

УДК 539.184.01

РАДИАЦИОННЫЕ ДВУХЭЛЕКТРОННЫЕ ОДНОФОТОННЫЕ ПЕРЕХОДЫ

ТИПА $n_1 l_1 n_2 l_2 \rightarrow 1s^2$

П. Г. Бодашко и У. И. Сафронова

Проведен расчет дипольного матричного элемента перехода $n_1 l_1 n_2 l_2 \rightarrow 1s^2$ для $n_1 > l_1 + 1$, $n_2 \geq l_2 + 1$ до $n_1, n_2 = 10$ ($l_1, l_2 = s, p, d, f, g$). Обсуждена зависимость от n_1, n_2, l_1, l_2 вероятности перехода W и фактора Фано q . На примере двухэлектронных систем обсужден вклад электростатического взаимодействия электронов и релятивистских эффектов на величины W и q . Проведено изучение Z -зависимости W и q на примере состояний $2l3l'$.

Радиационные двухэлектронные однофотонные переходы начали изучаться совсем недавно, но к настоящему времени имеется уже достаточно большое количество работ. В основном при этом изучались переходы с $n_1, n_2 = 2, 3$ [1-6]. В настоящей работе мы рассмотрим переходы с $n_1 = (l_1 + 1) \div 10$, $n_2 = (l_2 + 1) \div 10$ и выясним асимптотические зависимости параметров Фано q и вероятности переходов. Как и в работах [1, 6], нами будет использована кулоновская функция Грина.

Дипольный матричный элемент

Для дипольного матричного элемента перехода $n_1 l_1 n_2 l_2^1 P \rightarrow 1s^2^1 S$ имеем в общем случае

$$\begin{aligned} Z^2 \langle n_1 l_1 n_2 l_2^1 P | \hat{r} | 1s^2^1 S \rangle = & \sqrt{2} \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{(2l_1 + 1)(2l_2 + 1)}} \times \\ & \times \left\{ \frac{1}{2l_2 + 1} \sum_n \frac{1}{E_n + E_{n_2} - 2E_1} R_{l_2}(n l_2 n_2 l_2; 1010) R(n l_2, n_1 l_1) + \right. \\ & + \frac{1}{2l_1 + 1} \sum_n \frac{1}{E_n + E_{n_1} - 2E_1} R_{l_1}(n l_1 n_1 l_1; 1010) R(n l_1, n_2 l_2) + \\ & + \frac{1}{2l_2 + 1} \sum_n \frac{1}{E_n + E_1 - E_{n_2} - E_{n_1} - i\gamma} R_{l_2}(n 110; n_2 l_2 n_1 l_1) R(n 1, 10) + \\ & \left. + \frac{1}{2l_1 + 1} \sum_n \frac{1}{E_n + E_1 - E_{n_2} - E_{n_1} - i\gamma} R_{l_1}(n 110; n_1 l_1 n_2 l_2) R(n 1, 10) \right\}, \quad (1) \end{aligned}$$

где суммирование включает как сумму по дискретным параметрам, так и интеграл по непрерывным параметрам k . Два последних слагаемых в (1) являются комплексными, так как знаменатели в (1) при непрерывных значениях n имеют вид

$$\frac{1}{\frac{k^2}{2} - \frac{1}{2} + \frac{1}{2n_1^2} + \frac{1}{2n_2^2} - i\gamma} = \frac{1}{x - i\gamma}. \quad (2)$$

Параметры n_1, n_2 не равны 1 по определению, а следовательно, интеграл по k в (1) можно вычислять только в смысле главного значения, а дельта функция дает мнимую добавку. Таким образом, матричный элемент в (1) можем представить в следующем виде:

$$\langle n_1 l_1 n_2 l_2 + 1^1 P | \hat{r} | 1s^2^1 S \rangle = a(n_1 l_1, n_2 l_2 + 1) + ib(n_1 l_1, n_2 l_2 + 1), \quad (3)$$

где мы для определенности¹ положили $l_1 = l$, $l_2 = l + 1$. Как было показано в [1], для параметра Фано q имеем, учитывая (3),

$$q(n_1 l, n_2 l + 1) = \frac{a(n_1 l, n_2 l + 1)}{b(n_1 l, n_2 l + 1)}. \quad (4)$$

