

ЭНЕРГИИ  $K_\alpha$  РЕНТГЕНОВСКИХ ПЕРЕХОДОВ В НЕОНЕ

З. И. Купляускис

Прямым вариационным методом определены параметры аналитических радиальных орбиталей и энергии ионов неона с  $K$ -вакансией. Приведены значения энергий  $K_\alpha$  рентгеновских переходов в  $Ne^{8+}$ ,  $Ne^{7+}$ ,  $Ne^{6+}$ ,  $Ne^{5+}$ ,  $Ne^{4+}$  и  $Ne^{3+}$ .

1. В столкновениях атома неона с ионами, электронами, фотонами и другими частицами наблюдаются ионы неона с вакансией в  $K$ -оболочке. Распад этих возбужденных состояний сопровождается испусканием рентгеновских квантов или Оже-электронов. Рентгеновский спектр, полученный таким образом, содержит, кроме основной  $K_\alpha$ -линии, целый ряд сателлитов [1, 2].

Теоретическое изучение энергий рентгеновских переходов связано с необходимостью определения волновой функции атома или иона в возбужденном состоянии, имеющем нижележащие состояния той же самой симметрии. В этом случае используются теорема Хилерасса—Ундгейма—Мак Дональда, метод оператора перехода и неортогональные радиальные орбитали (см. ссылки в [3]).

Рентгеновские линии многозарядных ионов используются для диагностики горячей плазмы [4]. Значения энергий рентгеновских сателлитов необходимы также для изучения процессов, происходящих в результате взаимодействия ионов с другими атомными частицами и излучением. По этой причине большое количество работ посвящено определению энергий рентгеновских переходов, в частности в ионах неона [5-7]. Ввиду того, что в литературе имеющиеся значения этих энергий, полученные с использованием решений уравнений Хартри—Фока, значительно различаются между собой и представляет интерес определить энергии рентгеновских переходов с использованием другого метода. В нашей работе для расчета ионов неона с вакансией использованы неортогональные аналитические радиальные орбитали [8], параметры которых найдены прямым вариационным методом из стационарного выражения для нерелятивистской энергии.

2. Выражение для нерелятивистской энергии конфигурации  $1s2s^22p^N$  с использованием неортогональных радиальных орбиталей приведено в [9]. Выражение для энергии трехэлектронной конфигурации  $(nl n' l l_1 S_1) n_1 l_1 L S$  получаем аналогично работам [10, 11] в виде

$$\begin{aligned}
 E(nl n' l (L_1 S_1) n_1 l_1 L S) = & [1 + (-1)^{S_1} (nl | n' l)^2]^{-1} [I(nl) + I(n' l) + \\
 & + 2(-1)^{S_1} I(nl, n' l) (nl | n' l) + \sum_k \{A_k [F_k(nl, n_1 l_1) + F_k(n' l, n_1 l_1)] + \\
 & + B_k F_k(nl, n' l) + 2(-1)^{S_1} A_k (nl | n' l) R_k(nl n' l, n_1 l_1 n_1 l_1) + (-1)^{L_1 + S_1} B_k G_k(nl, n' l) + \\
 & + C_k [G_k(nl, n_1 l_1) + G_k(n' l, n_1 l_1)] + 2(-1)^{S_1} C_k (nl | n' l) \times \\
 & \times R_k(nl n_1 l_1, n' l n_1 l_1)\} + I(n_1 l_1).
 \end{aligned} \tag{1}$$

Коэффициенты при радиальных интегралах в (1) имеют вид

$$A_k = (-1)^{l_1+L} (l \| C^{(k)} \| l) (l_1 \| C^{(k)} \| l_1) (2L_1 + 1) \begin{Bmatrix} l & k & l \\ L_1 & l & L_1 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} l_1 & k & l_1 \\ L_1 & L & L_1 \end{Bmatrix}, \quad (2)$$

$$B_k = (-1)^{L_1} (l \| C^{(k)} \| l)^2 \begin{Bmatrix} l & k & l \\ l & L_1 & l \end{Bmatrix}, \quad (3)$$

$$C_k = (l \| C^{(k)} \| l_1)^2 (2L_1 + 1) (2S_1 + 1) \begin{Bmatrix} 1/2 & 1/2 & S_1 \\ S & 1/2 & S_1 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} k & l & l_1 \\ l & l & L_1 \\ l_1 & L_1 & L \end{Bmatrix}. \quad (4)$$

