

РАДИАЦИОННЫЕ ВРЕМЕНА ЖИЗНИ
УРОВНЕЙ АТОМА Кг I

П. Ф. Груздев и А. В. Логинов

Приведены результаты вычислений (в одно- и многоконфигурационном приближении) радиационных времен жизни большого числа уровней атома криптона. Расчетные значения времен жизни сравниваются с имеющимися экспериментальными данными.

Ранее [1, 2] нами был выполнен расчет радиационных времен жизни возбужденных состояний атомов и ионов изоэлектронных рядов неона (Ne I, Na II, Mg III) [1] и аргона (Ar I, K II, Ca III) [2]. Представляет интерес применить тот же метод расчета к вычислению радиационных времен жизни уровней более сложного атома этой же группы элементов — криптона. Имеющиеся в литературе к настоящему времени сведения о временах жизни уровней атома криптона очень малочисленны. Поэтому теоретическая оценка этих величин для Кг I представляется нам весьма полезной.

В основе метода расчета, как и в предыдущих работах [1, 2], лежит схема промежуточной связи с учетом наложения конфигураций. Для конфигураций $4p^5ns$ ($n=5\div 8$), $4p^5nd$ ($n=4\div 6$) и $4p^5np$ ($n=5\div 7$) + $4p^54f$ атома криптона были получены энергетические матрицы, включающие в себя электростатическую и спин-орбитальную энергии. Почти все необходимые для построения энергетической матрицы радиальные интегралы рассчитаны на функциях Хартри—Фока (ХФ), полученных по программе [3], и только при нахождении параметров, определяющих положение центров тяжести конфигураций, а также при нахождении спин-орбитального параметра ζ_{4p} были использованы экспериментальные уровни энергии, взятые из таблиц Мур [4]. Также на функциях ХФ по формулам длины, скорости диполя и их геометрического среднего рассчитаны радиальные интегралы перехода. Поскольку метод расчета ранее [1, 2] подробно обсуждался, то перейдем непосредственно к результатам вычислений.

В таблице приведены времена жизни, рассчитанные как в многоконфигурационном (МП), так и в одноконфигурационном (ОП) приближениях. Обозначения уровней (по Пашену); порядок их расположения совпадает с принятым в таблицах Мур [4]. Времена жизни, рассчитанные в ОП ($\tau_{оп}$), получены с интегралами перехода, вычисленными по формулам длины (τ_r) и скорости (τ_v) диполя, а также с их геометрическим средним (τ_{rv}). Числа τ_r и τ_v , представленные в таблице, отличаются друг от друга в ряде случаев значительно. Эти расхождения обусловлены различием в интегралах переходов, вычисленных по формулам длины и скорости диполя, что в свою очередь указывает на недостаточность радиальных функций ХФ для атома криптона. Некоторая компенсация этого различия достигается использованием интегралов переходов с геометрическим средним. При расчетах в МП ($\tau_{мп}$) использовано только геометрическое среднее, поэтому для выяснения влияния наложения конфигураций на времена жизни следует сравнивать τ_{rv} и $\tau_{мп}$.

Времена жизни уровней атома K_gI (в псек.)