Далее для расчета вероятности перехода следует рассчитать квадрат модуля $\langle n_1 l n_2 l + 1 | {}^1P | \hat{r} | 1s^2 {}^1S \rangle$

$$|\langle n_1 l n_2 l + 1 | {}^1P | \hat{r} | 1s^2 {}^1S \rangle|^2 = S(n_1 l, n_2 l + 1) = a^2(n_1 l, n_2 l + 1) + b^2(n_1 l, n_2 l + 1). \quad (4')$$

Именно эти характеристики q и s мы и обсудим ниже. На рис. 1, а, б приведены графики $q(n_1 l, n_2 l + 1)$ для $l=s, p, d, f, g$ как функции n_1, n_2 . По оси абсцисс

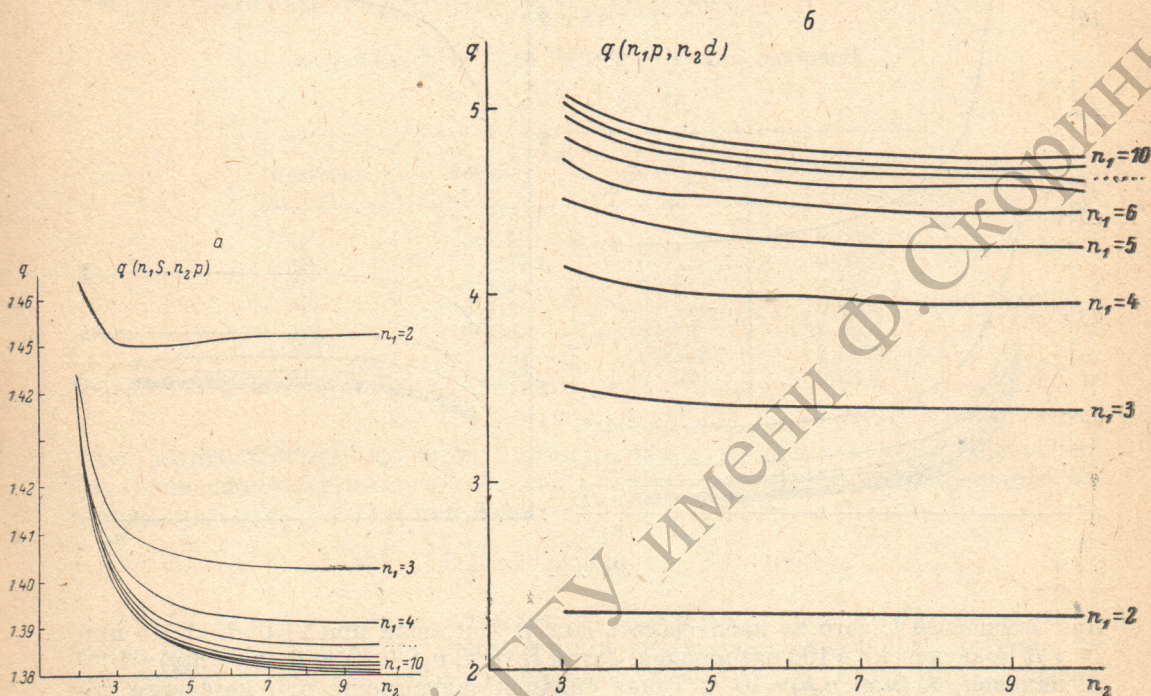


Рис. 1.

отложено значение n_2 , по оси ординат — абсолютное значение q .² На каждом графике приведены все q при $n_1 = (l+1) \div 10$.

Как видно из рис. 1, наиболее сильно отличается q при минимальном значении n_1 , т. е. при $n_1 = l+1$. Затем при увеличении n_1 кривые все меньше отличаются друг от друга и при $n_1 = 9, 10$ практически сливаются. Несколько меньше это относится к двум последним q при $l=f, l=g$. Для этих l также сгущение, по-видимому, наступит при больших значениях n_1 . Следует во всех случаях отметить, что весь интервал изменения q не очень значителен, т. е. $\sim 10-20\%$, за исключением $q(n_1 p, n_2 d)$. Для этого q зависимость от n_1 значительно сильнее, так как q меняется в два раза, в то время как зависимость от n_2 очень незначительная ($0.7-7\%$).

