

# ИНТЕРПОЛЯЦИОННАЯ ФОРМУЛА ДЛЯ ЭНЕРГИИ УРОВНЕЙ ИЗОЭЛЕКТРОННЫХ АТОМОВ И ИОНОВ С ПРОИЗВОЛЬНЫМ ЗНАЧЕНИЕМ ЗАРЯДА ЯДРА $1 \leq Z \leq 137$

Г. Л. Климчицкая и Л. Н. Лабзовский

Для энергии уровней изоэлектронных атомов и ионов хорошо известно разложение Хиллерааса по обратным степеням заряда ядра [1]

$$E = aZ^2 + bZ + c + \frac{d}{Z} + \dots \quad (1)$$

Коэффициенты  $a, b, c, d, \dots$  могут быть вычислены по теории возмущений. Формула (1) может быть использована так же как интерполяционная (экстраполяционная), так как зная уровни энергии для нескольких атомов или ионов изоэлектронного ряда, можно с ее помощью вычислить уровни для всех остальных членов ряда.

Формула (1) не учитывает релятивистских поправок, роль которых, как известно, возрастает с увеличением  $Z$ . Для устранения этого недостатка Веселовым [2] к выражению (1) был добавлен член  $\rho Z^4$ , учитывающий основные релятивистские поправки — спин-орбитальное взаимодействие и зависимость массы от скорости. В принципе к (1) можно добавить также члены, учитывающие другие релятивистские поправки

$$E = aZ^2 + bZ + c + \frac{d}{Z} + \dots + \rho (\alpha Z)^2 Z^2 + \dots + \lambda (\alpha Z)^2 Z + \nu (\alpha Z)^3 Z + \mu (\alpha Z)^3 Z \ln(\alpha Z) + \dots \quad (2)$$

Здесь член  $\lambda (\alpha Z)^2 Z$  учитывает релятивистские поправки к взаимодействию электронов, члены  $\nu (\alpha Z)^3 Z$  и  $\mu (\alpha Z)^3 Z \ln(\alpha Z)$  учитывают лэмбовский сдвиг, и т. д. Мы выделили явно зависимость от постоянной тонкой структуры  $\alpha$ . При этом в атомных единицах все коэффициенты в (2) порядка нескольких единиц.

Формула (2) написана в предположении, что релятивистские эффекты являются малыми. Это справедливо, вообще говоря, при условии  $\alpha Z \ll 1$ , т. е. для не слишком больших значений  $Z$ . Однако мы покажем, что на самом деле формула (2) может быть использована в весьма широком интервале изменения  $Z$  ( $1 \leq Z \leq 137$ ). Это объясняется тем, что с ростом  $Z$  члены с коэффициентами  $\rho, \lambda, \nu, \mu$  перестают быть малыми поправками и возникает возможность скорректировать за их счет формулу при больших значениях  $Z$ . Интерполяционная формула (2) благодаря своей простоте может оказаться полезной для различного рода оценок.

Рассмотрим в качестве примеров интерполяционные формулы для двухэлектронных конфигураций  $(1s)^2 1S$  и  $(1s2p) 1P$ . Мы ограничимся двумя порядками межэлектронного взаимодействия и не будем пока учитывать радиационных поправок. В таком приближении энергия как функция  $Z$  для этих конфигураций была вычислена в работах [3] без использования малости параметра  $\alpha Z$ , т. е. для произвольных значений  $Z$ . Для интерполяции мы используем формулу

$$E = aZ^2 + bZ + c + \rho (\alpha Z)^2 Z^2 + \lambda (\alpha Z)^2 Z. \quad (3)$$

При  $\alpha Z \ll 1$  все коэффициенты в (3) известны: например, для конфигурации  $(1s)^2 1S$ :  $a = -1$ ,  $b = 5/8$ ,  $c = -0.15744$  [4],  $\rho = -0.25$ ,  $\lambda = 0.48$  [5]. При произвольных значениях  $Z$  коэффициенты можно подобрать по методу наименьших квадратов, используя результаты работ [3]. Удобнее, однако, положить коэффициенты  $a, b, c$  равными их предельным значениям при  $\alpha Z \ll 1$ . Тогда три ведущих члена в (3) при малых значениях  $Z$  будут иметь правильные коэффициенты. После  $Z = 100$  на величину поправок к энергии начинает заметно влиять конечность размеров ядра. Поэтому мы будем считать концом промежутка интерполяции  $Z = 100$ , хотя в принципе формулу можно использовать вплоть до  $Z = 137$ . Для коэффициентов  $\rho$  и  $\lambda$  метод наименьших квадратов для конфигурации  $(1s)^2 1S$  дает:  $\rho = -0.28$ ,  $\lambda = -1.04$ . Отметим близость коэффициента  $\rho$  к его предельному значению.

