

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИЗУЧЕНИЕ СПЕКТРОВ Li-ПОДОБНЫХ МНОГОЗАРЯДНЫХ ИОНОВ

А. Ф. Шестаков

На основе релятивистских хартри-фоковских энергий второго порядка с учетом энергии брейтовского взаимодействия и поправок на лэмбовский сдвиг и корреляцию рассчитаны положения нижних термов $2P_{1/2}$ и $2P_{3/2}$ для Li-подобных многозарядных ионов при $Z \leq 28$, а также энергии $2-n$ -переходов ($n=3-7$) для иона Fe XXIV. Учет радиационных поправок при больших Z является существенным, поскольку он приводит к значительному улучшению согласия вычисленных длин волн и дублетных расщеплений с экспериментальными данными.

Теоретическое изучение спектров многозарядных ионов представляет важную задачу в связи с экспериментальным изучением высокоионизированных состояний атомов [1], астрофизическими исследованиями излучения звезд в рентгеновской области спектра [2], а также ввиду той важной роли, которую играют многозарядные ионы в балансе энергии термоядерной плазмы [3].

В настоящей работе произведен расчет положений термов Li-подобных многозарядных ионов с $Z=3-28$. Отправным пунктом вычислений были релятивистские хартри-фоковские уравнения, сформулированные Грантом [4], для решения которых использовалась теория возмущений по электростатическому взаимодействию электронов (детали расчета приведены в работе [5]). В пренебрежении величинами третьего и более высокого порядка малости по $1/Z$ и с учетом поправки на брейтовское взаимодействие электронов полная энергия атомной системы была представлена в виде

$$E(Z) = Z^2 E_0^R(Z\alpha) + Z \Delta E_1^{\text{RHF}}(Z\alpha) + \Delta E_2^{\text{RHF}}(Z\alpha) + \Delta E_B(Z), \quad (1)$$

где величина энергии брейтовского взаимодействия ΔE_B вычислялась на релятивистских хартри-фоковских функциях первого порядка. Анализ расхождения результатов расчета по формуле (1) с экспериментальными данными показал, что при малых значениях Z существенны корреляционная поправка второго порядка и хартри-фоковская поправка третьего порядка, причем выполнение условия $Z\alpha \ll 1$ позволяет использовать в качестве этих поправок их значения в нерелятивистском пределе — ΔE_3^{cor} и ΔE_3^{HF} . Расхождение при больших значениях Z в основном устраняется после учета поправок на лэмбовский сдвиг — ΔE_L , которые находились в приближении невзаимодействующих электронов по значениям ΔE_L для соответствующих состояний одноэлектронного иона с тем же зарядом ядра.

Полученные данные с учетом вышеуказанных поправок приведены в табл. 1—3. Значения ΔE_3^{cor} и ΔE_3^{HF} взяты из работ [6, 7]. При вычислении $\Delta E_L(Z)$ использованы разложения $\Delta E_L(Z)$ в ряд по $Z\alpha$ и $\ln(Z\alpha)$ [8, 9]. Исключение составляет случай $2s_{1/2}$ и $2p_{1/2}$ -состояний, когда собственно-энергетический вклад в $\Delta E_L(Z)$ находился интерполяцией по данным точного расчета [9].

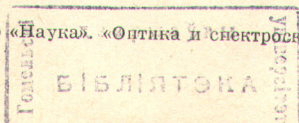


Таблица 1

Разности термов и длины волн для резонансного перехода
 $1s^2 2p^2 P \rightarrow 1s^2 2s^2 S$ в изоэлектронной серии Li

Z	A	Б	В	Г	Д
3	21337.8	15306	6531.9	6709.761	6661.6
	21343.1	15311	6531.4	6709.609	6661.3
4	36872.6	32047	3120.4	3131.969	3141.7
	36884.8	32059	3119.2	3131.321	3140.9
5	52427.7	48322	2069.5	2067.889	2076.5
	52467.7	48363	2067.7	2066.432	2074.8
6	68010.6	64377	1553.3	1550.768	1556.2
	68123.5	64491	1550.6	1548.195	1553.4
7	83629.5	80323	1245.0	1242.804	1246.1
	83893.2	80589	1240.9	1238.821	1241.8
8	99291.9	96216	1039.3	1037.618	1039.5
	99826.3	96754	1033.5	1031.912	1033.6
9	115005.7	112095	892.11	890.097	891.79
	115981.3	113076	884.37	882.423	883.87
10	130778	127978	781.38	780.324	780.71
	132425	129633	771.41	770.409	770.56
11	146618	143886	694.99	694.17	694.06
	149235	146515	682.53	681.72	681.44
12	162532	159831	625.67	624.93	624.52
	166497	163813	610.46	609.76	609.20
13	178529	175822	568.77	568.12	567.43
	184305	181621	550.61	550.01	549.22
14	194617	191870	521.20	520.66	519.70
	202763	200050	499.90	499.37	498.41
15	210804	207984	480.82	480.42	479.18
	221986	219209	456.20	455.78	454.67
16	227098	224170	446.10	445.78	444.33
	242096	239225	418.02	417.60	416.47
17	243508	240437	415.92	415.50	414.02
	263228	260228	384.30	383.96	382.72
18	260041	256783	389.43	389.12	387.41
	285522	282347	354.17	353.80	352.62
19	276707	273230	365.99	365.73	363.85
	309132	305757	327.06	326.71	325.54
20	293513	289786	345.08	344.80	342.83
	334221	330619	302.46	302.22	301.01
21	310470	306436	326.33		323.96
	360962	357078	280.05		278.68
22	327586	323209	309.40		306.92
	389538	385341	259.21		258.23
23	344869	340103	294.03		291.45
	420144	415592	240.621		239.46
24	362368	357124	280.02		277.34
	452984	448031	223.20		222.17
25	379975	374281	267.18		264.41
	488275	482908	207.08		206.20
26	397817	391582	255.37	255.29	252.52
	526245	520351	192.18	192.14	191.44
27	415864	409029	244.48		241.53
	567132	560691	178.35		177.77
28	434127	426635	234.39		231.36
	611188	604148	165.52		165.10