Таким образом, для $q(n_1 l, n_2 l + 1)$ мы не имеем явно выделенных функций от n_1, n_2 и для грубых оценок можем считать постоянной и зависящей только от l .

Перейдем к обсуждению $S(n_1 l, n_2 l + 1)$. Здесь мы имеем совершенно другую картину. Из формулы (1) легко сразу выделить простые зависимости от n_1, n_2 , вводя следующую функцию:

$$R(n_1 l, n_2 l + 1) = n_1^3 n_2^3 S(n_1 l, n_2 l + 1). \quad (5)$$

Графики R приведены на рис. 2, а, б. Как и для q , мы отложили по оси ординат R , по оси абсцисс n_2 и привели графики на рис. 2 для каждого фиксирован-

¹ $l_1 = l_2 \pm 1$.

² Отрицательными являются все q , кроме $q(n_1 d, n_2 f)$.

ного значения n_1 (начиная с $n_1=l+1$) до $n_1=10$. По своему поведению рис. 2 очень похож на рис. 1 — такое же отличие первого R при $n_1=l+1$ и постепенное сгущение кривых при увеличении n_1 . Лишь для последнего R мы не наблюдаем еще этого сгущения, так как для этого нужны R при $n_1 > 10$. Весь интервал изменения R не превышает 1—10 раз, т. е. зависимость от n_1 и n_2 практически описывается формулой (5). Основное отличие R от q — это сильное изменение R

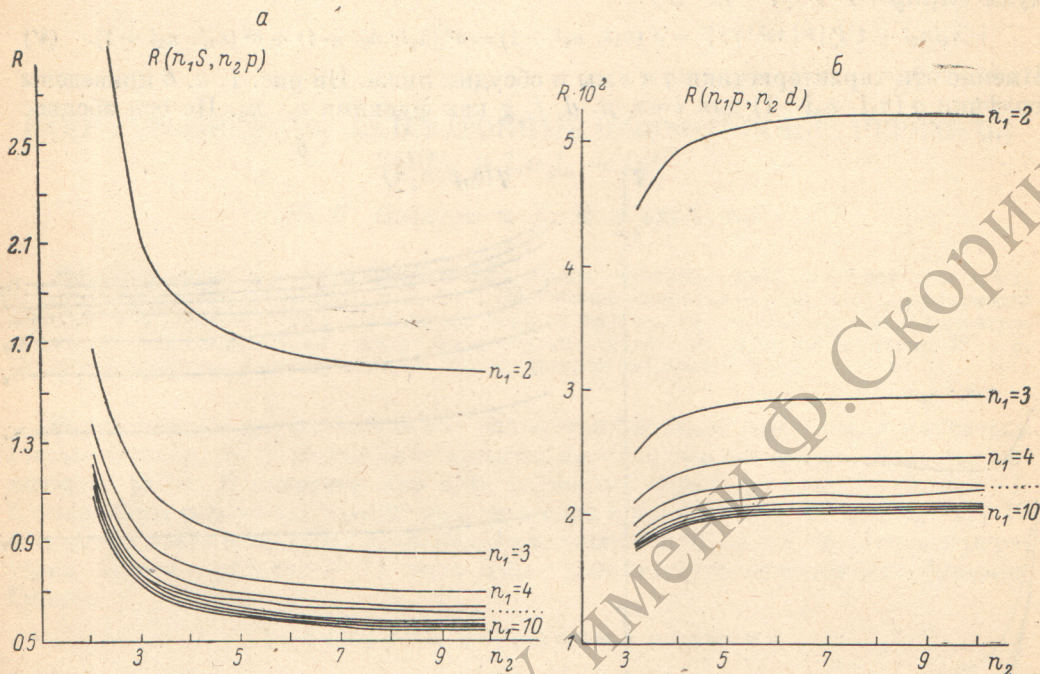


Рис. 2.

