

РАДИАЦИОННЫЕ ВРЕМЕНА ЖИЗНИ УРОВНЕЙ АТОМОВ K, Rb и Cs

П. Ф. Груздев и В. И. Денисов

В кулоновском приближении с учетом поляризации остова на вероятности переходов получены теоретические значения радиационных времен жизни для атомов K, Rb и Cs.

В работе [1] в кулоновском приближении на основе полуэмпирического метода эффективного орбитального параметра были получены теоретические значения радиационных времен жизни для большого числа уровней атома и ионов изоэлектронного ряда натрия Na I . . . Ni XVIII. Там же сделана попытка получить оценки величин τ для любых дискретных состояний переходов валентного электрона атома и ионов этого ряда.

В настоящем сообщении аналогичная задача решается для атомов K, Rb и Cs. Для уровней ns , np , nd , nf , ng , nh , ni , когда главное квантовое число меняется от наименьшего до $n=12 \div 16$, получены теоретические значения величин τ . Для уровней с $n > 13 \div 16$ указаны показатели степенных зависимостей $\tau = An^{*a}$, с помощью которых можно получить оценки теоретических значений τ для любых nl ($0 \leq l \leq 6$).

Как и ранее [1], за основу было принято кулоновское приближение, но в отличие от предыдущего [1] при вычислении вероятностей переходов учитывалось влияние поляризации остова. В работе [2] было показано, что поляризация остова может вызвать дополнительное возмущение для переходов оптического электрона. В данной работе, следуя [3, 4], значения интегралов, переходов, необходимые для определения вероятностей переходов, вычислялись по формуле

$$R_{n_2 l_2}^{n_1 l_1} = \int_0^{\infty} P_{n_1 l_1}(r) P_{n_2 l_2}(r) [1 - \alpha(r)] r dr, \quad (1)$$

где

$$\alpha(r) = ar / (r_0^2 + r^2)^2,$$

учитывает влияние поляризации остова. Значения α (статическая поляризуемость остова) и r_0 (средний радиус остова) для K I, Rb I и Cs I взяты из работы [3]. Радиальные волновые функции атомных соединений $P_{n_1 l_1}(r)$ и $P_{n_2 l_2}(r)$ определялись по методу Бейтца и Дамгард [41], поскольку соответствующие аналитические функции метода эффективного орбитального параметра [33] при численном интегрировании выражения (1) теряют свое основное преимущество. Экспериментальные значения уровней энергии были взяты из таблиц Мур [34], а для атома K принимались во внимание данные работы [35]. Для высоковозбужденных состояний величины энергии определялись по экстраполяции известных значений энергии. Для уровней nl с $l \geq 5$ считалось справедливым водородное приближение.

Радиальные интегралы переходов в спектрах атомов K, Rb и Cs вычислялись по формуле (1) с учетом влияния поляризации остова ($R_{\alpha \neq 0}$) и без учета влияния ($R_{\alpha=0}$). Сопоставление величин $R_{\alpha=0}$ и $R_{\alpha \neq 0}$ показало, что для атомов K, Rb, Cs влияние поляризации остова заметно сказывается в основном на переходах из наиболее глубоких состояний $n_1 s$ в возбужденные $n_2 p$ [$n_1=4, 5$ (K), 5, 6 (Rb), 6, 7 (Cs); $n_2 > n_1$], на переходах $n_1 p - n_2 d$ [$n_1=4, n_2=3, 4, \dots$ (K);

$n_1=5, n_2=4, 5 \dots$ (Rb); $n_1=6, n_2=5, 6 \dots$ (Cs)] и на переходах n_1d-n_2p [$n_1=3, n_2=5, 6 \dots$ (K); $n_1=4, n_2=6, 7 \dots$ (Rb), $n_1=5, n_2=7, 8 \dots$ (Cs)]. При переходах с более возбужденных n_1s, n_1p и n_1d на соответствующие высоковозбужденные состояния n_2l величины $R_{\alpha=0}$ и $R_{\alpha \neq 0}$ почти не различаются между собой. Практически учет влияния поляризации остова не сказывается на всех переходах n_1p-n_2s ($n_1 < n_2$), а также на переходах $n_1l_1-n_2l_2$, если $l_1, l_2 > 3$. В качестве примера в табл. 1 приведены значения радиальных интегралов переходов $R_{n_2l_2}^{n_1l_1}$ в спектре атома Cs, вычисленные по формуле (1) с $\alpha=0$ и $\alpha \neq 0$. Видно,

