

ВЕРОЯТНОСТИ ПЕРЕХОДОВ ИЗ АВТОИОНИЗАЦИОННЫХ СОСТОЯНИЙ $2l3l'$ ИОНОВ С $Z=5-30$

Т. Г. Лисина и У. И. Сафронова

Рассмотрены автоионизационные состояния $2l3l'$. Рассчитаны вероятности всех возможных переходов из данных состояний ($2l3l' - 1s3l'$, $2l3l' - 1s2l$, $2l'3l' - 2l2l'$, $2l3l' - 1skl''$). Показано, что все каналы существенны при расчете суммарной вероятности переходов из состояний $2l3l'$. Расчет проведен в промежуточной схеме связи. Релятивистские эффекты учитываются в рамках оператора Брейте. Обсуждаются две схемы расчета, в которых исходные матрицы строятся в LS-связи и в j-j-связи.

Первые автоионизационные состояния для двухэлектронных ионов $2l2l'$ исследованы достаточно хорошо как теоретически [1, 2], так и экспериментально [3]. Следующие автоионизационные состояния $2l3l'$ изучены менее подробно. В работе [4] получены и идентифицированы спектры ионов с $Z=12-16$ для переходов $2l3l' - 1s3l'$. В работе [5] было идентифицировано некоторое количество линий перехода $2l3l' - 1s3l'$ для MgXI. В работе [4] спектры были получены в лазерной плазме, в [5] — сопоставлялись спектры в солнечной и лазерной плазмах для MgXI.

При расчетах интенсивностей линий необходимо рассчитать сумму вероятностей переходов на все нижние уровни. В работах [4, 5] учитывался только один нижний уровень, а именно тот, на который происходит и сам переход — $1s3l'$. Кроме этого уровня, существуют еще и другие:

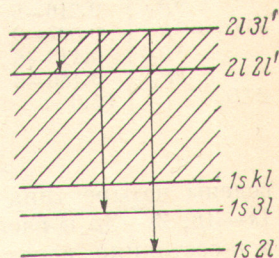


Рис. 1. Схема переходов двухэлектронной системы.

$1s2l$, $2l2l'$ (рис. 1). Таким образом, мы имеем три типа радиационных дипольных переходов $2l3l' - 1s3l'$, $2l3l' - 1s2l$, $2l3l' - 2l2l''$. В первом случае мы имеем переход $1s-2p$, во втором $1s-3p$ и в третьем $2s-3p$, $2p-3s$, $2s-3d$. Ниже мы приводим расчет всех трех переходов и покажем, что два последних дают существенный вклад в суммарную вероятность перехода. Мы здесь не будем рассматривать магнитно-дипольные переходы и все квадрупольные, так как вклад их на несколько порядков ниже электрических дипольных переходов.¹ Кроме вероятностей радиационных переходов, мы рассчитали еще и вероятности безрадиационных распадов: $2l3l' - 1skl''$. Эти вероятности сравнимы с вероятностями радиационных переходов, а при малых Z для ряда уровней превышают их.

¹ Мы не будем останавливаться также на двухэлектронном переходе $2l3l' - 1s^2$, подробно рассмотренном в работе [6]. Вероятность его также значительно ниже рассматриваемых нами переходов, и мы поэтому можем его не учитывать.

Промежуточная связь

Детали расчета в промежуточной схеме описаны довольно подробно [1], и мы не будем на них останавливаться. В качестве примера приведем результаты расчета вероятностей переходов $2p3p-1s3p$, $2p3p-1s2p$, $2p3p-2s2p$ и $2p3p-1skl$ для $Z=5 \div 30$. В табл. 1 для сопоставления при-

Таблица 1

Вероятности переходов (в 10^{13} c^{-1}) $2p3p-1s3p$ (a), $2p3p-1s2p$ (b), $2p3p-2s2p$ (c), $2p3p-1skl$ (d)

