

УДК 539.184

## ЭФФЕКТИВНЫЙ ПОТЕНЦИАЛ ОПТИЧЕСКОГО ЭЛЕКТРОНА В МНОГОЭЛЕКТРОННОМ АТОМЕ И ПОЛОЖИТЕЛЬНОМ ИОНЕ

И. И. Гутман

С помощью собственных функций модельного гамильтониана рассчитывается эффективный потенциал оптического электрона многоэлектронного атома и иона с учетом электростатического обменного и поляризационного взаимодействия.

### Введение

При решении многих прикладных задач спектроскопии, астрофизики, теплофизики и физики плазмы необходимо знать волновые функции дискретного и непрерывного спектра оптического электрона многоэлектронного атома или иона.

Большой прогресс был достигнут при использовании полуэмпирических методов расчета волновых функций [1-5] и борн-кулоновского приближения при расчете сечений электрон-ионных столкновений [6]. Однако для применения полуэмпирических методов к расчету волновых функций необходимо знание экспериментальных значений энергий возбуждения и экспериментальных квантовых дефектов, поэтому эти методы не работают в случае многозарядных ионов, по которым отсутствуют соответствующие экспериментальные данные. Известные нам попытки теоретически учесть влияние некулоновской части потенциала на волновые функции либо не были доведены до простых расчетных формул [7, 8], либо этот учет не был достаточно полным [9].

Поэтому возникает задача разработать простые теоретические методы расчета волновых функций оптического электрона атома или иона. В настоящей работе делается попытка решить эту задачу.

### § 1. Замкнутое выражение для поправки к энергии второго порядка

В работе [10] подробно излагается вариационная теория возмущений Кирквуда-Гельмана. В этой теории поправка первого порядка к волновой функции ищется в виде

$$\Psi' = \lambda \hat{V} \Psi_0, \quad (1, 1)$$

где  $\hat{V}$  — регуляризованный оператор возмущения,  $\Psi_0$  — волновая функция нулевого приближения,  $\lambda$  — варьируемый параметр. Выбор пробной функции в виде (1, 1) дает хорошие результаты лишь для атомов и ионов с замкнутыми оболочками. Кроме того, выражение (1, 1) не позволяет получить правильную зависимость статической поляризуемости и постоянной Ван дер Ваальса от заряда  $Z$  для щелочных и щелочноземельных атомов и подобных им ионов. Эти недостатки могут быть устранены, если модифицировать вариационную теорию возмущений.

Будем искать поправку к волновой функции первого порядка в виде

$$\Psi' = \lambda (\hat{V} - V_{00}) \Psi_0 - \sum_{n=1}^j V_{0n} \left( \frac{1}{\Delta E_n} + \lambda \right) \Psi_n, \quad (1, 2)$$

где выделено конечное число слагаемых с малыми энергетическими знаменателями  $\Delta E_n$ , которым соответствуют волновые функции нулевого приближения  $\Psi_n$ .

Варьируя по параметру  $\lambda$ , получаем следующее выражение для параметра  $\lambda$  и поправки к энергии  $E_2$  второго порядка [11]

$$\lambda = - \frac{(\hat{V}^2)_{00} - V_{00}^2 - \sum_{n=1}^j |V_{0n}|^2}{\langle \Psi_0 | \hat{V} (\hat{H}_0 - E_0) \hat{V} | \Psi_0 \rangle - \sum_{n=1}^j \Delta E_n |V_{0n}|^2}, \quad (1, 3)$$

$$E_2 = - \sum_{n=1}^j \frac{|V_{0n}|^2}{\Delta E_n} - \frac{\left\{ (\hat{V}^2)_{00} - V_{00}^2 - \sum_{n=1}^j |V_{0n}|^2 \right\}^2}{\langle \Psi_0 | \hat{V} (\hat{H}_0 - E_0) \hat{V} | \Psi_0 \rangle - \sum_{n=1}^j \Delta E_n |V_{0n}|^2}. \quad (1, 4)$$

Учитывая, что для атомов оператор потенциальной энергии гамильтониана  $\hat{H}_0$  и оператор возмущения  $\hat{V}$  коммутируют, можно преобразовать матричный элемент  $\langle \Psi_0 | \hat{V} (\hat{H}_0 - E_0) \hat{V} | \Psi_0 \rangle$  к виду

$$\langle \Psi_0 | \hat{V} (\hat{H}_0 - E_0) \hat{V} | \Psi_0 \rangle = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \langle \Psi_0 | \nabla_i \hat{V} \cdot \nabla_i \hat{V} | \Psi_0 \rangle, \quad (1, 5)$$

где суммирование ведется по числу электронов.