Сравним теперь результаты точного расчета [3] с результатами расчета по интерполяционной формуле (3). На рис. 1 по оси ординат отложена величина  $-E/Z^2$  в атомных единицах. Сплошные линии — точный расчет, штриховые линии — аппроксимация по формулам

$$-\frac{E[(1s)^2 1S]}{Z^2} = 1 - \frac{0.625}{Z} + \frac{0.157}{Z^2} - 0.328 (\alpha Z)^2 + \frac{0.890}{Z} (\alpha Z)^2, \quad (4)$$

$$-\frac{E[(1s2p) 1P]}{Z^2} = 0.625 - \frac{0.260}{Z} + \frac{0.157}{Z^2} + 0.169 (\alpha Z)^2 + \frac{0.027}{Z} (\alpha Z)^2. \quad (5)$$

Штрих-пунктирная линия построена по формуле (3), но с коэффициентами, экстраполированными от нерелятивистского предела  $\alpha Z \ll 1$ . Как видно из рисунка, относи-

тельная погрешность формул (4), (5) нигде не превышает 2%. Экстраполяционная кривая также весьма хорошо совпадает с точной: ее погрешность достигает 5% лишь при  $Z=100$ .

Рассмотрим теперь отдельно лэмбовский сдвиг. При малых значениях  $Z$  его одноэлектронная часть в низшем порядке по константе связи  $\alpha$  дается формулой (в атомных единицах)

$$\Delta E_L = \nu (\alpha Z)^3 Z + \mu (\alpha Z)^3 Z \ln(\alpha Z). \quad (6)$$

Для  $1s_{1/2}$ -состояния значения коэффициентов  $\nu$ ,  $\mu$  равны [4, 6]

$$\nu = \frac{4}{3\pi} \left( \frac{19}{30} - \ln 19.77 \right) = -1.00, \quad (7)$$

$$\mu = -\frac{8}{3\pi} = -0.85. \quad (8)$$

Вычисление  $\Delta E_L$  для произвольных значений  $Z$  является сложной задачей. Однако в работе [7] вычислены значения  $\Delta E_L(1s_{1/2})$  для  $Z=70, 75, 80, 85, 90$ .

Это позволяет построить для  $\Delta E_L$  интерполяционную формулу на основе формулы (6)

$$\Delta E_L = \nu (\alpha Z)^3 Z + \mu (\alpha Z)^3 Z \ln(\alpha Z) + \kappa (\alpha Z)^5 Z + \sigma (\alpha Z)^5 Z \ln(\alpha Z), \quad (9)$$

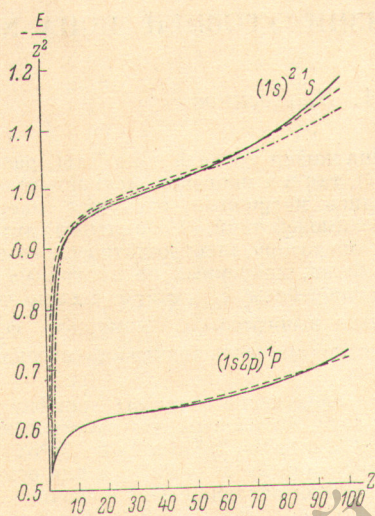


Рис. 1.

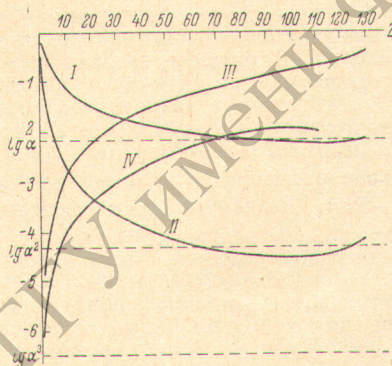


Рис. 2.

