

РЕЛЯТИВИСТСКИЕ РАСЧЕТЫ ВЕРОЯТНОСТЕЙ ПЕРЕХОДОВ В ДВУХЭЛЕКТРОННЫХ МНОГОЗАРЯДНЫХ ИОНАХ

Г. Л. Климчицкая, У. И. Сафронова и Л. Н. Лабзовский

Предложена схема полностью релятивистского расчета вероятностей переходов между уровнями многозарядных ионов. Используются дираковские волновые функции для электронов, а также релятивистский оператор взаимодействия с электромагнитным полем. Произведены расчеты вероятностей переходов между уровнями основной ($1s^2$) и возбужденной ($1s2s+1s2p$) конфигураций двухэлектронных ионов при всех значениях заряда ядра Z в интервале $1 \leq Z \leq 100$. Расчеты производятся в приближении невзаимодействующих электронов по схеме jj -связи. В тех случаях, когда это необходимо для получения правильного LS -предела, используется промежуточная схема связи, т. е. учитывается смешивание волновых функций различных jj -термов в первом порядке теории возмущений по кулоновскому взаимодействию.

Релятивистская теория спектров многозарядных ионов (т. е. таких, для которых $Z \gg N$, где Z — заряд ядра, N — число электронов) в последнее время привлекает интерес в связи с экспериментальным обнаружением таких ионов как при астрономических наблюдениях на Солнце [1], так и в лабораторных плазменных установках [2, 3]. Теория спектров атомов и ионов с различными значениями заряда ядра Z при учете релятивистских поправок порядка $(\alpha Z)^2$ (α — постоянная тонкой структуры) рассматривалась в ряде работ, например в [4]. При достаточно больших значениях Z параметр αZ перестает быть малым и целесообразно применять теорию, не использующую разложений по αZ . Такая теория для двухэлектронных ($N=2$) ионов была рассмотрена в [5], где были рассчитаны поправки термов конфигурации $1s2s+1s2p$ при всех значениях Z в интервале $1 \leq Z \leq 100$. В настоящей работе мы произведем полностью релятивистский расчет вероятностей переходов между уровнями основной ($1s^2$) и возбужденной $1s2s+1s2p$ конфигураций в том же интервале значений Z .

Общая схема расчета такова. Для описания одноэлектронных состояний используются дираковские волновые функции ψ_{njlm} . Для описания двухэлектронных состояний используется схема jj -связи. Строятся собственные функции полного момента и его проекции. Однако в LS -пределе волновые функции различных jj -состояний перемешиваются. Поэтому, чтобы построить термы при всех значениях Z , мы должны перейти к промежуточной схеме связи и строить собственные функции JM в виде линейных комбинаций функций $\psi_{JM}(jj'LL')$, где смешиваются лишь функции одинаковой четности. Релятивистская теория S -матрицы в ее обычной форме не приспособлена для смешивания конфигураций. Поэтому в данной задаче мы поступим следующим образом. Для определения коэффициентов смешивания используем обычную шредингеровскую теорию с гамильтонианом, учитывающим только кулоновское взаимодействие, и выполним обычную квантовомеханическую процедуру смешивания конфигураций. При малых значениях Z , где эффект смешивания jj -состояний значителен, магнитное и запаздывающее взаимодействия, отброшенные

нами, малы по сравнению с кулоновским членом. При больших же значениях Z , где все взаимодействия одного порядка, энергии смешиваемых jj -состояний существенно различны и сам эффект смешивания мал (порядка $1/Z$).

