

УДК 539.184.01

АВТОИОНИЗАЦИОННЫЕ СОСТОЯНИЯ ГЕЛИЕПОДОБНЫХ И ЛИТИЕПОДОБНЫХ ИОНОВ С БОЛЬШИМИ КВАНТОВЫМИ ЧИСЛАМИ n

А. В. Виноградов и У. И. Сафронова

Получены асимптотические формулы для первых двух членов ряда теорий возмущений для состояний $2l'nl$, $1s2l'nl$ при $n \rightarrow \infty$. Для хорошо известных формул с константой экранирования σ и квантовым дефектом Δ получено разложение в ряд по заряду ядра Z и n . Обсуждается влияние наложения конфигураций на коэффициенты при степенях Z^{-k} и $n^{-k'}$ для двух членов ряда теории возмущений. Численные результаты получены для состояний $2s3l$.

Одной из характерных особенностей рентгеновских спектров многозарядных ионов, получаемых в лабораторной и астрофизической плазме, является наличие диэлектронных сателлитов. Так, например, вблизи резонансных линий водородоподобных и гелиепоподобных ионов $2p-1s$ и $1s2p-1s^2$ располагается ряд менее интенсивных линий, начинающихся с автоионизационных состояний, типа $2pnl-1snl$, $1s2pnl-1s^2nl$.

Сателлиты водородоподобных и гелиепоподобных ионов, соответствующие $n=2$, в настоящее время хорошо изучены теоретически и экспериментально [1-8]. Измерение их относительных интенсивностей используется для определения температуры и плотности плазмы [9, 10]. При увеличении n сателлиты все теснее примыкают к резонансной линии. Сателлиты водородоподобных и гелиепоподобных ионов, соответствующие $n=3$, находятся на границе разрешения современных спектральных приборов. Поэтому сателлиты с $n > 4$ вносят фактически вклад в измеряемую интенсивность резонансной линии. В связи с этим изучение сателлитов необходимо как для правильной расшифровки, так и для интерпретации интенсивностей спектров многозарядных ионов.

В настоящей работе исследуется нерелятивистская часть энергии автоионизационных состояний типа $2l'nl$ и $1s2l'nl$ с целью выяснения положения сателлитов с большими n относительно резонансной линии. В двух последующих разделах мы рассмотрим два порядка теории возмущений, получим асимптотические формулы при больших n . В последнем разделе мы обсудим положение конфигураций и приведем результаты для состояний $2l'3l$.

Будем исходить из разложения энергии иона по заряду ядра Z

$$E = E^{(0)}Z^2 + E^{(1)}Z + E^{(2)} + \frac{1}{Z}E^{(3)} + \dots \quad (1)$$

Это разложение соответствует теории возмущений по межэлектронному взаимодействию. Как показало систематическое сопоставление теоретических и экспериментальных данных [11] для достижения точности, необходимой для расшифровки спектров, следует сохранить в разложении (1) по крайней мере три первых члена.

Ставя задачу определения энергии автоионизационных состояний $2l'nl$, $1s2l'nl$ с большим главным квантовым числом n , разложим коэффициенты $E^{(0)}$, $E^{(1)}$, $E^{(2)}$ в ряд по $1/n$. Энергия нулевого приближения, очевидно, равна $-Z^2\left(\frac{1}{8} + \frac{1}{2n^2}\right)$ для состояний $2l'nl$ и $-Z^2\left(\frac{5}{8} + \frac{1}{2n^2}\right)$ для состояний $1s2l'nl$.¹

Для определения зависимости от n энергий первого и второго порядка $E^{(1)}$ и $E^{(2)}$ требуется специальное рассмотрение.