Приведенные матричные элементы и  $3nj$ -коэффициенты в выражениях (2)–(4) определены в стандартной системе фаз [12]. Для конфигураций  $nsn'l$  выражения (2)–(4) упрощаются и принимают вид

$$A_0 = B_0 = 1, \quad (5)$$

$$C_l = \frac{2S_1 + 1}{2l + 1} \begin{Bmatrix} 1/2 & 1/2 & S_1 \\ S & 1/2 & S_1 \end{Bmatrix}. \quad (6)$$

Из всех трех термов конфигурации  $1s2s2p$  только терм  $1s2s(1S)2p^2P$  имеет нижележащее состояние той же самой симметрии  $1s^22p^2P$ . Ортогональность волновых функций этих состояний обеспечиваем требованием равенства нулю интеграла перекрытия

$$\langle 1s^2_2p^2P | 1s2s(1S)2p^2P \rangle = (2p_1 | 2p) (1s_1 | 1s) (1s_1 | 2s) = 0. \quad (7)$$

Выполнение условия (7) обеспечиваем требованием

$$(1s_1 | 2s) = \int_0^\infty P(1s_1 | r) P(2s | r) dr = 0. \quad (8)$$

Расчеты проведены с использованием аналитических радиальных орбиталей

$$P(nl | r) = A_{nl} \sum_{i=1}^{\max(2, n-l)} C_i r^{\min(l+i, n)} \exp(-a_i r), \quad C_1 = 1, \quad (9)$$

с независимым базисом для каждой оболочки эквивалентных электронов.  $A_{nl}$  — нормировочный множитель. Условие ортогональности (8) обеспечиваем путем определения из этого уравнения линейного параметра радиальной орбитали  $P(2s | r)$ . Вариационным способом найдено 8 параметров (3 параметра радиальной орбитали  $P(1s | r)$ , 2 —  $P(2s | r)$  и 3 —  $P(2p | r)$ ), т. е. 6 нелинейных и 3 линейных параметра.

3. Энергии ионов неона с вакансией в  $K$ -оболочке приведены в табл. 1. Сравнивая значения энергий для  $Ne^{5+}$  и полученные в [13], с использованием теории возмущений по  $1/Z$ , видим, что они хорошо согласуются. Расстояние между термами  $4P$  и  $2D$  в [13] составляет 0.26 ат. ед., а нами получено 0.27 ат. ед., между термами  $2S$  и  $2P$  0.22 и 0.21 ат. ед., а между термами  $4P$  и  $2P$  0.32 и 0.31 ат. ед. соответственно.

Таблица 1

Значения энергии ионов неона с  $1s$ -вакансией (в ат. ед.)

Состояние	$-E$	Состояние	$-E$	Состояние	$-E$
$1s2s^22p^4\ ^2S$	91.9582	$1s2s^22p^3\ ^3D$	88.5614	$1s2p^2\ ^2P$	68.7683
$\ ^2P$	92.1568	$1s2s^22p^2\ ^2S$	83.2531	$\ ^4P$	69.1405
$\ ^4P$	92.4068	$\ ^2P$	83.4646	$\ ^2D$	68.8342
$\ ^2D$	92.1774	$\ ^4P$	83.7733	$1s2s2p^4P$	69.7669
$1s2s^22p^3\ ^3S$	88.5165	$\ ^2D$	83.5035	$(3S)^2P$	69.1604
$\ ^5S$	88.8895	$1s2s^22p\ ^1P$	77.1955	$(1S)^2P$	69.2032
$\ ^1P$	88.2184	$\ ^3P$	77.4231	$1s2p^1P$	60.0474
$\ ^3P$	88.4049	$1s2s^2\ ^2S$	69.7430	$\ ^3P$	60.3125
$\ ^1D$	88.5614	$1s2p^2\ ^2S$	68.5604		

