УДК 539.184.01

РЕЛЯТИВИСТСКИЙ РАСЧЕТ ШИРИН УРОВНЕЙ ДВУХЭЛЕКТРОННЫХ АТОМНЫХ СИСТЕМ

Л. Н. Иванов, Е. П. Иванова, У. И. Сафронова и И. А. Шавтвалишвили

Рассчитаны ширины уровней ионов с $Z=10$, 20, 30, 40, 50, 60 состояний конфигураций $2s^2$, $2p^2$ и $2s2p$ с учетом вкладов высших гармоник межэлектронного взаимодействия.

1. Введение

Ширины уровней автоионизационных состояний He-подобных ионов теоретически изучались во многих публикациях. Мы не будем здесь касаться работ, где рассматривается атом гелия и ионы малой кратности ионизации, так как настоящая работа посвящена релятивистскому расчету, а релятивистский расчет наиболее целесообразен для ионов большей кратности ионизации. Ионы большой кратности ионизации (до $Z=34$), где Z — заряд ядра, рассматривались в работах [1, 2]. С еще большей кратностью ионизации ($z=10$, 30, 60) изучались ионы в работе [3]. В работах [1, 2] для учета релятивистских эффектов использовался гамильтониан Брейта. В работе [3] был непосредственно проведен релятивистский расчет ширин уровней состояний. Настоящая работа является продолжением работы [3]. Здесь мы расширили расчет (рассмотрены все состояния конфигураций $2s^2$, $2p^2$, $2s2p$ ионов с $z=10$, 20, 30, 40, 50, 60) и несколько модифицировали схему расчета, учтя опыт работ [3, 4] и проведя дополнительный расчет вкладов высших гармоник межэлектронного взаимодействия.

2. Схема расчета

Мы рассматривали ширину уровня как комплексную часть энергии состояния. В отличие от [3], здесь мы ограничимся первым неисчезающим приближением (второй порядок теории возмущений по межэлектронному взаимодействию), так как вклад диаграмм высших порядков, учтенных в [3], как оказалось, быстро падает с ростом z. В этом приближении ширина уровня определяется следующей формулой:

$$\Gamma=\frac{2\pi\varepsilon}{k_0}\sum_{\beta_1\beta_2} C^J_{\beta_1\beta_2} C^J_{\beta_1'\beta_2'} \sum_{\beta\beta_k} V_{\beta_1\beta_2;\,\beta\beta_k} V_{\beta_k\beta;\,\beta_2'\beta_1'}. \tag{1}$$

Остановимся коротко на введенных выше обозначениях. Для матричного элемента $V_{\beta_1\beta_2;\,\beta_4\beta_3}$ имеем

$$V_{\beta_1\beta_2;\,\beta_4\beta_3}=\int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \Psi^*_{\beta_1}(\mathbf{r}_1)\Psi^*_{\beta_2}(\mathbf{r}_2)\frac{1-\alpha_1\alpha_2}{|r_{12}|}\Psi_{\beta_4}(\mathbf{r}_2)\Psi_{\beta_3}(\mathbf{r}_1), \tag{2}$$

где $\Psi_\beta(\mathbf{r})$ — дираковские функции электрона в поле ядра с зарядом $z(\beta=nljm)$, α_i — матрицы Дирака. В отличие от работы [4], в которой мы рассчитывали энергии, здесь не учтено запаздывание межэлектронного взаимодействия (опущен множитель $\exp i(E_{\beta_1} - E_{\beta_3})$ в определении V). Для всех рассмотренных состояний энергия вылетающего электрона

$$\varepsilon = E_{2j_1} + E_{2j_2} - E_{1s_{1/2}}. \tag{3}$$

Для k_0 соответственно имеем

$$\frac{\alpha z}{\sqrt{2}} k_0 = \sqrt{\varepsilon^2 - 1}. \tag{4}$$

Коэффициенты C в (1) определены следующим образом:

$$C^J_{\beta_1\beta_2} = C^J(n_1j_1n_1^0j_1^0;\ n_2j_2n_2^0j_2^0)\, A(j_1m_1j_2m_2;\ JM), \tag{5}$$

