

ПЕРЕХОДЫ В МНОГОЗАРЯДНЫХ БЕРИЛЛИЕВО-ПОДОВНЫХ ИОНАХ

Э. Я. Кононов, К. Н. Кошелев и Л. И. Подобедова

Предложен метод полуэмпирической экстраполяции переходов типа $2s^2 2p^n - 2s 2p^{n+1}$. Метод основан на извлечении радиальных интегралов спин-орбитального взаимодействия и кулоновских энергий из экспериментального энергетического спектра с последующей экстраполяцией вдоль изоэлектронной последовательности. С помощью данного метода проведена экстраполяция энергий уровней конфигураций $2s^2$ и $2s 2p$ в последовательности Be I вплоть до Fe XXIII. Получены значения длин волн запрещенного перехода $2s^2 1S_0 - 2s 2p 3P_1^0$, представляющего астрофизический интерес.

При исследовании спектров многозарядных бериллиево-подобных ионов в солнечной короне и лабораторной плазме особое внимание уделяется отождествлению запрещенных переходов между основным состоянием $2s^2 1S_0$ и уровнями $3P_1^0$ и $3P_2^0$ метастабильного термина $3P^0$ первой возбужденной конфигурации $2s 2p$. Это обусловлено в первую очередь тем, что измерение длин волн этих переходов устанавливает точную связь между системами триплетных и синглетных состояний. Во-вторых, измеренное отношение интенсивностей разрешенного $2s^2 1S_0 - 2s 2p 1P_1^0$ и запрещенного переходов $2s^2 1S_0 - 2s 2p 3P_1^0$ или $2s^2 1S_0 - 2s 2p 3P_2^0$ служит для определения электронной плотности исследуемой плазмы [1].

К сожалению, из-за незначительной интенсивности интеркомбинационных линий в спектрах лабораторной плазмы длина волны перехода $1S_0 - 3P_1^0$ была измерена только для Be-подобного иона Ne VII [2]. Переход $1S_0 - 3P_2^0$ — магнитно-квадрупольный, и его вероятность еще ниже. Однако в условиях низкой плотности солнечной короны этот запрещенный переход имеет сравнимую с разрешенным интенсивность, и оба эти перехода могут наблюдаться одновременно. Так, в спектре солнечной короны интеркомбинационные переходы обнаружены для ионов C III (1909 Å), N IV (1487 Å), O V (1218 Å), Ne VII (895.2 Å) и Si XI (580.8 Å) [3]. Данные по всем другим членам изоэлектронной последовательности отсутствуют, в частности и по таким астрофизически обильным элементам, как сера и кальций.

Отождествление этих переходов проводилось обычно на основании различного типа экстраполяций вдоль изоэлектронной последовательности. Совершенно очевидно, что часто используемая экстраполяция методом разностей не может быть применена при столь малом количестве экспериментальных данных, да и надежность ее результатов абсолютно недостаточна для продвижения больше чем на один—два члена изоэлектронной последовательности. Длины волн, полученные с помощью хорошо известной методики Эдлена [4], гораздо более надежны. Однако и в этом случае для иона Si XI разность между предсказанным и экспериментальным значениями составляла 0.8 Å и, естественно, должна возрасти для более высоких членов ряда. Столь большое рассогласование затрудняет отождествление линий в спектре солнечной короны и может быть совершенно неприемлемым при исследовании лабораторной плазмы, спектр которой содержит множество тесно расположенных линий.

В этой связи мы предприняли попытку более точной экстраполяции энергии запрещенных переходов. В основе предложенной нами методики лежит тот факт, что параметры различного типа взаимодействий (кулоновского, спин-орбитального и т. д.), входящие в выражение для энергии, изменяются вдоль изоэлектронного ряда более гладко, чем длины волн или энергии переходов, наблюдаемые в спектрах. Это можно показать на примере изменения энергии уровня $2s2p^3P_1^0$ вдоль ряда. Для первых членов последовательности энергия этого уровня определяется в основном кулоновским взаимодействием электронов и лишь малой добавкой релятивистских эффектов и поэтому растет так, как растет энергия этого взаимодействия ($\sim Z$). Для больших Z значителен вклад спин-орбитального взаимодействия ($\sim Z^4$), входящий в выражение для энергии с противоположным знаком. Для еще более высоких членов ряда значительна добавка из-за взаимодействия уровня 3P_1 с уровнем $^1P_1^0$ той же конфигурации ($\sim Z^7$). Столь сложный характер поведения, конечно, затрудняет прямую экстраполяцию энергии перехода.