Выражение (1, 4) позволяет получить следующую формулу для расчета статической поляризуемости:

$$\alpha = \frac{f_{\text{pes.}}}{(\Delta E_{\text{pes.}})^2} + \frac{4}{9} \left[ \sum_{n'l'} N_{n'l'} \langle n'l' | r^2 | n'l' \rangle - \frac{l_1 + 1}{2l_1 + 1} N_{n_1 l_1} \langle n_1 l_1 | r | n_2 l_1 + 1 \rangle^2 \right]^2 / N - f_{\text{pes.}}, \quad (1, 6)$$

где  $N$  — число электронов в атоме,  $f_{\text{pes.}}$  и  $\Delta E_{\text{pes.}}$  — сила осциллятора и энергия возбуждения резонансного перехода,  $N_{n'l'}$  — числа заполнения оболочек,  $n_1$  и  $l_1$  — квантовые числа валентных электронов,  $n_2$  — главное квантовое число оболочки, на которую осуществляется резонансный переход.

Матричные элементы  $\langle n'l' | r^2 | n'l' \rangle$  и  $\langle n_1 l_1 | r | n_2 l_1 + 1 \rangle$ , а также  $f_{\text{pes.}}$  и  $\Delta E_{\text{pes.}}$  могут быть легко рассчитаны в явном аналитическом виде с по-

Таблица 1  
Статическая поляризуемость  $\alpha$

АТОМ	Наши расчеты	Метод RPAE	Эксперимент
He	1.09	1.25	1.38
Ne	2.39	2.30	2.66
Ar	12.55	10.7	11.0
H	4.32	—	4.5
Li	163.2	167.0	$150 \pm 13$
Na	162.9	—	$165 \pm 11$
K	294.0	—	$305 \pm 21$
Be	45.4	40.1	—
Ca	156.2	165.0	—

мощью собственных волновых функций модельного гамильтониана [12-14].

Результаты расчетов по формуле (1, 6) хорошо согласуются с экспериментальными данными и с расчетами по методу случайных фаз с обменом (RPAE), учитывающему многоэлектронные корреляции [15]. Соответствующие данные приведены в табл. 1.

## § 2. Расчет эффективного потенциала для оптического электрона

Рассмотрим произвольный атом или положительный ион, содержащий  $N$  электронов, из которых один находится в сильно возбужденном состоянии (так называемый «оптический» электрон). Гамильтониан такой системы может быть представлен в виде

$$\hat{H}_N(q, \mathbf{r}) = \hat{H}_{N-1}(q) + \hat{h}(\mathbf{r}) + \hat{V}(q, \mathbf{r}), \quad (2, 1)$$

где  $\hat{H}_{N-1}(q)$  — гамильтониан атомного остова, содержащий  $N - 1$  электронов,  $\hat{h}(\mathbf{r}) = -(1/2)\Delta - (z/r)$  представляет собой гамильтониан оптического электрона, а  $\hat{V}(q, \mathbf{r})$  — гамильтониан взаимодействия оптического электрона с атомным остовом. Совокупность координат всех электронов атомного остова обозначена  $q$ .

Уравнение Шредингера, определяющее волновую функцию системы  $\Psi(q, \mathbf{r})$ , имеет вид

$$\hat{H}_N \Psi(q, \mathbf{r}) = E_N \Psi(q, \mathbf{r}). \quad (2, 2)$$

Будем решать уравнение (2, 2) в адиабатическом приближении [16]. Для простоты рассмотрения временно не будем учитывать обмен. Тогда волновая функция  $\Psi(q, \mathbf{r})$  может быть представлена следующим образом:

$$\Psi(q, \mathbf{r}) = \Phi(q, \mathbf{r}) \varphi(\mathbf{r}). \quad (2, 3)$$

Здесь  $\Phi(q, \mathbf{r})$  — волновая функция атомного остова в поле оптического электрона, а  $\varphi(\mathbf{r})$  — волновая функция оптического электрона.