где

$$A(j_1m_1,\ j_2m_2;\ JM) = (-1)^{j_1-j_2+M}\sqrt{2J+1}\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & J \\ m_1 & m_2 & -M \end{pmatrix} \tag{6}$$

коэффициент Клебша—Гордана,

$$C^J(n_1j_1n_1^0j_1^0;\ n_2j_2n_2^0j_2^0) = N(n_1^0j_1^0;\ n_2^0j_2^0)\times$$
$$\times[\delta(n_1j_1,\ n_1^0j_1^0)\,\delta(n_2j_2;\ n_2^0j_2^0) + (-1)^{j_1+j_2+J+1}\delta(n_1j_1,\ n_2^0j_2^0)\,\delta(n_2j_2,\ n_1^0j_1^0)], \tag{7}$$

$$N(n_1^0j_1^0;\ n_2^0j_2^0) = \begin{cases} 1/\sqrt{2} & n_1^0j_1^0 = n_2^0j_2^0, \\ 1 & n_1^0j_1^0 \neq n_2^0j_2^0. \end{cases} \tag{8}$$

Индексы $n_1^0j_1^0$, $n_2^0j_2^0$, J определяют состояние рассматриваемой двухэлектронной системы. Как легко заметить, коэффициенты $C^J_{\beta_1\beta_2}$ антисимметричны и нормированы на 2.

Выполним в выражении для Γ суммирование по проекциям моментов. Рассмотрим сначала следующее выражение:

$$\gamma(\beta_3,\ \beta_4) = \sum_{\beta_1\beta_2} C^J_{\beta_1\beta_2} V_{\beta_1\beta_2;\ \beta_4\beta_3}. \tag{9}$$

Для матричного элемента $V_{\beta_1\beta_2;\ \beta_4\beta_3}$ имеем

$$V_{\beta_1\beta_2;\ \beta_4\beta_3} = \sqrt{(2j_1+1)(2j_2+1)(2j_3+1)(2j_4+1)}\,(-1)^{j_1+j_2+j_3+j_4+m_1+m_2}\times$$
$$\times\sum_{a\mu}(-1)^{\mu}\begin{pmatrix} j_1 & j_3 & a \\ m_1 & -m_3 & \mu \end{pmatrix}\begin{pmatrix} j_2 & j_4 & a \\ m_2 & -m_4 & -\mu \end{pmatrix} Q(n_1j_1l_1n_2j_2l_2;\ n_4j_4l_4n_3j_3l_3), \tag{10}$$

где Q_a является радиальной частью матричного элемента и мы сейчас не будем на ней останавливаться. Подставляя (10) и (5) в (9) и проводя соответствующие выкладки, находим

$$\gamma(\beta_3\beta_4) = \sum_{12} C^J(11^0,\ 22^0)\, A(j_3m_3,\ j_4m_4,\ JM)\, S^J_a(n_1j_1l_1n_2j_2l_2;\ n_4j_4l_4n_3j_3l_3), \tag{11}$$

где для S_a имеем

$$S^J_a(n_1j_1l_1n_2j_2l_2;\ n_4j_4l_4n_3j_3l_3) = (-1)^{j_4-j_2+J}\begin{Bmatrix} j_3 & j_4 & J \\ j_2 & j_1 & a \end{Bmatrix}\times$$
$$\times\sqrt{(2j_1+1)(2j_2+1)(2j_3+1)(2j_4+1)}\, Q_a(n_1j_1l_1n_2j_2l_2;\ n_4j_4l_4n_3j_3l_3). \tag{12}$$

Следует отметить, что для сокращения записи во всех выражениях для C в (11) опущен индекс главного квантового числа. В (11) и везде ниже мы будем во всех выражениях для C считать $1 = n_1j_1$.