что наиболее заметные различия между $R_{\alpha \neq 0}$ и $R_{\alpha=0}$ наблюдаются для переходов $6s_{1/2}-n_2p_{1/2}$ и $5d_{3/2}-n_2p_{1/2}$. Эти различия возрастают при переходах электронов $6s_{1/2}$ и $5d_{3/2}$ к высоковозбужденным состояниям $n_2p_{1/2}$. Учет влияния поляризации не сказывается для переходов n_1p-n_2s ($n_1 < n_2$); в табл. 1 приведены переходы $6p_{1/2}-n_2s_{1/2}$, аналогичные соотношения между $R_{\alpha=0}$ и $R_{\alpha \neq 0}$ и для других переходов $n_1p_{3/2, 1/2}-n_2s_{1/2}$, $n_1 > 6, n_2 > n_1$. Табл. 1 также демонстрирует и тот факт, что различия между $R_{\alpha=0}$ и $R_{\alpha \neq 0}$ значительно уменьшаются для переходов между более возбужденными состояниями n_1l_1 и n_2l_2 .

Радиационные времена жизни уровней атомов K, Rb и Cs были вычислены как с учетом ($\alpha \neq 0$), так и без учета влияния поляризации остова ($\alpha=0$). Как и следовало ожидать (из сопоставления величин $R_{\alpha=0}$ и $R_{\alpha \neq 0}$), влияние

Таблица 1

Значения интегралов переходов $|R_{n_2l_2}^{n_1l_1}|$ в спектре атома Cs

Переход	$R_{\alpha=0}$	$R_{\alpha \neq 0}$	Переход	$R_{\alpha=0}$	$R_{\alpha \neq 0}$
$6s_{1/2}-6p_{1/2}$	5.48	5.19	$6p_{1/2}-5d_{3/2}$	6.54	6.24
$-7p_{1/2}$	0.55	0.43	$-6d_{3/2}$	3.37	3.42
$-8p_{1/2}$	0.24	0.16	$-7d_{3/2}$	1.65	1.69
$-9p_{1/2}$	0.14	0.092	$-8d_{3/2}$	1.04	1.05
$-10p_{1/2}$	0.10	0.061	$-9d_{3/2}$	0.075	0.075
$-11p_{1/2}$	0.076	0.044	$-10d_{3/2}$	0.057	0.057
$7s_{1/2}-7p_{1/2}$	12.46	12.37	$7p_{1/2}-6d_{3/2}$	15.61	15.51
$-8p_{1/2}$	1.20	1.15	$-7d_{3/2}$	5.48	5.52
$-9p_{1/2}$	0.48	0.44	$-8d_{3/2}$	2.65	2.68
$-10p_{1/2}$	0.27	0.25	$-9d_{3/2}$	1.68	1.69
$-11p_{1/2}$	0.18	0.16	$-10d_{3/2}$	1.20	1.21
$8s_{1/2}-8p_{1/2}$	21.61	21.57	$5d_{3/2}-7p_{1/2}$	1.45	1.58
$-9p_{1/2}$	2.16	2.14	$-8p_{1/2}$	0.34	0.42
$-10p_{1/2}$	0.85	0.83	$-9p_{1/2}$	0.15	0.20
$-11p_{1/2}$	0.48	0.47	$-10p_{1/2}$	0.079	0.12
$9s_{1/2}-9p_{1/2}$	33.04	33.02	$-11p_{1/2}$	0.048	0.083
$-10p_{1/2}$	3.40	3.38	$-12p_{1/2}$	0.031	0.060
$-11p_{1/2}$	1.34	1.33	$6d_{3/2}-8p_{1/2}$	4.11	4.16
$6p_{1/2}-7s_{1/2}$	4.81	4.83	$-9p_{1/2}$	1.27	1.31
$-8s_{1/2}$	1.15	1.16	$-10p_{1/2}$	0.67	0.70
$-9s_{1/2}$	0.61	0.62	$-11p_{1/2}$	0.44	0.46
$-10s_{1/2}$	0.40	0.41	$-12p_{1/2}$	0.31	0.33
$-11s_{1/2}$	0.29	0.30			
$-12s_{1/2}$	0.23	0.24			