Переход	Z = 5	Z = 10	Z = 15	Z = 20	Z = 25	Z = 30
$a^1S_0 - ^1P_1$	0.274-1	0.467	2.49	8.46	22.4	49.8
3P_1	0.817-7	0.237-4	0.802-3	0.962-2	0.479-1	0.109
$b^1S_0 - ^1P_1$	0.611-2	0.113	0.622	2.15	5.74	12.8
3P_1	0.148-7	0.798-5	0.338-3	0.429-2	0.211-1	0.667-1
$c^1S_0 - ^1P_1$	0.100-2	0.219-1	0.213	0.406	1.00	2.06
3P_1	0.526-7	0.319-5	0.155-3	0.222-2	0.127-1	0.345-1
d^1S_0	0.298	0.585	0.877	1.38	2.13	2.91
$a^3P_0 - ^3P_1$	0.386-1	0.622	3.13	9.58	22.2	44.3
1P_1	0.129-6	0.142-3	0.581-2	0.462-1	0.118	0.150
$b^3P_0 - ^3P_1$	0.880-2	0.153	0.792	2.46	5.76	11.5
1P_1	0.348-7	0.291-4	0.113-2	0.839-2	0.198-1	0.229-1
$c^3P_0 - ^3P_1$	0.984-3	0.190-1	0.102	0.330	0.811	1.71
1P_1	0.370-8	0.384-5	0.248-3	0.445-2	0.315-1	0.108
d^3P_0	0.154-3	0.792-2	0.616-1	0.169	0.216	0.163
$a^1D_2 - ^1P_1$	0.290-1	0.144	0.784	5.53	16.0	32.1
3P_1	0.245-5	0.151	0.787-2	0.104	0.274	0.191
3P_2	0.615-4	0.332-1	0.805	0.408	4.58	13.1
$b^1D_2 - ^1P_1$	0.651-2	0.331-1	0.172	1.49	4.63	9.48
3P_1	0.101-4	0.632-3	0.177	0.276-2	0.404-1	0.108
3P_2	0.216-5	0.469-1	0.539-1	0.417-1	0.679	3.41
$c^1D_2 - ^1P_1$	0.897-6	0.188-3	0.162-2	1.07	1.84	2.35
3P_1	0.113-6	0.128-1	0.200-1	0.389-3	0.785-3	0.139-1
3P_2	0.486-5	0.504-4	0.162-2	0.592-2	0.942-1	0.467
d^1D_2	12.0	3.53	3.96	10.4	11.5	9.78

ведены четыре типа вероятностей: три радиационных перехода $1s-2p$, $1s-3p$, $2s-3p$ и распад с вылетом электрона в s - и d -состоянии. Так как в p -состоянии электрон вылететь не может, то распад для уровней 3P_1 и 1P_1 возможен только за счет отклонения от чистой LS -связи. Максимальным является распад состояния 1D , затем 1S . Вероятность распада этих состояний выше вероятности радиационных переходов для $Z=5$ и 10. Для всех других уровней она сравнима или даже меньше. С увеличением Z вероятность распада Γ меняется только за счет отклонения от чистой LS -связи, а вероятность радиационных переходов W растет как Z^4 для разрешенных переходов и как Z^{10} для интеркомбинационных. Таким образом, даже для уровня 1D уже при $Z=25$ W становится больше Γ . Для иллюстрации зависимости вероятности радиационных переходов от заряда ядра Z мы привели: на рис. 2 — вероятности перехода $2p3p-1s3p$, на рис. 3 — перехода $2p3p-1s2p$ и на рис. 4 — вероятности двух типов переходов. Довольно резкие изменения вероятностей связаны с близостью уровней и соответственно их сильным взаимодействием, причем как уровней данной конфигурации, так и уровней других конфигураций, наложение которых учитывалось нами (конфигурации $2p3p$ и $2s3s, 2s3d$). Наложение конфигураций мы обсудим в специальном разделе. Как видно из рис. 4, не во всех случаях вероятности перехода $1s-2p$ выше вероятностей перехода $1s-3p$, поэтому, естественно, те и другие должны учитываться в суммарных вероятностях.

LS - с в я з ь

Для вероятностей переходов $2p3p-1s3p$, $2p3p-1s2p$, $2p3p-2s2p$ в схеме чистой LS-связи без учета наложения конфигураций имеем

$$W(2p3pLS - 1s3pL^1S) = 0.624 \cdot 10^9 Z^4 \Delta_1^3 \text{ с}^{-1}, \quad (1)$$

$$W(2p3pLS - 1s2pL^1S) = 0.167 \cdot 10^9 Z^4 \Delta_2^3 \text{ с}^{-1}, \quad (2)$$

$$W(2p3pLS - 2s2pL^1S) = 0.223 \cdot 10^9 Z^4 \Delta_3^3 \text{ с}^{-1}. \quad (3)$$