Подставляя (11) в (1), легко находим

$$\Gamma = \frac{2\pi\varepsilon}{k_0}\sum_{12}\sum_{1'2'} C^J(11^0,\ 22^0)\, C^J(1'1'^0,\ 2'2'^0)\sum_{njjk} S^J_a(n_1j_1l_1n_2j_2l_2;\ njlk_0j_kl_k)\times$$
$$\times S^J_{a'}(k_0j_kl_knjl;\ n_{2'}j_{2'}l_{2'}n_{1'}j_{1'}l_{1'}). \tag{13}$$

Выражение для Г можно переписать в более компактном виде

$$\Gamma = \frac{2\pi\varepsilon}{k_0} \sum_{njjk} \left| \sum_{12} \sum_{a} C^J (11^0,\ 22^0)\, S_a^J (n_1 j_1 l_1 n_2 j_2 l_2;\ njlk_0 j_k l_k) \right|^2 . \tag{14}$$

Выражение (1) для ширины уровня и соответствующее ему выражение (14), в котором проведено интегрирование по угловым переменным, полученные из выражения для мнимой части энергии, совпадают с известным выражением для вероятности перехода $n_1^0 j_1^0 n_2^0 j_2^0 \to n^0 j^0 k_0 j k^0$ в состояние континуума, которое совершает система под влиянием межэлектронного взаимодействия. Покажем это. Как известно. вероятность такого перехода равна

$$\Gamma = \frac{2\pi\varepsilon}{k_0} \sum_{n^0 j^0 j_{k^0}} \left| \frac{1}{2} \sum_{\beta_1\beta_2} \sum_{\beta\beta_k} C^J_{\beta_1\beta_2} C^J_{\beta\beta_k} V_{\beta_1\beta_2;\ \beta\beta_k} \right|^2 . \tag{15}$$

Рассмотрим отдельно сумму

$$A = \frac{1}{2} \sum_{\beta_1\beta_2} \sum_{\beta_3\beta_4} C^J_{\beta_1\beta_2} C^J_{\beta_3\beta_4} V_{\beta_1\beta_2;\ \beta_4\beta_3} . \tag{16}$$

Воспользовавшись формулой (11), находим для A

$$A = \frac{1}{2} \sum_{12} \sum_{34} C^J (11^0,\ 22^0)\, C^J (33^0,\ 44^0) \sum_{a} S_a^J (n_1 j_1 l_1 n_2 j_2 l_2;\ n_4 j_4 l_4 n_3 j_3 l_3). \tag{17}$$

Подставим выражение для $C^J(11^0,\ 22^0)$ [8] и, учитывая, что $n_3^0 j_3^0 \neq n_4^0 j_4^0$, находим

$$A = \frac{1}{2} \sum_{12} C^J (11^0,\ 22^0) \sum_{a} [S_a^J (n_1 j_1 l_1 n_2 j_2 l_2;\ n_4^0 j_4^0 l_4^0 n_3^0 j_3^0 l_3^0) + $$
$$+ (-1)^{j_3^0 + j_4^0 + J + 1} S_a^J (n_1 j_1 l_1 n_2 j_2 l_2;\ n_3^0 j_3^0 l_3^0 n_4^0 j_4^0 l_4^0)] . \tag{18}$$

Покажем, что второй член в (18) в точности равен первому члену. Для этого воспользуемся следующими свойствами C и S в (8):

$$\left.\begin{aligned} S_a^J (n_2 j_2 l_2 n_1 j_1 l_1;\ n_3 j_3 l_3 n_4 j_4 l_4) &= (-1)^{-j_1 - j_3 + j_2 + j_4} S_a (n_1 j_1 l_1 n_2 j_2 l_2;\ n_4 j_4 l_4 n_3 j_3 l_3), \\ C^J (21^0;\ 12^0) &= (-1)^{j_1 + j_2 + J + 1} C^J (11^0,\ 22^0). \end{aligned}\right\} \tag{19}$$

Проводя замену $1 \rightleftarrows 2$ и используя (19), мы легко получаем, что первый и второй члены в (18) идентичны. Таким образом, для A имеем

$$A = \sum_{12} C^J (11^0,\ 22^0) \sum_{a} S^J (n_1 j_1 l_1 n_2 j_2 l_2;\ n_4^0 j_4^0 l_4^0 n_3^0 j_3^0 l_3^0). \tag{20}$$

Подставляя (20) в (15), мы получаем

$$\Gamma = \frac{2\pi\varepsilon}{k_0} \sum_{n^0 j^0 j_{k^0}} \left| \sum_{12} C^J (11^0,\ 22^0) \sum_{a} S_a^J (n_1 j_1 l_1 n_2 j_2 l_2;\ n^0 j^0 l^0 k^0 j_{k^0} l_{k^0}) \right|^2 , \tag{21}$$

что полностью совпадает с полученным ранее выражением для ширины уровня (14).