1. Первый порядок теории возмущений

Выражение для $E^{(1)}$ имеет вид [12]

$$E_1(2l'nl; LS) = (2l+1)(2l'+1) \sum_k (-1)^{l+l'+k} \left[R_k(2l'nl; n12l') \times \right. \\ \left. \times (llk)(l'l'k) \begin{Bmatrix} l & l' & L \\ l' & l & k \end{Bmatrix} + (-1)^{L+S} R_k(2l'nl; 2l'nl) (ll'k)^2 \begin{Bmatrix} l & l' & L \\ l & l' & k \end{Bmatrix} \right], \quad (2)$$

$(l_1 l_2 k)$ — модуль $3j$ -коэффициента Вигнера с $m_i = 0$, $\begin{Bmatrix} l & l' & L \\ l & l' & k \end{Bmatrix}$ — $6j$ коэффициент Вигнера. R_k — радиальный интеграл, вычисленный с водородными волновыми функциями,

$$R_k(n_1 l_1 n_2 l_2; n_3 l_3 n_4 l_4) = \int_0^\infty dr_1 r_1^2 \int_0^\infty dr_2 r_2^2 \frac{r_1^k}{r_1^{k+1}} R_{n_1 l_1}(r_1) R_{n_2 l_2}(r_2) R_{n_3 l_3}(r_2) R_{n_4 l_4}(r_1). \quad (3)$$

Состояния трехэлектронной системы $1s2l'nl$ будем описывать в рамках генеалогической схемы: $(1s2l' [L_1 S_1] nL S)$, где $L_1 S_1$ — терм атомного остатка. Тогда энергия первого порядка имеет вид

$$E(1s2l' [L_1 S_1] nL S) = E_1(1s2l'; L_1 S_1) + \\ + \sum_{S_2} C(S_2) [E_1(n12l'; L S_2) + E_1(n1s; L S_2)]. \quad (4)$$

Коэффициент $C(S_2)$ зависит от терма остатка

$$C(S_2) = \begin{cases} \frac{1}{4} \delta(S_2, 0) + \frac{3}{4} \delta(S_2, 1) & \text{для } S_1 = 0, S = \frac{1}{2}, \\ \frac{3}{4} \delta(S_2, 0) + \frac{1}{4} \delta(S_2, 1) & \text{для } S_1 = 1, S = \frac{1}{2}, \\ 1 \delta(S_2, 1) & \text{для } S_1 = 1, S = \frac{3}{2}. \end{cases}$$

Перейдем к рассмотрению асимптотических пределов выражений (2) и (4) при больших значениях главного квантового числа n . Как известно, радиальные функции в пределе $n \rightarrow \infty$ имеют вид [13]

$$R_{nl}(r) \simeq \frac{2}{n^{3/2}} \frac{1}{\sqrt{2r}} J_{2l+1}(\sqrt{8r}), \quad (5)$$

где $J_{2l+1}(x)$ — функция Бесселя.

Таким образом, радиальные интегралы R_k в (2) при стремлении n к бесконечности ведут себя $1/n^3$. Исключение составляет прямой радиальный интеграл с мультипольностью, равной нулю. Чтобы выделить зависимость от n , представим его в виде

$$R_0(nlpl; plnl) = \int_0^\infty dr_1 r_1^2 R_{nl}^2(r_1) \left[\frac{1}{r_1} + \int_{r_1}^\infty dr_2 r_2^2 R_{pl}^2(r_2) \left(\frac{1}{r_2} - \frac{1}{r_1} \right) \right]. \quad (6)$$

¹ Всюду ниже используются атомные единицы.