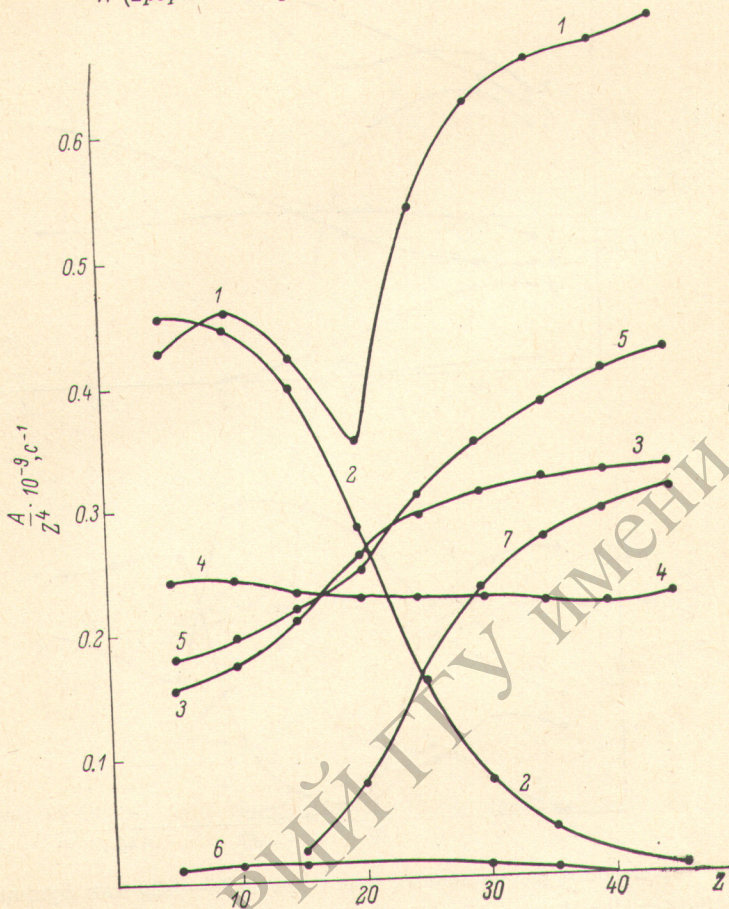


Рис. 2. Вероятности радиационных переходов $2p3p-1s3p$ как функции Z .
 1 - ${}^3D_3-{}^3P_2$, 2 - ${}^3D_2-{}^3P_1$, 3 - ${}^3D_2-{}^3P_2$, 4 - ${}^3D_1-{}^3P_0$, 5 - ${}^3D_1-{}^3P_1$, 6 - ${}^3D_1-{}^3P_2$, 7 - ${}^3D_2-{}^1P_1$.

Величины $\Delta_1, \Delta_2, \Delta_3$ — это отклонения энергий от нулевого значения. Так для перехода ${}^3D-{}^3P$ имеем

$$\Delta_1({}^3D - {}^3P) = 1 - 0.05245 \frac{1}{Z} + 0.04291 \frac{1}{Z^2}, \quad (4)$$

$$\Delta_2({}^3D - {}^3P) = 1 - 0.31749 \frac{1}{Z} + 0.10628 \frac{1}{Z^2}, \quad (5)$$

$$\Delta_3({}^3D - {}^3P) = 1 - 0.69399 \frac{1}{Z} + 0.0274 \frac{1}{Z^2}. \quad (6)$$

Как мы видим, самой существенной будет поправка к нулевому значению для $2s-3p$ -перехода. В табл. 2 приведены вероятности перехода $2p3p-1s3p$, просуммированные по J , т. е.

$$W(LS - L'S) = \frac{\sum_{JJ'} (2J+1) W(LSJ - L'SJ')}{\sum_J (2J+1)}.$$

Таким образом, эти вероятности получены из расчета с учетом вкладов электростатического взаимодействия электронов, наложения конфигураций и релятивистских эффектов. В последней строчке мы привели зна-

