*, t. 659, Nr. 2, p. 1265, 2007 m.

- [18] Sterling, N. C. ir Witthoef, M. C., "Atomic data for neutron-capture elements - I. Photoionization and recombination properties of low-charge selenium ions," *A&A*, t. 529, A147, 2011 m.
- [19] I. U. Roederer, "Germanium, Arsenic, And Selenium Abundances in Metal-Poor Stars," *The Astrophysical Journal*, t. 756, Nr. 1, p. 36, 2012 m.
- [20] V. Jonauskas, A. Pranciukevičius, Š. Masys ir A. Kynienė, "Electron-impact direct double ionization as a sequence of processes," *Phys. Rev. A*, t. 89, Nr. 5, p. 052 714, 2014 m.
- [21] D. H. Sampson, H. L. Zhang, A. K. Mohanty ir R. E. H. Clark, "A Dirac-Fock-Slater approach to atomic structure for highly charged ions," *Phys. Rev. A*, t. 40, Nr. 2, p. 604, 1989 m.
- [22] D. H. Sampson, H. L. Zhang ir C. J. Fontes, "A fully relativistic approach for calculating atomic data for highly charged ions," *Physics Reports*, t. 477, Nr. 4, p. 111, 2009 m.
- [23] J. C. Slater, "A Simplification of the Hartree-Fock Method," *Phys. Rev.*, t. 81, Nr. 3, p. 385, 1951 m.
- [24] M. F. Gu, "The flexible atomic code," *Canadian Journal of Physics*, t. 86, Nr. 5, p. 675, 2008 m.
- [25] I. Shavitt, "The history and evolution of configuration interaction," *Molecular Physics*, t. 94, Nr. 1, p. 3, 1998 m.
- [26] P.-O. Löwdin, "Correlation Problem in Many-Electron Quantum Mechanics I. Review of Different Approaches and Discussion of Some Current Ideas," in *Advances in Chemical Physics*. John Wiley & Sons, Ltd, 1958 m., p. 207.
- [27] R. Karazija, *Introduction to the Theory of X-Ray and Electronic Spectra of Free Atoms*. Plenum Press, New York, 1996 m.

- [28] S. Kučas, V. Jonauskas ir R. Karazija, "Global characteristics of atomic spectra and their use for the analysis of spectra. IV. Configuration interaction effects," *Physica Scripta*, t. 55, Nr. 6, p. 667, 1997 m.
- [29] P. L. Hagelstein, "Relativistic distorted-wave results for nickel-like gadolinium," *Phys. Rev. A*, t. 34, Nr. 2, p. 874, 1986 m.
- [30] Y.-K. Kim ir M. E. Rudd, "Binary-encounter-dipole model for electron-impact ionization," *Phys. Rev. A*, t. 50, Nr. 5, p. 3954, 1994 m.
- [31] Y.-K. Kim, "Scaling of plane-wave Born cross sections for electron-impact excitation of neutral atoms," *Phys. Rev. A*, t. 64, Nr. 3, p. 032 713, 2001 m.
- [32] Y.-K. Kim ir P. M. Stone, "Ionization of boron, aluminum, gallium, and indium by electron impact," *Phys. Rev. A*, t. 64, Nr. 5, p. 052 707, 2001 m.
- [33] Y.-K. Kim, "Scaling of Coulomb Born cross sections for electron-impact excitation of singly charged ions," *Phys. Rev. A*, t. 65, Nr. 2, p. 022 705, 2002 m.
- [34] Y.-K. Kim ir P. M. Stone, "Ionization of boron, aluminum, gallium, and indium by electron impact," *Phys. Rev. A*, t. 64, p. 052 707, 5 2001 m.
- [35] Y.-K. Kim ir J.-P. Desclaux, "Ionization of carbon, nitrogen, and oxygen by electron impact," *Phys. Rev. A*, t. 66, p. 012 708, 1 2002 m.
- [36] I. P. Grant, "Gauge invariance and relativistic radiative transitions," *Journal of Physics B: Atomic and Molecular Physics*, t. 7, Nr. 12, p. 1458, 1974 m.

