

## РЕЛЯТИВИСТСКИЙ РАСЧЕТ ШИРИНЫ УРОВНЕЙ МНОГОЗАРЯДНЫХ ИОНОВ

А. Д. Гурчумелия и У. И. Сафронова

На основе  $S$ -матричного подхода развита теория расчета ширины уровня, установлена связь мнимой части энергии с электрическими и магнитными мультиполями и на основе этой связи получена формула для расчета радиационной ширины. Она выражена через радиальные интегралы и содержит зависимость от полного момента атома. В работе получена также формула для расчета безрадиационной ширины и проведен численный расчет для конфигурации  $2p_{1/2}3p_{3/2}$ , иллюстрирующий предложенный метод расчета.

Из имеющихся в настоящее время методов расчета сдвига уровня энергии многозарядных ионов наилучшим надо признать  $S$ -матричный подход [1-3]. В связи с этим возникает и другая задача — определение ширины уровня на основе того же метода [4, 5]. В [4] приведена формула для определения радиационной ширины в наименьшем порядке теории возмущений. Для практического использования этой формулы результаты работы [4] должны быть дополнены. В частности, необходимо, чтобы окончательные формулы содержали полный момент системы, формулы для расчета ширины должны быть выражены через радиальные интегралы, должен быть определен вклад высших порядков теории возмущений в ширину уровня.

Настоящая работа посвящена решению этих задач. В качестве примера дан численный расчет радиационной ширины линий для состояний  $2p_{1/2}3p_{3/2}$ .

### Мнимая часть диаграммы собственной энергии электрона

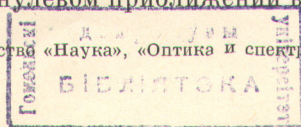
Ширина уровня связана с эффектом самодействия электрона [6]. В связи с этим при  $S$ -матричном подходе к расчету ширины прежде всего следует рассмотреть диаграмму собственной энергии электрона  $R_1$  (рис. 1). Вклад этой диаграммы в энергию электрона равен

$$\Delta E_{R_1} = \frac{\alpha}{2\pi i} \sum_n \left\langle 1n \left| \frac{1 - \alpha_1 \alpha_2}{r_{12}} J_n(r_{12}) \right| 1n \right\rangle, \quad (1)$$

где

$$J_n(r_{12}) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{i|\omega|r_{12}}}{E_n(1-i0) + \omega - E_1} d\omega, \quad (2)$$

$\alpha$  — постоянная тонкой структуры,  $\alpha_i$  — матрицы Дирака,  $E_1$  — энергия электрона в нулевом приближении в состоянии 1.





Этот вклад состоит из вещественной и мнимой частей. Вещественная часть после перенормировки становится конечной и приводит к ламбовскому сдвигу, а мнимая часть, которая нас интересует, конечна и определяет радиационную ширину. Она была вычислена в [4] и равна

$$\Gamma_{R_1} = -\frac{e^2}{4} \sum_n \left(1 - \frac{\beta_n}{|\beta_n|}\right) \left(1 + \frac{E_n}{|E_n|}\right) \left\langle 1n \left| \frac{1 - \alpha_1 \alpha_2}{r_{12}} \sin |\beta_n| r_{12} \right| 1n \right\rangle, \quad (3)$$

где  $\beta_n = E_1 - E_n$ . Для многоэлектронных атомов необходим также учет мнимой части обменной диаграммы однофотонного обмена  $D_1$  (рис. 1).

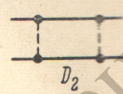
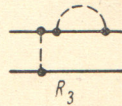
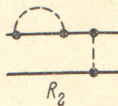
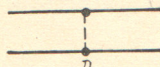
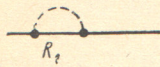


Рис. 1. Диаграмма первого порядка.

Рис. 2. Диаграмма второго порядка.

имеющей по  $\alpha$  тот же порядок, что и диаграмма  $R_1$ . Мнимая часть диаграммы  $D_1$  равна

$$\Gamma_{12, 12} = \alpha \int \psi_1^*(\mathbf{r}_1) \psi_2^*(\mathbf{r}_2) \frac{1 - \alpha_1 \alpha_2}{r_{12}} \sin(E_1 - E_2) r_{12} \psi_1(\mathbf{r}_2) \psi_2(\mathbf{r}_1) dV_1 dV_2. \quad (4)$$

В первом порядке теории возмущений ширина уровней двухэлектронных систем определяется суммой выражений (3) и (4).

