

ВЕРОЯТНОСТИ ПЕРЕХОДОВ
 $2p^6, 2p^5np-2p^5ms$ ($n=3, 4; m=3, 4, 5$)
И РАДИАЦИОННЫЕ ВРЕМЕНА ЖИЗНИ
УРОВНЕЙ СПЕКТРА ИОНА Al IV

А. В. Логинов и П. Ф. Груздев

В схеме промежуточной связи в одноконfigurационном приближении с включением эффективных взаимодействий выполнен расчет вероятностей переходов $2p^6, 2p^53p, 2p^54p - 2p^53s, 4s, 5s$ и времен жизни уровней $2p^5ms, np, nd$ ($n=3, 4; m=3-5$) в спектре иона Al IV.

Настоящая работа является продолжением начатого нами ранее [1, 2] теоретического определения вероятностей переходов в спектрах атома и ионов изоэлектронного ряда неона. В [1] приведены значения вероятностей переходов $2p^53p, 4p-2p^5ms$ в спектре атома неона, а в [2] — в спектре иона Mg III. Данное сообщение посвящено изучению радиационных переходов в спектре иона Al IV. В нем даны результаты расчетов вероятностей переходов $2p^6, 2p^53p, 2p^54p-2p^53s, 4s, 5s$ и времен жизни уровней $2p^5ms, np, nd$ ($n=3, 4; m=3-5$).

Метод расчета подробно изложен в [1]. Напомним, что это полуэмпирический метод, в основе которого лежит схема промежуточной связи в одноконfigurационном приближении с включением эффективных взаимодействий. В качестве полуэмпирических параметров при расчете волновых функций промежуточной связи конфигураций $2p^5nl$ взяты электростатические интегралы F_{pl}^k, G_{pl}^k и спин-орбитальные константы ξ_p, ξ_l . Кроме того, при $l \neq 0$ к ним добавляются параметры F_1, G_1 , возникающие при учете прямого и обменного эффективных взаимодействий. Коэффициенты перед параметрами F_1, G_1 для конфигурации p^5p можно найти в [1].

Соответствующие выражения для конфигурации p^5d имеют вид: $F_1/2\sqrt{5} + G_2/25$ для термов $^1P, ^3P$; $F_1/6\sqrt{5} - G_2/25$ для 1D ; $F_1/6\sqrt{5} + G_2/25$ для 3D ; $-F_1/3\sqrt{5} + G_2/25$ для $^1F, ^3F$.

Значения параметров, включенных в схему расчета, были нами найдены методом наименьших квадратов, используя экспериментальные уровни энергии из работы [3] (табл. 1). Под параметром F_0 в этой таблице имеется в виду та часть вклада всевозможных взаимодействий, которая одинакова для всех уровней данной конфигурации. В табл. 1 приведены также среднеквадратичные отклонения по энергиям ΔE . Параметры для конфигураций $2p^5ms$ ($m=3-5$) не приводятся, поскольку они совпали с полученными в [3], ΔE при этом меньше 1 см^{-1} .

Отметим, что в работе [3] проведена параметризация полученного спектра. Однако эффективное взаимодействие было представлено при этом только параметром F_1 для конфигураций $2p^5np$. Добавление параметра G_1 позволило уменьшить среднеквадратичное отклонение ΔE по энергиям по сравнению с [3] с 34 до 5 см^{-1} (для $2p^53p$) и с 13 до 3 см^{-1} (для $2p^54p$). А для конфигураций $2p^5nd$ учет эффективного взаимодействия снизил ΔE с 58 до 4 см^{-1} (для $2p^53d$) и с 19 до 3 см^{-1} (для $2p^54d$).