Функция  $\Phi(q, \mathbf{r})$  удовлетворяет уравнению

$$[\hat{H}_{N-1}(q) + \hat{V}(q, \mathbf{r})] \Phi(q, \mathbf{r}) = E(\mathbf{r}) \Phi(q, \mathbf{r}). \quad (2, 4)$$

Наряду с функцией  $\Phi(q, \mathbf{r})$  рассмотрим волновую функцию «свободного» атомного остова  $\Phi_0(q)$ , удовлетворяющую уравнению

$$\hat{H}_{N-1}(q) \Phi_0(q) = E_{N-1} \Phi_0(q), \quad (2, 5)$$

где  $E_{N-1}$  — энергия атомного остова без учета взаимодействия с оптическим электроном.

Уравнение (2, 4) можно решать методом теории возмущений, выбрав в качестве нулевого приближения уравнение (2, 5). При этом энергия  $E(\mathbf{r})$  может быть представлена в виде

$$E(\mathbf{r}) = E_{N-1} + U(\mathbf{r}). \quad (2, 6)$$

В первом порядке теории возмущений  $U(\mathbf{r})$  определяется выражением

$$U_1(\mathbf{r}) = \langle \Phi_0(q) | \hat{V}(q, \mathbf{r}) | \Phi_0(q) \rangle. \quad (2, 7)$$

Во втором порядке

$$U(\mathbf{r}) = U_1(\mathbf{r}) + U_2(\mathbf{r}), \quad (2, 8)$$

где  $U_2(\mathbf{r})$  определяется выражением (1, 4).

Волновая функция  $\Phi(q, \mathbf{r})$  в первом порядке теории возмущений представляется в виде

$$\Phi(q, \mathbf{r}) = \Phi_0(q) + \Phi'_0(q, \mathbf{r}), \quad (2, 9)$$

где  $\Phi'_0(q, \mathbf{r})$  определяется выражением типа (1, 2).

Для вывода уравнения, которому удовлетворяет функция  $\varphi(\mathbf{r})$ , подставим (2, 3) в (2, 2), умножим (2, 2) на  $\Phi^*(q, \mathbf{r})$  и проинтегрируем по  $q$ . Учитывая (2, 4), получим

$$\hat{h}(\mathbf{r})\varphi(\mathbf{r}) + U(\mathbf{r})\varphi(\mathbf{r}) = \varepsilon\varphi(\mathbf{r}), \quad (2, 10)$$

где  $\varepsilon = E_N - E_{N-1}$ , а оператор  $\hat{h}(\mathbf{r})$  определяется следующим образом:

$$\hat{h}(\mathbf{r}) = \langle \Phi(q, \mathbf{r}) | \hat{h}(\mathbf{r}) | \Phi(q, \mathbf{r}) \rangle_q. \quad (2, 11)$$

Здесь  $\langle \dots \rangle_q$  означает интегрирование по координате  $q$ . Оператор  $\hat{h}(\mathbf{r})$  может быть представлен в виде

$$\hat{h}(\mathbf{r}) = -\frac{1}{2}\Delta - \frac{z}{r} + U_{\text{ад.}}(\mathbf{r}), \quad (2, 12)$$

где  $U_{\text{ад.}}(\mathbf{r})$  — так называемый адиабатический потенциал<sup>[16]</sup>, который представляет собой поправку на неадиабатичность.

Таким образом, уравнение для волновой функции  $\varphi(\mathbf{r})$  оптического электрона записывается следующим образом:

$$-\frac{1}{2}\Delta\varphi(\mathbf{r}) + U_{\text{ад.}}(\mathbf{r})\varphi(\mathbf{r}) = \varepsilon\varphi(\mathbf{r}), \quad (2, 13)$$

где<sup>[17]</sup>

$$U_{\text{ад.}}(\mathbf{r}) = -\frac{Z}{r} + U_1(\mathbf{r}) + U_2(\mathbf{r}) + U_{\text{ад.}}(\mathbf{r}). \quad (2, 14)$$

Используя собственные волновые функции модельного гамильтонiana<sup>[12-14]</sup>, можно получить явное выражение для потенциала  $U_{\text{ад.}}$ .