где члены с коэффициентами  $\kappa$ ,  $\sigma$  исчезающе малы в пределе  $\alpha Z \ll 1$ . Определение коэффициентов в (9) произведем следующим образом. Коэффициенты  $\nu$ ,  $\mu$  положим равными их предельным значениям при  $\alpha Z \ll 1$ . Остальные коэффициенты подбираем по методу наименьших квадратов, используя результаты работы [7] для участка  $Z=70-90$ . В результате получаем следующую интерполяционную формулу:

$$\Delta E_L = -1.00 (\alpha Z)^3 Z - 0.85 (\alpha Z)^3 Z \ln(\alpha Z) + 1.30 (\alpha Z)^5 Z - 3.10 (\alpha Z)^5 Z \ln(\alpha Z). \quad (10)$$

Оценим теперь с помощью формулы (10) относительную роль поправки  $\Delta E_L$  при различных значениях  $Z$ . Для этого построим следующую диаграмму (рис. 2). По оси абсцисс будем откладывать заряд  $Z$ , по оси ординат — величины  $\lg |\Delta E_i/\Delta E_0|$ , где  $\Delta E_0$  — суммарная энергия связи двух не взаимодействующих электронов в атоме,  $\Delta E_i$  — различные поправки к энергии. Кривые I и II на диаграмме соответствуют поправкам первого и второго порядков теории возмущений по кулоновскому взаимодействию электронов, вычисленным в [3] на дираковских функциях для конфигурации  $(1s)^2 1S$ . Кривая III — сумма одноэлектронных релятивистских поправок для двух электронов, в данном случае учитывающих лишь зависимость массы от скорости (спин-орбитальное взаимодействие для рассматриваемой конфигурации отсутствует). Наконец, кривая IV — лэмбовский сдвиг, построенный по интерполяционной формуле (10). Как видно из диаграммы, уже при  $Z=25$  лэмбовский сдвиг превосходит по величине поправку второго порядка по кулоновскому взаимодействию, а при  $Z=70$  становится сравнимым с кулоновской поправкой первого порядка.

Авторы благодарят М. Г. Веселова за обсуждение работы.

#### Литература

- [1] E. Hylleraas. Zs. Phys., 65, 209, 1930.  
 [2] М. Г. Веселов. ЖЭТФ, 24, 65, 1953; М. Г. Веселов, И. М. Антонова, В. Ф. Братцев, И. В. Кириллова. Опт. и спектр., 10,

693, 1961; М. Г. Веселов, И. В. Кириллова, В. Ф. Братцев. Опт. и спектр., 15, 145, 1963; М. Г. Веселов, Т. Н. Рекашева. Опт. и спектр., 24, 3, 1968; 25, 633, 1968.

- [3] Г. Л. Климчицкая, Л. Н. Лабзовский. ЖЭТФ, 60, 2019, 1971; Опт. и спектр., 34, 608, 1972.
- [4] Г. Бете, Э. Солпитер. Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами. Физматгиз, М., 1960.
- [5] У. И. Сафронова. Опт. и спектр., 28, 1050, 1970.
- [6] А. И. Ахизер, В. Б. Берестецкий. Квантовая электродинамика. Физматгиз, М., 1969.
- [7] А. М. Desiderio, W. R. Johnson. Phys. Rev., 3, 1267, 1971.

Поступило в Редакцию 26 апреля 1972 г.

УДК 539.184

## РАДИАЦИОННЫЕ ВРЕМЕНА ЖИЗНИ УРОВНЕЙ ИОНА Na II

П. Ф. Груздев и А. В. Логинов

В работе приводятся радиационные времена жизни уровней иона NaII, рассчитанные при промежуточной связи как в одно- (ОК), так и в многоконфигурационном (МК) приближениях. В матрицу энергии включались матричные элементы операторов электростатического и спин-орбитального взаимодействий. Радиальные интегралы  $F^k$ ,  $G^k$ ,  $R^k$ , входящие в матричные элементы оператора электростатического взаимодействия, рассчитаны на функциях Хартри—Фока, найденных по программе Богдановича и Каразия [1]. Интегралы  $\xi_{nl}$  (за исключением  $\xi_{2p}$ ), ответственные за спин-орбитальное расщепление уровней, также были вычислены с помощью функций Хартри—Фока. Величины  $\xi_{2p}$  и не зависящая от терма часть электростатической энергии определялись полуэмпирически.