Таблица 2

Радиационные времена жизни уровней атомов K, Rb и Cs (в нс)

Уровень	KI, n = 3		RbI, n = 4		CsI, n = 5	
	$\tau_{расч.}$	$\tau_{эксп.}$	$\tau_{расч.}$	$\tau_{эксп.}$	$\tau_{расч.}$	$\tau_{эксп.}$
$(n+2)^2 S_{1/2}$	46		51		56	
$(n+3)^2 S_{1/2}$	87	68 (9) [5]	96	95 (9) [6], 91 (11) [5]	100	101 (4) [7], 96 (14) [5]
$(n+4)^2 S_{1/2}$	160	165 (12) [8]	170	169 (10) [6], 153 (8) [9]	180	196 (13) [7], 167 (3) [10]
$(n+5)^2 S_{1/2}$	270	260 (14) [8]	290	288 (15) [6], 258 (13) [9]	300	270 (5) [10], 260 (12) [9]
$(n+6)^2 S_{1/2}$	420	441 (18) [8]	460		480	411 (8) [10], 343 (22) [9]
$(n+7)^2 S_{1/2}$	620	600 (13) [8]	680		700	571 (15) [10], 545 (30) [9]
$(n+8)^2 S_{1/2}$	870	910 (12) [8]	1000	770 (150) [11]	1000	754 (35) [10]
$(n+9)^2 S_{1/2}$	1200		1400		1450	959 (50) [10]
$(n+10)^2 S_{1/2}$	1650		1850	1260 (250) [11]	1900	
$(n+11)^2 S_{1/2}$	2200		2400		2450	
$(n+1)^2 P_{1/2}$	29	27.8 (5) [12]	30	29.4 (7) [13], 28.5 (1.1) [14]	38	34 (2) [23], 34.0 (6) [12]
$(n+2)^2 P_{1/2}$	130		120	131 (5) [14]	160	158 (3) [10], 158 (5) [15, 16]
$(n+3)^2 P_{1/2}$	320		260		390	330 (30) [17], 307 (14) [16]
$(n+4)^2 P_{1/2}$	620		480		730	575 (35) [16]
$(n+5)^2 P_{1/2}$	1050		770		1200	
$(n+6)^2 P_{1/2}$	1600		1150		1800	
$(n+7)^2 P_{1/2}$	2250		1600		2450	
$(n+8)^2 P_{1/2}$	3150		2250		3350	
$(n+9)^2 P_{1/2}$	4300		3000		4450	
$(n+10)^2 P_{1/2}$	5650		3900		5700	
$(n+1)^2 P_{3/2}$	28	27.8 (5) [12], 28 (2) [19]	29	27.0 (5) [13], 25.8 (8) [20]	34	32.7 (3) [21], 28 (2) [22]
$(n+2)^2 P_{3/2}$	130	133 (3) [24]	105	109 (7) [14], 111 (3) [20]	135	135 (1) [27], 134 (3) [10, 25]
$(n+3)^2 P_{3/2}$	315	310 (15) [24]	240	233 (10) [20], 240 (20) [26]	320	300 (15) [27], 274 (12) [16]
$(n+4)^2 P_{3/2}$	600		440		615	502 (22) [16], 390 (30) [27]
$(n+5)^2 P_{3/2}$	1000		720		1020	900 (40) [18]
$(n+6)^2 P_{3/2}$	1550		1100		1550	
$(n+7)^2 P_{3/2}$	2200		1550		2250	
$(n+8)^2 P_{3/2}$	3050		2150	1550 (200) [28]	3100	
$(n+9)^2 P_{3/2}$	4200		2900		4200	
$(n+10)^2 P_{3/2}$	5500		3750	2600 (400) [28]	5500	
$n^2 D$	39		78		1150	
$(n+1)^2 D$	280		255	242 (23) [6], 205 (40) [28]	69	57 (15) [28]
$(n+2)^2 D$	710	610 (90) [8]	300	296 (10) [6], 285 (16) [9]	100	98 (3) [7], 98 (10) [29]
$(n+3)^2 D$	1050	890 (60) [8]	400	388 (25) [9], 370 (25) [6]	160	152 (3) [10], 148 (3) [30]
$(n+4)^2 D$	1500	1210 (100) [8]	560	515 (20) [9]	250	218 (4) [10], 208 (2) [30]
$(n+5)^2 D$	1910	1590 (130) [8]	750	565 (120) [11]	350	311 (60) [10], 310 (3) [30]
$(n+6)^2 D$	2450	2040 (300) [8]	1040	720 (120) [11]	520	428 (12) [10]
$(n+7)^2 D$	3280		1400	975 (200) [11]	700	561 (18) [10]
$(n+8)^2 D$	4260		1820	1250 (300) [11]	920	741 (22) [10]

