УДК 539.184 : 546.15

ИОД. КОНФИГУРАЦИИ $5p^4ns$, $5p^4np$ (n=6,7). ВОЛНОВЫЕ ФУНКЦИИ ПРОМЕЖУТОЧНОЙ СВЯЗИ, УРОВНИ ЭНЕРГИИ, МНОЖИТЕЛИ ЛАНДЕ

А. В. Логинов и *П. Ф. Груздев*

В одноконфигурационном приближении с включением эффективных взаимодействий при промежуточной связи выполнен полуэмпирический расчет энергетического спектра конфигураций $5p^4ns$, $5p^4np$ (n=6, 7) атома иода. Приведены результаты расчета уровней энергии, множителей Ландэ и волновых функций. Уточнена классификация уровней энергии $^3P_0\,[1]_{1/2}$, $^3P_1\,[0]_{1/2}$ конфигураций $5p^46p$, $5p^47p$ и $^3P_1\,[2]_{3/2}$, $^3P_1\,[1]_{3/2}$ конфигурации $5p^47p$.

Введение. Изучение радиационных спектроскопических характеристик (вероятностей переходов, времен жизни уровней) в спектре атома иода имеет важное прикладное значение. Этому вопросу посвящено несколько экспериментальных и теоретических исследований [1]. Настоящая работа продолжает эти исследования. В ней полуэмпирически в схеме промежуточной связи изучаются конфигурации $5p^4ns$, $5p^4np$ (n=6, 7) спектра атома иода. В первой части работы приведены результаты расчетов уровней энергии, множителей Ланде, волновых функций промежуточной связи. В последующей публикации (вторая часть) будут даны значения вероятностей переходов и времен жизни уровней.

Спектр атома иода систематически изучен и проклассифицирован Миннхагеном [2]. Для целей классификации ему оказалось достаточно учесть только электростатические обменные интегралы G^1_{5pns} при оценке энергии уровней $5p^4ns$ и интегралы прямого электростатического взаимодействия F^2_{5pnp} при оценке энергии уровней $5p^4np$. Кёллерстрём с соавторами [3] уточнили расчет Миннхагена, касающийся конфигураций $5p^46p+5p^5$, $5p^47p$, приняв во внимание опущенную Миннхагеном часть электростатического взаимодействия. При этом радиальные интегралы матрицы энергии были получены как полуэмпирически, так и в приближении Томаса-Ферми-Дирака. В работах [4, 5] эти радиальные интегралы найдены полуэмпирически по экспериментальным значениям энергии уровней. Лоуренс [4] нашел волновые функции промежуточной связи для уровней $5p^46s$, использовав данные таблиц Мур [6]. Здесь необходимо отметить, что классификация уровней, принятая в этих таблицах, была пересмотрена Миннхагеном [2]. При этом уровни, обозначенные в [6] как $5p^4(^1D_2)6s$, Миннхаген отнес к $5p^4(^3P_2)5d$. Это обстоятельство следует учитывать при сопоставлении с результатами работы [4]. Люк Кёниг с соавторами [5] по экспериментальным данным Миннхагена [2] получили волновые функции $5p^4\,(6p+7p)$ и $5s^25p^4(6s+5d+7s+6d)+5s5p^6$. Лучшее согласие с экспериментальными значениями энергии уровней достигнуто в [5]. В нашей работе для расчета волновых функций промежуточной связи применяется аналогичная процедура, но в одноконфигурационном приближении. Ниже будет проведено сопоставление точности расчета, достигнутой в [3, 4, 5] и в данной работе.

Метод расчета. Метод расчета подробно описан нами ранее [7] применительно к тем же конфигурациям p^4l. Напомним, что в его основе лежит одноконфигурационный вариант промежуточной схемы связи. Пользуясь случаем, уточним, что в формуле для матричного элемента $\langle p^4l|1/r_{ik}|p^4l\rangle$, приведенной в [7], опущено выражение, относящееся к взаимодействию электронов

Таблица 1

Значения параметров (в см$^{-1}$) и среднеквадратичных отклонений по энергии (в см$^{-1}$) для конфигураций $5p^4nl$