Согласно теореме вириала, первый интеграл равен $1/n^2$. Остальная часть убывает пропорционально $1/n^3$, так как обменные интегралы и прямые интегралы с $k \neq 0$. Таким образом, для прямого интеграла получаем

$$R_0(nlp\lambda; p\lambda nl) \simeq_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n^2} + \frac{2}{n^3} \int_0^\infty dr_1 r_1 J_{2l+1}^2(\sqrt{8r_1}) \int_{r_1}^\infty dr_2 r_2^2 R_{p\lambda}^2(r_2) \left[\frac{1}{r_2} - \frac{1}{r_1} \right], \quad (7)$$

$$R_k(nlp\lambda; p\lambda nl) \simeq \frac{2}{n^3} \int_0^\infty dr_1 r_1 J_{2l+1}^2(\sqrt{8r_1}) \times \\ \times \left[\int_{r_1}^\infty dr_2 r_2^2 \frac{r_1^k}{r_2^{k+1}} - \int_0^{r_1} dr_2 r_2^2 \frac{r_1^k}{r_1^{k+1}} \right] R_{p\lambda}^2(r_2), \quad (8)$$

а для обменного

$$R_k(nlp\lambda; nl p\lambda)_{n \rightarrow \infty} \simeq \frac{4}{n^3} \int_0^\infty dr_1 r_1^{3/2} J_{2l+1}(\sqrt{8r_1}) R_{p\lambda}(r_1) \int_{r_1}^\infty dr_2 r_2^{3/2} J_{2l+1}(\sqrt{8r_2}) R_{p\lambda}(r_2). \quad (9)$$

Подставляя выражения (7)–(9) в (2), находим

$$E^{(1)}(2l'nl; LS) = \frac{1}{n^2} + \frac{1}{n^3} C(2l', l; LS). \quad (10)$$

Соответственно для трехэлектронной системы получаем из (4)

$$E^{(1)}(1s2l' [L_1 S_1] nl LS) = \frac{2}{n^2} + E_1(1s2l'; L_1 S_1) + \\ + \frac{1}{n^3} \sum_{S_2} C(S_2) [C(2l'; l; LS_2) + C(1s, l; LS_2)]. \quad (11)$$

Константы $C(2l' l; LS)$ выражаются через $6j$ -символы и радиальные интегралы (7)–(9). Перейдем к рассмотрению второго порядка.

2. Второй порядок теории возмущений

Во втором порядке по электростатическому взаимодействию электронов вклад дают две диаграммы: $2F$ и $2G$ (см. рисунок). В случае двухэлектронной системы вклад от диаграммы $2G$ равен нулю. Поэтому $E^{(2)}(2l'nl; LS) = E_{2F}(2l'nl; LS)$

$$E_{2F}(2l'nl; LS) = (2l+1)(2l'+1) \sum_k (-1)^{l+l'+L+k} \times \\ \times \left[S_k(2l'nl; nl2l') \begin{Bmatrix} l & l' & L \\ l' & l & k \end{Bmatrix} + (-1)^{L+s} S_k(2l'nl; 2l'nl) \begin{Bmatrix} l & l' & L \\ l & l' & k \end{Bmatrix} \right], \quad (12)$$

$$S_k(n_1 l_1 n_2 l_2; n_4 l_4 n_3 l_3) = \sum_{p l, p' l'} \frac{(2l+1)(2l'+1)}{E_p + E_{p'} - E_{n_1} - E_{n_2}} \times \\ \times \sum_{\chi \chi'} (ll_1 \chi) (l' l_2 \chi) R_\chi(plp'l'; n_2 l_2 n_1 l_1) R_{\chi'}(plp'l'; n_4 l_4 n_3 l_3) (ll_3 \chi') (l' l_4 \chi') \times \\ \times (2k+1) (-1)^{\chi-\chi'+l_1+l_2} \begin{Bmatrix} \chi' & \chi & k \\ l_2 & l_4 & l' \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} \chi' & \chi & k \\ l_1 & l_3 & l \end{Bmatrix}. \quad (13)$$

Суммирование в (13) проводится по всему водородному спектру (как дискретному, так и непрерывному), исключая члены, в которых индексы p, p' принимают значение n_1, n_2 .

