

ВЫЧИСЛЕНИЕ ВЕРОЯТНОСТЕЙ ПЕРЕХОДОВ МЕЖДУ КОНФИГУРАЦИЯМИ $3p^5ns-3p^54p$ Ag I ИЗ ГИРОМАГНИТНЫХ ОТНОШЕНИЙ

Г. П. Анисимова, Р. И. Семёнов

Вероятности переходов между конфигурациями $3p^5ns-3p^54p$ Ag I вычислены в приближении промежуточной связи. Коэффициенты промежуточной связи конфигурации $3p^54p$ получены из гиромагнитных отношений. Проводится сравнение вычисленных вероятностей с вероятностями, полученными из экспериментов и вычисленными теоретически из тонкой структуры.

Существует много способов для вычисления вероятностей переходов в приближении промежуточной связи. Для того чтобы вычислить вероятности переходов в этом приближении, необходимо знать набор коэффициентов связи α_{ik} , который дает преобразование от какого-либо векторного типа связи к промежуточной. Этот набор может быть найден из интервалов энергии тонкой структуры, относительных сил линий, g -факторов, времен жизни и т. д. В настоящей работе была сделана попытка показать, что вероятности переходов, вычисленные из гиромагнитных отношений, находятся в удовлетворительном согласии с экспериментальными данными. Коэффициенты связи для конфигурации $3p^54p$ вычислялись в одноконфигурационном приближении методом итераций по стандартной программе на ЭВМ [1]. В качестве нулевых приближений были взяты коэффициенты связи, полученные из интервалов энергии тонкой структуры по методу Шоргли. Параметры электростатических и спин-орбитальных взаимодействий взяты из работы Гарстанга [2]. В табл. 1 приведены значения коэффициентов связи, вычисленных из гиромагнитных отношений. Для сравнения здесь же приведены коэффициенты связи, полученные из интервалов энергии тонкой структуры, и вычисленные из них гиромагнитные отношения. Видно, что g -факторы, вычисленные из тонкой структуры, не всегда совпадают с экспериментальными. Это свидетельствует о том, что недостаточно хороша та модель, которая применялась при расчете тонкой структуры.

Следует отметить, что коэффициенты связи, полученные из гиромагнитных отношений и относительных сил линий, совпадают между собой лучше, чем с вычисленными из тонкой структуры для конфигураций sl [3]. Кроме того, в работе Мелхорна [4] было показано, что вероятности переходов, полученные по методу наименьших квадратов из тонкой структуры и g -факторов одновременно, дают лучшее согласие с экспериментом. Поэтому можно ожидать, что вероятности переходов, вычисленные из гиромагнитных отношений, должны давать лучшее согласие с экспериментом, чем те, которые вычислены обычным методом из тонкой структуры.

Что касается конфигураций $3p^5ns$, то для них коэффициенты связи вычислены из интервалов энергии тонкой структуры, так как для конфигурации $3p^54s$ они дают гиромагнитные отношения, хорошо совпадающие с экспериментальными, для конфигурации $3p^55s$ экспериментальные

Таблица 1

Коэффициенты связи для конфигурации $3p^5 4p$

		3D_2	1D_2	3P_2	3D_1	3P_1	1P_1	3S_1	3P_0	1S_0	$g_{\text{выч.}}$	$g_{\text{эксп.}}$	$g_{\text{эксп. норм.}}$
${}^3\bar{D}_2$	{ 1	0.771	-0.621	0.139							1.108	} 1.112	1.109
	{ 2	0.806	-0.575	0.137							1.117		
${}^1\bar{D}_2$	{ 1	0.325	0.572	0.753							1.301	} 1.305	1.302
	{ 2	0.307	0.608	0.732							1.284		
${}^3\bar{P}_2$	{ 1	-0.547	-0.536	0.643							1.257	} 1.260	1.257
	{ 2	-0.506	-0.548	0.666							1.265		
3S_1	{ 1				0.089	0.178	0.055	0.982			1.983	} 1.985	1.977
	{ 2				0.004	0.170	0.108	0.980			1.976		
${}^3\bar{D}_1$	{ 1				0.725	0.405	-0.542	-0.121			0.832	} 0.838	0.835
	{ 2				0.754	0.380	-0.536	-0.026			0.789		
${}^1\bar{P}_1$	{ 1				0.669	-0.302	0.681	-0.035			0.826	} 0.819	0.816
	{ 2				0.656	-0.417	0.626	0.001			0.867		
${}^3\bar{P}_1$	{ 1				-0.132	0.844	0.495	-0.154			1.369	} 1.380	1.374
	{ 2				-0.022	0.805	0.558	-0.200			1.365		
3P_0	2								0.904	-0.427			
1S_0	2								0.427	0.904			

Примечание. 1 — вычислено из g , 2 — вычислено из тонкой структуры.