Во втором порядке теории возмущений появляются диаграммы, приведенные на рис. 2. При вычислении этих диаграмм будем предполагать, что фотонной линии, отвечающей взаимодействию между электронами, сопоставляется фотонный пропагатор в кулоновой калибровке, а фотонной линии, отвечающей самодействию электрона, — фотонный пропагатор в фейнмановской калибровке.

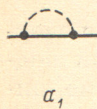


Рис. 3. Несвязанные диаграммы второго порядка.

Кроме того, расчет проведем без учета позитронных состояний и используем адиабатический формализм Гелл—Мана и Лоу [7]. Мы будем также пренебрегать зависимостью матричных элементов от энергии. При этих предположениях для матричного элемента, соответствующего диаграмме  $R_2$  (рис. 2), получим

$$M_{R_2} = \sum_m V_{1'm}^A \frac{1}{E_m + E_{2'} - E_2 - E_1 + 2i\gamma} V_{m2'}^c, \quad (5)$$

где

$$V_{1'm}^A = \frac{\alpha}{2\pi i} \sum_n \int \frac{V_{1'n, mn}^{1k}}{E_{1'} - E_n + k + i\gamma} dk, \quad (6)$$

$V_{m2'}^c$  — матричный элемент электростатического взаимодействия,  $\gamma$  — адиабатический параметр.

Выражение (5) содержит расходящуюся часть, когда  $E_m = E_2 + E_1 - E_{2'}$  и  $\gamma \rightarrow 0$ . Однако она сокращается с вкладом несвязанной диаграммы  $a_1$  (рис. 3), и окончательно для вклада диаграмм  $R_2$  и  $a_2$  в энергию находим

$$\Delta E_{R_2} = V_{1'm}^A \frac{1}{E_m + E_{2'} - E_1 - E_2} V_{m2'}^c, \quad (7)$$

где по дважды повторяющемуся индексу  $m$  подразумевается суммирование по всем состояниям, для которых  $E_m \neq E_2 + E_1 - E_{2'}$ . Полностью идентичный расчет вкладов диаграмм  $R_3$  и  $a_2$  в энергию приводит к следующему выражению:

$$\Delta E_{R_3} = V_{1'2', 2m}^c \frac{1}{E_m + E_2 - E_{1'} - E_{2'}} V_{m1}^A. \quad (8)$$



Мнимые части (7) и (8) происходят от мнимой части (6), которую обозначим через  $\Gamma(R_1)$ . Следовательно, вклад диаграммы  $R_2$  и  $R_3$  в радиационную ширину уровня равен

$$\Gamma^{(2)} = \Gamma_m(R_1) \frac{1}{E_m + E_2 - E_{1'} - E_{2'}} V_{m2', 21}^c + V_{1'2', 2m}^c \frac{1}{E_m + E_2 - E_{1'} - E_{2'}} \Gamma_m(R_1). \quad (9)$$

Формула расчета безрадиационной ширины

Для вывода формулы, определяющей безрадиационную ширину, рассмотрим диаграмму  $D_2$  (рис. 2), вклад которой в энергию равен

$$\Delta E_{D_2} = V_{1'2', mn}^c \frac{1}{E_m + E_n - E_{1'} - E_{2'} + 2i\gamma} V_{nm, 21}^c. \quad (10)$$

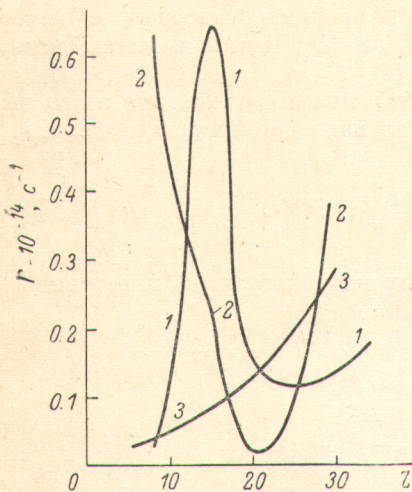


Рис. 4. Вероятность распада  $2p3p \rightarrow 1skl$ .  
1 —  $^3P_2$ , 2 —  $^1D_2$ , 3 —  $^1S_0$ .