Преобразуем сначала выражение

$$-\frac{Z}{r} + U_1(\mathbf{r}). \quad (2, 15)$$

Потенциал возмущения  $\hat{V}(q, \mathbf{r})$  представим в виде

$$\hat{V} = \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{j=1}^{N-1} \frac{r_{<}^k(j, N)}{r_{>}^{k+1}(j, N)} P_k(\cos \vartheta_{jN}), \quad (2, 16)$$

где  $r_{<}(j, N) = \min(r_j, r_N)$ ,  $r_{>}(j, N) = \max(r_j, r_N)$ , а радиус-вектор оптического электрона обозначен  $\mathbf{r}_N$ .

Если атомный остов содержит лишь замкнутые оболочки, то вклад в  $U_1(\mathbf{r})$  дает лишь член с  $k=0$  и потенциал  $U_1$  в этом случае будет сферически-симметричным. В случае произвольного атома или иона также будем учитывать лишь член с  $k=0$ . При этом мы теряем в случае наличия незамкнутых оболочек малые поправочные несферические члены, которые учтем несколько позднее. В этом приближении выражение (2, 15) преобразуется следующим образом:

$$-\frac{Z^*}{r} + U_{\text{ад.}}(\mathbf{r}), \quad (2, 17)$$

где  $Z^* = Z - N + 1$ , а  $U_{\text{ад.}}(\mathbf{r})$  определяется в виде

$$U_{\text{ад.}}(\mathbf{r}) = \sum_{n'l'} N_{n'l'} v_{n'l'}(\mathbf{r}), \quad (2, 18)$$

$$v_{n'l'}(\mathbf{r}) = -e^{-\frac{2Z_{n'l'}}{n'}r} \left\{ \frac{1}{r} + \frac{2Z_{n'l'}}{n'} \sum_{\gamma=0}^{2n'-2l'-2} \lambda_{n'l', \gamma} \times \right.$$

$$\left. \times \sum_{s=0}^{2l'+\gamma} \frac{2l' + \gamma - s + 1}{(2l' + \gamma + 2)(s + 1)!} \left( \frac{2Z_{n'l'}}{n'} r \right)^s \right\}. \quad (2, 19)$$

Суммирование в (2, 18) ведется по всем занятым (не пустым) оболочкам. Параметры  $Z_{nl}$  представляют собой эффективные заряды электрона в оболочке  $nl$  и определены в работах [12–14]. Постоянные  $\lambda_{n'l'}, \gamma$  приведены в работе [18].

Первое слагаемое (2, 17) имеет вид кулоновского потенциала с экранированным зарядом ядра. Второе слагаемое  $U_{\text{эк}}$  учитывает отклонение электростатического поля ядра и атомного остова от кулоновского вида. При  $r \rightarrow 0$  выражение (2, 17) имеет асимптотику  $-z/r$ .

Рассмотрим теперь расчет слагаемого  $U_2(r)$  в выражении (2, 14). Для того чтобы получить выражение  $U_2$ , подставим (2, 16) в (1, 4). Основной вклад дает член с  $k=1$  (дипольный член). Ограничимся дипольным приближением. Использование собственных волновых функций модельного гамильтонiana [12–14] позволяет получить в явном виде выражение для  $U_2$ . Однако соответствующие выражения громоздки и неудобны в расчетах. Поэтому целесообразно их заменить интерполяционным выражением, которое совпадает с точным при  $r \rightarrow 0$  и  $r \rightarrow \infty$ .

Асимптотическое выражение при  $r \rightarrow \infty$  имеет вид

$$U_2^{(\infty)}(r) = -\frac{\alpha}{2r^4}, \quad (2, 20)$$

где  $\alpha$  — статическая дипольная поляризуемость атома или иона. При  $r \rightarrow 0$  потенциал  $U_2(r) \rightarrow 0$ , что следует из (1, 4). Ведущий член первого слагаемого в выражении для  $U_2$ , который соответствует первому слагаемому (1, 4), имеет структуру