Таблица 2
Коэффициенты связи для конфигураций $3p^{5ns}$

Конфигурация	3P_1	1P_1	$g_{\text{выч.}}$	$g_{\text{эксп.}}$	
$3p^54s$	$3\bar{P}_1$	0.893	-0.449	1.399	1.404
	$1\bar{P}_1$	0.449	0.893	1.100	1.102
$3p^55s$	$3\bar{P}_1$	0.659	-0.752	1.217	—
	$1\bar{P}_1$	0.752	0.659	1.283	—
$3p^56s$	$3\bar{P}_1$	0.618	-0.786	1.191	1.184
	$1\bar{P}_1$	0.786	0.618	1.309	$\Sigma_g \frac{1.271}{2.455}$
$3p^57s$	$3\bar{P}_1$	0.589	-0.808	1.174	1.164
	$1\bar{P}_1$	0.808	0.589	1.327	$\Sigma_g \frac{1.296}{2.460}$

Таблица 3
Значения σ^2 , полученные для переходов между конфигурациями $3p^54p - 3p^5ns$, ат. ед.

$3p^54s - 3p^54p$	$3p^54p - 3p^55s$	$3p^54p - 3p^56s$	$3p^54p - 3p^57s$
9.15	6.97	0.385	0.108

Таблица 4
Вероятности электрических дипольных переходов между конфигурациями $3p^54p - 3p^5ns$, вычисленные из гироманнитных отношений (сек. $^{-1} \cdot 10^6$)

Переход	$3p^54p - 3p^55s$		$3p^54p - 3p^56s$		$3p^54p - 3p^57s$		
	из тонкой структуры	Мёрфи [°]	из g	из тонкой структуры	из g	из тонкой структуры	из g
$ns_5 - 2p_{10}$	4.914	4.958	5.156	1.250	1.310	0.572	0.600
$ns_5 - 2p_9$	10.144	10.288	—	3.140	—	1.499	—
$ns_5 - 2p_8$	1.866	1.925	1.750	0.592	0.555	0.284	0.266
$ns_5 - 2p_7$	0.422	0.465	0.285	0.146	0.100	0.071	0.049
$ns_5 - 2p_6$	3.311	3.327	3.543	1.176	1.259	0.577	0.618
$ns_5 - 2p_4$	0.053	0.059	0.021	0.023	0.011	0.012	0.006
$ns_5 - 2p_3$	0.348	0.365	0.264	0.156	0.119	0.080	0.061
$ns_5 - 2p_2$	0.243	0.250	0.295	0.114	0.141	0.059	0.073
$ns_4 - 2p_{10}$	1.940	1.972	1.234	0.434	0.276	0.185	0.115
$ns_4 - 2p_8$	8.742	8.782	9.027	2.602	2.706	1.219	1.277
$ns_4 - 2p_7$	4.492	4.453	4.882	1.438	1.557	0.681	0.736
$ns_4 - 2p_6$	2.615	2.718	2.320	0.937	0.829	0.473	0.419
$ns_4 - 2p_5$	1.128	1.145	—	0.427	—	0.206	—
$ns_4 - 2p_4$	0.422	0.446	0.380	0.204	0.192	0.114	0.109
$ns_4 - 2p_3$	0.053	0.049	0.084	0.006	0.012	0.000	0.002
$ns_4 - 2p_2$	0.021	0.026	0.032	0.023	0.023	0.018	0.016
$ns_4 - 2p_1$	0.084	0.092	—	0.070	—	0.044	—
$ns_3 - 2p_{10}$	2.657	2.909	4.197	0.609	0.961	0.269	0.424
$ns_3 - 2p_7$	3.016	3.385	1.909	0.886	0.562	0.414	0.262
$ns_3 - 2p_4$	9.722	10.606	7.983	3.399	2.791	1.643	1.349
$ns_3 - 2p_2$	4.714	5.057	6.380	1.766	2.390	0.865	1.171
$ns_2 - 2p_{10}$	1.508	1.564	1.413	0.369	0.337	0.176	0.159
$ns_2 - 2p_8$	0.169	0.210	0.032	0.097	0.036	0.064	0.031
$ns_2 - 2p_7$	0.264	0.283	0.401	0.120	0.163	0.073	0.096
$ns_2 - 2p_6$	1.656	1.676	1.455	0.381	0.337	0.154	0.136
$ns_2 - 2p_5$	0.369	0.383	—	0.146	—	0.080	—
$ns_2 - 2p_4$	2.246	2.251	3.100	0.665	0.930	0.302	0.427
$ns_2 - 2p_3$	9.459	9.578	9.670	3.098	3.173	1.490	1.529
$ns_2 - 2p_2$	3.301	3.361	2.468	1.093	0.816	0.522	0.390
$ns_2 - 2p_1$	0.970	0.979	—	0.400	—	0.196	—