- [37] M. Gryziński, "Classical Theory of Atomic Collisions. I. Theory of Inelastic Collisions," *Phys. Rev.*, t. 138, Nr. 2A, A336, 1965 m.
- [38] A. Kramida, Yu. Ralchenko, J. Reader ir and NIST ASD Team, NIST Atomic Spectra Database (ver. 5.10), [Online]. Available: <https://physics.nist.gov/asd>. National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD. 2022 m.
- [39] G. A. Alna'washi, N. B. Aryal, K. K. Baral, C. M. Thomas ir R. A. Phaneuf, "Electron-impact ionization of Se^{2+} ," *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, t. 47, Nr. 13, p. 135 203, 2014 m.
- [40] J. C. Berengut ir kt., "Electron-impact ionization of B^+ ," *Phys. Rev. A*, t. 78, Nr. 1, p. 012 704, 2008 m.
- [41] V. Jonauskas ir kt., "Electron-impact ionization of W^{5+} ," *Phys. Rev. A*, t. 100, Nr. 6, p. 062 701, 2019 m.
- [42] M. S. Pindzola ir S. D. Loch, "Electron-impact ionization of Se^{2+} and Se^{3+} ," *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, t. 49, Nr. 12, p. 125 202, 2016 m.
- [43] G. A. Alna'washi, K. K. Baral, N. B. Aryal, C. M. Thomas ir R. A. Phaneuf, "Electron-impact ionization of Se^{3+} ," *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, t. 47, Nr. 10, p. 105 201, 2014 m.
- [44] M. S. Pindzola, J. A. Ludlow, C. P. Ballance, F. Robicheaux ir J. Colgan, "Electron-impact double ionization of B^+ ," *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, t. 44, Nr. 10, p. 105 202, 2011 m.

- [45] V. P. Shevelko, H. Tawara, F. Scheuermann, B. Fabian, A. Müller ir E. Salzbom, "Semiempirical formulae for electron-impact double-ionization cross sections of light positive ions," *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, t. 38, Nr. 5, p. 525, 2005 m.
- [46] J. Palaudoux ir kt., "Multielectron spectroscopy: Auger decays of the Krypton 3d hole," *Phys. Rev. A*, t. 82, Nr. 4, p. 043 419, 2010 m.
- [47] V. Jonauskas, S. Kučas ir R. Karazija, "Auger decay of 3p-ionized Krypton," *Phys. Rev. A*, t. 84, Nr. 5, p. 053 415, 2011 m.

6. PUBLIKACIJOS

6.1. Straipsniai

- A1 **J. Koncevičiūtė**, S. Kučas, Š. Masys, A. Kynienė, and V. Jonauskas, "Electron-impact triple ionization of Se^{2+} ", *Phys. Rev. A.*, vol. 97, no. 1, p. 012705, January 2018
- A2 **J. Koncevičiūtė**, S. Kučas, A. Kynienė, Š. Masys, and V. Jonauskas, "Electron-impact double and triple ionization of Se^{3+} ", *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, vol. 52, no. 2, p. 025203, November 2018
- A3 **J. Koncevičiūtė**, and V. Jonauskas, "Electron-impact single, double, and triple ionization of B^+ ", *Phys. Rev. A.*, vol. 104, no. 4, p. 042804, October 2021

6.2. Pranešimai konferencijose

- C1 Lithuanian National Physics Conference. Poster presentation "Electron-impact double ionization of Se^{2+} ", Vilnius, Lithuania, 2017.
- C2 31st International Conference on Photonic, Electronic and Atomic Collisions (ICPEAC XXXI). Poster presentation "Double photoionization of He isoelectronic sequence", Deauville, France, 2019.
- C3 31st International Conference on Photonic, Electronic and Atomic Collisions (ICPEAC XXXI). Poster presentation "Radiative and Auger cascades in Fe^{3+} ", Deauville, France, 2019
- C4 31st International Conference on Photonic, Electronic and Atomic Collisions (ICPEAC XXXI). Poster presentation

"Cascade of elementary processes in Se^+ ", Deauville, France, 2019.

C5 32st International Conference on Photonic, Electronic and Atomic Collisions (ViCPEAC 2021). Poster presentation "Electron-impact double ionization of B^+ ", held in virtual format, 2021.

7. TRUMPOS ŽINIOS APIE DISERTANTĘ

Vardas, Pavardė	Jurgita Koncevičiūtė
Gimimo data	1985-03-22
Gimimo vieta	Klaipėda
El. paštas	koncevicutej@gmail.com

Išsilavinimas	
2004 - 2008	Vilniaus universitetas, ekonomikos bakalauro laipsnis
2009 - 2014	Lietuvos edukologijos universitetas, fizikos bakalauro laipsnis
2014 - 2016	Lietuvos edukologijos universitetas, fizikos magistro laipsnis
2016 - 2023	Vilniaus universitetas, Teorinės fizikos ir astronomijos institutas, fizikos doktorantūros studijos

Profesinė patirtis	
2014-09 - 2014-12	Atlikti moksliniai tyrimai pagal LMT projektą "Studentų mokslinės veiklos skatinimas"
2015-04 - 2015-10	Vilniaus universitetas, Teorinės fizikos ir astronomijos institutas, technikė
2016-03 - 2016-09	Vilniaus universitetas, Teorinės fizikos ir astronomijos institutas, technikė
2012-12 - dabar	UAB "Intersurgical", liejimo kokybės vadovė (nuo 2018-09), vyr. testavimo inžinierė (nuo 2016-05), testavimo inžinierė (nuo 2012-12)

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