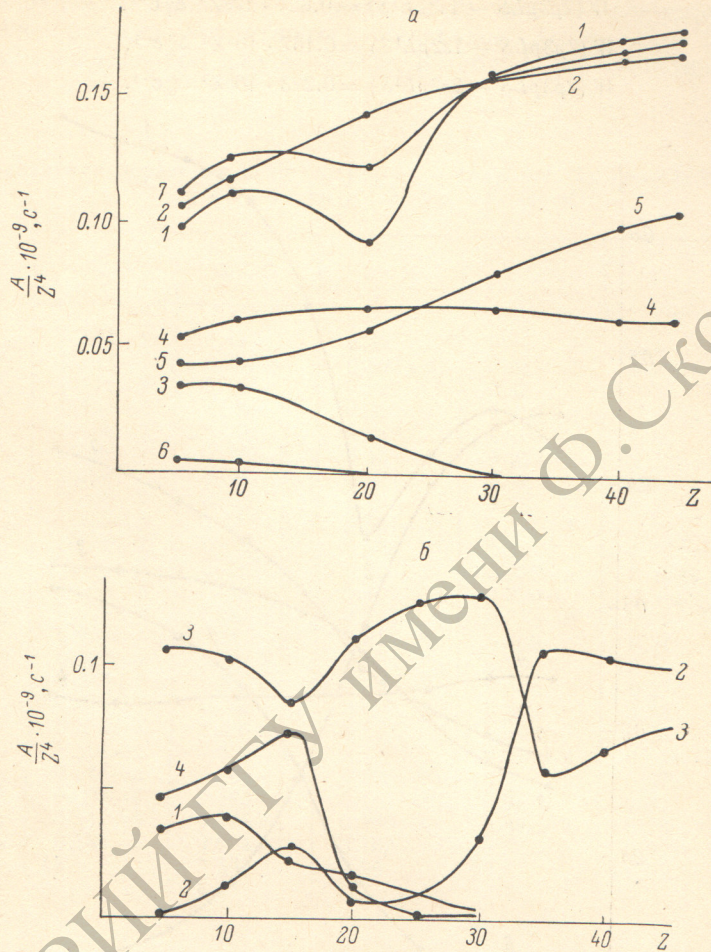


Рис. 3. Вероятности радиационных переходов $2p3p-1s2p$ как функции Z .
 а: 1 — ${}^3D_3-{}^3P_2$, 2 — ${}^3D_3-{}^3P_1$, 3 — ${}^3D_3-{}^3P_0$, 4 — ${}^3D_1-{}^3P_2$, 5 — ${}^3D_3-{}^3P_1$, 6 — ${}^3D_1-{}^3P_2$; б: 1 — ${}^3P_2-{}^3P_1$, 2 — ${}^3P_1-{}^3P_1$, 3 — ${}^3P_2-{}^3P_2$, 4 — ${}^3P_1-{}^3P_0$.

чение W_0 — вероятности перехода в нулевом приближении, т. е. без учета всех этих факторов. Как видно из табл. 2, для $Z=5$ в ряде случаев W_0 отличается от W лишь на несколько процентов. Для $Z=10$ это отличие достигает уже 2, а для больших Z это отличие еще более существенное.

Таблица 2
 Вероятности переходов $2p3p-1s3p$ (в 10^{13} c^{-1})

Термы	$Z=5$	$Z=10$	$Z=15$	$Z=20$	$Z=25$	$Z=30$
${}^3D-{}^3P$	0.307-1	0.508	2.45	7.13	20.0	43.1
${}^3P-{}^3P$	0.386-1	0.577	2.38	8.11	19.7	43.1
${}^3S-{}^3P$	0.026-1	0.435	0.27	7.90	17.2	23.7
${}^1D-{}^1P$	0.291-1	0.340	1.15	5.63	16.0	32.1
${}^1P-{}^1P$	0.375-1	0.564	2.68	7.13	10.6	13.8
${}^1S-{}^1P$	0.244-1	0.466	2.44	7.72	17.6	31.5
W_0	0.390-1	0.624	3.16	9.99	24.3	50.6

Для $Z=5, 10$ сказывается влияние двух факторов: электростатического взаимодействия электронов, т. е. отличие Δ от 1, и наложения конфигураций $2p3p$, $2s3d$ и $2s3s$. Наложение конфигураций имеет отношение к пере-