g -факторы отсутствуют, а для конфигураций $3p^{56s}$ и $3p^{57s}$ не выполняется правило g -сумм (табл. 2).

Зная коэффициенты связи, можно подсчитать относительные силы линий по формуле: $S_{ij}^{\text{отн.}} = D_{ij}^2$, где D_{ij} — угловая часть матричного элемента перехода. Вероятности переходов связаны с относительными силами линий следующим выражением:

$$A_{ij} = \frac{2.026 \cdot 10^{-6}}{2J+1} v_{ij}^3 \sigma^2 S_{ij}^{\text{отн.}},$$

где v_{ij} — расстояние между уровнями в обратных сантиметрах, $2J+1$ — статистический вес верхнего уровня, σ^2 — радиальная часть.

Радиальная часть считалась по методу Бейтса и Дамгаард [5]. Получены следующие значения σ^2 (табл. 3).

В табл. 4 даны вероятности электрических дипольных переходов между конфигурациями $3p^{55s}-3p^{54p}$, $3p^{56s}-3p^{54p}$ и $3p^{57s}-3p^{54p}$. Для сравнения приведены вероятности переходов, вычисленные из тонкой структуры. В табл. 5 даны вероятности переходов между конфигурациями $3p^{54s}-3p^{54p}$, полученные из тонкой структуры, гиромангнитных отношений и экспериментальных данных. Согласие с экспериментом удовлетворительное.

Таблица 5
Вероятности электрических дипольных переходов между конфигурациями $3p^{54s}-3p^{54p}$ (сек. $\cdot 10^7$)

Переход	Настоящая работа		[7]	[7]	[8]	[9]	[10]	[11]
	из g	из тонкой структуры						
$1s_5-2p_{10}$	1.807	1.722	1.74	2.29	2.19	1.67	—	—
$1s_4-2p_{10}$	0.328	0.467	0.47	0.645	0.596	0.46	—	—
$1s_3-2p_{10}$	0.135	0.086	0.088	0.126	0.114	0.085	—	—
$1s_2-2p_{10}$	0.023	0.017	0.018	0.027	0.021	0.017	—	—
$1s_5-2p_9$	—	3.466	3.51	3.95	—	3.33	2.22	2.22
$1s_5-2p_8$	0.920	0.981	1.00	1.04	—	0.97	0.796	0.93
$1s_4-2p_8$	2.051	2.085	2.11	2.52	—	2.04	1.94	1.67
$1s_2-2p_8$	0.161	0.106	0.107	0.174	0.162	0.094	—	—
$1s_5-2p_7$	0.343	0.498	0.55	0.618	—	0.53	—	0.99
$1s_4-2p_7$	2.848	2.561	2.56	2.99	—	2.42	2.68	2.43
$1s_3-2p_7$	0.203	0.319	0.32	0.302	—	0.32	—	—
$1s_2-2p_7$	0.053	0.066	0.064	0.124	0.127	0.060	—	—
$1s_5-2p_6$	2.764	2.582	2.62	2.96	—	2.48	2.03	2.50
$1s_4-2p_6$	0.421	0.474	0.48	0.505	—	0.49	0.51	—
$1s_2-2p_6$	0.517	0.585	0.59	0.633	0.706	0.57	—	—
$1s_4-2p_5$	—	4.360	4.42	4.64	—	4.23	3.62	4.80
$1s_2-2p_5$	—	0.002	0.002	0.0001	—	0.0019	—	—
$1s_5-2p_4$	0.059	0.129	0.13	0.071	—	0.14	—	—
$1s_4-2p_4$	0.004	0.036	0.036	0.003	—	0.040	—	—
$1s_3-2p_4$	1.616	1.968	2.00	2.12	—	1.91	1.47	2.18
$1s_2-2p_4$	1.651	1.288	1.31	1.59	—	1.25	1.06	—
$1s_5-2p_3$	0.423	0.552	0.57	0.427	—	0.55	—	—
$1s_4-2p_3$	1.014	0.901	0.91	0.938	—	0.86	0.868	1.07
$1s_2-2p_3$	2.177	2.177	2.21	2.64	—	2.12	1.99	1.88
$1s_5-2p_2$	0.913	0.740	0.89	0.728	—	0.73	0.531	—
$1s_4-2p_2$	0.090	0.193	0.19	0.216	—	0.19	—	—
$1s_3-2p_2$	1.634	1.206	1.22	1.37	—	1.14	—	1.31
$1s_2-2p_2$	1.318	1.726	1.75	1.81	—	1.70	1.55	1.54
$1s_4-2p_1$	—	0.004	0.004	0.026	—	0.0046	—	—
$1s_2-2p_1$	—	4.380	4.44	5.10	—	4.30	4.32	5.50