	$nl=6s$	$nl=7s$	$nl=6p$	$nl=7p$
F^0	80600	96492	91093	99779
F^2_{5p5p}	33209	33209	34295	33641
ξ_{5p}	4517	4607	5656	5715
F^2_{5pnl}	—	—	4408	2754
G^{l-1}_{5pnl}	—	—	606	220
G^{l+1}_{5pnl}	2074	494	844	143
ξ_{nl}	—	—	312	48
α'	—	—	−36	—
ΔE	62	82	49	104
$\Delta E'$	95	106	64	142

оболочки p^4. Экспериментальные значения энергии уровней, необходимые для выполнения метода наименьших квадратов, взяты из работы Миннхагена [2]. В качестве параметров, описывающих энергию уровней конфигурации p^4l, рассматриваем электростатические радиальные интегралы F^0_{pl}, F^2_{pl}, G^{l-1}_{pl}, G^{l+1}_{pl}, F^2_{pp}, спин-орбитальные константы ξ_p, ξ_l и параметр эффективного двухэлектронного взаимодействия α' (параметр Трис). Соответствующие выражения для угловых коэффициентов можно найти в [7].

Заметим, что для конфигураций $5p^47s$, $5p^47p$ в работе [2] приведены значения энергии только для уровней, основанных на ^3P состояниях оболочки $5p^4$. Поэтому значение параметра F^2_{5p5p} для этих конфигураций было фиксировано и приравнено значению того же параметра, полученному соответственно для $5p^46s$ и $5p^46p$.

Обсуждение результатов. В табл. 1 приведены найденные нами значения параметров и соответствующие им значения ΔE, $\Delta E'$ среднеквадратичных отклонений по энергии, рассчитанных по формулам

$$\Delta E = \sqrt{\sum_i (E^i_{\text{эксп}} - E^i_{\text{расч}})^2/n};\ \Delta E' = \sqrt{\sum_i (E^i_{\text{эксп}} - E^i_{\text{расч}})^2/(n-p)}.$$

Здесь суммирование ведется по всем n участвующим в параметризации уровням, расчетное и экспериментальное значение энергии которых равно соответственно $E^i_{\text{расч}}$ и $E^i_{\text{эксп}}$; p — число свободно варьируемых параметров. В табл. 2, 3 значения энергии уровней ($E_{\text{расч}}$), рассчитанные в настоящей работе, и значения множителей Ланде ($g_{\text{расч}}$), рассчитанные в данной работе и работе [5], сравниваются с экспериментальными данными по энергии уровней ($E_{\text{эксп}}$) из работы Миннхагена [2] и множителям Ланде ($g_{\text{эксп}}$) из работы Кисса и Корлисса [8]. Там же приведены волновые функции промежуточной связи, выраженные в состояниях JK-связи. Судя по весовым коэффициентам, следует поменять местами обозначения уровней конфигураций $5p^46p$, $5p^47p$, классифицированных в работе [2] как $^3P_0\,[1]_{1/2}$, $^3P_1[0]_{1/2}$. То же самое относится к уровням $^3P_1[2]_{3/2}$, $^3P_1[1]_{3/2}$ конфигурации $5p^47p$. Заметим, что для уровней $np^3P_0\,[1]_{1/2}$, $^3P_1[0]_{1/2}$ Миннхаген [2] оговорил неоднозначность принятой им классификации.

При использовании данных табл. 2, 3 надо иметь в виду, что уровни $5p^4(^1S)6p$, $7s$, $7p$ и $5p^4(^1D)7s$, $7p$ лежат за пределами ионизации. При реализации схемы промежуточной связи для этих уровней, вообще говоря, требуется принять во внимание наложение сплошного спектра. В нашей работе этого не сделано. Поэтому вопрос о влиянии сплошного спектра на величины, приведенные в табл. 2, 3, остается пока открытым. В работах [3, 5] для указанных уровней никаких сведений не приводится.