Уровень	KI, $n=3$		RbI, $n=4$		CsI, $n=5$	
	$\tau_{\text{расч.}}$	$\tau_{\text{эксп.}}$	$\tau_{\text{расч.}}$	$\tau_{\text{эксп.}}$	$\tau_{\text{расч.}}$	$\tau_{\text{эксп.}}$
$(n+9)^2 D$	5400		2300	1400 (300) [11]	1170	980 (30) [10]
$4^2 F$	58		53		49	
$5^2 F$	105		96		85	
$6^2 F$	180		160		140	
$7^2 F$	275		245		220	238 (10) [7]
$8^2 F$	400		360		320	
$9^2 F$	560		500	550 (80) [31]	450	
$10^2 F$	760		680	680 (100) [31]	610	
$11^2 F$	1000		890	900 (140) [31]	800	830 (15) [32]
$12^2 F$	1280		1140		1030	1060 (25) [32]
$5^2 G$	231		229		225	
$6^2 G$	398		392		382	
$7^2 G$	620		615		597	
$8^2 G$	920		910		880	
$9^2 G$	1300		1290		1240	
$10^2 G$	1780		1760		1680	
$11^2 G$	2350		2330		2220	
$12^2 G$	3040		3010		2850	
$6^2 H$	602		602		602	
$7^2 H$	945		945		946	
$8^2 H$	1390		1390		1400	
$9^2 H$	1960		1960		1980	
$10^2 H$	2670		2670		2690	
$11^2 H$	3540		3540		3560	
$12^2 H$	4560		4560		4590	
$7^2 I$	1350		1350		1340	
$8^2 I$	2000		2000		1990	
$9^2 I$	2830		2830		2810	
$10^2 I$	3860		3860		3830	
$11^2 I$	5100		5100		5070	
$12^2 I$	6580		6580		6550	

поляризации остова сказывается в основном только на уровнях np . Например, для уровней np атома Cs величины $\tau_{\alpha \neq 0}$ приблизительно на 10–15% превышают соответствующие значения $\tau_{\alpha=0}$. Результаты расчета ($\alpha \neq 0$) радиационных времен жизни уровней ns , np , nd , nf , ng , nh , ni атомов K, Rb и Cs приведены в табл. 2 ($\tau_{\text{расч.}}$). В этой же таблице представлены и экспериментальные данные ($\tau_{\text{эксп.}}$). К настоящему времени имеется значительное число работ, посвященных экспериментальному определению времен жизни уровней атомов K, Rb и Cs [36]. В тех случаях, когда имеется несколько экспериментальных значений чисел τ , в табл. 2 приведены только два из них, как правило, из работ последнего десятилетия. В табл. 2, чтобы не перегружать ее числовыми данными, не приведены теоретические числа τ , полученные для ряда уровней методом Бейтса и Дангард в работах [27–39]. Отметим здесь только следующее. В работе Хевенса [37] величины τ получены только для двух наиболее глубоких ns -, nd - и трех np -состояний. Для ns - и nd -состояний $\tau_{\text{расч.}}$, полученные нами, хорошо согласуются с $\tau_{\text{расч.}}$ [37], а для np превышают \sim на 10–15% $\tau_{\text{расч.}}$ [37]. В работе Линдгарда и Нельсона [38] получено большое число данных по радиационным временам жизни уровней атомов щелочных металлов. Для состояний np сравнить результаты расчетов данной работы и [38] затруднительно, поскольку в настоящем сообщении числа τ получены для уровней тонкой структуры nP_j , а в [38] даны для всего терма nP . Для состояний ns , nd , nf (кроме Cs) и ng наши $\tau_{\text{расч.}}$ в общем хорошо согласуются с $\tau_{\text{расч.}}$ [38], а для уровней nf атома Cs $\tau_{\text{расч.}}$ данной работы на $\sim 15\%$ превышают величины $\tau_{\text{расч.}}$ [38]. Имеющиеся экспериментальные значения $\tau_{\text{эксп.}}$ для уровней nf лучше согласуются с расчетом настоящей работы ($\tau_{\text{наст. раб.}}$), чем с $\tau_{\text{расч.}}$ [38]. Так, для $7f$ $\tau_{\text{эксп.}} [7] = 238 (10)$ нс, $\tau_{\text{наст. раб.}} = 220$ нс, а $\tau_{\text{расч.}} [38] = 189$ нс; для $11f$