В использованной нами процедуре мы принимали, что основной вклад в энергии переходов вносят электростатическое взаимодействие электронов и взаимодействие спин—своя орбита. Добавки, обусловленные остальными взаимодействиями, как показал опыт, эффективно учитываются в использованных нами параметрах и не вносят существенных расхождений.

Таблица 1
Положения нерасщепленных термов и радиальный интеграл ξ_{2p}
конфигурации $2s2p$ (см^{-1})

	N IV	O V	Ne VII	Si XI	Ti XIX
ξ_{2p}	143	306	989	5098	39358
H_{2p}	67342	82234	112193	174793	327704
H_{1p}	130695	158797	214947	329624	586900

Первый этап процедуры заключается в извлечении из экспериментальных данных положения нерасщепленных термов H_{LS} и величины спин-орбитального интеграла ξ_{2p} . Заметим, что положение термов H_{LS} совпадает с центром тяжести терма лишь в отсутствие отклонений от связи LS , т. е. при малых добавках из-за перемешивания уровней с равным J , принадлежащих различным термам. В табл. 1 приведены положения нерасщепленных термов и величина ξ_{2p} конфигурации $2s2p$ для некоторых членов последовательности. На втором этапе проведена экстраполяция полученных значений вдоль изоэлектронного ряда. При этом использовался тот факт, что добавка к энергии терма из-за кулоновского взаимодействия электронов может быть разложена в полином по убывающим степеням Z , начиная с первой степени $BZ+C+D/Z+\dots$. Для радиального интеграла спин-орбитального взаимодействия это разложение имеет вид $\alpha Z^4+\beta Z^3+\gamma Z^2+\dots$, причем в обоих случаях основной вклад дают первые два—три члена. Мы ограничились тремя членами разложения. В тех случаях, когда использовалось более трех экспериментальных точек (т. е. более трех членов изоэлектронного ряда), подбор коэффициентов разложения проводился по методу наименьших квадратов. На последнем этапе по экстраполированным значениям H_{LS} и ξ_{2p} для каждого иона вычислялись энергии уровней, как собственные значения матрицы $\{W_{ik}\}$, где $W_{ik}=H_{LS}\delta_{ik}+V_{ik}$ (V_{ik} — матричный элемент спин-орбитального взаимодействия, выраженный с помощью угловых коэффициентов через ξ_{2p} ; δ_{ik} — символ Кронекера). Опыт показал, что точность расчета улучшается при учете общего сдвига терма из-за релятивистских эффектов, что и было сделано по данным [5].

Результаты

Для оценки точности экстраполяции мы получили значение длины волны уже упомянутого перехода $^1S_0 - ^3P_1^0$ в спектре Si XI. При этом использовались солнечные данные по энергиям этого перехода в N IV, O V и Ne VII. Вычисленная для Si XI длина волны составляла 580.65 \AA ; это лишь на 0.2 \AA отличается от измеренного значения 580.85 \AA . В последующих расчетах мы использовали экспериментальные данные и для Si XI. В табл. 2 приведены известные по литературе и вычисленные нами

Таблица 2

Результаты экстраполяции и экспериментальные данные ($\lambda, \text{ \AA}$)

Ион	$^1S_0 - ^3P_1^0$		$^1S_0 - ^1P_1^0$		
	измерения	экстраполяция	измерения	экстраполяция	
N IV *	1486.57	—	765.148	—	—
O V *	1218.30	—	629.732	—	—
F VI	—	1031.82	535.204	535.180	0.024
Ne VII *	895.30	—	465.221	—	—
Na VIII	—	789.90	411.145	411.211	-0.066
Mg IX	—	706.27	368.071	368.103	-0.032
Al X	—	637.987	332.78	332.807	-0.027
Si XI *	580.85	—	303.30	—	—
P XII	—	532.711	278.26	278.28	-0.02
S XIII	—	491.101	256.66	256.63	0.03
Cl XIV	—	454.84	237.70	237.69	0.01

* Экспериментальные данные по этим ионам использованы для экстраполяции.