Перейдем теперь к обсуждению частных случаев.

3. Аналитические выражения для ширин уровней состояний $2s^2$, $2s2p$, $2p^2$

Как уже говорилось в предыдущем разделе, для состояний $2s^2$, $2s2p$, $2p^2$ возможен лишь распад в состояние типа $1s_{1/2} k_0 j_k l_k$. Таким образом, (14) перепишется в следующем виде:

$$\Gamma = A_0 \sum_{j_k} \left| \sum_{12} \sum_{a} C^J (11^0,\ 22^0)\, S_a^J (n_1 j_1 l_1 n_2 j_2 l_2;\ 1s_{1/2} k_0 j_k l_k \right|^2 , \tag{22}$$

где $A_0 = 2\pi\varepsilon / k_0$.

Перейдем теперь к обсуждению Q_a. Определим введенное в формулах (10), (12) выражение для Q_a. Из [4] имеем

$$Q_a(n_1j_1l_1n_2j_2l_2;\ n_4j_4l_4n_3j_3l_3) =$$
$$= -\begin{pmatrix} j_1 & j_3 & a \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} j_2 & j_4 & a \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \end{pmatrix} P_a(n_1j_1l_1n_2j_2l_2;\ n_4j_4l_4n_3j_3l_3), \tag{23}$$

где введены $3j$ коэффициенты Вигнера, а для P_a имеем

$$P_a(n_1j_1l_1n_2j_2l_2;\ n_4j_4l_4n_3j_3l_3) = \{al_1l_3\}\{al_2l_4\} F_a(n_1j_1l_1n_2j_2l_2;\ n_4j_4l_4n_3j_3l_3) +$$
$$+ \sum_l (-1)^{l+a}(2a+1)\, M_a^l(n_1j_1l_1n_2j_2l_2;\ n_4j_4l_4n_3j_3l_3), \tag{24}$$

причем $\{al_1l_3\}$ обозначает выполнение условия треугольника для индексов a, l_1, l_3, а для F_a и M_a^l имеем

$$F_a(n_1j_1l_1n_2j_2l_2;\ n_4j_4l_4n_3j_3l_3) = R_a(n_1j_1l_1n_2j_2l_2;\ n_4j_4l_4n_3j_3l_3) +$$
$$+ R_a(n_1j_1l_1n_2\tilde{j}_2l_2;\ n_4\tilde{j}_4l_4n_3j_3l_3) + R_a(n_1\tilde{j}_1l_1n_2j_2l_2;\ n_4j_4l_4n_3\tilde{j}_3l_3) +$$
$$+ R_a(n_1\tilde{j}_1l_1n_2\tilde{j}_2l_2;\ n_4\tilde{j}_4l_4n_3\tilde{j}_3l_3), \tag{25}$$

$$M_a^l(n_1j_1l_1n_2j_2l_2;\ n_4j_4l_4n_3j_3l_3) = R_l(n_1j_1l_1n_2j_2l_2;\ n_4\tilde{j}_4l_4n_3\tilde{j}_3l_3)\, X_a^l(j_1l_1,\ j_3l_3') \times$$
$$\times X_a^l(j_2l_2;\ j_4l_4') + R_l(n_1\tilde{j}_1l_1n_2\tilde{j}_2l_2;\ n_4j_4l_4n_3j_3l_3)\, X_a^l(j_1l_1';\ j_3l_3)\, X_a^l(j_2l_2';\ j_4l_4) -$$
$$- R_l(n_1\tilde{j}_1l_1n_2j_2l_2;\ n_4\tilde{j}_4l_4n_3j_3l_3)\, X_a^l(j_1l_1';\ j_3l_3)\, X_a^l(j_2l_2;\ j_4l_4') -$$
$$- R_l(n_1j_1l_1n_2\tilde{j}_2l_2;\ n_4j_4l_4n_3\tilde{j}_3l_3)\, X_a^l(j_1l_1;\ j_3l_3')\, X_a^l(j_2l_2';\ j_4l_4). \tag{26}$$

