

КСЕНОН. РАДИАЦИОННЫЕ ВРЕМЕНА ЖИЗНИ УРОВНЕЙ

А. В. Логинов и П. Ф. Груздев

Приведены результаты вычислений (в одно- и многоконфигурационном приближении) радиационных времен жизни уровней конфигураций $5p^5ns$ ($n=6-9$), $5p^5np$ ($n=6-8$), $5p^5nd$ ($n=5-7$) и $5p^54f$ в спектре атома ксенона. Расчетные значения времен жизни сравниваются с имеющимися экспериментальными данными.

За последние годы значительно возросло число работ [1-13] по изучению радиационных переходов в спектре атома ксенона. Сейчас для конфигураций $5p^56s$, $5p^56p$ можно более или менее определенно сказать о величинах радиационных времен жизни уровней. Что касается более возбужденных состояний, то имеющиеся в литературе сведения немногочисленны и противоречивы. Поэтому теоретические оценки времен жизни как глубоких, так и более возбужденных состояний атома ксенона представляют несомненный интерес.

Настоящая работа продолжает серию наших статей [14] по расчету времен жизни уровней атомов инертных газов и изоэлектронных им ионов. В ней приведены результаты вычислений радиационных времен жизни уровней конфигураций $5p^5ns$ ($n=6-9$), $5p^5np$ ($n=6-8$), $5p^5nd$ ($n=5-7$) и $5p^54f$ в спектре атома ксенона. Метод расчета обсуждался ранее. Напомним, что в основе его лежит схема промежуточной связи.

Для всех изучаемых конфигураций по программе [15] были получены радиальные функции Хартри—Фока (ХФ). Поскольку функции ХФ получены в приближении, не зависящем от схемы связи, то приходится учитывать наложение конфигураций с одинаковыми наборами орбитальных квантовых чисел. Подробно этот вопрос рассмотрен нами при изучении спектров ионов KII и $CaIII$ [16]. Здесь мы только отметим, что в данном случае наложение конфигураций можно разделить на два типа — наложение типа $5p^5(nl+ml')$, вызванное недостаточностью собственно одноконфигурационного подхода, и наложение типа $5p^5(nl+ml)$, вызванное недостаточностью конкретного приближения, в котором получены радиальные волновые функции.

В случае атома ксенона учитывалось наложение конфигураций $5p^5(6s+7s+8s+9s+5d+6d+7d)$ и $5p^5(6p+7p+8p+4f)$. Для этих конфигураций были построены матрицы энергии с учетом электростатического и упрощенного спин-орбитального взаимодействий. Все необходимые радиальные интегралы (исключая полуэмпирические значения спин-орбитальной константы оболочки $5p^5$ и той части энергии конфигурации, которая не зависит от терма) были вычислены на функциях ХФ. Оказалось, что наиболее существенным является наложение конфигураций именно второго типа. Так например, состояние $^3D_1 5p^56p$ представляет собой следующую смесь конфигураций $5p^56p$, $5p^57p$: $6p \sim 0.49$ $6p+0.50$ $7p$. Обе конфигурации представлены практически поровну. Вклад остальных конфигураций ~ 0.01 . Столь же велико наложение для $5p^5nd$. Причем решающую роль снова играет взаимное перемешивание этих конфигураций,

в то время как вклад конфигураций $5p^5ms$ сравнительно невелик. Характерный пример в этом смысле представляет уровень $^1P_1 5p^55d$

$$5d \sim 0.33 5d + 0.36 6d + 0.23 7d + 0.08 7s.$$

Напротив, наложение $5p^5np$ с $5p^54f$ не превышает долей процента.

Эти примеры наглядно показывают, что в многоконфигурационном подходе с использованием схемы промежуточной связи предпочтительно пользоваться радиальными функциями ХФ, зависящими от терма. Тогда, согласно теореме Бриллюэна [17], отпадает необходимость учета наложения конфигураций с одинаковыми наборами орбитальных квантовых чисел, и, следовательно, уменьшается погрешность расчета, связанная с увеличением размерности энергетических матриц.