Для вычисления вероятностей переходов через S -матрицу мы используем формулу

$$\left. \begin{aligned} W_{ab} &= 2\pi |\langle b | M | a \rangle|^2, \\ \langle b | S | a \rangle &= -2\pi i \langle b | M | a \rangle \delta(E_a^0 - E_b^0). \end{aligned} \right\} \quad (1)$$

При вычислении матричных элементов S -матрицы мы используем точный релятивистский оператор взаимодействия с электромагнитным полем без разложения по αZ [6]. Результаты расчета вероятностей всевозможных переходов между термами основной $(1s)^2$ и возбужденной $1s2s+1s2p$ конфигураций при всех значениях Z в интервале $1 \leq Z \leq 100$ приведены на рис. 1. По оси ординат отложена величина $\lg W$, где W — вероятность перехода в единицах $\hbar=c=m=1$. Из числа всех переходов только три (${}^1P_1 \rightarrow {}^1S_0^{(0)}$, ${}^3P_2 \rightarrow {}^3S_1$ и ${}^1P_1 \rightarrow {}^1S_0$) разрешены в нерелятивистском пределе (через ${}^1S_0^{(0)}$ мы обозначаем терм основной конфигурации). Остальные переходы запрещены правилами отбора либо по азимутальному квантовому числу, либо по спиновому, либо по тому и другому вместе. Тем не менее некоторые из таких переходов, например ${}^3P_2 \rightarrow {}^1S_0^{(0)}$, мы можем вычислять и в пределе малых Z , так как в наших формулах учтены релятивистские эффекты, снимающие запрет. Далее, часть переходов оказывается запрещена в релятивистском пределе (большие Z), так как частота ω_{12} в нулевом приближении оказывается равной нулю, а вероятность пропорциональна частоте. Это относится, например, к переходам ${}^3P_0 \rightarrow {}^3S_1$, ${}^3P_1 \rightarrow {}^3S_1$. Действительно, записывая уровни в терминах jj -связи ${}^3P_0 \sim [1s_{1/2}, 2p_{1/2}]_0$, ${}^3P_1 \sim [1s_{1/2}, 2p_{1/2}]_1$, ${}^3S_1 \sim [1s_{1/2}, 2s_{1/2}]_1$ и учитывая $E_{2p_{1/2}}^0 = E_{2s_{1/2}}^0$, получаем для этих переходов $\omega_{12} = 0$. Этот запрет снимается при учете либо межэлектронного взаимодействия, либо лэмбовского сдвига, либо при двухквантовом переходе. При больших Z все эти эффекты порядка α или Z^{-1} . Некоторые из таких переходов в нашем приближении все же оказываются отличными от нуля благодаря смешиванию конфигураций: например, ${}^3P_1 \rightarrow {}^3S_1$. Дело в том, что к терму ${}^3P_1 \sim [1s_{1/2}, 2p_{1/2}]_1$ мы примешиваем терм ${}^1P_1 \sim [1s_{1/2}, 2p_{3/2}]_1$; благодаря этой примеси наш результат и оказывается отличным от нуля. Примесь дает поправку $\sim 1/Z$ при больших значениях Z . Надо, однако, отметить, что погрешность нашего расчета для такого перехода увеличивается с ростом Z : при $\alpha Z \sim 1$ нужно учитывать не одну конфигурацию, а весь второй порядок теории возмущений, и не только кулоновское, а полное взаимодействие в недиагональных матричных элементах. Далее, в нашем приближении

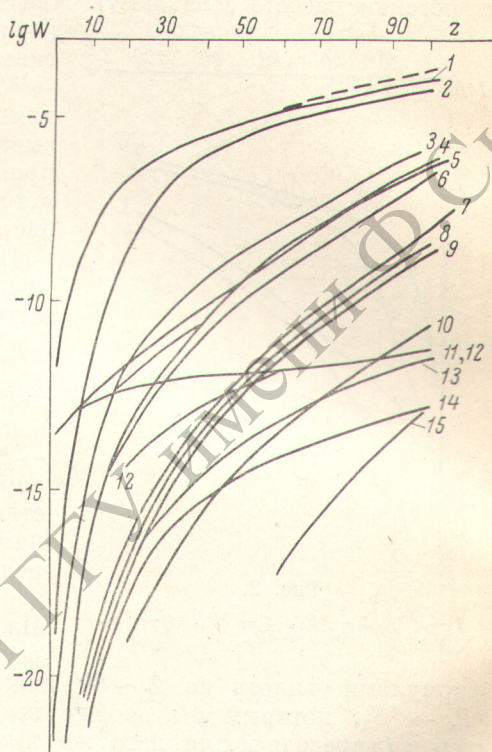


Рис. 1.

