

СИЛЫ ОСЦИЛЛЯТОРОВ ПЕРЕХОДОВ $3s^23p^N - 3s3p^{N+1}$ В АТОМАХ, ОДНОКРАТНЫХ И ДВУКРАТНЫХ ИОНАХ

З. И. Купляускис и А. В. Купляускене

Силы осцилляторов переходов $2s^22p^N - 2s2p^{N+1}$ для атомов и изоэлектронных им ионов изучались в ряде работ [1, 2]. Наличие большого количества теоретических результатов для атомов второго периода обусловлено простотой изучаемых атомных систем. Из третьего периода наиболее изучены атомы первой, второй и третьей групп и их изоэлектронные последовательности [3], так как их изучение может быть сведено к одноэлектронной или двухэлектронной задаче. Представляет интерес провести расчеты сил осцилляторов переходов $3s^23p^N - 3s3p^{N+1}$ в атомах и ионах третьего периода, так как в литературе имеются лишь отрывочные данные.

Нами изучены силы осцилляторов этих переходов для атомов, однократных и двукратных ионов. Для расчета использованы радиальные орбитали с независимым базисом для каждой оболочки и длиной базиса (2, 2, 2, 3, 2) для оболочек (1s, 2s, 2p, 3s, 3p) соответственно. Эти орбитали в работе [4] названы обобщенными водородоподобными радиальными орбиталями. Параметры одноэлектронных радиальных орбиталей для основной конфигурации атомов и ионов третьего периода приведены в [5], а для возбужденной конфигурации $3s3p^N$ — в [6]. Расчеты сил осцилляторов проведены с использованием всех трех выражений [7], т. е. формул «длины», «скорости» и «ускорения».

Таблица 1

Силы осцилляторов переходов $3s^2S - 3s3p^1P$

| | Наши расчеты | | | Другие теоретические результаты | | Экспериментальные значения | |
|------------------|--------------|-------|-------|---------------------------------|-------|----------------------------|------|
| | f_L | f_v | f_a | f_L | f_v | [10] | [11] |
| Mg | 2.43 | 1.56 | 614 | 1.77 | 1.72 | 1.76 | — |
| Al ⁺ | 2.41 | 1.53 | 507 | 1.84 | 1.84 | — | 2.4 |
| Si ²⁺ | 2.22 | 1.54 | 468 | 1.70 | 1.70 | — | 1.9 |

Примечание. Значения сил осцилляторов получены по формуле «длины» (f_L), «скорости» (f_v) и «ускорения» (f_a).

В табл. 1 приведены силы осцилляторов для перехода $3s^2S - 3s3p^1P$, полученные в нашей работе, некоторые теоретические результаты [8, 9] и экспериментальные данные [10, 11]. Из сравнения результатов, полученных по различным выражениям для сил осцилляторов, видно, что значения, полученные по формуле «ускорения», на несколько порядков превышают другие результаты. Это является общеизвестным фактором [12], так как обыкновенный метод расчета не позволяет получить точных радиальных волновых функций вблизи ядра. По этой причине для всех других переходов значения, полученные по формуле «ускорения», не приведены. Силы осцилляторов, рассчитанные по формулам «длины» и «скорости», и особенно их среднее значение хорошо согласуются с другими теоретическими результатами и экспериментальными значениями.

В табл. 2 приведены силы осцилляторов переходов $3s^23p^N - 3s3p^{N+1}$ ($N=1, 2, \dots, 5$). Там же приведены известные нам экспериментальные значения сил осцилляторов. Из этих результатов следует отметить хорошее согласие наших результатов и экспериментальных значений для четырех переходов двукратных ионов из пяти, для которых известны экспериментальные данные. Для нейтральных атомов экспериментальные значения известны для пяти переходов; наши результаты согласуются лишь для одного перехода. Для однократных ионов измерены силы осцилляторов для девяти переходов; наши результаты согласуются лишь для двух. Следует отметить, что теоретические значения сил осцилляторов при переходе вдоль изоэлектронного ряда меняются плавно, как для переходов $2s^32p^N - 2s2p^{N+1}$ в атомах второго периода [2], так и для переходов $3s^23p^N - 3s3p^{N+1}$ в атомах третьего периода. В то же время для экспериментальных значений сил осцилляторов такой последовательности не наблюдается.

Бэк и Николайдес [18], изучая силы осцилляторов переходов в атомах второго периода, делают вывод, что получаемые значения лучше согласуются с опытом при использовании формулы «скорости», так как средняя часть радиальной орбитали в вариационных расчетах определяется наиболее точно. Из результатов наших расчетов такой вывод делать затруднительно ввиду малого количества известных экспериментальных данных. Однако из семи случаев, когда результаты нашего расчета согласуются с экспериментальными значениями сил осцилляторов табл. 2, во всех случаях лучшие результаты получены по формуле «скорости».