Таблица 1

Радиационные времена жизни уровней (в нс) спектра атома ксенона

Уровни	$\tau_{ол}$			$\tau_{мп}$	Уровни	$\tau_{ол}$			$\tau_{мп}$
	τ_r	τ_{rp}	τ_p			τ_r	τ_{rp}	τ_p	
1	2	3	4	5	1	2	3	4	5
$1s_4$	4.06	4.59	5.18	4.16	$4s''''$	97.2	102	90.1	93.4
$1s_2$	3.64	4.11	4.65	4.29	$4s_1'$	1.04	1.14	1.22	1.19
$2p_{10}$	29.7	43.5	63.6	32.5	$4s_1''$	105	120	129	96.5
$2p_9$	28.6	41.8	61.1	39.5	$4s_1'''$	106	120	125	118
$2p_8$	22.0	32.2	47.1	29.9	$3s_5$	92.3	102	113	108
$2p_7$	24.6	36.0	52.6	41.5	$3s_4$	19.4	23.1	27.5	66.0
$2p_6$	19.2	28.1	41.2	34.5	$3s_3$	87.6	96.7	106	91.6
$2p_5$	20.5	29.9	43.7	24.5	$3s_2$	24.7	29.3	34.5	—
$2p_4$	17.5	25.4	36.8	39.2	$4f^3D_1$	14.8	19.0	24.2	30.9
$2p_3$	16.5	24.0	34.4	26.5	$4f^3D_2$	25.9	33.1	42.0	34.5
$2p_2$	14.9	21.6	30.8	31.9	$4f^1G_4$	28.9	30.4	38.6	32.8
$2p_1$	14.1	20.0	27.5	18.4	$4f^3G_5$	19.1	24.5	31.1	32.4
$3d_6$	8490	5765	3910	2670	$4f^3F_3$	22.8	29.1	36.9	34.1
$3d_5$	56.3	60.5	64.7	—	$4f^1D_2$	35.8	45.7	58.0	37.4
$3d_4$	2910	1980	1340	2410	$4f^1F_3$	28.8	36.7	46.5	34.7
$3d_3$	1240	841	571	899	$4f^3F_4$	30.8	39.2	49.7	36.0
$3d_2$	1610	1093	742	1559	$4f^3D_3$	19.8	25.4	32.3	33.0
$3d_1''$	0.83	0.89	0.96	1.69	$4f^3F_2$	25.8	34.1	44.0	37.0
$3d_1'$	661	449	305	452	$4f^3G_3$	20.7	26.5	33.7	32.7
$3s_1''''$	513	348	237	343	$4f^3G_4$	24.8	31.7	40.3	34.3
$3s_1'''$	384	261	177	206	$4p_{10}$	196	221	243	249
$3s_1''$	0.30	0.32	0.35	0.55	$4p_9$	241	276	307	322
$3s_1'$	806	547	372	547	$4p_8$	204	232	259	335
$3s_1$	634	431	292	316	$4p_7$	276	321	364	147
$2s_5$	48.5	54.2	60.6	54.2	$4p_6$	224	256	292	239
$2s_4$	8.85	10.5	12.5	12.1	$4p_5$	369	452	540	—
$2s_3$	46.4	51.9	58.1	52.3	$4p_4$	188	201	206	155
$2s_2$	11.0	13.0	15.4	—	$4p_3$	204	225	239	142
$3p_{10}$	89.6	107	125	69.2	$4p_2$	170	184	190	91.2
$3p_9$	107	130	156	108	$4p_1$	115	108	96.5	—
$3p_8$	88.5	107	128	147	$5d_6$	118	141	164	139
$3p_7$	142	139	169	—	$5d_5$	74.8	87.1	99.0	—
$3p_6$	90.7	111	135	100	$5d_4$	128	152	173	143
$3p_5$	118	153	194	—	$5d_3$	122	145	163	168
$3p_4$	88.1	94.0	83.5	99.0	$5d_2$	128	152	168	170
$3p_3$	88.8	98.6	93.9	82.4	$5d_1'$	2.41	2.70	3.00	—
$3p_2$	76.4	80.3	69.6	62.5	$5d_1''$	126	150	170	186
$3p_1$	61.3	47.6	28.0	25.0	$5d_1'''$	130	153	166	162
$4d_6$	110	129	153	77.5	$5s_1''''$	120	138	147	126
$4d_5$	53.4	61.0	69.6	79.5	$5s_1'''$	2.62	2.92	3.23	—
$4d_4$	116	137	161	93.9	$5s_1''$	122	144	161	133
$4d_3$	107	126	147	103	$5s_1'$	126	148	161	143
$4d_2$	112	132	154	88.2	$4s_5$	156	175	196	115
$4d_1''$	1.30	1.44	1.58	—	$4s_4$	36.0	43.1	51.4	33.4
$4d_1'$	109	127	147	127	$4s_3$	118	141	164	86.9
$4d_1$	109	126	143	170	$4s_2$	74.9	87.1	99.0	—