при изменении l , чего не наблюдалось для q . Так, если при $l=0$ $R \approx 1$, то при $l=1$ R практически в 100 раз меньше. Затем $R(n_1 d, n_2 f) = 10^{-4}$, $R(n_1 f, n_2 g) \approx 10^{-7}$ и, наконец, $R(n_1 g, n_2 h) = 10^{-9}$. Такая сильная зависимость от l не совсем понятна и не вытекает явно из формулы (1). Приведенные графики дают возможность получить R и затем рассчитать S по формуле (5). Таким образом, мы рассмотрели q и S в широком интервале $l, n_1 n_2$. Представленные на рисунках зависимости дают возможность выяснить как поведение и изменение этих величин от n_1, n_2, l , так и получить численные значения.³

Вероятности переходов и факторы Фано для двухэлектронных систем

В предыдущем разделе мы рассмотрели дипольный матричный элемент конкретного перехода $n_1 l n_2 l + 1^1 P - 1s^2 ^1 S$. В общем случае в дальнейшем следует рассмотреть два эффекта, которые влияют на величину дипольного матричного элемента: электростатическое взаимодействие электронов и релятивистские эффекты. Учет электростатического взаимодействия электронов приводит к тому, что состояния с разными l , но совпадающими n_1, n_2 перемешиваются, т. е. следует рассматривать дипольный матричный элемент в виде

$$\sum_i C(i, l) \langle n_1 l n_2 l + 1^1 P | r | 1s^2 ^1 S \rangle, \quad (6)$$

где $C(i, l)$ — коэффициент перемешивания. Индекс i в (6) мы оставили просто для нумерации состояний, так как орбитальное число уже не имеет смысла. Например, для состояния $2s3p^1 P, 2p3s^1 P, 2p3d^1 P$ имеем

³ Мы не приводим численных значений, чтобы не загромождать работу табличными данными.

$$\left. \begin{aligned} \Psi_1 &= 0.62572\Psi(2s3p) + 0.70966\Psi(2p3s) + 0.32381\Psi(2p3d), \\ \Psi_2 &= -0.68489\Psi(2s3p) + 0.69851\Psi(2p3s) - 0.20739\Psi(2p3d), \\ \Psi_3 &= -0.37336\Psi(2s3p) - 0.09200\Psi(2p3s) + 0.92311\Psi(2p3d). \end{aligned} \right\} \quad (7)$$

Таким образом, состояния $2s3p$ и $2p3s$ столь перемешаны, что имеет смысл говорить лишь о состояниях Ψ_- и Ψ_+ вместо Ψ_1 и Ψ_2 в (7). Для функции Ψ_3 существенным является вклад состояния $2p3d$. Следует при этом заметить, что коэффициенты в (7) были рассчитаны с учетом матрицы первого порядка по энергии, а следовательно, не зависят от Z . Учет второго и более высоких порядков теории возмущений по $1/Z$ приводит к зависимости от Z коэффициентов C .

Т а б л и ц а 1

$$\Psi(LSi) = \sum_l C^1(LSi, {}^1Pl) \Psi({}^1Pl) \text{ для состояний } 2l3(l \pm 1) \text{ с } Z = 20$$

Уровень	$2s3p^1P$	$2p3s^1P$	$2p3d^1P$
${}^1P_+$	0.6255	0.6799	0.0886
${}^3P_+$	0.1277	0.0532	0.0605
${}^1P_-$	-0.6243	0.6503	-0.1597
${}^3P_-$	0.3497	-0.1934	0.0934
1P_d	-0.2501	-0.0243	0.9257
3P_d	0.0098	0.0407	0.1370
3D	0.1376	0.2689	0.2802

Учет релятивистских эффектов приводит как к дополнительному изменению Z -зависимости коэффициентов C , так и к дополнительному суммированию по термам, т. е. вместо (6) мы получаем

$$C^1(LS, {}^1P) \sum_l C(i, l) \langle n_1 l n_2 l + {}^1P | r | 1s^2 1S \rangle, \quad (8)$$

где $C^1(LS, {}^1P)$ — коэффициенты примеси уровня 1P_1 в уровни $LS1$. Такое положение уровня 1P_1 связано с ненулевыми значениями дипольного матричного элемента (1) только для этого уровня. Объединяя $C^1(LS, {}^1P)$ и $C(i, l)$, перепишем (7) следующим образом:

$$\sum_l C^1(LSi, {}^1Pl) \langle n_1 l n_2 l + {}^1P | r | 1s^2 1S \rangle. \quad (9)$$

В качестве примера в табл. 1 приведены коэффициенты для семи уровней состояний 2, 3. Таким образом, мы имеем уже семь ненулевых значений для дипольного матричного элемента. Также следует отметить Z -зависимость дипольного матричного элемента, а следовательно, для каждого Z мы должны получать графики, подобные графикам на рис. 1 и 2. Неизменной остается лишь выделенная зависимость от n_1, n_2 (формула (5)).