Таблица 2
 Расщепление терма $1s^2 2p^2 P$, в см^{-1}

Z	Получено на основе формулы (1)	Получено на основе формулы (1) с учетом ΔE_L	Экспериментальные данные [10]	Теоретические данные [11]	Теоретические данные [7]
3	5.34	5.41	0.34		0.62
4	12.2	12.4	6.61		8.6
5	40.0	40.5	34.10	34.0	40
6	113	114	107.17	109	117
7	264	266	258.70	264	275
8	534	538	532.4	542	554
9	976	981	977	994	990
10	1647	1655	1649	1680	1690
11	2618	2630	2631	2670	2670
12	3965	3982	3981	4040	4030
13	5775	5799	5798	5880	5850
14	8146	8177	8188	8290	8420
15	11182	11223	11253	11400	11250
16	14998	15050	15139	15200	15060
17	19720	19786	19770	20000	19750
18	25481	25564	25655	25800	25470
19	32425	32527	32656	32900	32340
20	40708	40833	40862	41200	40530
21	50492	50642		51100	50150
22	61952	62132		62600	60690
23	75275	75489		76600	74490
24	90656	90907		91600	89540
25	108300	108627		109000	106770
26	128428	128769	128742	130000	126350
27	151268	151662		153000	148500

В табл. 1 в колонках А и Б указаны положения термов $^2P_{1/2}$ и $^2P_{3/2}$ в обратных сантиметрах для Li-подобных ионов, причем верхние значения относятся к термам $^2P_{1/2}$, а нижние значения — к термам $^2P_{3/2}$; А — на основе расчета по формуле (1), Б — с дополнительным учетом поправок ΔE_L и $\Delta E_{\text{cor}}^2 + (1/Z) \Delta E_3^{\text{HF}}$. В трех последних колонках приведены величины длин волн для переходов $(1s_{1/2})^2 2s_{1/2} - (1s_{1/2})^2 2p_{1/2}$, $2p_{3/2}$ в Å: В — полученные значения с использованием энергий перехода из столбца Б, Г — экспериментальные данные [10], Д — нерелятивистский расчет по теории возмущений с включением членов до третьего порядка и с приближенным учетом релятивистских поправок [7]. Из табл. 1 видно, что последовательный учет релятивистских эффектов значительно улучшает согласие с экспериментом при больших Z. Имеющееся расхождение между рассчитанными и экспериментальными термами в большинстве случаев не превышает 200 см^{-1} и примерно постоянно вдоль Z. Ввиду того что с ростом Z это различие становится сравнимым с экспериментальной ошибкой, трудно проанализировать его Z-зависимость и указать поправки, ответственные за него.

В табл. 2 полученные значения дублетных расщеплений терма $2p^2 P$ Li-подобных ионов сравниваются с экспериментальными и теоретическими данными. Отличие найденных значений от экспериментальных расщеплений при малых Z обусловлено не учтенными вкладами высших порядков теории возмущений в релятивистскую хартри-фоковскую энергию атомной системы. С ростом Z величина этих отброшенных членов становится пренебрежимо малой и после учета поправок на лэмбовский сдвиг полученные значения дублетных расщеплений согласуются с измеренными в пределах экспериментальных ошибок.

В табл. 3 приведены данные по длинам волн 2—n-переходов для более подробно изученного иона Fe XXIV. В случае 2—3-переходов, когда известны соответствующие значения ΔE_L и ΔE_{cor}^2 , даны также длины волн с учетом этих поправок. Для большинства переходов различие между

Таблица 3
Длины волн 2—n-переходов для иона Fe XXIV (в Å)