Значения энергий рентгеновских переходов для  $Ne^{7+}$  приведены в табл. 2. Кроме наших результатов (а), в таблице помещены значения энергий, полученные с использованием решений уравнений Хартри—Фока [7], Хартри—Фока—Слэтера [5] и теории возмущений по  $1/Z$  [14]. Из этих результатов следует, что для большинства переходов значения энергий, полученные различными методами, хорошо согласуются. Исключением являются лишь результаты, определенные в [14] с учетом первого приближения теории возмущений по  $1/Z$ . Различие для энергии перехода  $1s2s(^3S)2p^2P-1s^22s^2S$ , полученной в нашей работе и в [7], одной стороны, и в работах [5, 14], с другой, следует отнести к использованию различных схем связывания моментов электронов. В [10] показано, что расстояния между дублетными термами в схеме  $(1s2s)2p$  получается значительно меньше, чем в схеме  $1s(2s2p)$ .

Таблица 2

Значения энергий рентгеновских переходов  $1s2p^2LS-1s^22p^2P$  и  $1s2s(L_1S_1)2pLS-1s^22s^2S$  в  $Ne^{7+}$  (эВ)

$LS$	$a$	[7]	[5]	[14]	$L_1S_1LS$	$a$	[7]	[5]	[14]
$^2S$	911.0	991.2	911.2	917.2	$^3S^2P$	910.6	910.9	914.0	914.6
$^2P$	905.4	905.5	905.7	908.2	$^4P$	894.1	894.3	894.9	895.5
$^4P$	895.3	895.3	895.9	897.1	$^1S^2P$	909.4	907.2	906.6	907.5
$^2D$	903.6	903.7	904.0	905.8					

Определение радиальной орбитали и энергии термина  $1s2s(^1S)2p^2P$  или в другой схеме связывания моментов электронов  $1s(2s2p^3P)^2P$  затруднено необходимостью обеспечить условие ортогональности волновой функции изучаемого состояния и термина  $1s^22p^2P$ . Несоблюдение этого условия приводит к заниженному значению энергии термина  $1s2s(^1S)2p^2P$  и тем самым уменьшенному значению энергии перехода (табл. 2). Аналогичная картина наблюдается при изучении состояния  $1s2s^1S$ , что является хорошо известным фактом, который многократно обсужден начиная с 30-х годов и до настоящего времени в различных монографиях и учебниках по теории атома.

Значения энергий  $K_\alpha$  переходов в  $Ne^{3+}-Ne^{6+}$  и в  $Ne^{8+}$  приведены в табл. 3 (а). Туда же включены значения, полученные с использованием решений уравнений Хартри—Фока в работах [5-7]. Следует отметить хорошее согласие результатов, полученных различными методами. Приведенные в табл. 3 значения энергий позволяют исключить опечатки в работах [5, 7], которые наблюдаются в  $Ne^{3+}$  для переходов  $^2P-^2P$ , в  $Ne^{4+}$   $^1P-^1S$ ,  $^1P-^1D$  и  $^3P-^3P$ , а также в  $Ne^{6+}$  для  $^1P-^1S$  и  $^3P-^1S$ .

Таблица 3

Энергии рентгеновских переходов  $1s2s^22p^N L_1 S_1-1s^22s^22p^{N-1} L_2 S_2$  в  $Ne^{3+}-Ne^{6+}$  и  $1s2p L_1 S_1-1s^2 1S$  в  $Ne^{8+}$  (эВ)