Для X_a^l имеем

$$X_a^l(j_1l_1,\ j_3l_3) = (-1)^{j_1+l_3+1}\{l_1l_3l\}\left[\frac{1}{\sqrt{2a(a+1)}}\begin{pmatrix} a & 1 & l \\ -1 & 1 & 0 \end{pmatrix} \times\right.$$
$$\left.\times\left((2j_3+1)(-1)^{j_1+j_3-a} + 2j_1 + 1\right) + (-1)^{l_3+j_1-1/2+a}\begin{pmatrix} a & 1 & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}\right], \tag{27}$$

причем $j' = 2j - l$. Для введенных выше радиальных интегралов имеем

$$R_l(n_1j_1l_1n_2j_2l_2;\ n_4j_4l_4n_3j_3l_3) = \int_0^\infty dr_1 r_1^2 \int_0^\infty dr_2 r_2^2 \frac{r_<^l}{r_>^{l+1}} R_{n_1j_1l_1}(r_1) \times$$
$$\times R_{n_2j_2l_2}(r_2)\, R_{n_4j_4l_4}(r_2)\, R_{n_3j_3l_3}(r_1), \tag{28}$$

причем $R_{njl}(r)$ — радиальные части дираковских функций, определенных в поле ядра z. Волна над индексами njl в (27), (28) обозначает малую компоненту дираковской функции. Для удобства записи перепишем (22) в следующем виде:

$$\Gamma(n_1^0j_1^0l_1^0n_2^0j_2^0l_2^0;\ J) = A_0 \sum_{jk} \Gamma_J^2(n_1^0j_1^0l_1^0n_2^0j_2^0l_2^0;\ 1s_{1/2}k_0j_kl_k), \tag{29}$$

где

$$\Gamma_J(n_1j_1l_1n_2j_2l_2;\ n_2'j_2'l_2'n_1'j_1'l_1') = N(-1)^{j_2+j_2'}\sqrt{(2j_1+1)(2j_2+1)(2j_2'+1)(2j_1'+1)} \times$$
$$\times \sum_a \left[(-1)^J \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & J \\ j_2' & j_1' & a \end{Bmatrix}\begin{pmatrix} j_1 & j_1' & a \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} j_2 & j_2' & a \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \end{pmatrix} P_a(n_1j_1l_1n_2j_2l_2;\ n_2'j_2'l_2'n_1'l_1'j_1') +\right.$$
$$\left. + \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & J \\ j_1' & j_2' & a \end{Bmatrix}\begin{pmatrix} j_1 & j_2' & a \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} j_2 & j_1' & a \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \end{pmatrix} P_a(n_1j_1l_1n_2j_2l_2;\ n_1'j_1'l_1'n_2'l_2'j_2')\right], \tag{30}$$

где N определяется в соответствии с (8). Для рассматриваемых состояний имеем

$$\Gamma(2s_{1/2}2p_{1/2};\ 0) = A_0\Gamma_0^2(2s_{1/2}2p_{1/2};\ 1s_{1/2}kp_{1/2}), \tag{31}$$

$$\Gamma(2s_{1/2}2p_{3/2};\ 2) = A_0\Gamma_2^2(2s_{1/2}2p_{3/2};\ 1s_{1/2}kp_{3/2}) + A_0\Gamma_2^2(2s_{1/2}2p_{3/2};\ 1s_{1/2}kp_{1/2}), \tag{32}$$

$$\Gamma(2p_{1/2}2p_{3/2};\ 1) = A_0\Gamma_1^2(2p_{1/2}2p_{3/2};\ 1s_{1/2}ks_{1/2}) + A_0\Gamma_1^2(2p_{1/2}2p_{3/2};\ 1s_{1/2}kd_{3/2}). \tag{33}$$