Рассмотрим поведение S_k при больших n . Выясним, следуя (13), те члены, которые будут вести себя как $1/n^2$

$$\begin{aligned} S'_k(n'l'nl; nln'l') &\simeq \sum_{p \neq n} \frac{1}{E_p - E_n} R_0^2(pln'l'; n'l'nl) (2k+1) (-1)^{l+l'} \times \\ &\times \left\{ \begin{matrix} 0 & 0 & k \\ l & l & l \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} 0 & 0 & k \\ l' & l' & l' \end{matrix} \right\} = \delta(k, 0) \frac{1}{\sqrt{(2l+1)(2l'+1)}} \sum_{p \neq n} \frac{1}{E_p - E_n} R_0^2(pln'l'; n'l'nl) = \\ &= \delta(k, 0) \frac{1}{\sqrt{(2l+1)(2l'+1)}} \sum_{p \neq n} \frac{1}{E_p - E_n} \left\langle pl \left| \frac{1}{r} \right| nl \right\rangle^2. \end{aligned} \quad (14)$$

Легко показать, что сумма по p равна $-1/2n^2$. Таким образом

$$S'_k(n'l'nl; nln'l') \simeq -\frac{1}{2n^2} \frac{1}{\sqrt{(2l+1)(2l'+1)}}. \quad (15)$$

Подставляя в (12) находим

$$E^{(2)} = E_{2F}(2l'nl; LS) \simeq -\frac{1}{2n^2} + \frac{1}{n^3} \alpha(2l'l; LS). \quad (16)$$

В случае трехэлектронной системы для расчета вклада от диаграммы $2F$ мы можем воспользоваться формулой (4), заменив в ней индекс «1» на индекс «2». Используя далее формулу (16), находим

$$\begin{aligned} E_{2F}(1s2l' \begin{matrix} 1, 3l' \\ 1, 3l' \end{matrix} nlLS) &= E_{2F}(1s2l'; 1, 3l') - \\ &- \frac{4}{n^2} + \frac{1}{n^3} \sum_{S_2} C(S_2) [\alpha(2l', l; LS_2) + \\ &+ \alpha(1sl; LS_2)]. \end{aligned} \quad (17)$$

Диаграммы второго порядка.

Перейдем теперь к расчету диаграммы $2G$. Эта диаграмма дает вклад для состояний с тремя электронами и выше. Таким образом, для состояний с тремя электронами мы имеем

$$\begin{aligned} E_{2G}(1s2l' [L_{12}S_{12}] nlLS) &= -(2l+1)(2l'+1) \sum_{l_1 l_2 l_3} \sum_{l'_1 l'_2 l'_3} \sum_{\chi' \chi \lambda} (2\lambda+1) \times \\ &\times (\chi \lambda l_1) (\chi l'_2 l_2) (\chi' \lambda l'_1) (\chi' l_3 l'_2) (-1)^{\lambda+\chi+\chi'+\frac{1}{2}(l_1+l'_1-l_2-l'_2+l_3+l'_3)} \times \\ &\times \sum_n \frac{1}{E_n + E_3 - E_1 - E_2} R_\chi(n\lambda n'_3 l'_3; n_2 l_2 n_1 l_1) R_{\chi'}(n\lambda n_3 l_3; n'_2 l'_2 n'_1 l'_1) \times \\ &\times \sum_{L''_{12} S''_{12}} \sum_{L''_{12} S''_{12}} (-1)^{S''_{12}+S''_{12}} \left\{ \begin{matrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & S''_{12} \\ L''_{12} & S''_{12} & S''_{12} \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} l'_3 & \lambda & L''_{12} \\ l_1 & l_2 & \chi \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} l_3 & \lambda & L''_{12} \\ l'_1 & l'_2 & \chi' \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} L''_{12} & l'_3 & L \\ L''_{12} & l_3 & \lambda \end{matrix} \right\} \times \\ &\times \sqrt{(2S''_{12}+1)(2S''_{12}+1)(2L''_{12}+1)(2L''_{12}+1)} C_{l_1 s l_2 l'_1 l'_3 l} (L_{12} S_{12}, L''_{12} S''_{12}, LS) \times \\ &\times C_{l'_1 s l'_2 l'_3 l} (L_{12} S_{12}, L''_{12} S''_{12}, LS), \end{aligned} \quad (18)$$