В табл. 1 приведен конечный результат нашего расчета — значения времен жизни уровней атома ксенона, вычисленные в одно ($\tau_{он}$) и многоконфигурационном ($\tau_{мп}$) приближениях. Наименования уровней даются по Пашену (за исключением уровней $4f$), а последовательность расположения совпадает с принятой в таблицах Мур [1⁸]. Времена жизни $\tau_{он}$ рассчитаны с интегралами переходов, полученными на функциях ХФ по формулам длины (τ_r) и скорости (τ_v) диполя, а также с их геометрическим средним (τ_{rv}). Числа τ_r и τ_v отличаются друг от друга и в ряде случаев значительно. Эти расхождения обусловлены различием в интегралах переходов, вычисленных на функциях ХФ по формулам длины и скорости диполя, что в свою очередь указывает на недостаточную точность одноконфигурационных функций ХФ для расчета атомных характеристик ксенона. Некоторая компенсация погрешностей в определении интегралов переходов с функциями ХФ по формулам длины и скорости диполя достигается, если использовать интегралы переходов, полученные с теми же функциями по формуле геометрического среднего. При расчетах величин $\tau_{мп}$ в качестве интегралов переходов использованы только геометрические средние, поэтому для выяснения влияния наложения конфигураций следует сравнивать τ_{rv} и $\tau_{мп}$. Для ряда уровней атома ксенона наблюдаются значительные расхождения между τ_{rv} и $\tau_{мп}$. Для некоторых уровней имеет место интерференция слагаемых при вычислении сил линий при промежуточной связи. В таких случаях мы считаем нецелесообразным приводить $\tau_{мп}$.

Таблица 2
Сопоставление $\tau_{расч.}$ и $\tau_{эксп.}$ для уровней атома ксенона

Уровень	$\tau_{расч.}, \text{нс}$				$\tau_{эксп.}, \text{нс}$
	τ_{rv} , данная работа	τ_{jl} [4]	τ_r [11]	τ_v [11]	
$1s_4$	4.59				3.31 [3], 3.70 [2], 4.29 [9]
$1s_2$	4.11				3.17 [2], 3.29 [3], 3.91 [7], 4.20 [9]
$2p_8$	32.2	33.0	24.7	34.4	32.7 [1]
$2p_7$	36.0	35.0	29.0	35.2	35.9 [10]
$2p_6$	28.1	27.1	27.4	31.7	33 [4], 38.8 [10], 48 [5]
$2p_5$	29.9	27.0	24.7	32.3	30 [5], 40 [4]
$2p_4$	25.4	28.7	37.2	48.8	38.1 [10]
$2p_3$	24.0	28.0	26.3	35.6	30.5 [13], 34 [6], 39.0 [4]
$2p_2$	21.6	24.8	23.9	36.1	29.5 [13], 35 [5], 43.5 [4]
$2p_1$	20.0	23.0	27.2	35.0	30 [5], 30.7 [14], 38.5 [4]
$3p_{10}$	107	155			143 [4], 156 [13]
$3p_9$	130	140			168 [13], 200 [4]
$3p_8$	107	115			141 [4], 150 [6], 163 [12], 183 [13]
$3p_7$	139	125			100 [13], 101 [4], 203 [5]
$3p_6$	111	112			107 [13], 140 [5], 155 [6], 156 [4], 169 [12]
$3p_5$	153	118			87 [4], 107 [13], 115 [5]
$4p_8$	232	550			275 [4], 449 [13], 420 [12]
$4p_7$	321				350 [13]
$4p_6$	259				285 [13], 290 [12]
$4p_5$	452				171 [13]
$3d'$	1980	5250			8000 [12]
$5d_5$	87.1	114			87 [4]