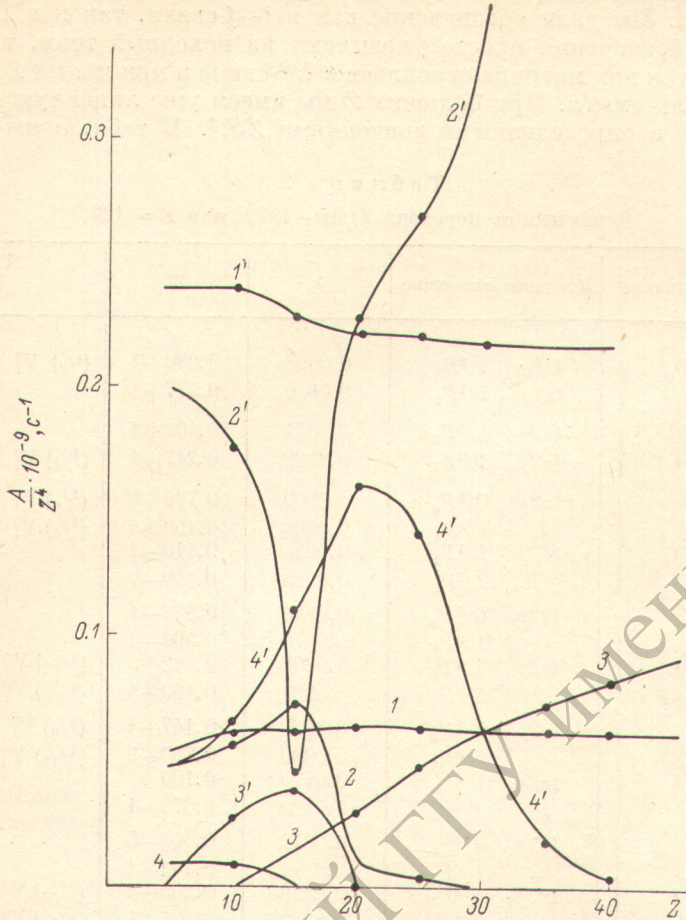


Рис. 4. Сопоставление вероятностей радиационных переходов $2p3p-1s3p$ и $2p3p-1s2p$. $1' - {}^3D_1-{}^3P_0$, $2' - {}^3P_1-{}^3P_0$, $3' - {}^1P_1-{}^3P_0$, $4' - {}^3S_1-{}^3P_0$, $1 - {}^3D_1-{}^3P_0$, $2 - {}^3P_1-{}^3P_0$, $3 - {}^1P_1-{}^3P_0$, $4 - {}^3S_1-{}^3P_0$.

ходам ${}^1S-{}^1P$, ${}^3S-{}^3P$, ${}^3D-{}^3P$, ${}^1D-{}^1P$, так как термы 1S , 3S имеются в конфигурации $2s3s$, а термы 1D , 3D в конфигурации $2s3d$. Для переходов ${}^1P-{}^1P$, ${}^3P-{}^3P$ важен только один фактор Δ , и как мы видим из табл. 2, именно вероятности этих переходов меньше всего отличаются от W_0 . Для $Z \geq 10$ существенными являются уже релятивистские эффекты.

$j-j$ - связь

Вероятность перехода в схеме $j-j$ -связи рассчитывалась по формуле

$$W_p(2p_j 3p_{j'} J - 1s 2p_j J') = (2J' + 1) \left\{ \begin{matrix} 1 & J' & J \\ j & j' & 1/2 \end{matrix} \right\} V_1^2(3p_{j'}, 1s). \quad (7)$$

Для вероятностей $V_1^2(3p_{1/2}, 1s)$ и $V_1^2(3p_{3/2}, 1s)$ из [7] имеем следующие значения:

$$V_1^2(3p_{3/2}, 1s) = 0.988 \cdot 10^{17} \text{ c}^{-1}, \quad V_1^2(3p_{1/2}, 1s) = 0.460 \cdot 10^{17} \text{ c}^{-1}. \quad (8)$$

Как мы уже говорили выше, все расчеты мы провели в схеме промежуточной связи, исходной для построения этой схемы являлась LS -связь. Если мы все правильно рассчитали, то при больших Z промежуточ-

ная связь должна выходить на $j-j$ -связь, а вероятности перехода должны стремиться к значениям вероятностей перехода, приведенным в [7]. В табл. 2 приведены вероятности перехода для $Z=100$, полученные из нашего расчета. Мы дали обозначение как в $j-j$ -связи, так и в LS -связи. Последние обозначения просто указывают на исходный терм, т. е. терм в LS -связи, так как матрица строилась в LS -схеме и при малых Z эти обозначения имели смысл. При больших Z мы имеем уже линейную комбинацию уровней с определенными значениями ZS .² В табл. 3 мы привели