где

$$\begin{aligned} C_{l_1 s l_2 l'_1 l'_3 l} (L_{12} S_{12}, L''_{12} S''_{12}, LS) &= Q(1s2l'nl; L_{12} S_{12}) \delta(L_{12} S_{12}, L''_{12} S''_{12}) + \\ &+ \left\{ \begin{matrix} 1/2 & S''_{12} & 1/2 \\ 1/2 & S_{12} & S \end{matrix} \right\} \sqrt{(2S_{12}+1)(2S''_{12}+1)} (-1)^{l+l'+L} \delta(L_{12}, l') \times \\ &\times [Q(nl2l'1s; L''_{12} S''_{12}) \delta(L''_{12}, L) + (-1)^{S_{12}} Q(nl1s2l'; L''_{12} S''_{12}) \delta(L''_{12}, l)]. \end{aligned} \quad (19)$$

Для Q имеем

$$Q(n_1^0 j_1 n_2^0 j_2 n_3^0 j_3; LS) = \delta(n_3^0 j_3, n_3 l_3) [\delta(n_1^0 j_1, n_1 l_1) \delta(n_2^0 j_2, n_2 l_2) + \\ + (-1)^{j_1+j_2+L+S} \delta(n_1^0 j_1, n_2 l_2) \delta(n_2^0 j_2, n_1 l_1)]. \quad (20)$$

Как и для диаграммы $2F$, выделим в E_{2G} члены, ведущие себя как $1/n^2$. Легко видеть, что в суммах (18) мы должны рассмотреть следующие члены: $\chi = \chi' = 0$, $\lambda = l_1 = l'_1$, $n_3 l'_3 = n_2 l_2$, $n_3 l_3 = n_2 l'_2$. Из всех слагаемых в (18) этим условиям удовлетворяют два члена: $n_2 l_2 = 1s$, $n_3 l_3 = 2l'$ и $n_3 l'_3 = 1s$, $n_2 l'_2 = 2l'$. Эти члены равны друг другу. Таким образом, находим

$$E_{2G}'(1s2l' [L_{12}S_{12}] nlLS) = -2 \sum_{p \neq n} \frac{1}{E_p - E_n} R_0(pl2l'; 2l'nl) \times \\ \times R_0(pl1s; 1snl) \sum_{s_{12}'' s_{12}'} (-1)^{s_{12}''+s_{12}'+s_{12}} \sqrt{(2S_{12}+1)(2S_{12}''+1)(2S_{12}'+1)} \times \\ \times \begin{Bmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & S_{12}'' \\ \frac{1}{2} & S & S_{12}' \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} \frac{1}{2} & S_{12}'' & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & S_{12} & S \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} \frac{1}{2} & S_{12}'' & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & S_{12} & S \end{Bmatrix}. \quad (21)$$

Сумма по S_{12}'' , S_{12}' легко вычисляется и дает 1. Выделяя в радиальных интегралах член, ведущий себя как $1/n^2$, находим

$$E_{2G}'(1s2l' [L_{12}S_{12}] nlLS) = -2 \sum_{p \neq n} \frac{\left\langle pl \left| \frac{1}{r} \right| nl \right\rangle^2}{E_p - E_n} = -\frac{1}{n^2}. \quad (22)$$

Таким образом, для диаграммы $2G$ находим

$$E_{2G}(1s2l' [L_{12}S_{12}] nlLS)_{n \rightarrow \infty} \simeq -\frac{1}{n^2} + \frac{1}{n^3} \beta(1s2l' [L_{12}S_{12}] lLS). \quad (23)$$