Переход	Получено на основе формулы (1)	Получено на основе формулы (1) с учетом $\Delta E_L, \Delta E_{\frac{1}{2}}^{\text{ор}}$	Экспериментальные значения [12]	Теоретические данные [7]
$2p^2 P_{3/2} - 3s^2 S_{1/2}$	11.436	11.4318	11.426	11.435
$2p^2 P_{1/2} - 3s^2 S_{1/2}$	11.271	11.2664	11.261	11.272
$2p^2 P_{3/2} - 3d^2 D_{3/2}$	11.194	11.1915	11.187	11.195
$2p^2 P_{3/2} - 3d^2 D_{5/2}$	11.179	11.1764	11.171	11.181
$2p^2 P_{1/2} - 3d^2 D_{3/2}$	11.036	11.0325	11.030	11.039
$2s^2 S_{1/2} - 3p^2 P_{1/2}$	10.660	10.6647	10.663	10.664
$2s^2 S_{1/2} - 3p^2 P_{3/2}$	10.617	10.6215	10.619	10.621
$2p^2 P_{3/2} - 4s^2 S_{1/2}$	8.377		8.371	
$2p^2 P_{1/2} - 4s^2 S_{1/2}$	8.288		8.285	
$2p^2 P_{3/2} - 4d^2 D_{3/2}$	8.323		8.316	
$2p^2 P_{3/2} - 4d^2 D_{5/2}$	8.319		8.316	
$2p^2 P_{1/2} - 4d^2 D_{3/2}$	8.235		8.231	
$2s^2 S_{1/2} - 4p^2 P_{1/2}$	7.995		7.993	
$2s^2 S_{1/2} - 4p^2 P_{3/2}$	7.984		7.983	
$2p^2 P_{3/2} - 5s^2 S_{1/2}$	7.462		—	
$2p^2 P_{1/2} - 5s^2 S_{1/2}$	7.391		—	
$2p^2 P_{3/2} - 5d^2 D_{3/2}$	7.440		7.438	
$2p^2 P_{3/2} - 5d^2 D_{5/2}$	7.438		7.438	
$2p^2 P_{1/2} - 5d^2 D_{3/2}$	7.369		7.370	
$2s^2 S_{1/2} - 5p^2 P_{1/2}$	7.168		7.169	
$2s^2 S_{1/2} - 5p^2 P_{3/2}$	7.164			
$2p^2 P_{3/2} - 6s^2 S_{1/2}$	7.046		—	
$2p^2 P_{1/2} - 6s^2 S_{1/2}$	6.982		—	
$2p^2 P_{3/2} - 6d^2 D_{3/2}$	7.034		7.033	
$2p^2 P_{3/2} - 6d^2 D_{5/2}$	7.033			
$2p^2 P_{1/2} - 6d^2 D_{3/2}$	6.971		6.972	
$2s^2 S_{1/2} - 6p^2 P_{1/2}$	6.788		6.787	
$2s^2 S_{1/2} - 6p^2 P_{3/2}$	6.785			
$2p^2 P_{3/2} - 7s^2 S_{1/2}$	6.817		—	
$2p^2 P_{1/2} - 7s^2 S_{1/2}$	6.758		—	
$2p^2 P_{3/2} - 7d^2 D_{3/2}$	6.810		6.808	
$2p^2 P_{3/2} - 7d^2 D_{5/2}$	6.810			
$2p^2 P_{1/2} - 7d^2 D_{3/2}$	6.751		—	
$2s^2 S_{1/2} - 7p^2 P_{1/2}$	6.577		6.583	
$2s^2 S_{1/2} - 7p^2 P_{3/2}$	6.576			

вычисленными и измеренными длинами волн не превосходит экспериментальной ошибки 0.003 Å. Имеющееся расхождение в 0.006 Å для некоторых переходов может быть объяснено ошибочной идентификацией линий.

Литература

- [1] M. Swartz, S. Kastner, E. Rotte, W. Neutert. J. Phys., B4, 1747, 1971; S. Goldsmith, U. Feldman, L. Cohen Astr. J., 174, 209, 1972; Е. В. Аглицкий, В. Л. Бойко, О. И. Крохин, С. А. Пикюз, А. Я. Фаенов. Квант. электрон., 1, 2067, 1974.

- [2] С. Л. Манделъштам, Э. Я. Кононов. Усп. физ. наук, 117, 565, 1975;
Л. П. Пресняков. Усп. физ. наук, 119, 49, 1976.
- [3] D. Meade. Nucl. Fusion, 14, 383, 1974.
- [4] I. P. Grant. Adv. Phys., 19, 747, 1970.
- [5] А. Ф. Шестаков. Опт. и спектр., 41, 705, 1976.
- [6] U. I. Safronova. JQSRT, 15, 231, 1975.
- [7] U. I. Safronova. JQSRT, 14, 251, 1974.
- [8] G. W. Ericson, D. R. Yennie. Ann. Phys., 35, 271, 1968.
- [9] P. J. Mohr. Phys. Rev. Lett., 34, 1050, 1975.
- [10] B. C. Fawcett. Preprint ARU-R2, 1971, Culham laboratory.
- [11] S. O. Kastner. J. Opt. Soc. Am., 61, 335, 1971.
- [12] Е. В. Аглицкий, В. А. Бойко, С. А. Пикюз, А. Я. Фаенов. Пре-
принт № 56, ФИАН, 1974.

Поступило в Редакцию 4 июля 1978 г.

РЕПОЗИТОРИЙ ГГУ ИМЕНИ Ф. СКОРИНЫ