В схему МК расчетов были включены следующие группы конфигураций:  $2p^5ms + 2p^5nd$  и  $2p^5np + 2p^54f$  ( $n=3 \div 5$ ,  $m=3 \div 6$ ). Оказалось, что заметное наложение испытывают только пары конфигураций:  $2p^53d$  и  $2p^54s$ ,  $2p^54d$  и  $2p^55s$ ,  $2p^55d$  и  $2p^56s$ . Например, для состояния  $^3P_0$  «чистота» конфигурации  $2p^53s \sim 99\%$ , а для остальных конфигураций  $2p^5ns$  ( $n=4 \div 6$ ) весовые соотношения основной и поправочной конфигураций следующие:  $2p^54s \sim 0.89$   $2p^54s + 0.11$   $2p^53d$ ,  $2p^55s \sim 0.55$   $2p^55s + 0.45$   $2p^54d$ ,  $2p^56s \sim 0.62$   $2p^56s + 0.38$   $2p^55d$ . Примесь остальных конфигураций в этих случаях незначительна. Аналогичная картина наблюдается и для состояний  $^3P_1$ ,  $^3P_2$ ,  $^1P_1$  в указанных парах конфигураций.

Результат расчета времен жизни (в нсек.) уровней конфигураций  $2p^5ms$ ,  $2p^5np$ ,  $2p^5nd$  ( $m=3 \div 6$ ,  $n=3 \div 5$ ) в спектре иона NaII, вычисленные в ОК ( $\tau_{OK}$ , столбцы 2, 5, 8) и МК ( $\tau_{МК}$ , столбцы 3, 6, 9) приближениях, представлены в таблице. Обозначения уровней (столбцы 1, 4, 7) взяты из таблиц Мур [2]. Времена жизни уровней вычислялись через вероятности переходов. Интегралы переходов, необходимые при вычислении вероятностей переходов, определялись на функциях Хартри—Фока. Из таблицы видно, что заметное расхождение между  $\tau_{OK}$  и  $\tau_{МК}$  наблюдается только для тех состояний, для которых имеет место значительное наложение конфигураций, т. е. для состояний  $^3P_1$ ,  $^1P_1$ ,  $^3P_0$ ,  $^3P_2$  конфигураций  $2p^5ms$  ( $m=4 \div 6$ ) и  $2p^5nd$  ( $n=3 \div 5$ ). Конфигурации  $2p^5np$  не испытывают заметного перемешивания, тем не менее для ряда состояний конфигураций  $2p^54p$  и  $2p^55p$  наблюдаются значительные расхождения между  $\tau_{OK}$  и  $\tau_{МК}$ . Причину этого расхождения следует искать в наложении конфигураций  $2p^5ms$  и  $2p^5nd$ , поскольку силы линий перехода  $2p^5ms + 2p^5nd - 2p^6 + 2p^5np + 2p^54f$ , с помощью которых находятся вероятности переходов (а следовательно, и времена жизни), зависят от перемешивания состояний обеих групп конфигураций. Сопоставление наших расчетных величин  $\tau$  с другими литературными данными можно провести только для конфигурации  $2p^53p$ . Экспериментальные измерения  $\tau_{эксп.}$  уровней конфигурации  $2p^53p$  были выполнены в работе Карре, Галларда и Субтила [3] методом лучевой фольговой техники. В этой работе получены следующие значения  $\tau_{эксп.}$  (в нсек.): 7 ( $3p_{10}$ ), 6.1 ( $3p_9$ ), 4.2 ( $3p_8$ ), 4.8 ( $3p_7$ ), 5.3 ( $3p_6$ ), 4.3 ( $3p_5$ ), 3.8 ( $3p_4$ ), 4.9 ( $3p_3$ ), 4.2 ( $3p_2$ ), 2.6 ( $3p_1$ ). Легко видеть (см. таблицу), что как  $\tau_{OK}$ , так и  $\tau_{МК}$  близки к этим  $\tau_{эксп.}$ . Расчетные значения  $\tau$  для уровней конфигурации  $2p^53p$  приведены в работе Гранде [4]. В этой работе наложение конфигураций учитывалось введением эффективных параметров. Наши расчетные значения  $\tau_{OK}$  и  $\tau_{МК}$  для уровней этой конфигурации хорошо согласуются с данными работы [4].

Ранее [5] были приведены значения сил осцилляторов резонансных линий в спектре иона NaII. Значения сил осцилляторов, вычисленные в многоконфигурационном при-