Собирая члены первого и второго порядков теории возмущений, полученные в разд. 1 и 2, имеем

$$E(2l'nl; LS) = -Z^2 \left(\frac{1}{8} + \frac{1}{2n^2} \right) + Z \left(\frac{1}{n^2} + \frac{1}{n^3} C(2l', l; LS) \right) - \\ - \frac{1}{2n^2} + \frac{1}{n^3} \alpha(2l', l; LS), \quad (24)$$

$$E(1s2l' [L_{12}S_{12}] nlLS) = -Z^2 \left(\frac{5}{8} + \frac{1}{2n^2} \right) + Z \left\{ \frac{2}{n^2} + E(1s2l', L_{12}S_{12}) + \right. \\ \left. + \frac{1}{n^3} \sum_{s_2} C(S_2) [C(2l', l; LS_2) + C(1sl; lS_2)] - \frac{1}{n^2} + \right. \\ \left. + E_{2F}(1s2l'; 1, 3l') + \frac{1}{n^3} \sum_{s_2} C(S_2) [\alpha(2l', l; LS_2) + \alpha(1s, l; lS_2)] - \right. \\ \left. - \frac{1}{n^2} + \frac{1}{n^3} \beta(1s2l' [l'S_{12}] lLS) \right\}. \quad (25)$$

3. Экранирование и квантовый дефект

Как видно из (24), (25), члены $1/n^2$ собираются в простую формулу

$$E(2l'nl; LS) = -\frac{Z^2}{8} - \frac{1}{2n^2} (Z-1)^2 + \frac{2}{n^3} \{ZC(2l'l; LS) + \alpha(2l'l; LS)\}, \quad (26)$$

$$E(1s2l' [L_{12}S_{12}] nlLS) = E(1s2l'; L_{12}S_{12}) - \frac{1}{2n^2} (Z-2)^2 +$$

$$+ \frac{1}{n^2} \left\{ \sum_{S_2} C(S_2) [ZC(2l', l; LS_2) + \alpha(2l', l; LS_2) + ZC(1sl; LS_2) + \right. \\ \left. + \alpha(1sl; LS_2)] + \beta(1s2l' [L_{12}S_{12}] LS) \right\}. \quad (27)$$

Используя полученные разложения по $1/Z$ и $1/n$, можно исследовать хорошо известные эмпирические формулы для описания рассматриваемых систем.

Рассмотрим сначала двухэлектронную систему. Для экстраполяции энергии вдоль изоэлектронной последовательности удобно использовать формулы полуэмпирического характера, включающие константу экранирования, описывающую экранировку оптического электрона внутренними [14]. Действуя в духе такого подхода, запишем энергию двухэлектронной системы в виде

$$E(2l'nl; LS) = -\frac{Z^2}{8} - \frac{1}{2n^2} (z - 1 - \sigma)^2. \quad (28)$$

В общем случае для σ имеем

$$\sigma = \frac{1}{n} \left(\sigma_0 + \frac{\sigma_1}{Z} + \frac{\sigma_2}{Z^2} + \dots \right) + \frac{1}{n^2} \left(\alpha_0 + \frac{\alpha_1}{Z} + \frac{\alpha_2}{Z^2} + \dots \right). \quad (29)$$

Сравнивая (28) и (26), для σ_0 и σ_1 находим

$$\sigma_0 = C(2l', l; LS) \quad \sigma_1 = \alpha(2l', l; LS). \quad (30)$$

Формулы (28)—(30) удобны для экстраполяции энергии вдоль изоэлектронной последовательности. Наше рассмотрение, основанное на теории возмущений, дало возможность явно вычислить константу экранирования σ .