Таблица 1
 Параметры (см⁻¹) для конфигураций
 2p⁵np', nd (n=3, 4)

	2p ³ 3p'	2p ³ 4p'	2p ³ 3d	2p ³ 4d
F ₀	692948	828936	767460	856016
F _{pp'} ²	25454	8429	—	—
F _{pd'} ²	—	—	16099	6436
G _{pp'} ⁰	7036	2429	—	—
G _{pd'} ¹	—	—	7352	3539
G _{pp'} ²	8603	2893	—	—
G _{pd'} ³	—	—	3833	1885
ξ _p	2273	2285	2278	2290
ξ _{p'}	247	86	—	—
ξ _{d'}	—	—	-2	-3
F ₁	1823	672	-542	-196
G ₁	-1757	-827	—	—
G ₂	—	—	3412	1968
ΔE	5	3	4	3

Таблица 2
 Вероятности радиационных переходов
 2p⁵np — 2p⁵ms (u=3, 4; m=3, 4, 5)

Переход	A _{ij} , 10 ⁷ с ⁻¹					
	3p → 3s	4s → 3p	5s → 3p	4p → 3s	4p → 4s	5s → 4p
np' [1/2] ₀ — ms' [1/2] ₁	188	11.4	4.51	38.8	25.4	3.41
— ms [3/2] ₁	11.0	4.91	4.06	0.36	9.60	1.52
np [1/2] ₀ — ms' [1/2] ₁	3.24	11.5	6.75	0.29	2.50	3.71
— ms [3/2] ₁	89.7	21.9	6.69	37.4	13.9	5.16
np' [3/2] ₁ — ms' [1/2] ₀	22.8	88.8	34.9	19.9	7.11	47.9
— ms' [1/2] ₁	39.2	41.0	11.2	14.3	5.25	12.9
— ms [3/2] ₁	5.80	28.3	15.6	1.54	0.06	0.70
— ms [3/2] ₂	6.59	4.05	1.64	0.19	0.10	0.07
np [1/2] ₁ — ms' [1/2] ₀	3.04	37.2	12.8	1.50	0.22	5.87
— ms' [1/2] ₁	0.26	13.1	6.89	—	0.13	2.81
— ms [3/2] ₁	11.3	28.2	7.88	7.76	1.41	5.99
— ms [3/2] ₂	29.2	54.5	19.3	25.7	6.25	15.6
np' [1/2] ₁ — ms' [1/2] ₀	26.6	92.1	36.7	13.8	5.35	31.6
— ms' [1/2] ₁	28.7	51.0	19.7	13.5	6.40	14.7
— ms [3/2] ₁	8.33	0.10	0.28	4.60	0.13	0.03
— ms [3/2] ₂	22.1	12.1	4.99	4.62	2.57	1.59
np [3/2] ₁ — ms' [1/2] ₀	23.6	122	46.3	1.55	0.40	4.55
— ms' [1/2] ₁	0.16	6.96	5.71	6.52	0.10	0.05
— ms [3/2] ₁	42.4	57.8	19.2	22.2	10.3	23.4
— ms [3/2] ₂	6.39	5.18	2.02	5.50	2.17	2.47
np [3/2] ₂ — ms' [1/2] ₁	29.9	45.9	10.6	7.38	0.58	1.43
— ms [3/2] ₁	12.1	65.6	32.4	7.56	4.94	18.9
— ms [3/2] ₂	34.4	38.3	15.4	21.5	8.95	15.5
np' [3/2] ₂ — ms' [1/2] ₁	35.6	128	51.5	23.4	11.7	46.8
— ms [3/2] ₁	21.1	4.69	0.05	11.1	0.66	0.02
— ms [3/2] ₂	25.7	24.7	10.1	1.35	0.75	0.78
np [5/2] ₂ — ms' [1/2] ₁	0.53	9.02	8.51	3.43	0.01	0.63
— ms [3/2] ₁	43.6	114	38.3	18.0	7.08	30.1
— ms [3/2] ₂	27.6	40.8	15.7	14.5	5.28	11.5
np [5/2] ₃ — ms [3/2] ₂	73.1	161	61.5	36.7	12.6	42.3

Таблица 3

Радиационные времена жизни уровней $2p^5ms$, np , nd ($n=3, 4$; $m=3, 4, 5$)