$L_1 S_1 L_2 S_2$	$a$	[7]	[5]	$L_1 S_1 L_2 S_2$	$a$	[7]	[5]		
$Ne^{3+}$	$^2S^2P$	865.2	865.1	865.1	$Ne^{4+}$	$^1D^1D$	871.2	871.4	871.3
	$^2P^2P$	859.8	869.0	860.0		$^3D^3P$	870.1	869.9	869.9
	$^2D$	863.5	863.7	863.6	$Ne^{5+}$	$^2S^2P$	888.6	888.4	888.3
	$^2D^2P$	859.2	859.1	859.1		$^2P^2P$	882.8	883.1	882.9
	$^2D$	863.0	862.6	862.8		$^2D^2P$	881.8	881.5	881.6
$Ne^{4+}$	$^4P^4S$	862.3	861.9	861.9	$Ne^{6+}$	$^1P^1S$	895.6	919.5	895.6
	$^3S^3P$	871.3	871.6	871.5		$^3P^1S$	889.4	881.9	—
	$^1P^1S$	869.5	867.5	869.6	$Ne^{8+}$	$^1P^1S$	920.0	920.3	921.1 *
	$^1D$	875.5	867.5	875.5		$^3P^1S$	912.8	912.9	914.1 *
	$^3P^3P$	874.4	874.2	876.9					

\* Значения получены по теории возмущений по  $1/Z$  в [14].

Сравнение полученных теоретических энергий рентгеновских переходов с экспериментальными затруднено тем, что переходы из различных начальных состояний того же иона в эксперименте наблюдаются в виде одного пика. Исключениями являются лишь  $\text{Ne}^{7+}$  и  $\text{Ne}^{8+}$ , для которых зарегистрирована структура пика [1, 2]. Экспериментальные значения энергии переходов из конфигураций  $KL^2$  (861.8/863.6 эВ),  $KL^3$  (871.1/872.4 эВ),  $KL^4$  (880.3/882.5 эВ),  $KL^5$  (892.9/896.5 эВ).  $KL^6$  ( $^4P$ , 895.5 и  $^2P$ , 906.3/908.4 эВ) и  $KL^7$  ( $^3P$ , 914.0 и  $^1P$ , 920.7/915.9 и 922.5 эВ) (косая черта отделяет значения, измеренные в [1, 2], от полученных в [15]) попадают в теоретически определенный энергетический интервал для соответствующего иона.

#### Литература

- [1] C. F. Moore, J. Bolger, K. Roberts, D. K. Olsen, B. M. Johnson, J. J. Mackey, L. E. Smith, D. L. Matthews. *J. Phys. B*, **15**, L415, 1974.
- [2] D. L. Matthews, B. M. Johnson, G. W. Hoffman, C. F. Moore. *Phys. Lett.*, **49A**, 195, 1974.
- [3] З. И. Купляускис. *Изв. АН СССР, сер. физ.*, **41**, 2626, 1977.
- [4] А. В. Виноградов, И. Ю. Скобелев. *Письма ЖЭТФ*, **27**, 97, 1978.
- [5] С. Р. Bhalla. *Phys. Rev. A*, **12**, 122, 1975.
- [6] L. L. House. *Astrophys. J. Suppl.*, **18**, 21, 1969.
- [7] D. L. Matthews, B. M. Johnson, C. F. Moore. *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, **15**, 41, 1975.
- [8] З. И. Купляускис, А. В. Купляускене. *Опт. и спектр.*, **39**, 993, 1975; *Изв. вузов, физика*, № 9, 19, 1975.
- [9] А. В. Купляускене, З. И. Купляускис. *Лит. физ. сб.*, **16**, 231, 1976.
- [10] З. И. Купляускис, А. В. Купляускене. *Изв. вузов, физика*, № 6, 70, 1977.
- [11] А. В. Купляускене. В сб.: *Применение математических методов в физике и вычислительных системах*, 152. Институт физики и математики АН ЛитССР, Вильнюс, 1976.
- [12] А. П. Юцис, А. А. Бандзайтис. *Теория момента количества движения в квантовой механике*, «Минтис», Вильнюс, 1965.
- [13] А. Д. Гурчумелия, У. И. Сафронова, И. А. Шавтвалишвили. В сб.: *Автоионизационные явления в атомах*, 136. Изд. МГУ, М., 1976.
- [14] H. P. Summers. *Astrophys. J.*, **179**, L45, 1973.
- [15] R. L. Kauffman, C. W. Woods, K. A. Jamison, P. Richard. *Phys. Rev. A*, **11**, 872, 1975.

Поступило в Редакцию 28 марта 1978 г.