Точность найденных нами волновых функций уровней дискретного спектра можно сравнить с аналогичными данными работ [3, 4, 5]. Значения ΔE, найденные Кёллерстрёмом с соавторами [3] для $5p^46p$ и $5p^47p$, равны 217 см$^{-1}$ и 131 см$^{-1}$,

Таблица 2

Энергия ($см^{-1}$), множители Ланде, волновые функции промежуточной связи уровней $5p^4nl$ ($nl = 6s$, $7s$)

	Уровни по Миннхагену	$E_{эксп.}$ [2]	$E_{расч.}$, данная работа	$g_{расч.}$		$g_{эксп.}$ [8]	Функции промежуточной связи				
				данная работа	[5]		$^1S_0$ [0]	$^3P_1$ [1]	$^3P_0$ [0]	$^3B_2$ [2]	$^1D_2$ [2]
6s	$^1S_0\ [0]_{1/2}$	—	82658	1.985	—	—	0.915	0.020	0.403		
	$^3P_1\ [1]_{1/2}$	63187	63188	0.789	0.849	0.799	—0.196	0.895	0.401		
	$^3P_0\ [0]_{1/2}$	60896	60944	2.559	2.496	2.561	—0.352	—0.446	0.823		
	$^3P_2\ [2]_{3/2}$	56093	56087	1.376	1.374	1.385		—0.129		0.936	0.328
	$^3P_1\ [1]_{3/2}$	61820	61797	1.626	1.625	1.618		0.991		0.109	0.078
	$^1D_2\ [2]_{3/2}$	68550	68653	0.865	1.035	—		—0.037		—0.335	0.942
	$^3P_2\ [2]_{5/2}$	54633	54624	1.565	1.564	1.576				0.955	0.296
	$^1D_2\ [2]_{5/2}$	68588	68473	1.235	1.245	—				—0.296	0.955
7s	$^1S_0\ [0]_{1/2}$	—	99730	1.996	—		0.913	0.005	0.408		
	$^3P_1\ [1]_{1/2}$	79285	79270	1.004	1.135		—0.093	0.976	0.196		
	$^3P_0\ [0]_{1/2}$	78415	78266	2.333	2.208		—0.398	—0.217	0.892		
	$^3P_2\ [2]_{3/2}$	72294	72320	1.347	1.332			—0.026		0.948	0.318
	$^3P_1\ [1]_{3/2}$	78891	78981	1.660	1.651			0.999		0.022	0.017
	$^1D_2\ [2]_{3/2}$	—	85548	0.860	—			—0.009		—0.318	0.948
	$^3P_2\ [2]_{5/2}$	71903	71953	1.562	1.542					0.951	0.310
	$^1D_2\ [2]_{5/2}$	—	85507	1.238	—					—0.310	0.951

а Лоуренс [4] получил для $5p^46s$ значение ΔE, равное 457 $см^{-1}$. Гораздо ближе к эксперименту значения энергии уровней, вычисленные в работе [5]. В этой работе учтено наложение конфигураций $5p^4(6p+7p)$ и $5s^25p^4$ $(6s+5d+7s+$ $+6d)+5s5p^6$. Учет наложения конфигураций, вообще говоря, уточняет расчет. Однако, если рассчитать ΔE по приведенным в работе [5] данным отдельно для каждой из конфигураций $5p^46s$, $5p^47s$, $5p^46p$, $5p^47p$, то мы получим соответственно такие значения (в $см^{-1}$) — 119, 67, 68, 108. Обращаясь к табл. 1, легко видеть, что улучшение по сравнению с одноконфигурационным приближением данной работы достигнуто в [5] лишь для уровней $5p^47s$, для $5p^47p$ результаты примерно одинаковы, а для $5p^46s$, $5p^46p$ нами получено лучшее согласие по энергии. Такое, несколько парадоксальное, положение объясняется скорее всего конкретным способом учета наложения конфигураций, осуществленным в [5]. В частности, там фиксируются некоторые соотношения между параметрами, что приводит к уменьшению числа свободно варьируемых параметров, а следовательно, и к снижению точности полуэмпирической процедуры. Аналогичная картина наблюдается и для множителей Ланде (табл. 2, 3). Для уровней $5p^46s$, полученные нами $g_{расч}$ ближе к $g_{эксп}$ по сравнению с $g_{расч}$ работы [5]. Для конфигураций $5p^46p$, $5p^47p$ учет наложения конфигураций также не дает радикального улучшения. Для уровней $6p$ с $J=3/2$ (здесь J — полный момент) в работе [5] получено несколько лучшее согласие с $g_{эксп}$ сравнительно с данной работой, а для уровней $6p$, $7p$ с $J=1/2$ и $7p$ с $J=3/2$ ситуация совершенно противоположная — особенно для уровней $3P_0[1]_{1/2}$, $^3P_1[0]_{1/2}$ конфигурации $5p^46p$ и уровня $^3P_2[1]_{3/2}$ конфигурации $5p^47p$. Вообще говоря, легко видеть, что учет наложения конфигураций $5p^4$ $(6p+7p)$, реализованный в работе [5], почти не привел к перераспределению значений множителей Ланде между конфигурациями $5p^46p$ и $5p^47p$ по сравнению с нашим одноконфигурационным расчетом. Это обстоятельство является следствием слабого перемешивания конфигураций $5p^4$ $(6p+7p)$, что и отмечено в работе [5].