$\tau_{\text{экс.}}^{[32]} = 830$ (15) пс, $\tau_{\text{наст. раб.}} = 800$ пс, а $\tau_{\text{расч.}}^{[38]} = 690$ пс. В работе Гау-
нанда [39] приведены $\tau_{\text{расч.}}$ для высоковозбужденных состояний nl ($n = 10 \div 28$,
 $l = s, p, d, f$), атома Rb и даны показатели степенных зависимостей изменений
чисел τ для тех же состояний атомов щелочных металлов.

Сопоставление $\tau_{\text{расч.}}$ с $\tau_{\text{экс.}}$ (табл. 2) показывает, что для наиболее глубо-
ких состояний имеет место хорошее согласование экспериментальных и теоре-
тических значений времен жизни, для высоковозбужденных состояний s, p
и d наблюдается систематическое превышение величин $\tau_{\text{расч.}}$ над числами $\tau_{\text{экс.}}$.
Одной из основных причин этого различия, как было показано в работе Гал-
лахера и Кука [40], является зависимость времени жизни высоковозбужденных
состояний от температурных условий эксперимента, обусловленная взаимо-
действием излучения черного тела с атомами.

Таблица 3

Эффективные квантовые числа n^* и показатели степенной
зависимости α_l для атомов K, Rb и Cs

K	Rb	Cs
$n_{14s}^* = 11.8180,$ $\alpha_s = 2.90$	$n_{15s}^* = 11.8665,$ $\alpha_s = 2.90$	$n_{16s}^* = 11.9437,$ $\alpha_s = 2.85$
$n_{13p_{1/2}}^* = 11.2848,$ $\alpha_p = 2.90$	$n_{14p_{1/2}}^* = 11.3421,$ $\alpha_p = 2.82$	$n_{15p_{1/2}}^* = 11.4053,$ $\alpha_p = 2.80$
$n_{13p_{3/2}}^* = 11.2877,$ $\alpha_p = 2.90$	$n_{14p_{3/2}}^* = 11.3555,$ $\alpha_p = 2.85$	$n_{15p_{3/2}}^* = 11.4053,$ $\alpha_p = 2.80$
$n_{12d}^* = 11.7314,$ $\alpha_d = 2.70$	$n_{13d}^* = 11.6580,$ $\alpha_d = 2.70$	$n_{14d}^* = 11.5303,$ $\alpha_d = 2.70$
$n_{12f}^* = 11.9895,$ $\alpha_f = 2.85$	$n_{12f}^* = 11.9825,$ $\alpha_f = 2.85$	$n_{12f}^* = 11.9685,$ $\alpha_f = 2.85$

Теоретические значения времен жизни высоковозбужденных состояний
атомов K, Gb и Cs, так же как и в случае атома и ионов ряда натрия [1], под-
чиняются степенной зависимости вида $\tau_l = A_l n^{*\alpha_l}$. В табл. 3 приведены значения
показателей степенной зависимости α_l и эффективных квантовых чисел n^* .
Данные табл. 3 позволяют получить оценки теоретических чисел τ для более
возбужденных состояний nl , чем те, что приведены в табл. 2. Для уровней nl
с $l \geq 4$ справедливы водородные значения чисел τ и показатель степенной за-
висимости для них равен трем.