Для вероятности перехода окончательно имеем

$$W(1LSi, 1s^2 1S_0) = \frac{2}{9} \left| \sum_l C^1(LSi, {}^1Pl) \langle n_1 l n_2 l + {}^1P | r | 1s^2 1S \rangle \right|^2 \times \\ \times [E(1LSi) - E(1s^2 1S_0)]^3 \cdot 3.21 \cdot 10^{10} \text{ с}^{-1}. \quad (10)$$

В качестве примера в табл. 2 приведены вероятности перехода для семи уровней состояний 2, 3. Мы выделили основную Z -зависимость, т. е. привели величину ω для $=5, 10, 15, 20, 25$

$$W(1LSi, 1s^2 1S_0) = \left(\frac{Z}{10} \right)^2 \omega(1LSi, 1s^2 1S_0). \quad (11)$$

Во второй графе табл. 2 приведено ω , определяемое на основании коэффициентов формулы (7), т. е. при учете электростатического взаимодействия электронов в первом порядке теории возмущений, причем с $\Delta E = \Delta E_0$. Следует заметить,

Таблица 2

Вероятности перехода $W(1LSi - 1s^2 {}^1S_0) = \omega(1LSi - 1s^2 {}^1S_0) \left(\frac{Z}{10}\right)^2 e^{-1}$

$1LSi$	Формула (7)	$Z=5$	$Z=10$	$Z=15$	$Z=20$	$Z=25$
$1P_+$	$6.519 + 9$	$4.458 + 9$	$5.445 + 9$	$5.684 + 9$	$5.474 + 9$	$5.806 + 9$
$3P_+$	—	$6.749 + 4$	$3.219 + 6$	$2.992 + 7$	$1.177 + 8$	$1.067 + 8$
$1P_-$	$3.016 + 7$	$3.424 + 7$	$3.347 + 7$	$3.243 + 7$	$1.462 + 7$	$1.317 + 6$
$3P_-$	—	$4.157 + 4$	$1.713 + 6$	$2.063 + 7$	$1.260 + 8$	$5.688 + 8$
$1P_d$	$4.028 + 8$	$2.199 + 7$	$2.567 + 7$	$1.766 + 8$	$7.145 + 7$	$1.382 + 7$
$3P_d$	—	$1.052 + 4$	$3.972 + 3$	$1.254 + 6$	$1.532 + 7$	$1.066 + 7$
$3D$	—	$6.131 + 5$	$1.925 + 7$	$2.271 + 8$	$6.044 + 8$	$8.878 + 7$

что ΔE не очень сильно отличается от ΔE_0 . Так, для $Z=5$ это отличие составляет ~ 13 , для $Z=10$ — ~ 6 , для $Z=25$ — всего лишь 2%. Таким образом, основная Z -зависимость ω определяется дипольным матричным элементом (8). Как видно из таблицы, уже при $Z=15$ происходит перераспределение вероятностей за счет включения релятивистских эффектов, а следовательно, при расчете

Таблица 3
Факторы Фано $q(1LSi)$ как функций Z

$1LSi$	Формула (7)	$Z=5$	$Z=10$	$Z=15$	$Z=20$	$Z=25$
$1P_+$	1.4696	1.4674	1.4671	1.4628	1.4541	1.4512
$3P_+$	—	1.4853	1.4866	1.4838	1.4784	1.5075
$1P_-$	1.7325	1.6739	1.6900	1.6852	1.7645	0.9224
$3P_-$	—	1.4966	1.5058	1.5062	1.5008	1.4800
$1P_d$	1.2270	1.2020	1.1968	1.1425	0.9954	0.6052
$3P_d$	—	1.0841	-0.5868	1.5128	1.6451	1.6971
$3D$	—	1.4965	1.5072	1.5024	1.5077	1.6674

рассматриваемых вероятностей переходов для многозарядных ионов следует по возможности точнее учесть как электростатическое взаимодействие электронов (6), так и релятивистские эффекты (8). В заключение заметим, что вероятность перехода как функция от n_1 и n_2 имеет ту же зависимость, что и квадрат дипольного матричного элемента (5), так как разность энергий переходов с ростом n_1 и n_2 практически стремится к $E(1s^2 {}^1S_0)$. В связи с этим при расчете вероятности перехода можно ограничиться не полным учетом всех l , а всего лишь несколькими членами, так как R , по определению (рис. 2), быстро падает с ростом l .