Прежде чем выписать выражения для остальных величин Г, коротко остановимся на диагонализации матрицы энергии. В качестве примера рассмотрим состояния $2s_{1/2}2p_{1/2}$, $2s_{1/2}2p_{3/2}$ с $J=1$. Правильная нулевая функция является линейной комбинацией функции $\Psi(2s_{1/2}2p_{1/2})$ и $\Psi(2s_{1/2}2p_{3/2})$.

$$\left.\begin{aligned}\Psi_1 &= a_{11}\Psi(2s_{1/2}2p_{1/2}) + a_{12}\Psi(2s_{1/2}2p_{3/2}),\\ \Psi_2 &= a_{21}\Psi(2s_{1/2}2p_{1/2}) + a_{22}\Psi(2s_{1/2}2p_{3/2}).\end{aligned}\right\} \tag{34}$$

Учитывая это, для Г находим

$$\begin{aligned}\frac{1}{A_0}\Gamma_1(2s_{1/2}2pj;\ 1) &= \{a_{11}\Gamma_1(2s_{1/2}2p_{1/2};\ 1s_{1/2}kp_{1/2}) + a_{12}\Gamma(2s_{1/2}2p_{3/2};\ 1s_{1/2}kp_{1/2})\}^2 +\\ &+ \{a_{11}\Gamma_1(2s_{1/2}2p_{1/2};\ 1s_{1/2}kp_{3/2}) + a_{12}\Gamma_1(2s_{1/2}2p_{3/2};\ 1s_{1/2}kp_{3/2})\}^2,\end{aligned} \tag{35}$$

$$\begin{aligned}\frac{1}{A_0}\Gamma_2(2s_{1/2}2p_j;\ 1) &= \{a_{21}\Gamma_1(2s_{1/2}2p_{1/2};\ 1s_{1/2}kp_{1/2}) + a_{22}\Gamma_1(2s_{1/2}2p_{3/2};\ 1s_{1/2}kp_{1/2})\}^2 +\\ &+ \{a_{21}\Gamma_1(2s_{1/2}2p_{1/2};\ 1s_{1/2}kp_{3/2}) + a_{22}\Gamma_1(2s_{1/2}2p_{3/2};\ 1s_{1/2}kp_{3/2})\}^2.\end{aligned} \tag{36}$$

Состояния $2p_{1/2}2p_{3/2}$, $2p_{3/2}2p_{3/2}$ с $J=2$ также образуют матрицу второго порядка. Полностью аналогично (35), (36) имеем

$$\begin{aligned}\frac{1}{A_0}\Gamma_1(2p_j2p_{j'};\ 2) &= \{a_{11}\Gamma_2(2p_{3/2}2p_{3/2};\ 1s_{1/2}kd_{3/2}) + a_{12}\Gamma_2(2p_{1/2}2p_{3/2};\ 1s_{1/2}kd_{3/2})\}^2 +\\ &+ \{a_{11}\Gamma_2(2p_{3/2}2p_{3/2};\ 1s_{1/2}kd_{5/2}) + a_{12}\Gamma_2(2p_{1/2}2p_{3/2};\ 1s_{1/2}kd_{5/2})\}^2,\end{aligned} \tag{37}$$

$$\begin{aligned}\frac{1}{A_0}\Gamma_2(2p_j2p_{j'};\ 2) &= \{a_{21}\Gamma_2(2p_{3/2}2p_{3/2};\ 1s_{1/2}kd_{3/2}) + a_{22}\Gamma_2(2p_{1/2}2p_{3/2};\ 1s_{1/2}kd_{3/2})\}^2 +\\ &+ \{a_{21}\Gamma_2(2p_{3/2}2p_{3/2};\ 1s_{1/2}kd_{5/2}) + a_{22}\Gamma_2(2p_{1/2}2p_{3/2};\ 1s_{1/2}kd_{5/2})\}^2.\end{aligned} \tag{38}$$