Т а б л и ц а 3
Вероятности перехода $2p3p-1s2p$ для $Z=100$

Начальное состояние	Конечное состояние	λ	W	W_p
$2p_{1/2} 3p_{1/2} 0 {}^3P_0$	$1s2p_{1/2} 1 {}^3P_1$	0.0908	0.236+4	$(1/2) V_1^2 (3p_{1/2}, 1s)$
	$1s2p_{3/2} 1 {}^1P_1$	0.0939	0.577+1	
$2p_{3/2} 3p_{3/2} 0 {}^1S_0$	$1s2p_{1/2} 1 {}^3P_1$	0.0871	0.402+1	
	$1s2p_{3/2} 1 {}^1P_1$	0.0899	0.247+4	$(1/4) V_1^2 (3p_{3/2}, 1s)$
$2p_{1/2} 3p_{1/2} 1 {}^3D_1$	$1s2p_{1/2} 0 {}^3P_0$	0.0909	0.796+6	$(1/6) V_1^2 (3p_{1/2}, 1s)$
	$1 {}^3P_1$	0.0908	0.159+4	$(1/3) V_1^2 (3p_{1/2}, 1s)$
	$1s2p_{3/2} 1 {}^1P_1$	0.0939	0.110-1	
	$2 {}^3P_2$	0.0933	0.349-7	
$2p_{3/2} 3p_{1/2} 1 {}^3P_1$	$1s2p_{1/2} 0 {}^3P_0$	0.0880	0.582-1	
	$1 {}^3P_1$	0.0879	0.596-1	
	$1s2p_{3/2} 1 {}^1P_1$	0.0908	0.412+3	$(1/12) V_1^2 (3p_{1/2}, 1s)$
	$2 {}^3P_2$	0.0907	0.199+4	$(5/12) V_1^2 (3p_{1/2}, 1s)$
$2p_{1/2} 3p_{3/2} 1 {}^3S_1$	$1s2p_{1/2} 0 {}^3P_0$	0.0900	0.147+4	$(1/6) V_1^2 (3p_{3/2}, 1s)$
	$1 {}^3P_1$	0.0900	0.750+3	$(1/12) V_1^2 (3p_{3/2}, 1s)$
	$1s2p_{3/2} 1 {}^1P_1$	0.0970	0.106	
	$2 {}^3P_2$	0.0929	0.676-1	
$2p_{3/2} 3p_{3/2} 1 {}^1P_1$	$1s2p_{1/2} 0 {}^3P_0$	0.0872	0.406-5	
	$1 {}^3P_1$	0.0871	0.144-1	
	$1s2p_{3/2} 1 {}^1P_1$	0.0859	0.205+4	$(5/24) V_1^2 (3p_{3/2}, 1s)$
	$2 {}^3P_2$	0.0899	0.425+3	$(1/24) V_1^2 (3p_{3/2}, 1s)$

λ и W из полного расчета и W_p по формуле (7). Как видно из сопоставления двух последних столбцов, согласование W и W_p (7) достаточно хорошее, что говорит, во-первых, о правильности нашего расчета и, во-вторых, подтверждает хорошо известную истину, что наблюдаемые характеристики не должны зависеть от выбора схемы связи.

Н а л о ж е н и е к о н ф и г у р а ц и й

В табл. 4 мы привели вероятности переходов типа $2s3s-1snp$, $2s3d-1snp$, $2s3s-2s2p$, $2s3d-2s2p$. Первые два перехода имеют место лишь за счет наложения конфигураций $2s3s$, $2p3p$ и $2s3d$, $2p3p$. Как видно из сопоставления вероятностей данных переходов с вероятностями переходов $2p3p-1snp$, приведенными в табл. 1, мы имеем численные значения

² Так, например,

$$\Psi(2p_{3/2} 3p_{1/2}; 1) = -\frac{2\sqrt{6}}{9} \Psi({}^3S_1) + \frac{1}{3} \Psi({}^1P_1) + \frac{1}{\sqrt{2}} \Psi({}^3P_1) - \frac{\sqrt{30}}{18} \Psi({}^3D_1),$$

$$\Psi(2p_{3/2} 3p_{3/2}; 1) = \frac{2\sqrt{6}}{9} \Psi({}^3S_1) - \frac{1}{3} \Psi({}^1P_1) + \frac{1}{\sqrt{2}} \Psi({}^3P_1) + \frac{\sqrt{30}}{18} \Psi({}^3D_1).$$