длины волн переходов $^1S_0 - ^3P_1^0$ и $^1S_0 - ^1P_1^0$ (использованы данные по спектрам N IV, O V, Ne VII и Si XI). Отметим, что резонансный переход измерен для всех членов последовательности вплоть до Cl XIV и ошибка экстраполяции этого перехода может служить мерой точности предсказания положения запрещенного перехода $^1S_0 - ^3P_1^0$. В табл. 3 приведены данные по тем же переходам, полученные на основании экспериментальных данных о положении уровня $2s2p^1P_1^0$ для ионов Al X, Si XI, P XII, S XIII, Cl XIV и Ti XIX [8-11]. В табл. 4 приведены энергии конфигура-

Таблица 3

Результаты экстраполяции ($\lambda, \text{ \AA}$)

Ион	$^1S_0 - ^1P_1^0$	$^1S_0 - ^3P_1^0$	Ион	$^1S_0 - ^1P_1^0$	$^1S_0 - ^3P_1^0$
Ar XV	221.13	423.61	V XX	159.36	308.95
K XVI	206.26	395.61	Mn XXI	149.89	291.95
Ca XVII	192.86	370.55	Cr XXII	141.09	276.37
Sc XVIII	180.71	347.99	Fe XXIII	132.88	262.04
Ti XIX	169.59	327.55			

Таблица 4

Экстраполированные энергии уровней конфигурации $2s2p$ (см⁻¹)

Терм I	Ar XV	K XVI	Ca XVII	Sc XVIII	Ti XIX	V XX	Mn XXI	Cr XXII	Fe XXIII	
$3p^0$	0	228605	243416	258304	273284	288375	303586	318932	334426	350075
	1	236064	252776	269866	287362	305293	323675	342520	361839	381627
	2	252791	274235	297032	324350	347369	375270	405245	437497	472229
$1p^0$	1	452232	484823	518484	553371	589654	627515	667146	708753	752558

ции $2s2p$. Значения расщеплений термина ${}^3P^0$ дадут возможность отождествления перехода ${}^1S_0 - {}^3P^0_2$, а также мультиплета $2s2p^3P^0 - 2p^2{}^3P$. Заметим, что надежность наших данных падает с удалением от экспериментальных точек. Особенно это относится к положению интеркомбинационного перехода ${}^1S_0 - {}^3P^0_1$. Тонкое расщепление термина ${}^3P^0$ предсказано более надежно, так как на основании экстраполяции нам удалось отождествить мультиплет $2s2p^3P^0 - 2p^2{}^3P$ в спектре Ti XIX [6].

Вероятности переходов

Как известно, переход ${}^2S_0 - {}^3P^0_1$ разрешен за счет перемешивания уровней ${}^1P^0_1$ и ${}^3P^0_1$, конфигурации $2s2p$ при учете спин-орбитального взаимодействия. Поэтому одновременно с собственными числами матрицы $\{W_{ik}\}$ — энергиями уровней, мы получили и собственные векторы этой матрицы, т. е. коэффициенты перемешивания. Это дает возможность вычислить вероятность интеркомбинационного перехода ${}^1S_0 - {}^3P^0_1$, если известна вероятность резонансного перехода ${}^1S_0 - {}^1P^0_1$. Вероятности разрешенного перехода были получены в работе [7] методом теории возмущений с учетом взаимодействия конфигураций $1s^22s^2$ и $1s^22p^2$. Эти значения приведены в табл. 5. Там же приводится величина вклада уровня ${}^1P^0_1$ в волновую функцию (состояния ${}^3P^0_1$) и вероятности интеркомбинационного перехода ${}^1S_0 - {}^3P^0_1$, рассчитанные нами. Вероятность такого перехода растет $\sim Z^7$ вдоль изоэлектронного ряда.