| Уровни | τ _{ОП} | | | τ _{МП} | Уровни | τ _{ОП} | | | τ _{МП} |
|--------------------|-----------------|-----------------|----------------|-----------------|--------------------|-----------------|-----------------|----------------|-----------------|
| | τ _r | τ _{rp} | τ _p | | | τ _r | τ _{rp} | τ _p | |
| 1s ₄ | 3.38 | 3.79 | 4.26 | 3.61 | 4s _{1'''} | 528 | 522 | 476 | 420 |
| 1s ₂ | 3.22 | 3.61 | 4.06 | 3.45 | 4s _{1''} | 596 | 588 | 538 | 553 |
| 2p ₁₀ | 27.4 | 35.5 | 46.0 | 29.7 | 4s _{1'} | 624 | 625 | 579 | 512 |
| 2p ₉ | 20.7 | 26.8 | 34.7 | 25.9 | 4s ₁ | 1.70 | 1.83 | 1.97 | 1.35 |
| 2p ₈ | 23.8 | 30.9 | 40.1 | 29.5 | 3s ₅ | 82.2 | 92.0 | 103 | 89.4 |
| 2p ₇ | 20.9 | 27.1 | 35.1 | 29.7 | 3s ₄ | 17.4 | 20.3 | 23.7 | 10.1 |
| 2p ₆ | 18.1 | 23.4 | 30.3 | 26.3 | 3s ₃ | 81.4 | 91.0 | 102 | 87.4 |
| 2p ₅ | 16.8 | 21.8 | 28.3 | 18.9 | 3s ₂ | 25.0 | 29.1 | 33.7 | |
| 2p ₄ | 21.6 | 28.0 | 36.4 | 28.8 | 4X ₁ | 23.8 | 30.1 | 37.9 | 37.3 |
| 2p ₂ | 21.2 | 27.5 | 35.6 | 26.9 | 4Z ₂ | 34.2 | 43.1 | 54.2 | 42.0 |
| 2p ₃ | 19.3 | 25.0 | 32.4 | 28.6 | 4V ₄ | 30.8 | 38.9 | 48.9 | 40.5 |
| 2p ₁ | 17.2 | 22.3 | 28.9 | 19.0 | 4V ₅ | 27.4 | 34.6 | 43.6 | 39.3 |
| 3d ₆ | 124 | 108 | 94.6 | 118 | 4T ₃ | 30.8 | 38.9 | 48.9 | 41.0 |
| 3d ₅ | 37.5 | 37.3 | 36.8 | 44.5 | 4Y ₂ | 41.2 | 51.9 | 65.2 | 44.5 |
| 3d ₄ | 125 | 109 | 95.2 | 114 | 4W ₃ | 35.7 | 45.0 | 56.6 | 42.8 |
| 3d ₃ | 113 | 98.4 | 85.8 | 100 | 4W ₄ | 36.5 | 46.0 | 57.8 | 43.3 |
| 3d ₃ | 114 | 99.6 | 86.9 | 116 | 4V ₃ | 28.9 | 36.5 | 46.1 | 40.3 |
| 3d ₂ | 1.23 | 1.30 | 1.38 | 1.87 | 4S ₂ | 39.0 | 49.7 | 62.9 | 43.9 |
| 3d ₁ | 103 | 90.1 | 78.6 | 89.8 | 4S ₃ | 29.5 | 37.3 | 47.0 | 40.3 |
| 3d ₁ | 102 | 88.6 | 77.2 | 87.9 | 4V ₄ | 31.9 | 40.2 | 50.6 | 41.3 |
| 3s _{1'''} | 104 | 90.8 | 79.2 | 98.0 | 4p ₁₀ | 173 | 206 | 242 | 299 |
| 3s _{1''} | 111 | 96.5 | 84.1 | 101 | 4p ₉ | 175 | 207 | 243 | 246 |
| 3s _{1'} | 111 | 97.0 | 84.5 | 102 | 4p ₈ | 198 | 234 | 274 | 251 |
| 3s ₁ | 0.84 | 0.89 | 0.95 | | 4p ₇ | 221 | 261 | 305 | 218 |
| 2s ₅ | 41.9 | 47.3 | 53.3 | 47.5 | 4p ₆ | 185 | 248 | 256 | 243 |
| 2s ₄ | 7.75 | 9.04 | 10.5 | 17.7 | 4p ₅ | 262 | 304 | 349 | |
| 2s ₃ | 41.5 | 46.8 | 52.8 | 52.6 | 4p ₄ | 185 | 218 | 255 | 242 |
| 2s ₂ | 10.6 | 12.3 | 14.4 | | 4p ₂ | 184 | 216 | 252 | 220 |
| 3p ₁₀ | 84.6 | 104 | 127 | 122 | 4p ₃ | 171 | 201 | 234 | 215 |
| 3p ₉ | 80.6 | 98.4 | 119 | 107 | 4p ₁ | 184 | 211 | 238 | |
| 3p ₈ | 91.1 | 111 | 135 | 117 | 5d ₆ | 556 | 669 | 786 | 425 |
| 3p ₇ | 95.1 | 115 | 139 | 109 | 5d ₅ | 129 | 143 | 157 | 172 |
| 3p ₆ | 79.8 | 96.8 | 117 | 99.7 | 5d ₄ | 569 | 669 | 762 | 686 |
| 3p ₅ | 92.5 | 111 | 131 | 54.1 | 5d ₄ | 544 | 628 | 699 | 619 |
| 3p ₄ | 86.8 | 106 | 128 | 113 | 5d ₃ | 555 | 646 | 726 | 425 |
| 3p ₂ | 84.4 | 103 | 124 | 105 | 5d ₂ | 2.91 | 3.15 | 3.41 | 2.37 |
| 3p ₃ | 80.2 | 97.3 | 117 | 108 | 5d _{1'} | 540 | 609 | 659 | 536 |
| 3p ₁ | 83.2 | 99.3 | 117 | 52.7 | 5d _{1''} | 533 | 597 | 640 | 551 |
| 4d ₆ | 806 | 873 | 870 | 203 | 5s _{1'''} | 514 | 578 | 624 | 382 |
| 4d ₅ | 86.3 | 92.7 | 98.6 | | 5s _{1''} | 542 | 618 | 677 | 603 |
| 4d ₄ | 739 | 760 | 723 | 515 | 5s _{1'} | 544 | 628 | 698 | 612 |
| 4d ₄ | 639 | 635 | 586 | 467 | 5s ₁ | 3.57 | 3.86 | 4.17 | 1.05 |
| 4d ₃ | 674 | 678 | 633 | 310 | 4s ₅ | 151 | 167 | 185 | 106 |
| 4d ₂ | 1.81 | 1.95 | 2.09 | 1.68 | 4s ₄ | 33.2 | 38.8 | 45.4 | 15.2 |
| 4d ₁ | 564 | 540 | 484 | 471 | 4s ₃ | 150 | 166 | 183 | 97.4 |
| 4d ₁ | 542 | 514 | 457 | 528 | 4s ₂ | 48.5 | 56.3 | 65.3 | |