Таблица 2

Силы осцилляторов переходов $3s^23p^N LS-3s3p^{N+1}L'S$

| LS | L'S | A | f_L | f_0 | A ⁺ | f_L | f_0 | A ⁺ | f_L | f_0 |
|----|-----|----|-------|--|-----------------|-----------------------------|------------------------------|------------------|-------|-----------------------------|
| 2P | 2S | Al | 0.12 | 0.09 | Si ⁺ | 0.12 | 0.09 (0.09) _a | P ²⁺ | 0.11 | 0.09 |
| | 2P | | 1.37 | 0.69 | | 1.29 (0.91) | 0.69 (0.76) _б | | 1.18 | 0.71 |
| | 2D | | 0.51 | 0.58 (0.01) _a | | 0.49 | 0.56 (0.01) _a | | 0.46 | 0.56 (0.64) _a |
| 1S | 1P | Si | 1.56 | 1.06 | P ⁺ | 1.46 | 1.06 | S ²⁺ | 1.34 | 1.08 |
| 3P | 3S | | 0.64 | 0.28 | | 0.60 | 0.29 | | 0.55 | 0.30 |
| | 3P | | 0.32 | 0.32 | | 0.31 (0.04) _a | 0.32 (0.02) _в | | 0.29 | 0.32 |
| 1D | 3D | P | 0.46 | 0.62 (0.07) _a | S ⁺ | 0.44 | 0.61 (0.01) _a | Cl ²⁺ | 0.41 | 0.61 (0.62) _a |
| | 1P | | 0.46 | 0.22 | | 0.43 | 0.23 | | 0.39 | 0.23 |
| | 1D | | 1.24 | 0.75 | | 1.16 | 0.75 | | 1.07 | 0.76 |
| 4S | 4P | P | 0.82 | 1.10 (1.4) _a | S ⁺ | 0.77 | 1.09 (0.03) _a | Cl ²⁺ | 0.73 | 1.11 (1.2) _a |
| 2P | 2S | | 0.24 | 0.19 | | 0.22 | 0.19 | | 0.21 | 0.19 |
| | 2P | | 0.62 | 0.36 | | 0.58 | 0.37 (0.001) _a | | 0.53 | 0.38 |
| 2D | 2D | S | 0.24 | 0.29 | Cl ⁺ | 0.23 | 0.29 | Ar ²⁺ | 0.21 | 0.29 |
| | 2P | | 0.46 | 0.22 | | 0.42 | 0.22 | | 0.39 | 0.23 |
| | 2D | | 0.50 | 0.49 | | 0.47 | 0.45 | | 0.44 | 0.46 |
| 1S | 1P | S | 0.71 | 0.54 (0.12) _a | Cl ⁺ | 0.67 | 0.55 | Ar ²⁺ | 0.61 | 0.56 |
| 3P | 3P | | 0.61 | 0.64 (3.4 · 10 ⁻⁴) _a | | 0.57 | 0.64 (0.02) _a | | 0.53 | 0.65 (0.03) _a |
| | 1D | | 1P | 0.83 | | 0.46 | 0.77 | | 0.48 | 0.71 |
| 2P | 2S | Cl | 0.33 | 0.29 | Ar ⁺ | 0.31 | 0.29 (0.01) _a | K ²⁺ | 0.29 | 0.29 (0.22) _a |

Примечание. Значения сил осцилляторов получены по формуле «длины» (f_L) и по формуле «скорости» (f_0). В скобках приведены экспериментальные значения a — из [1^а], b — из [1^б] и c — из [1^в].

Литература

- [1] W. L. Luken, O. Sinanoglu. Phys. Rev. A, 13, 1293, 1976; D. R. Beck, C. A. Nicolaides. Can. J. Phys., 54, 689, 1976; C. M. Moser, R. K. Nesbet, M. N. Gupta. Phys. Rev. A, 13, 17, 1976.
- [2] З. И. Купляускис, В. М. Лазаускас. Лит. физ. сб., 14, 67, 1975.
- [3] П. Ф. Груздев. Опт. и спектр., 20, 377, 1966; Э. К. Андерсон, Э. М. Андерсон. В сб.: Расчеты атомных и ядерных констант, 3, 40. Изд. ЛГУ им. П. Стучки, Рига, 1975; Ch. Froese-Fischer. Can. J. Phys., 53, 338, 1975.
- [4] З. И. Купляускис, А. В. Матулайтите, А. П. Юцис. Лит. физ. сб., 11, 557, 1971.
- [5] А. В. Купляускене, З. И. Купляускис, А. П. Юцис. ВИНТИ, № 7260—73 Деп., 1973.
- [6] А. В. Купляускене, З. И. Купляускис, А. П. Юцис. ВИНТИ, № 416—74 Деп., 1974.
- [7] И. И. Сوبельман. Введение в теорию атомных спектров, 402. ГИФМЛ, М., 1963.
- [8] A. W. Weiss. J. Chem. Phys., 47, 3573, 1967.
- [9] R. N. Zare. J. Chem. Phys., 47, 3561, 1967.
- [10] L. Lundin, B. Engman, J. Hilke, I. Martinson. Phys. Scripta, 8, 274, 1974.
- [11] H. G. Berry, J. Promander, R. Buchta. Phys. Scripta, 1, 181, 1970.
- [12] A. W. Weiss. Astrophys. J., 138, 1262, 1963.
- [13] W. L. Wiese, M. W. Smith, B. M. Miles. Atomic Transition Probabilities Na Through Ca, II, NSRDS-NBS 22, Washington, 1969.
- [14] A. E. Livingston, J. A. Kernahan, D. J. G. Irwin, E. H. Pennington. J. Phys. B: Atom. Molec. Phys., 9, 389, 1976.
- [15] A. E. Livingston, J. A. Kernahan, D. J. G. Irwin, E. H. Pennington. Phys. Scripta, 12, 223, 1975.
- [16] D. R. Beck, C. A. Nicolaides. JQSRT, 16, 297, 1976.

Поступило в Редакцию 25 мая 1977 г.