Таблица 4

Вероятности переходов (в 10^{13} с^{-1}) $2s3s-1s3p$, $1s2p$, $2s2p$, $1sks$; $2s3d-1s3p$, $1s2p$, $2s2p$, $1skd$

Переход	Z = 5	Z = 10	Z = 15	Z = 20	Z = 25	Z = 30
$2s3s - 1s3p$						
$^1S_0 - ^1P_1$	0.116-1	0.161	0.705	1.68	2.60	2.97
3P_1	0.110-5	0.961-3	0.441-1	0.523	2.65	7.87
$2s3s - 1s2p$						
$^1S_0 - ^1P_1$	0.262-2	0.393-1	0.177	0.434	0.686	0.301
3P_1	0.261-6	0.230-3	0.108-1	0.129	0.666	2.00
$2s3s - 2s2p$						
$^1S_0 - ^1P_1$	0.704-5	0.488-4	0.229-4	0.429-3	0.783-2	0.442-1
3P_1	0.115-7	0.129-4	0.622-3	0.718-2	0.346-1	0.947-1
$2s3s ^1S_0 - 1sks$	18.0	17.7	17.3	16.7	15.9	15.2
$2s3d - 1s3p$						
$^1D_2 - ^1P_1$	0.943-2	0.219	1.36	1.57	1.34	0.753-1
3P_1	0.977-7	0.141-3	0.812-2	3.24	6.06	5.44
3P_2	0.187-6	0.217-3	0.156-1	0.748-2	0.611	2.71
$2s3d - 1s2p$						
$^1D_2 - ^1P_1$	0.211-2	0.534-1	0.345	0.708	1.24	0.979
3P_1	0.157-10	0.294-6	0.453-4	0.866-1	0.335	0.911
3P_2	0.128-7	0.141-4	0.118-2	0.432	0.480	0.236
$2s3d - 2s2p$						
$^1D_2 - ^1P_1$	0.277-2	0.624-1	0.345	0.739-1	0.650	2.77
3P_1	0.458-8	0.309-5	0.107-3	0.455-1	0.184-3	0.112
3P_2	0.155-8	0.191-5	0.165-3	0.824-4	0.490-3	0.289-1
$2s3d ^1D_2 - 1skd$	5.03	6.96	8.32	3.59	1.77	0.228

одного порядка, что говорит о значительном наложении конфигураций. В двух последних случаях — переходы $2s3s-2s2p$, $2s3d-2s2p$ — мы имеем разрешенные переходы и без наложения конфигураций. С другой стороны, переход $2p3p-2s2p$ также разрешен. Как мы уже говорили выше, коэффициенты перемешивания конфигураций $2s3s$, $2p3p$ и $2s3d$, $2p3p$ значительны. Это приводит к резкому уменьшению вероятностей переходов $2s3s^1S_0-2s2p^1P_1$ и $2p3p^1D_2-2s2p^1P_1$ и соответственно увеличению вероятностей переходов $2p3p^1S_0-2s2p^1P_1$ и $2s3d^1D_2-2s2p^1P_1$. Аналогичные результаты мы имеем и для других переходов.

В заключение считаем своим приятным долгом выразить благодарность Л. А. Вайнштейну за постоянный интерес к работе.

Литература

- [1] Л. А. Вайнштейн, У. И. Сафронова. *Atom. Data and Nucl. Data Tables*, 21, 49, 1978.
- [2] Л. П. Пресняков. *Усп. физ. наук*, 119, 49, 1976.
- [3] В. А. Воико, А. Я. Фаенов, С. А. Пикус. *J. Quant. Spectr. Rad. Trans.*, 19, 11, 1978.
- [4] В. А. Воико, С. А. Пикус, У. И. Сафронова, А. Я. Фаенов. *Mon. Not. Roy. Astron. Soc.*, 181, 107, 1977.
- [5] E. V. Aglitzki et al. *Sol. Phys.*, 56, 375, 1978.
- [6] С. В. Христенко. *Опт. и спектр.*, 39, 143, 1975.
- [7] П. Г. Бодашко, С. А. Запругаев. В сб.: *Атомные константы*, 212. «Наука», 1978.

Поступило в Редакцию 11 октября 1979 г.