$$\frac{\text{const}}{r^4} [1 - P_n(a_1 r) e^{-a_1 r}]^2, \quad (2, 21)$$

где  $P_n(x)$  — некоторый полином, а постоянная  $a_1$  равна

$$a_1 = \frac{z_{n_1 l_1}}{n_1} + \frac{z_{n_2 l_1 + 1}}{n_2}. \quad (2, 22)$$

Ведущий член второго слагаемого имеет вид

$$\frac{\text{const}}{r^4} [1 - Q_n(a_2 r) e^{-a_2 r}], \quad (2, 23)$$

где  $Q_n(x)$  — другой полином, а постоянная  $a_2$  равна

$$a_2 = \frac{2Z_{n_1 l_1}}{n_1}. \quad (2, 24)$$

Первое слагаемое вносит существенный вклад лишь для щелочных и щелочноземельных атомов и подобных им ионов. В этом случае  $n_2 = n_1$ ,  $l_1 = 0$  и  $Z_{n_1 0} \approx Z_{n_1 1}$ . Таким образом,  $a_1 \approx a_2$ , поэтому структура интерполяционного выражения может быть выбрана следующим образом:

$$U_{\text{пол.}}(r) = -\frac{\alpha}{2r^4} \left\{ 1 - \left( 1 + ar + \frac{1}{2} a^2 r^2 + \frac{1}{6} a^3 r^3 + \frac{1}{24} a^4 r^4 \right) e^{-ar} \right\}, \quad (2, 25)$$

где потенциал  $U_2$  в соответствии с его физическим смыслом мы будем обозначать  $U_{\text{пол.}}$  и называть поляризационным, а постоянная  $a = a_2$ . Заметим, что необходимость регуляризации  $U_{\text{пол.}}$  в нуле позволяет однозначно определить первые пять членов многочлена перед  $e^{-ar}$ .

Рассмотрим адиабатический потенциал  $U_{\text{ад.}}$ . Легко видеть, что на больших расстояниях он убывает как  $r^{-6}$ . Таким образом, он такого же порядка, как и неучтенный квадрупольный член в  $U_{\text{пол.}}$ . Поэтому его следует учитывать лишь в том случае, если мы учитываем квадрупольный член. Заметим, что адиабатический и квадрупольный члены имеют разные знаки и потому частично компенсируют друг друга. Вследствие этого можно ожидать, что ошибка от пренебрежения этими членами будет невелика.

Учтем теперь обменное взаимодействие. Для этого следовало бы антисимметризовать выражение (2, 3) по координатам всех электронов и затем повторить весь предыдущий вывод. Тогда в выражении  $U_{\text{эфф.}}$  добавится нелокальный обменный потенциал. Однако для упрощения расчетной процедуры заменим несферическую часть электростатического потенциала и нелокальный обменный потенциал эффективным локальным сферически симметричным потенциалом  $U_{\text{обм.}}(r)$ .

При выборе потенциала  $U_{\text{обм.}}(r)$  необходимо удовлетворить следующим трем условиям. Во-первых, потенциал  $U_{\text{обм.}}$  должен давать правильные значения энергии для обменной поправки и поправки на несферическую часть электростатического взаимодействия. Во-вторых, он должен иметь тот же экспоненциальный закон убывания на бесконечности, что и  $U_{\text{эл.}}$ , так как обменное взаимодействие оптического электрона с атомным остовом также пропорционально плотности распределения электрического заряда в атомном остове (степень перекрытия волновых функций оптического электрона и электронов атомного остова будет учтена выбором константы перед экспонентой).

В-третьих,  $U_{\text{обм.}}(r)$  должен стремиться к нулю при  $r \rightarrow 0$ , чтобы асимптотика  $U_{\text{эфф.}}$  при  $r \rightarrow 0$  имела вид  $-Z/r$ . Простейший потенциал, удовлетворяющий этим условиям, имеет вид

$$U_{\text{обм.}}(r) = \sum_{l=0}^{\infty} U_{\text{обм.}}^{(l)}(r) \hat{\Omega}_l, \quad (2, 26)$$