Результат диагонализации матриц энергии показал, что для конфигурации 4p⁵4f наложение составляет доли процента, для конфигураций 4p⁵np — несколько процентов, а для конфигураций 4p⁵ns, 4p⁵nd оно достигает десятков процентов, увеличиваясь по мере возбуждения. Поэтому и максимального отличия τ_{МП} от τ_{rp} следует ожидать для высоковозбужденных уровней конфигураций 4p⁵ns, 4p⁵nd, особенно для состояний с J=1. Примерно такую ситуацию мы и наблюдаем в таблице. Для конфигурации 4p⁵4f τ_{rp} и τ_{МП} различаются очень мало, в то время как для некоторых уровней конфигураций 4p⁵8s, 4p⁵6d τ_{rp} и τ_{МП} различаются в несколько раз. Конфигурации 4p⁵np занимают в этом смысле промежуточное положение, хотя для 4p⁵7p различие τ_{rp} и τ_{МП} также очень велико. Здесь следует отметить, что на времена жизни уровней конфигураций 4p⁵np влияет наложение конфигураций 4p⁵ns+4p⁵nd, поскольку при расчете вероятностей переходов существенны коэффициенты наложе-

ния в обеих группах конфигураций. Этим можно объяснить столь большое различие τ_{rr} и $\tau_{мп}$ для некоторых уровней конфигурации $4p^57p$. Кроме того, следует иметь в виду, что при вычислении вероятностей переходов метод промежуточной связи может давать большую погрешность, поскольку искомая величина представляется в виде суммы большого числа слагаемых, причем каждое из слагаемых вносит некую погрешность. При учете наложения конфигураций число слагаемых увеличивается, что приводит к росту погрешности, которая может замаскировать влияние собственно наложения. Это особенно существенно для малых значений вероятностей переходов (больших значений времен жизни). Считаю, что следует относиться с осторожностью к расчетным значениям времен жизни в тех случаях, когда наблюдаются большие различия τ_{rr} и $\tau_{мп}$. Эти большие расхождения могут быть обусловлены именно недостатком конкретного метода учета наложения конфигураций.