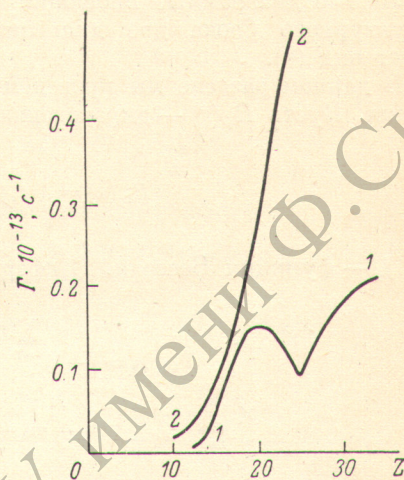


Рис. 5. Вероятность распада  $2p3p \rightarrow 1skl$ .  
1 —  $^3P_1$ , 2 —  $^3D_2$ .

где подразумевается суммирование по индексам  $m$  и  $n$ . Это суммирование состоит из трех частей: дискретно-дискретной, дискретно-непрерывной и непрерывно-непрерывной. Для расчета ширины уровня представляет интерес дискретно-непрерывная часть, которая имеет особенность, когда  $E_1 + E_2 = \varepsilon + E_{1'}$ , где  $\varepsilon$  — энергия сплошного спектра. Для выделения этой особенности воспользуемся формулой

$$\frac{1}{x + i0} = \mathcal{P} \left( \frac{1}{x} \right) - i\pi \delta(x). \quad (11)$$

Из (10) находим мнимую часть вклада диаграммы  $D_2$  в энергию атома. Эта мни-

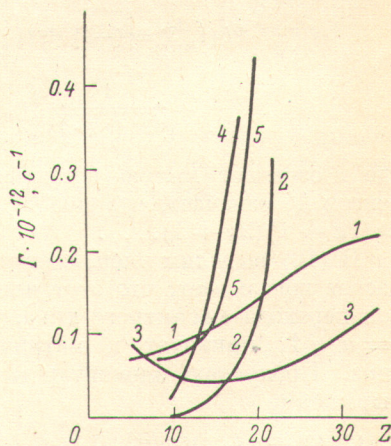


Рис. 6. Вероятность распада  $2p3p \rightarrow 1skl$ .  
1 —  $^3S_1$ , 2 —  $^1P_1$ , 3 —  $^3D_1$ , 4 —  $^3P_0$ , 5 —  $^3D_3$ .

мая часть определяет безрадиационную ширину уровня, для вычисления которой получаем следующее выражение:

$$\Gamma_{1'2', 21}^B = \frac{2\pi\varepsilon}{k_0} \sum_{\beta\beta_k} V_{1'2', \beta\beta_k}^c V_{\beta_k\beta, 21}^c. \quad (12)$$



где

$$k_0 = \frac{1}{aZ} \sqrt{1 - \epsilon^2}. \quad (13)$$

На рис. 4—6 приведены графики безрадиационных переходов  $2p3p \rightarrow 1skl$ . На рис. 4 мы приводим графики зависимости вероятности распада состояний  ${}^3P_2$ ,  ${}^1D_2$  и  ${}^1S_0$  конфигурации  $2p3p$  от  $Z$ .

На рис. 5 и 6 приведены вероятности распада состояний той же конфигурации в зависимости от  $Z$ . Приведенные на этих рисунках переходы являются менее интенсивными, чем переходы на рис. 4. Расчет всех этих безрадиационных переходов был проведен при промежуточной схеме связи.

Мультипольное разложение мнимой части энергии

Любые диаграммы, вносящие вклад в энергию, содержат в качестве структурного блока две диаграммы  $R_1$  и  $D_1$ , мнимая часть которых имеет вид (4).

В данном разделе мы проведем мультипольное разложение этого выражения. Пусть  $R_i(r)$  — дираковская радиальная функция, где  $i = n_i l_i j_i$  и

$$R_a(\omega) = \int_0^\infty j_a(\omega r) R_1(r) R_2(r) r^2 dr, \quad (14)$$

где  $j_a$  — функция Бесселя. В сферических координатах (4) имеет вид

$$\Gamma_{12, 43} = (-1)^{\sum_{i=1}^4 j_i + m_1 + m_2} [j_1, j_2, j_3, j_4]^{1/2} \times \\ \times \sum_{\mu} (-1)^\mu \binom{j_1 j_3 a}{m_1 - m_3 - \mu} \binom{j_2 j_4 a}{m_2 - m_4 - \mu} \Gamma_a(12, 43), \quad (15)$$