В табл. 2 дано сопоставление экспериментальных значений времен жизни ($\tau_{эксп.}$), имеющих к настоящему времени, с расчетными величинами ($\tau_{расч.}$). Здесь $\tau_{эксп.}$ сравниваются с τ_{rv} , полученными в настоящей работе, с τ_{jl} , взятыми из [4] (расчет по методу Бейтса и Дамгард [1⁹] при схеме ll -связи), и с τ_r , τ_v из работы [11] (метод эффективных операторов). Хорошо видно, что расчетные значения τ_{rv} и τ_{jl} для уровней pr (за исключением $3p_{10}$, $3p_5$ и $4p_8$) хорошо согласуются друг с другом; τ_{rv} частично лучше согласуются с τ_r , а частично с τ_v работы [11]. Из табл. 2 видно, что $\tau_{эксп.}$, полученные разными методами, различаются между собой

и в ряде случаев значительно. Наши расчетные τ_{rv} для уровней $1s_1$ и $1s_2$ ближе к $\tau_{\text{эксн.}}$ из работы [9], а для уровней $2p$, $3p$ и $4p$ (за исключением $3p_5$ и $4p_5$) ближе к меньшим по величине $\tau_{\text{эксн.}}$. Для такого высоковозбужденного состояния, как $5d_5$, имеет место совпадения τ_{rv} и $\tau_{\text{эксн.}}$ работы [4].

Литература

- [1] В. П. Малахов. Изв. вузов, физика, 1, 180, 1965.
- [2] D. Anderson. Phys. Rev., 137, A21, 1965.
- [3] Г. И. Чашина, Е. Я. Шрейдер. Опт. и спектр., 20, 283, 1966.
- [4] L. Allen, D. Jones, D. Schofield. J. Opt. Soc. Am., 59, 842, 1969.
- [5] Я. Ф. Веролайнен, А. Л. Ошерович. Опт. и спектр., 27, 31, 1969.
- [6] M. Chenevier. Compt. Rend., 268B, 1179, 1969.
- [7] P. M. Griffin, J. M. Hutcherson. J. Opt. Soc. Am., 59, 1607, 1969.
- [8] C. J. Chen, R. H. Garstang. JQSRT, 10, 1347, 1970.
- [9] W. Wieme, P. Mortier. Physica, 65, 198, 1972.
- [10] X. Husson, J. Margerie. Opt. commun., 5, 139, 1972.
- [11] М. Аумар. Physica, 57, 178, 1972.
- [12] M. Chenevier, P. Moskowitz. J. Phys., 35, 401, 1974.
- [13] E. Jimenez, J. Campos, C. Sanchez del Rio. J. Opt. Soc. Am., 64, 1009, 1974.
- [14] П. Ф. Груздев, А. В. Логинов. Опт. и спектр., 34, 611, 812, 1973; 35, 3, 994, 1973; 36, 1232, 1974.
- [15] П. О. Богданович, Р. И. Каразия. Гос. фонд алгоритмов и программ. П-000083, 1971.
- [16] П. Ф. Груздев, А. В. Логинов. В сб.: Теория атомов и атомных спектров, 1, 75. Изд. Латв. ГУ, Рига, 1974.
- [17] L. Brillouin. Actual. sci. et ind., NO 159, 1934.
- [18] C. E. Moore. Atomic Energy Levels. Circ. NBS 467, vol. 3, 1958.
- [19] D. Bates, A. Damgaard. Phil. Trans., A242, 101, 1949.

Поступило в Редакцию 19 июня 1975 г.