Для конфигурации $3p^{55p}$ g -факторы измерены с малой точностью (два знака после запятой), а для конфигурации $3p^{56p}$ они отсутствуют вообще. Поэтому для этих конфигураций мы ограничились только вычислением коэффициентов связи из тонкой структуры. В табл. 6 приведены значения коэффициентов связи для этих конфигураций и вычисленные из них гиромангнитные отношения.

Таблица 6

Коэффициенты связи для конфигураций $3p^{55}p$ и $3p^{56}p$

	3D_2	1D_2	3P_2	3D_1	3P_1	1P_1	3S_1	3P_0	1S_0	$g_{\text{внч.}}$	$g_{\text{эксн.}}$
$^3\bar{D}_2$	0.732	-0.652	0.199							1.109	1.09
$^3\bar{P}_2$	0.189	0.470	0.862							1.378	1.42
$^1\bar{D}_2$	-0.655	-0.596	0.465							1.180	1.18
3S_1				0.008	0.344	0.224	0.912			1.892	1.90
1P_1				-0.486	-0.499	0.718	0.021			1.007	1.01
$^3\bar{D}_1$				-0.871	0.218	-0.440	0.032			0.644	0.61
$^3\bar{P}_1$				0.078	-0.766	-0.491	0.408			1.457	1.45
$^3\bar{P}_0$								0.738	-0.674		
1S_0								0.674	0.738		
$^3\bar{D}_2$	0.718	-0.647	0.256							1.149	
$^3\bar{P}_2$	0.139	0.484	0.864							1.377	
$^1\bar{D}_2$	-0.684	-0.589	0.429							1.170	
3S_1				0.013	0.426	0.268	0.864			1.839	
1P_1				-0.437	-0.503	0.745	0.034			1.032	
$^3\bar{D}_1$				-0.884	0.122	-0.442	0.090			0.620	
$^3\bar{P}_1$				0.165	-0.740	-0.426	0.494			1.505	
$^3\bar{P}_0$								0.659	-0.752		
1S_0								0.752	0.659		

Литература

- [1] Г. П. Анисимова, В. Д. Галкина, Р. И. Семенов. *Опт. и спектр.*, 30, 164, 1971.
- [2] R. H. Garstang, J. Van Blerkom. *J. Opt. Soc. Am.*, 55, 1054, 1965.
- [3] Р. И. Семенов, Б. А. Стругач. *Опт. и спектр.*, 18, 756, 1965.
- [4] R. Mehlhorn. *J. Opt. Soc. Am.*, 59, 1453, 1969.
- [5] B. R. Bates, A. Damgaard. *Phil. Trans. Roy. Soc.*, A242, 101, 1950.
- [6] P. W. Murphy. *J. Opt. Soc. Am.*, 58, 1200, 1968.
- [7] J. B. Shumaker, С. Н. Попеное. *J. Opt. Soc. Am.*, 57, 8, 1967.
- [8] W. L. Wiese, J. M. Bridges, K. L. Kornblith, D. E. Kellerher. *J. Opt. Soc. Am.*, 59, 1206, 1969.
- [9] P. D. Johnston. *Proc. Phys. Soc. (L)*, 92, 896, 1967.
- [10] B. D. Adcock, W. E. Plumtree. *J. Quant. Spectr. Rad. Transf.*, 4, 29, 1964.
- [11] H. N. Olsen. *J. Quant. Spectr. Rad. Transf.*, 3, 59, 1963.

Поступило в Редакцию 1 июня 1972 г.