Наконец рассмотрим состояния $(2s_{1/2})^2$, $(2p_{1/2})^2$, $(2p_{3/2})^2$ с $J=0$. Эти состояния образуют матрицу третьего порядка. Здесь мы имеем дело с перемешиванием состояний как с разными j, так и с разными l. Окончательно для Г имеем

$$\begin{aligned}\frac{1}{A_0}\Gamma_1(J=0) &= \{a_{11}\Gamma_0(2s_{1/2}2s_{1/2};\ 1s_{1/2}ks_{1/2}) + a_{12}\Gamma_0(2p_{1/2}2p_{1/2};\ 1s_{1/2}ks_{1/2}) +\\ &+ a_{13}\Gamma_0(2p_{3/2}2p_{3/2};\ 1s_{1/2}ks_{1/2})\}^2,\end{aligned} \tag{39}$$

$$\begin{aligned}\frac{1}{A_0}\Gamma_2(J=0) &= \{a_{21}\Gamma_0(2s_{1/2}2s_{1/2};\ 1s_{1/2}ks_{1/2}) + a_{22}\Gamma_0(2p_{1/2}2p_{1/2};\ 1s_{1/2}ks_{1/2}) +\\ &+ a_{23}\Gamma_0(2p_{3/2}2p_{3/2};\ 1s_{1/2}ks_{1/2})\}^2,\end{aligned} \tag{40}$$

$$\begin{aligned}\frac{1}{A_0}\Gamma_3(J=0) &= \{a_{31}\Gamma_0(2s_{1/2}2s_{1/2};\ 1s_{1/2}ks_{1/2}) +\\ &+ a_{32}\Gamma_0(2p_{1/2}2p_{1/2};\ 1s_{1/2}ks_{1/2}) + a_{33}\Gamma_0(2p_{3/2}2p_{3/2};\ 1s_{1/2}ks_{1/2})\}^2.\end{aligned} \tag{41}$$

Приведенные формулы дают возможность рассчитать ширины уровней. Перейдем к обсуждению численных результатов.

4. Результаты численных расчетов

Остановимся коротко на обсужении радиальных интегралов. Абсолютные значения F_a значительно больше радиальных интегралов с двумя большими компонентами и двумя малыми. В F_a (25) входят интегралы со всеми большими компонентами. Как известно, радиальные интегралы имеют следующую зависимость от z:

$$\left.\begin{aligned}\frac{1}{z\alpha}R_l(n_1j_1l_1n_2j_2l_2;\ n_4j_4l_4n_3j_3l_3) &\simeq a_1 + a_2(\alpha z)^2,\\ \frac{1}{z\alpha}R_l(n_1j_1l_1n_2j_2l_2:\ n_4\bar{j}_4l_4n_3\bar{j}_3l_3) &\simeq c_1(z\alpha)^2 + c_3(z\alpha)^4,\\ \frac{1}{z\alpha}R_l(n_1\bar{j}_1l_1n_2\bar{j}_2l_2;\ n_4\bar{j}_4l_4n_3\bar{j}_3l_3) &\simeq d(z\alpha)^4.\end{aligned}\right\} \tag{42}$$

Для $z=10$ радиальные интегралы со всеми большими компонентами в $10^2 \div 10^3$ раз больше радиальных интегралов с двумя большими компонентами. Для $z=60$ это различие становится несколько меньше (10—100 раз), так как вторые интегралы растут в z^2 раз быстрее, чем первые. Приняв во внимание это обстоятельство, мы учли только интегралы с большими компонентами. Окончательные результаты расчета приведены в таблице. Как видно из таблицы, зависимость Г от z самая разнообразная.