где

$$\Gamma_a(12, 43) = -\omega [a] Q_a(1, 3) Q_a(2, 4) + \omega \sum_l (-1)^l [a, l] H_{la}(1, 3) H_{la}(2, 4), \quad (16)$$

$$Q_a(1, 3) = \{a l_1 l_3\} \begin{pmatrix} j_1 & j_3 & a \\ 1/2 & -1/2 & 0 \end{pmatrix} [R_a(1, 3) + R_a(\bar{1}, \bar{3})], \quad (17)$$

$$H_{la}(1, 3) = R_l(1, \bar{3}) P_a^l(1, 3') - R_a(\bar{1}, 3) P_a^l(1', 3), \quad (18)$$

$$P_a^l(1, 3) = (-1)^{l_3 + j_3} \begin{pmatrix} j_3 & j_1 & a \\ -1/2 & 1/2 & 0 \end{pmatrix} \left[ (-1)^{l_3 + j_1 - 1/2 + a} \begin{pmatrix} a & 1 & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + \right. \\ \left. + \frac{1}{\sqrt{2a(a+1)}} \{ [j_3] (-1)^{j_1 + j_3 - a} + [j_1] \} \begin{pmatrix} a & 1 & l \\ -1 & 1 & 0 \end{pmatrix} \right], \quad (19)$$

где  $\bar{1}$  означает малую компоненту радиальной функции, штрих над индексом  $1'$  означает, что вместо  $l$  мы должны взять  $(2j - l)$  и  $[x, y, \dots] = (2x + 1)(2y + 1) \dots$ .

В (16) выделим член, соответствующий случаю  $l = a$ . Непосредственный расчет показывает, что этот член отвечает матричным элементам операторов перехода магнитного типа. Слагаемые в (16), соответствующие случаям  $l = a \pm 1$ , приводят к матричным элементам операторов электрического типа. Пропуская элементарные преобразования, выпишем окончательное выражение

$$\Gamma_a(12, 43) = \pi (-1)^{j_1 + j_4 + 1} [j_1, j_2, j_3, j_4]^{-1/2} \{ M_a^\omega(1, 3) M_a^{\omega*}(4, 2) + E_a^\omega(1, 3) E_a^{\omega*}(4, 2) \}, \quad (20)$$

где  $M_a^\omega(1, 2)$  и  $E_a^\omega(1, 2)$  матричные элементы операторов переходов магнитного и электрического типов. Явные выражения этих операторов для краткости мы не приводим [8].

Формула (20) связывает мнимую часть энергии с магнитными и электрическими мультиполями.



Расчет радиационной ширины линий ионов  
с двумя электронами

Волновую функцию иона с двумя электронами в состояниях  $n_{1'}^0 j_1^0$  и  $n_{2'}^0 j_2^0$  с полным моментом  $J$  и его проекцией  $M$  представим в виде

$$\Phi(JM) = \sum_{1,2} C_{12}^{JM} a_1^+ a_2^+ | \Phi_0 \rangle, \quad (21)$$

где  $a_1^+$  — оператор рождения электрона в состоянии 1,  $| \Phi_0 \rangle$  — состояние вакуума;  $C_{12}^{JM}$  — коэффициенты векторного сложения.

Для ширины уровня двухэлектронной системы мы получаем

$$\Gamma(J) = - \sum_{1,2} \sum_{1',3} C_{12}^{JM} C_{1'3}^{JM} \Gamma_{13,1'3} + \frac{1}{2} \sum_{1,2} \sum_{1',2'} C_{12}^{JM} C_{1'2'}^{JM} \Gamma_{12,2'1'}, \quad (22)$$

где в первом слагаемом  $E_1 = E_{1'}$ ,  $E_3 < E_1$ .

Выполнив суммирование в (22), находим

$$\Gamma(J) = \sum_{n_3, j_3, a} [j_3] \{ \Gamma_a(1^{\circ}3, 1^{\circ}3) + \Gamma_a(2^{\circ}3, 2^{\circ}3) \} - \sum_a [j_1^0, j_2^0] \begin{Bmatrix} j_2^0 & j_1^0 & J \\ j_3^0 & j_1^0 & a \end{Bmatrix} \Gamma_a(1^{\circ}2^{\circ}, 1^{\circ}2^{\circ}). \quad (23)$$

В качестве примера рассмотрим ширину уровней конфигурации  $2p_{1/2} 3p_{3/2}$ . Из этой конфигурации возможны следующие переходы:  $2p_{1/2} 3p_{3/2} \rightarrow 2p_{1/2} 3p_{1/2}$ ,  $2p_{1/2} 3s_{1/2}$ ,  $2p_{1/2}^2$ ,  $2p_{1/2} 2s_{1/2}$ ,  $2p_{1/2} 2p_{3/2}$ ,  $2p_{1/2} 1s_{1/2}$ ,  $1s_{1/2} 2p_{3/2}$ .