При рассмотрении высоковозбужденных состояний с большими n (практически $n \geq 5$) пользуются формулой квантового дефекта

$$E(2l'nl; LS) = -\frac{Z^2}{8} - \frac{(Z-1)^2}{2(n-\Delta)^2}. \quad (31)$$

Ряд для Δ по $1/Z$ и по $1/n$ имеет вид

$$\Delta = \frac{\Delta_0}{Z} + \frac{\Delta_1}{Z^2} + \dots + \frac{1}{n} \left(\frac{\gamma_0}{Z} + \frac{\gamma_1}{Z^2} + \dots \right). \quad (32)$$

Для Δ_0 и Δ_1 из (26) имеем

$$\Delta_0 = C(2l', l; LS); \quad \Delta_1 = 2\Delta_0 + \alpha(2l', l; LS). \quad (33)$$

Приведенные формулы легко обобщаются и на трехэлектронные системы, что видно из сопоставления (26) и (27).

4. Диагонализация матрицы

В предыдущем разделе, строго говоря, мы привели формулы не для энергии, а для диагональных матричных элементов. В случае рассматриваемых нами автоионизационных состояний для определения истинного значения энергии необходимо учесть наложение конфигураций. Так, например, конфигурация $2snl$ должна рассматриваться вместе с конфигурациями $2pn(l \pm 1)$. Учет этого обстоятельства приводит к необходимости диагонализировать матрицы второго и третьего порядков. Соответственно для трехэлектронных систем возникают матрицы более высоких порядков. Легко убедиться, что недиагональные матричные элементы в отличие от диагональных (сравним с (11) и (16)) не содержат членов порядка $1/n^2$ ни в первом, ни во втором порядках теории возмущений. Это обстоятельство приводит к тому, что формулы (26), (27) и (28)—(33), полученные, строго говоря, для диагональных матричных элементов, сохраняют

Таблица 1

$$E(A, B) = -\frac{13}{72} Z^2 + \Delta \epsilon_1(A, B) Z + \Delta \epsilon_2(A, B),$$

$$E = -\frac{13}{72} Z^2 + \Delta E_1 Z + \Delta E_2$$

A, B	Терм	$\Delta \epsilon_1$	ΔE_1	$-\Delta \epsilon_2$	$-\Delta E_2$
(2s3s), (2s3s)	1S	0.091590	0.077843	0.0347	0.0267
(2p3p), (2p3p)		0.118739	0.132485	0.0970	0.1050
(2s3s), (2p3p)		0.023711		0.0273	
(2s3s), (2s3s)	3S	0.076638	0.065054	0.0164	0.0106
(2p3p), (2p3p)		0.089869	0.101452	0.0307	0.0366
(2s3s), (2p3p)		0.016954		0.0145	
(2p3p), (2p3p)	1D	0.105343	0.097195	0.0603	0.0323
(2s3d), (2s3d)		0.110882	0.119030	0.0569	0.0849
(2p3p), (2s3d)		0.010560		0.0246	
(2p3p), (2p3p)	3D	0.084618	0.081371	0.0258	0.0286
(2s3d), (2s3d)		0.096274	0.099522	0.0530	0.0501
(2p3p), (2s3d)		0.006957		0.0026	
(2s3p), (2s3p)	1P	0.092823	0.109311	0.049983	0.073238
(2p3s), (2p3s)		0.089897	0.0692132	0.042004	0.014546
(2p3d), (2p3d)		0.121852	0.126048	0.082792	0.086995
(2s3p), (2p3s)		0.019757		0.029756	
(2s3p), (2p3d)		$-\sqrt{2}0.008105$		$-\sqrt{2}0.008022$	
(2p3s), (2p3d)		$\sqrt{2}0.003102$		$\sqrt{2}0.003082$	
(2s3p), (2s3p)	3P	0.087201	0.089204	0.0243	0.0232
(2p3s), (2p3s)		0.083615	0.076986	0.0252	0.0215
(2p3d), (2p3d)		0.105658	0.111285	0.0337	0.0385
(2s3p), (2p3s)		0.003721		0.0011	
(2s3p), (2p3d)		-0.011151		-0.0078	
(2p3s), (2p3d)		-0.005267		-0.0036	
(2p3p), (2p3p)	1P	0.081120	0.081120	0.0202	0.0202
(2p3p), (2p3p)	3P	0.096411	0.096411	0.0382	0.0382