где  $\hat{\Omega}_l$  — проекционный оператор

$$\hat{\Omega}_l Y_{l'm} = \delta_{l'm} Y_{l'm}, \quad (2, 27)$$

а потенциал  $U_{\text{обм.}}^{(l)}(r)$  имеет вид

$$U_{\text{обм.}}^{(l)}(r) = - \sum_{n'l'} N_{nl} \langle nl | u_{n'l'}(r) | nl \rangle^{-1} G_{nl, n'l', n'l'}(r), \quad (2, 28)$$

$$u_{n'l'}(r) = \frac{1}{r} e^{\frac{2Z_{n'l'}}{n'} r} (1 - e^{-\gamma r}), \quad (2, 29)$$

где параметры  $G_{nl, n'l'}$  принимают вид

$$G_{nl, n'l'} = \left\{ \sum_{k=1}^{\min(l, l')} f_k(l, n'l') F^{2k}(nl, n'l') - \sum_{n=|l-l'|}^{l+l'} g_n(l, n'l') G^k(nl, n'l') \right\}. \quad (2, 30)$$

Здесь  $F^k(nl, n'l')$  — кулоновские параметры Слетера, а угловые матричные элементы  $f_k(l, n'l')$  и  $g_k(l, n'l')$  приведены в [19].

Таким образом, окончательно эффективный потенциал оптического электрона  $U_{\text{эфф.}}$  принимает вид

$$U_{\text{эфф.}}(r) = -\frac{Z^*}{r} + U_{\text{эл.}}(r) + U_{\text{обм.}}(r) + U_{\text{пол.}}(r), \quad (2, 31)$$

где  $U_{\text{эл.}}(r)$  определяется выражениями (2, 18), (2, 19),  $U_{\text{обм.}}(r)$  — определяется выражениями (2, 26)–(2, 30),  $U_{\text{пол.}}(r)$  — выражениями (2, 24), (2, 25).

Для нахождения энергии оптического электрона необходимо решить уравнение (2, 13) с потенциалом (2, 31). В нулевом приближении потенциал  $U_{\text{эфф.}}$  можно считать кулоновским, а в качестве оператора возмущения выбрать выражение

$$V_{\text{эфф.}}(r) = U_{\text{эл.}}(r) + U_{\text{обм.}}(r) + U_{\text{пол.}}(r). \quad (2, 32)$$

Тогда в первом порядке теории возмущений по потенциальному (2, 32) энергия оптического электрона может быть представлена в виде

$$\varepsilon = -\frac{Z^{*2}}{2n^2} + \Delta E_{\text{эл.}} + \Delta E_{\text{обм.}} + \Delta E_{\text{пол.}}. \quad (2, 33)$$

Для поправок к энергии  $\Delta E_{\text{эк.}}$ ,  $\Delta E_{\text{обм.}}$  и  $\Delta E_{\text{пол.}}$  получены явные аналитические выражения.

### § 3. Сравнение с экспериментом

На примере атома Не Мазур [20] произвел тщательное сравнение эффективного потенциала с экспериментальными данными и другими имеющимися расчетами.

Если рассчитать электрическое поле атомного остатка в приближении Хартри—Фока, то получается выражение вида

$$U_{\text{эфф.}}(r) = -\frac{Z^*}{r} + U_{x-\phi}(r). \quad (3, 1)$$

Потенциал  $U_{x-\phi}$  практически совпадает с потенциалом  $U_{\text{эл.}}$ , что было показано в работе [20] как непосредственным сравнением этих потенциалов, так и сравнением фаз рассеяния. Таким образом, использование потенциала (2, 32) позволяет уточнить хартри-фоковское приближение. Потенциалы  $U_{\text{обм.}}$  и  $U_{\text{пол.}}$  проверялись сравнением теоретических и экспериментальных ридберговых поправок для Не.

Другим важным доводом в пользу потенциала (2, 32) являются результаты расчетов энергии оптического электрона. В качестве примера рассмотрим оптический электрон в поле гелиевоподобного иона. При  $Z=15$  и  $n=3$  (ион РХIII, конфигурация  $1s^23d$ ) получаем  $\varepsilon=-9.394190$  а. е., в то время как экспериментальные значения для  $J=3/2, 5/2$  соответственно равны:  $\varepsilon_{3/2}=-9.398810$ ,  $\varepsilon_{5/2}=-9.392613$ . Учет спин-орбитальной поправки улучшает согласие с экспериментом (табл. 2).