Уровни	τ , нс	Уровни	τ , нс	Уровни	τ , нс	Уровни	τ , нс
$3s^1P_1$	0.058	$3d^3P_1$	0.37	$4p' [1/2]_0$	0.69	$4d [5/2]_2$	1.81
$3s^3P_1$	0.77	$3d^3D_1$	0.041	$4p [1/2]_0$	0.89	$4d [3/2]_2$	1.75
$3p^1S_0$	0.50	$3d^1D_2$	0.48	$4p [3/2]_1$	0.97	$4d' [3/2]_2$	1.80
$3p^3P_0$	1.08	$3d^3P_2$	0.45	$4p [1/2]_1$	1.01	$4d' [5/2]_2$	1.81
$3p^1P_1$	1.34	$3d^3D_2$	0.48	$4p' [1/2]_1$	0.94	$4d' [5/2]_3$	1.84
$3p^3S_1$	2.28	$3d^3F_2$	0.47	$4p' [3/2]_1$	0.97	$4d [5/2]_3$	1.84
$3p^3P_1$	1.17	$3d^1D_3$	0.50	$4p' [3/2]_2$	0.94	$4d [7/2]_3$	1.83
$3p^3D_1$	1.38	$3d^3D_3$	0.48	$4p [3/2]_2$	0.92	$4d [7/2]_4$	1.81
$3p^1D_2$	1.31	$3d^3F_3$	0.48	$4p [5/2]_2$	0.95	$5s' [1/2]_0$	0.45
$3p^3P_2$	1.21	$3d^3F_4$	0.47	$4p [5/2]_3$	0.94	$5s [3/2]_1$	0.28
$3p^3D_2$	1.39	$4s' [1/2]_0$	0.29	$4d [1/2]_0$	1.73	$5s' [1/2]_1$	0.30
$3p^3D_3$	1.37	$4s' [1/2]_1$	0.14	$4d' [3/2]_1$	0.021	$5s [3/2]_2$	0.45
$3d^3P_0$	0.44	$4s [3/2]_1$	0.18	$4d [1/2]_1$	0.90		
$3d^1P_1$	0.009	$4s [3/2]_2$	0.29	$4d [3/2]_1$	0.049		

Интегралы переходов рассчитаны по формуле длины диполя на радиальных функциях Хартри—Фока, полученных по программе [4]. Вероятности переходов $2p^5np-2p^5ms$ ($n=3, 4$; $m=3-5$), найденные с этими интегралами, представлены в табл. 2. Вероятности переходов с участием уровней $2p^53d$, $2p^54d$ здесь не приводятся, однако в табл. 3 даны времена жизни этих уровней. Там же приведены времена жизни уровней $2p^5np$, $2p^5ms$. Система обозначения уровней в табл. 3 та же, что и в работе [3]. Приведем также вероятность переходов $ms' [1/2]_1 \rightarrow 2p^6$ и $ms [3/2]_1 \rightarrow 2p^6$. При $m=3$ их значения равны соответственно $1.74 \cdot 10^{10}$ и $1.30 \cdot 10^9$ с $^{-1}$; при $m=4$ — $3.78 \cdot 10^9$ и $2.27 \cdot 10^9$ с $^{-1}$; при $m=5$ — $1.47 \cdot 10^9$ и $1.24 \cdot 10^9$ с $^{-1}$.

К настоящему времени пока еще отсутствуют экспериментальные данные по вероятностям переходов и временам жизни уровней в спектре иона Al IV и нет возможности сопоставить расчетные значения с экспериментом. Тем не менее хорошее согласие вычисленных энергий уровней и экспериментальных (малые величины ΔE , табл. 1), а также успешный расчет вероятностей аналогичных переходов в спектре неона [1] дают нам уверенность в том, что значения вероятностей переходов и времен жизни уровней, приведенные в табл. 2 и 3, будут соответствовать надежному эксперименту не хуже, чем в случае атома неона [1].

Литература

- [1] А. В. Логинов, П. Ф. Груздев. Опт. и спектр., 37, 817, 1974; 39, 817, 1975.
 [2] П. Ф. Груздев, А. В. Логинов. Опт. и спектр., 44, 606, 1978.
 [3] V. Kaufman, M.-C. Artru, W.-U. L. Brillet. J. Opt. Soc. Am., 64, 197, 1974; M.-C. Artru, V. Kaufman. J. Opt. Soc. Am., 65, 594, 1975.
 [4] П. О. Богданович, Р. И. Каразия. Гос. фонд алгоритмов и программ. И-000083, 1971.

Поступило в Редакцию 3 мая 1978 г.