Таблица 2

$$E(1snl) = -\left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2n^2}\right) Z^2 + \Delta E_1 Z + \Delta E_2$$

nl	Терм	ΔE_1	ΔE_2
2s	1S	0.231824	-0.11450
	3S	0.187929	-0.04740
2p	1P	0.259869	-0.15703
	3P	0.225728	-0.07300
3s	1S	0.105255	-0.049104
	3S	0.093719	-0.032318
3p	1P	0.113358	-0.060651
	3P	0.104294	-0.041856
3d	1D	0.111270	-0.057570
	3D	0.110776	-0.054616

свой аналитический вид и для энергии. Учет наложения конфигураций приводит лишь к переопределению коэффициентов C и α . Формулы для недиагональных матричных элементов, необходимые для конкретных расчетов ввиду краткости изложения, мы приводить здесь не будем.

Рассмотрим в качестве примера автоионизационные состояния, соответствующие конфигурациям $2s3l'$, $2p3l'$.

В табл. 1 в качестве примера мы привели для конфигурации $2l3'$ матрицы энергии до диагонализации и значения E^k , полученные после диагонализации.

Для расчета длин волн спутников к резонансным линиям мы привели в табл. 2 энергии состояний $2p-1s$ и $3p-1s$. Как и ранее, мы привели результаты в виде ряда по $1/Z$. Используя приведенные данные, можно рассчитать длины волн переходов $2l3l'-1s3l'$ и $2l3l'-1s2l$. Для ионов с $Z \leq 10$ неучитываемые нами релятивистские эффекты дают поправку $\sim 1-1.5\%$. С увеличением Z эта поправка растет. Рассмотрению релятивистских эффектов будет посвящена следующая работа.

Литература

- [1] Л. П. Пресняков. Усп. физ. наук, 119, 49, 1976.
- [2] L. A. Vainshtein, U. I. Safronova. Atomic data and nucl. data tables, 21, 49, 1978.
- [3] C. P. Bhalla, A. H. Gabriel, L. P. Presnyakov. Mon. Not. Roy. Astr. Soc., 172, 359, 1975.
- [4] S. Goldsmith. J. Phys. B, 7, 2325, 1974.
- [5] V. A. Boiko, A. Yu. Chugunov, T. G. Ivanova, A. Ya. Faenov, I. V. Holin, S. A. Pikus, U. I. Safronova, A. M. Urnov, L. A. Vainstein. Mon. Not. Roy. Astr. Soc., 185, 305, 1978.
- [6] U. I. Safronova, A. M. Urnov. J. Phys. B, 7, 1974.
- [7] H. Nussbaumer. J. Phys. B, 9, 1757, 1976.
- [8] Е. В. Аглицкий, А. Н. Жерихин, П. Г. Крюков, С. В. Чекалин. ЖЭТФ, 72, 1344, 1972.
- [9] V. P. Shevelko, I. Y. Skobelev, A. V. Vinogradov. Phys. Scr., 16, 123, 1977.
- [10] V. A. Boiko, S. A. Pikus, A. Ja. Faenov. J. Quant Spectr., Rad, Trans, 19, 11, 1978.
- [11] V. A. Boiko, S. A. Pikus, U. I. Safronova, A. Ya. Faenov. J. Phys. 10, B, 1253, 1977.
- [12] А. Н. Иванова, У. И. Сафронова, В. Н. Харитонова. Опт. и спектр., 24, 660, 1968.
- [13] Г. Бете, Э. Солпитер. Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами. Физматгиз, М., 1960.
- [14] B. Edlen. Handbuch der Physik, 97, 80, 1964.

Поступило в Редакцию 11 декабря 1979 г.