Для фактора Фано q , согласно (3), (4), (9), имеем

$$q(1LS, i) = \frac{\sum_l C^1(1LSi, {}^1Pl) a(n_1 l, n_2 l + 1)}{\sum_l C^1(1LSi, {}^1Pl) b(n_1 l, n_2 l + 1)} \quad (12)$$

Для иллюстрации в табл. 3 приведены факторы Фано для семи уровней 2, 3 состояний. В первой графе даны q , для которых C определялось из уравнения (7), т. е. постоянное для всех Z . Учет Z -зависимости коэффициентов C от Z приводит к Z -зависимости и для коэффициентов q . Интересно отметить, что дипольный матричный элемент (9) изменяется довольно сильно с изменением Z , что видно из табл. 2, но фактор q при этом может оставаться практически постоянным, например, для $q({}^3P_+)$. Довольно сильно меняется $q({}^3P_d)$, происходит даже изменение знака. Следует заметить, что q в отличие от R (5) мало меняется при изменении l , а следовательно, при определении $C^1(1LSi, {}^1Pl)$ нужно учесть полностью все члены по l , а не ограничиваться 2—3 членами, как это можно сделать для W .

Вероятности перехода и факторы Фано для дырочных состояний

Рассмотрим состояния с дырками $(n_1 l_1)^{-1} (n_2 l_2)^{-1}$. Для дипольного матричного элемента $\langle (n_1 l_1)^{-1} (n_2 l_2)^{-1} {}^1P \mid r \mid (1s)^{-2} {}^1S \rangle$ мы можем воспользоваться формулой (1). Это связано с тем, что расчет проводится на водородоподобном базисе, а следовательно, все численные значения сумм и интервалов в (1) остаются неизменными. Для расчета вероятностей и факторов q воспользуемся формулами (10), (12) предыдущего раздела. Мы не будем здесь приводить численные результаты для W и q . Обсудим лишь наиболее существенные черты, отличающие расчет дырочных состояний от расчета частичных состояний.

Основным является, конечно, значительно меньшее перемешивание состояний, чем это имело место для частичных состояний. Это связано в первую очередь с тем, что при расчете матрицы энергии довольно быстро растут диагональные матричные элементы при увеличении числа электронов в рассматриваемой системе. Недиагональные матричные элементы для дырочных состояний $(n_1 l_1)^{-1} (n_2 l_2)^{-1}$ в первом порядке теории возмущений останутся теми же самыми и для частичных состояний $n_1 l_1 n_2 l_2$. Так, например, если частичные состояния $2s3p$, $2p3s$ — перемешанные практически с коэффициентом $1/\sqrt{2}$, то дырочные состояния $2s^{-1}3p^{-1}$, $2p^{-1}3s^{-1}$ при заполненных оболочках $n=1, 2, 3$ перемешаны лишь с весом 0.15. В связи с таким незначительным перемешиванием состояний можно для оценки вообще пренебречь коэффициентами C и воспользоваться прямо значениями R и q , приведенными на рис. 1 и 2.

Литература

- [1] S. V. Khristenko. Phys. Lett., 59A, 202, 1976.
- [2] H. R. Kelly. Phys. Rev. Lett., 37, 37, 1976.
- [3] М. Я. Амусья, И. С. Ли. ЖЭТФ, 73, 430, 1977.
- [4] У. И. Сафронова, В. С. Сенашенко. Изв. АН СССР, сер. физ., 41, 2610, 1977.
- [5] M. Gavrilá, J. E. Hansen. J. Phys., 11B, 1353, 1978.
- [6] П. Г. Бодашко, С. А. Запрягаев, У. И. Сафронова, В. С. Сенашенко. Опт. и спектр., 51, 18, 1981.

Поступило в Редакцию 15 апреля 1981 г.