Для уровней конфигураций $4p^55s$, $4p^55p$ и $4p^56p$ наши расчетные значения времен жизни можно сопоставить с экспериментальными. Для уровней $1s_1$ и $1s_2$ конфигурации $4p^55s$ соответственно получены следующие значения $\tau_{экс.}$ (в нсек.): 3.26, 2.90 (метод поглощения [5]), 3.37, 3.30 (резонансное уширение [6]), 3.67, 3.15 (метод поглощения [7]). Для уровня $1s_2$ в работе [8] (по изучению радиационного распада уровня) получено также значение 4.15 нсек. Видно, что $\tau_{экс.}$ в пределах 20% согласуются между собой. Расчетные значения (см. таблицу) хорошо согласуются с экспериментальными.

Для уровней конфигурации $4p^55p$ наиболее полно $\tau_{экс.}$ представлены в работе [9] (метод задержанных совпадений). Для восьми уровней (из десяти) приведены $\tau_{экс.}$ (в нсек.): 44 ($2p_7$), 44 ($2p_8$), 34 ($2p_7$), 23 ($2p_6$), 40 ($2p_5$), 36 ($2p_4$), 34 ($2p_2$) и 26 ($2p_2$). Одно значение $\tau_{экс.}$ можно получить из работы [10] (метод реабсорбции): $2p_7$ — 27 нсек. Совсем недавно появилась работа [11], в которой методом явления Ханле получены для уровней $2p_9$ и $2p_6$ соответственно значения $\tau_{экс.}$ 28.1 и 30.2 нсек. Если сравнить наши расчетные значения (см. таблицу), то видно, что для уровней $2p_9$, τ_{rr} и $\tau_{мп}$ очень хорошо согласуются с $\tau_{экс.}$ из работ [10], [11], а для уровней $2p_6$ и $2p_2$ с данными из [9].

Для конфигурации $4p^56p$ наши расчетные значения τ можно сопоставить с $\tau_{экс.}$ из работ [9, 12] (метод задержанных совпадений). В этих работах приведены следующие значения $\tau_{экс.}$: $3p_{10}$ — 240 [12]; $3p_8$ — 173 [9], 199 [12]; $3p_7$ — 181 [9], 186 [12]; $3p_6$ — 173 [9], 198 [12]; $3p_5$ — 87 [9], 128 [12]; $3p_4$ — 127 [12]; $3p_3$ — 74.3 [12]; $3p_1$ — 111 нсек. [12]. Для пяти (из измеренных восьми) уровней $\tau_{экс.}$ превышают $\tau_{расч.}$

Литература

- [1] П. Ф. Груздев, А. В. Логинов. Опт. и спектр., 35, 3, 1973; 34, 612, 812, 1973.
- [2] А. В. Логинов, П. Ф. Груздев. Опт. и спектр., 35, 994, 1973; 38, 1056, 1975; 35, 994, 1973; 36, 1232, 1974.
- [3] П. О. Богданович, Р. И. Каразия. Всесоюзный фонд алгоритмов и программ. П-000083, 1971.
- [4] С. Е. Мооре. Atomic Energy Levels, Circ. NBS 467, vol. 2, 1952.
- [5] Г. И. Чашина, Е. Я. Шрейдер. Опт. и спектр., 22, 519, 1967.
- [6] J. M. Vaughan. Phys. Rev., 166, 13, 1968.
- [7] P. M. Griffin, T. M. Hutcheson. J. Opt. Soc. Am., 59, 1607, 1969.
- [8] R. Turner. Phys. Rev., 140, A426, 1965.
- [9] А. Л. Ошерович, Я. Ф. Веролайн. Вестн. ЛГУ, в. 1, 140, 1967; Я. Ф. Веролайн. Канд. дисс., ЛГУ, 1970.
- [10] В. П. Малахов. Изв. вузов, физика, № 1, 180, 1965.
- [11] D. Landman, R. Dobrin. Phys. Rev., A, 8, 1868, 1973.
- [12] A. Delgado, T. Campos, C. Sanchez del Rio. Z. Physik, 257, 9, 1972.

Поступило в Редакцию 21 июня 1974 г.