Таблица 5
Вероятности переходов

Ион	Коэффициент перемешивания, % ${}^1P^0_1$ и ${}^3P^0_1$	Вероятность переходов		Ион	Коэффициент перемешивания, % ${}^1P^0_1$ и ${}^3P^0_1$	Вероятность переходов	
		разрешенный, 10^{10} сек. $^{-1}$	запрещенный, сек. $^{-1}$			разрешенный, 10^{10} сек. $^{-1}$	запрещенный, сек. $^{-1}$
N IV	0.46	0.330	$0.76 \cdot 10^3$	Cl XIV	4.41	1.23	$0.23 \cdot 10^7$
O V	0.28	0.420	$0.30 \cdot 10^4$	Ar XV	5.28	1.34	$0.35 \cdot 10^7$
F VI	0.45	0.500	$0.95 \cdot 10^4$	K XVI	6.28	1.44	$0.53 \cdot 10^7$
Ne VII	0.68	0.580	$0.25 \cdot 10^5$	Ca XVII	7.37	1.55	$0.79 \cdot 10^7$
Na VIII	0.97	0.670	$0.60 \cdot 10^5$	Sc XVIII	8.56	1.68	$0.12 \cdot 10^8$
Mg IX	1.34	0.760	$1.30 \cdot 10^5$	Ti XIX	9.85	1.81	$0.16 \cdot 10^8$
Al X	1.80	0.840	$0.26 \cdot 10^6$	V XX	11.24	1.95	$0.23 \cdot 10^8$
Si XI	2.32	0.940	$0.48 \cdot 10^6$	Cr XXI	12.70	2.10	$0.31 \cdot 10^8$
P XII	2.91	1.030	$0.84 \cdot 10^6$	Mn XXII	14.26	2.27	$0.42 \cdot 10^8$
S XIII	3.61	1.130	$0.14 \cdot 10^7$	Fe XXIII	15.88	2.44	$0.55 \cdot 10^8$

Заключение

Как показано выше, надежные данные об астрофизически важных переходах в многократно ионизованных атомах могут быть получены путем усовершенствования процедуры полуэмпирических расчетов. При этом существен тщательный учет быстро растущих вдоль изоэлектронной последовательности релятивистских эффектов. Расчет показал, что вероятность интеркомбинационного перехода $2s^2 {}^1S_0 - 2s2p^3P^0_1$ в случае железа Fe XXIII является достаточно большой величиной и можно ожидать, что эта линия будет обнаружена в лабораторной плазме.

Литература

- [1] A. H. Gabriel, C. Jordan. Case Studies in Atomic Collision Physics. 2, North Holland, 1972.
- [2] G. Tondello, T. M. Paget. J. Phys., B3, 1757, 1970.
- [3] W. M. Burton, A. Ridgeley. Solar Phys., 14, 3, 1970.
- [4] B. Edlen. Handbuch der Physik, 27, 80, 1964.

- [5] У. И. Сафронова. Опт. и спектр., 28, 1050, 1970.
- [6] Ю. С. Касьянов, Э. Я. Кононов, В. В. Коробкин, К. Н. Кошелев, А. Н. Рябцев, Р. В. Серов, Е. В. Скокан. Опт. и спектр., 36, 8, 1974.
- [7] У. И. Сафронова, А. Н. Иванова, В. Н. Харитонова. Теор. и exper. химия, 5, 325, 1969.
- [8] Э. Я. Кононов, К. Н. Кошелев, А. Н. Рябцев. Опт. и спектр., 30, 996, 1971.
- [9] Л. И. Подобедова, Э. Я. Кононов, К. Н. Кошелев. Опт. и спектр., 30, 394, 1971.
- [10] Ю. С. Касьянов, Э. Я. Кононов, В. В. Коробкин, К. Н. Кошелев, Р. В. Серов. Опт. и спектр., 35, 1005, 1973.
- [11] В. С. Fawcett. Preprint, ARU-R2, 1971.

Поступило в Редакцию 2 февраля 1973 г.

РЕПОЗИТОРИЙ ГГУ имени Ф. Скорини