Ширина уровня (в эВ) как функция z

z	$2s^2\,{}^1S_0$	$2p^2\,{}^1S_0$	$2p^2\,{}^3P_0$	$2p^2\,{}^3P_2$	$2p^2\,{}^1D_2$
10	0.2203	0.0103	0.00011	0.0005	0.2398
20	0.2215	0.0164	0.0052	0.0284	0.2080
30	0.2212	0.0288	0.00095	0.1048	0.1251
40	0.2308	0.0426	0.00751	0.1313	0.0893
50	0.2568	0.0502	0.0033	0.1359	0.0740
60	0.2957	0.0485	0.0015	0.1225	0.0655

z	$2s2p\,{}^3P_0$	$2s2p\,{}^3P_1$	$2s2p\,{}^3P_2$	$2s2p\,{}^1P_1$	
10	0.0090	0.0094	0.0106	0.1476	
20	0.0102	0.0115	0.0108	0.1495	
30	0.0124	0.0226	0.0110	0.1447	
40	0.0163	0.0429	0.0113	0.1330	
50	0.0226	0.0644	0.0114	0.1220	
60	0.0325	0.0872	0.0114	0.1124	

Для удобства обсуждения мы в таблице перешли к обозначениям в схеме LS-связи. Это, конечно, справедливо для самых небольших значений z ($z \leqslant 20$), но это удобно для обсуждения и сопоставления с результатами других авторов. Как видно из таблицы, для состояний $2s^2\,{}^1S_0$, $2s2p^3P_2$, $2s2p^1P_1$ Г довольно слабо меняется при переходе от $z=10$ к $z=60$ ($10 \div 30\%$). У остальных состояний эти изменения более значительны (для состояний $2p^2\,{}^1S_0$, $2s2p^3P_0$, $2p^2\,{}^1D_2$ — в 4 раза, у состояний $2p^2\,{}^3P_0$, $2s2p^3P_1$ — в 10 раз, для состояния $2p^2\,{}^3P_2$ — в 250 раз). В приближении чистой LS-связи для состояний $2p^2$ ширина уровней равнялась бы нулю. Отклонение от чистой LS-связи и приводит к не нулевым значениям Г. Для $z=10$ это отклонение не очень значительно и Г для этих состояний еще в 100 раз меньше Г состояний $2p^2\,{}^1D_2$ и $2s^2\,{}^1S_0$. Для $z=30$ Г $2p^2\,{}^3P_2$ сравнивается с Г $2p^2\,{}^1D_2$, а для $z \geqslant 40$ уже превышает Г для $2p^2\,{}^1D_2$. У состояний $2s2p$ все значения Г для разных J должны совпадать при чистой LS-связи. Для $z=10$ это различие еще не очень существенное. Для $z=30$ значения различаются уже в два раза, а у $z=60$ в восемь раз. Следует отметить, что наши данные и данные из [3] для ширин уровней несколько различаются. Это связано с тем, что в обоих работах приведены различные допущения для сокращения расчета. Для учета всех членов в (14) необходимо было рассчитать 153 интеграла. В данной работе были учтены только интегралы с большими компонентами. В [3] учитывались также интегралы с двумя малыми компонентами, но рассматривались только члены с $l=0$, т. е. интегралы вида $R_0\,(n_1j_1l_1n_2j_2l_2;\ n_4\bar{j}_4l_4n_3\bar{j}_3l_3)$. Нами были рассчитаны частично и интегралы с $l \neq 0$. Как видно из результатов, нет большого различия между интегралами с $l=0$ и $l \neq 0$. В связи с этим мы не сочли целесообразным ограничиться только членами $l=0$, как в [3]. В данной работе мы воспользовались коэффициентами для векторов, приведенными в [4]. С этими двумя фактами и связано главное различие в результатах для ширин, полученных в обеих работах.

В заключение считаем своим приятным долгом выразить благодарность Л. А. Вайнштейну, А. Д. Гурчумелия и Л. Н. Лабзовскому за полезные дискуссии.

Литература

[1] У. И. Сафронова. Опт. и спектр., *38*, 212, 1975.
[2] Л. А. Вайнштейн, У. И. Сафронова. Препринт ИСАН, № 5, 1975.
[3] Л. Н. Иванов. Опт. и спектр., *38*, 31, 1975.
[4] Л. Н. Иванов, У. И. Сафронова, И. А. Шавтвалишвили. Препринт ИСАН, № 9, 1975.

Поступило в Редакцию 10 декабря 1976 г.