Литература

- [1] П. Ф. Груздев, Н. В. Афанасьева. Опт. и спектр., 49, 625, 1980.
- [2] И. Б. Берсукер, Опт. и спектр., 3, 97, 1957.
- [3] S. Hameed, A. Herzenberg, M. G. James. J. Phys. B, 1, 822, 1968.
- [4] И. Л. Бейгман, Л. А. Вайнштейн, В. П. Шевелько. Опт. и спектр., 28, 425, 1970.
- [5] B. R. Bulos, R. Gupta, W. Harper, J. Opt. Soc. Am., 66, 426, 1976.
- [6] А. Я. Николаич, А. Л. Оперович. Вестн. ЛГУ, № 10, 44, 1976.
- [7] А. Л. Оперович, А. Я. Николаич, Я. Ф. Веролайнен. Вестн. ЛГУ, № 16, 42, 1976.
- [8] T. F. Gallagher, W. E. Cooke. Phys. Rev. A, 20, 670, 1979.
- [9] H. Lundberg, S. Svanberg. Phys. Lett., 56A, 31, 1976.
- [10] J. S. Deech, R. Luybaert, L. P. Pendrill, G. W. Series. J. Phys. B., 10, 137, 1977.
- [11] M. Hugon, P. R. Fournier. J. Phys., 41, 119, 1980.
- [12] J. K. Link. J. Opt. Soc. Am., 56, 1195, 1966.
- [13] A. Gallagher, E. L. Lewis. Phys. Rev. A, 10, 231, 1974.
- [14] Э. Л. Альтман, С. А. Казанцев. Опт. и спектр., 28, 805, 1970.
- [15] P. W. Race, J. V. Atkinson. Can. J. Phys., 53, 937, 1975.
- [16] J. Marek, K. Niemax. J. Phys. B., 9, 483, 1976.
- [17] Э. Л. Альтман. Опт. и спектр., 28, 1029, 1970.
- [18] A. Sierdran, W. Jastrzebski, J. Krasinski. Opt. Commun., 28, 73, 1979.
- [19] T. Ney. Z. Physik, 223, 126, 1969.
- [20] G. Belin, S. Svanberg. Phys. Ser., 4, 269, 1971.
- [21] R. W. Schmieder, A. Lurio, W. Harper, A. Khadjavi. Phys. Rev., A2, 1216, 1970.

- [22] Г. Маркова, Г. Хвостенко, М. Чайка. Опт. и спектр., 23, 835, 1967.
[23] A. Gallagher. Phys. Rev., 157, 68, 1967.
[24] S. Svanberg. Phys. Scr., 4, 275, 1971.
[25] R. W. Schmieder, A. Lurio. Phys. Rev. A, 2, 1189, 1970.
[26] H. Bucka, G. zu Putlitz, R. Robold. Z. Physik., 213, 101, 1968.
[27] S. Rydberg, S. Svanberg. Phys. Ser., 5, 209, 1972.
[28] C. Tai, W. Happer, R. Gupta. Phys. Rev. A, 12, 736, 1975.
[29] J. Marek. Phys. Lett. A, 60, 190, 1977.
[30] J. S. Deech, R. Luypaert, G. W. Series. J. Phys. B., 8, 1406, 1975.
[31] M. Hugon, F. Gounand, P. R. Fournier. J. Phys. B., 11, L605, 1978.
[32] H. Lundberg, S. Svanberg. Z. Phys. A, 290, 127, 1979.
[33] П. Ф. Груздев, А. И. Шерстюк. Опт. и спектр., 40, 617, 1976.
[34] C. E. Moore. Atomic Energy Levels, NBS, 1, 1949; 2, 1952; 3, 1958.
[35] P. Risberg. Arkiv Fysik, 10, 583, 1956.
[36] J. R. Fuhr, B. T. Miller, G. A. Martin. Bibliography on Atomic Transition Probabilities (1914 through October 1977), NBS, 1978.
[37] O. S. Heavens. J. Opt. Soc. Am., 51, 1058, 1961.
[38] A. Lindgard, S. E. Nielsen. Atom. Data and Nucl. Data Tables, 19, 533, 1977.
[39] F. Gounand. J. de Phys., 40, 457, 1979.
[40] T. F. Gallagher, W. E. Cooke. Phys. Rev. Lett., 42, 835, 1979.
[41] R. Bates, A. Damgaard. Phil. Trans. Soc., A242, 101, 1949.

Поступило в Редакцию 22 января 1981 г.