1 — ${}^1P_1 \rightarrow {}^1S_0^{(0)}$, 2 — ${}^3P_1 \rightarrow {}^1S_0^{(0)}$, 3 — ${}^3P_2 \rightarrow {}^3S_1$,
 4 — ${}^3P_2 \rightarrow {}^1S_0^{(0)}$, 5 — ${}^3S_1 \rightarrow {}^1S_0^{(0)}$, 6 — ${}^1P_1 \rightarrow {}^1S_0$, 7 —
 ${}^1P_1 \rightarrow {}^3S_1$, 8 — ${}^1P_1 \rightarrow {}^3P_1 = {}^3P_2$, 9 — ${}^1P_1 \rightarrow {}^3P_0$,
 10 — ${}^3P_2 \rightarrow {}^3P_0$, 11 — ${}^3P_1 \rightarrow {}^1S_0$, 12 — ${}^3P_1 \rightarrow {}^3S_1$,
 13 — ${}^1P_1 \rightarrow {}^3P_2$, 14 — ${}^3P_1 \rightarrow {}^3P_0$, 15 — ${}^3P_2 \rightarrow {}^3P_0$.

во многих случаях получается ложный «запрет» в нерелятивистском пределе, связанный с обращением в нуль частоты ω_{12} . Это происходит для разрешенных в нерелятивистском пределе переходов между термами возбужденной конфигурации, так как в нулевом приближении, т. е. без учета электронного взаимодействия, все термы вырождены по энергии. Поэтому мы в таких случаях в пределе малых Z используем нерелятивистские формулы для вероятностей переходов [7, 8] и сшиваем их с релятивистскими формулами при промежуточных значениях Z . Выясним теперь, до каких значений Z сохраняется пригодность нерелятивистских формул. На рис. 1 штриховой линией нанесены результаты расчета по нерелятивистским формулам при всех значениях Z для переходов ${}^1P_1 \rightarrow {}^1S_0^{(0)}$, ${}^3P_{2,1,0} \rightarrow {}^3S_1$ (вероятности трех последних переходов в нерелятивистском расчете совпадают). Как видно из рис. 1, нерелятивистский

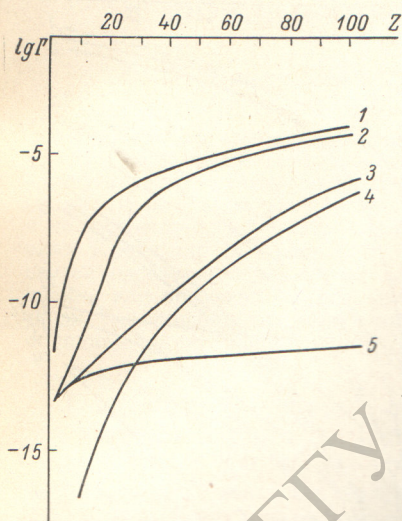


Рис. 2.

1 — 1P_1 , 2 — 3P_2 , 3 — 3P_1 , 4 — 3P_0 , 5 — 3S_1 .