Таблица 2  
Потенциал возбуждения иона РХIII

Уровень	$J_{\text{теор.}}, \text{см}^{-1}$	$J_{\text{эксп.}} [22], \text{см}^{-1}$	$J_{\text{эксп.}} - J_{\text{теор.}}$	$\frac{J_{\text{эксп.}} - J_{\text{теор.}}}{J_{\text{эксп.}}}$
$1s^23d \ ^2D_{3/2}$	2062385	2062800	415	$2.04 \cdot 10^{-4}$
$1s^23d \ ^2D_{5/2}$	2061352	2061440	88	$4.26 \cdot 10^{-5}$

Для оптического электрона, находящегося в поле атомного остатка типа литиевоподобного иона, была рассчитана сила осциллятора перехода  $2s3p (^1P^0) - 2s3d (^1D)$ . Для больших  $Z^*$  выражение силы осциллятора может быть представлено в виде

$$f = \frac{1.466005}{Z^*} \left( 1 - \frac{0.556237}{Z^*} \right). \quad (3, 2)$$

Сравнение результатов расчета по формуле (3, 2) с данными [21] дано в табл. 3.

Таблица 3  
Силы осцилляторов перехода  $2s3p (^1P^0) - 2s3d (^1D)$

АТОМ	$Z^*$	Наши расчеты	Визе [21]	Относительная погрешность, %
C	3	0.398	0.407	2.0
N	4	0.315	0.312	1.1
O	5	0.260	0.258	1.0

### Литература

- [1] D. Bates, A. Damgaard. Phil. Trans., A242, 101, 1949.
- [2] М. И. Петрашень, И. В. Абаренков. Вестн. ЛГУ, № 5, 141, 1954.
- [3] Л. А. Вайнштейн. Опт. и спектр., 3, 313, 1957.

- [4] A. Burgess, M. F. Seaton. Rev. Mod. Phys., 40, 992, 1958; Mon. Not. Roy. Astron. Soc., 118, 504, 1958; 120, 1960.
- [5] Л. М. Биберман, Г. Э. Норман. Опт. и спектр., 8, 433, 1960.
- [6] Л. А. Вайнштейн, И. И. Собельман, Е. А. Юков. Сечения возбуждения атомов и ионов электронами. Изд. «Наука», М., 1973.
- [7] А. Б. Болотин, А. П. Юцис. ЖЭТФ, 24, 537, 1953.
- [8] М. Г. Веселов, И. Б. Берсукер. Изв. АН СССР, сер. физ., 22, 622, 1958.
- [9] Л. А. Вайнштейн. Опт. и спектр., 3, 313, 1957; Тр. ФИАН, 15, 3, 1961.
- [10] П. Гомбаш. Проблемы многих тел в квантовой механике. ИЛ, 1952.
- [11] Г. Бете, Э. Солпитер. Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами. Физматгиз, 1960.
- [12] И. И. Гутман, Р. М. Безпалъко. Изв. вузов, физика, № 1, 137, 1969.
- [13] И. И. Гутман, Р. М. Безпалъко. Изв. вузов, физика, № 8, 124, 1970.
- [14] И. И. Гутман, Р. М. Безпалъко. УФЖ, 15, 482, 1971.
- [15] М. Я. Амусья, С. Г. Шапиро. Сб. «Теория атомов и атомных спектров», 1, 17, 1974.
- [16] М. Г. Веселов. Вестн. ЛГУ, № 22, 20, 1968.
- [17] И. И. Гутман, Н. А. Следзюк, Н. Г. Смирнова. Тез. докл. Все-союзн. семинара по теории атомов и атомных спектров, 23. Ташкент, 1974.
- [18] И. И. Гутман, Н. А. Следзюк. Методические указания к решению задач и упражнений по атомной и ядерной физике. Одесса, ОПИ, 1973.
- [19] И. И. Собельман. Введение в теорию атомных спектров. Физматгиз, 1963.
- [20] В. А. Мазур. Автореф. канд. дисс., Одесса, 1974.
- [21] W. L. Wiese, M. W. Smith, B. M. Glennon. Atomic Transition Probabilities Hydrogen Through Neon, vol. 1, NBS, 1966.
- [22] C. E. Moore. Atomic Energy Levels, vol. 1, NBS, Circular 467, 1949.

Поступило в Редакцию 15 ноября 1973 г.