Из них наиболее вероятным является переход  $2p_{1/2} 3p_{3/2} \rightarrow 2p_{1/2} 2s_{1/2}$ , принадлежащий к типу  $E1$ .

Таблица 1

Переход	Z			
	10	20	30	40
$2p_{1/2} 3p_{3/2} 2 \rightarrow a2$	$0.3136 \cdot 10^{18}$	$0.5027 \cdot 10^{14}$	$0.2553 \cdot 10^{15}$	$0.8105 \cdot 10^{15}$
$2 \rightarrow 1$	$0.2032 \cdot 10^{13}$	$0.8059 \cdot 10^{14}$	$0.4081 \cdot 10^{15}$	$0.1291 \cdot 10^{16}$
$2 \rightarrow 0$	$0.9592 \cdot 10^{13}$	$0.6180 \cdot 10^9$	$0.7120 \cdot 10^{10}$	$0.4062 \cdot 10^{11}$
$1 \rightarrow 0$	$0.6523 \cdot 10^{13}$	$0.8378 \cdot 10^{14}$	$0.4255 \cdot 10^{15}$	$0.1351 \cdot 10^{16}$
$1 \rightarrow 1$	$0.1677 \cdot 10^{13}$	$0.2685 \cdot 10^{14}$	$0.1360 \cdot 10^{15}$	$0.4304 \cdot 10^{15}$
$1 \rightarrow 2$	$0.1265 \cdot 10^{13}$	$0.2020 \cdot 10^{14}$	$0.1019 \cdot 10^{15}$	$0.3205 \cdot 10^{15}$

Был проведен расчет всех приведенных переходов. В табл. 1 приведены суммарные вероятности переходов с уровня  $2p_{1/2} 3p_{3/2} J$  на уровень конфигурации  $a$  с фиксированным  $J'$  при разных значениях  $Z$ .

Таблица 2

Уровень	Z			
	10	20	30	40
$2p_{1/2} 3p_{3/2} 2$	} 1225	76.4	15.1	4.76
$2p_{1/2} 3p_{3/2} 1$				

Численные результаты для времен жизни уровней конфигурации  $2p_{1/2} 3p_{3/2}$  даны в табл. 2. Как и следовало ожидать, время жизни уровней не зависит от  $J$ . На самом деле зависимость вероятности от  $J$  отсутствует для всех переходов, кроме перехода  $2p_{1/2} 3p_{3/2} \rightarrow 2p_{1/2} 3p_{1/2}$  в первом порядке теории



возмущений, а вероятность перехода  $2p_{1/2}3p_{3/2} \rightarrow 2p_{1/2}3p_{1/2}$  мала и не оказывает существенного влияния на общую ширину уровня.

Заметим, что зависимость времени жизни от  $J$  появляется при учете взаимодействия электронов. Кроме того, рассматриваемые состояния  $2p_{1/2}3p_{3/2}$  являются автоионизационными и поэтому необходим также учет безрадиационного распада. Эти вопросы будут исследованы в отдельной работе.

Авторы выражают свою признательность Л. Н. Лабзовскому за многочисленные полезные дискуссии.

#### Литература

- [1] М. А. Браун, Ю. Ю. Дмитриев, Л. Н. Лабзовский. ЖЭТФ, 57, 2189, 1969.
- [2] Л. Н. Лабзовский. ЖЭТФ, 59, 168, 1970.
- [3] А. Д. Гурчумелия, У. И. Сафронова. Изв. АН СССР, сер. физ., 41, 2603, 1977.
- [4] Ю. Ю. Дмитриев, Л. Н. Лабзовский. В сб.: Теория атомов и атомных спектров, часть I, 93, Рига, 1974.
- [5] А. Д. Гурчумелия, Л. Н. Лабзовский, У. И. Сафронова. Тр. Грузинского политехнического института им. В. И. Ленина, № 5, (178), 88, 1975.
- [6] В. Гайтлер. Квантовая теория излучения. М., 1956.
- [7] В. В. Толмачев. Теория Ферми-газа. МГУ, 1973.
- [8] А. И. Ахнезер, В. В. Берестецкий. Квантовая электродинамика. М., 1969.

Поступило в Редакцию 23 ноября 1978 г.