расчет мало расходится с релятивистским для переходов ${}^1P_1 \rightarrow {}^1S_0^{(0)}$, ${}^3P_1 \rightarrow {}^3S_1$ вплоть до $Z \sim 80$. Вместе с тем для перехода ${}^3P_2 \rightarrow {}^3S_1$ различие оказывается резким и проявляется уже при $Z \sim 15$. Причина расхождения в том, что в последнем случае разность энергий уровней ${}^3P_2 \sim [1s_{1/2}2p_{3/2}]_2$ и ${}^3S_1 \sim [1s_{1/2}2s_{1/2}]_1$ определяется квантовым числом l , чего не может отразить нерелятивистская формула. Напротив, в случае перехода ${}^1P_1 \sim [1s_{1/2}2p_{3/2}]_1 \rightarrow {}^1S_0^{(0)} \sim [1s_{1/2}1s_{1/2}]_0$ разность энергий определяется главным квантовым числом, а в случае перехода ${}^3P_0 \sim [1s_{1/2}2p_{1/2}]_0 \rightarrow {}^3S_1 \sim [1s_{1/2}2s_{1/2}]_1$ разность энергий определяется кулоновским взаимодействием электронов, т. е. теми причинами, которые поддаются учету в нерелятивистской теории и отражены в соответствующих формулах [7, 8]. Из сказанного следует, что мы можем воспользоваться нерелятивистскими формулами вплоть до $Z \sim 80$ для вычисления вероятности перехода ${}^3P_0 \rightarrow {}^3S_1$, который мы вообще не можем иначе рассчитать (он запрещен в LS -пределе и для него же имеет место ложный «запрет» в LS -пределе). Наконец, имеется ряд переходов, которые мы в нашем приближении вообще не можем рассчитать. Это, например, переход ${}^1S_0 \rightarrow {}^3S_1$, трудности при расчете которого те же, что и для перехода ${}^3P_0 \rightarrow {}^3S_1$. Однако этот переход действительно запрещен в нерелятивистском пределе, так что мы не можем здесь воспользоваться нерелятивистскими формулами. Кроме того, для ряда переходов имеет место точный (одно-квантовый) $0-0$ запрет по полному моменту J . Правда, недоступные для наших расчетов переходы имеют самые малые вероятности, так что мы можем утверждать, что соответствующие им кривые должны располагаться в самой нижней части рис. 1.

Наконец, суммируя вероятности переходов, мы можем вычислить радиационные ширины возбужденных уровней. Эти ширины (также в логарифмическом масштабе и в релятивистских единицах) приведены на рис. 2. При расчете учтены пересечения термов. Ширина уровня 3P_0 определяется в основном переходом ${}^3P_0 \rightarrow {}^3S_1$ и может быть вычислена по нашему методу только в нерелятивистском приближении. Согласно сказанному выше, такой расчет должен быть справедлив вплоть до $Z \sim 80$. Отметим, что уровень 3P_0 — единственный, ширина которого растет относительно медленно с ростом Z : при $Z \sim 80$ $\Gamma({}^3P_0)$ увеличивается всего в 10^2 раз по сравнению с $Z \sim 1$, тогда как $\Gamma({}^1P_1)$ увеличивается в 10^8 раз, а $\Gamma({}^3S_1)$ — в 10^{20} раз.

Литература

- [1] С. Л. Манделъштам. Вестн. АН СССР, № 9, 26, 1972.
- [2] Л. И. Подобедова, Э. Я. Кононов, К. Н. Кошелев. Опт. и спектр., 30, 394, 1971.
- [3] Э. Я. Кононов, К. Н. Кошелев, А. Н. Рябцев. Опт. и спектр., 30, 996, 1971.
- [4] У. И. Сафронова, В. Н. Харитонова. Опт. и спектр., 28, 1070, 1970.
- [5] Г. Л. Климчицкая, Л. Н. Лабзовский. Опт. и спектр., 34, 633, 1973.
- [6] А. И. Ахизер, В. Б. Берестецкий. Квантовая электродинамика. Физматгиз, М., 1969.
- [7] И. И. Собельман. Введение в теорию атомных спектров. Физматгиз, М., 1963.
- [8] У. И. Сафронова, В. Н. Харитонова, А. Н. Иванова. Опт. и спектр., 28, 585, 1970.

Поступило в Редакцию 15 ноября 1973 г.