В целом, учитывая сопоставление с результатами работ [3-5], приходим к выводу, что найденные нами волновые функции промежуточной связи достаточно точны для того, чтобы имело смысл вычислять с ними вероятности переходов.

Таблица 3

Энергия (см$^{-1}$), множители Ланде, волновые функции промежуточной связи уровней $5p^4nl$ (nl=$6p$, $7p$)

Уровни по Миннхагену		$E_{эксп.}$ [1]	$E_{расч.}$, данная работа	$g_{расч.}$		$g_{эксп.}$ [7]	Функции промежуточной связи							
				данная работа	[4]									
$J=1/2$							$^1S_0$ [1]	$^3P_1$ [1]	$^3P_2$ [1]	$^3P_0$ [1]	$^3P_1$ [0]	$^1D_2$ [1]		
$6p$	$^1S_0$ [1]	—	93841	0.668	—	—	0.913	−0.015	0.004	0.404	−0.020	−0.046		
	$^3P_1$ [1]	73387	73403	1.167	1.147	1.137	0.112	0.864	−0.138	−0.189	0.422	0.092		
	$^3P_2$ [1]	65856	65903	1.522	1.519	1.556	0.061	0.106	0.909	−0.104	−0.065	0.379		
	$^3P_0$ [1]	71813	71764	1.307	1.500	1.377	0.173	−0.488	0.004	−0.357	0.767	0.131		
	$^3P_1$ [0]	71501	71518	1.270	1.101	1.239	−0.346	0.017	0.138	0.806	0.459	0.021		
	$^1D_2$ [1]	79701	79662	0.733	0.813	1.02	−0.008	−0.062	−0.368	0.116	−0.137	0.910		
$7p$	$^1S_0$ [1]	—	103267	0.667	—	—	0.911	−0.006	0.008	0.410	−0.008	−0.042		
	$^3P_2$ [1]	75303	75383	1.509	1.486	1.53	0.040	0.073	0.931	−0.071	−0.019	0.349		
	$^3P_1$ [1]	82615	82646	1.060	1.073	—	0.058	0.956	−0.080	−0.108	0.240	−0.003		
	$^3P_0$ [1]	81604	81809	1.886	1.473	—	0.081	−0.259	0.001	−0.160	0.947	0.062		
	$^3P_1$ [0]	81506	81438	0.780	1.126	—	−0.398	0.079	0.088	0.886	0.206	−0.014		
	$^1D_2$ [1]	—	88624	0.763	—	—	0.015	−0.006	−0.346	0.068	−0.052	0.934		
$J=3/2$							$^1S_0$ [1]	$^3P_1$ [1]	$^3P_2$ [1]	$^3P_2$ [2]	$^3P_1$ [2]	$^3P_0$ [1]	$^1D_2$ [1]	$^1D_2$ [2]
$6p$	$^1S_0$ [1]	—	94092	1.333	—	—	0.916	0.002	0.024	0.005	—	0.392	−0.072	—
	$^3P_1$ [1]	73054	73137	1.378	1.351	1.329	−0.030	0.917	−0.088	0.021	0.372	0.052	−0.093	—
	$^3P_2$ [1]	67062	67017	1.398	1.399	1.415	0.007	0.043	0.679	0.674	0.066	−0.037	0.170	0.221
	$^3P_2$ [2]	64990	64994	1.603	1.602	1.619	−0.044	−0.099	−0.652	0.671	−0.028	0.086	−0.255	0.197
	$^3P_1$ [2]	72807	72790	1.260	1.268	1.316	−0.216	−0.325	0.003	−0.038	0.743	0.528	0.116	−0.045
	$^3P_0$ [1]	71976	71967	1.316	1.335	1.317	−0.324	0.177	0.107	−0.014	−0.545	0.745	−0.018	−0.011
	$^1D_2$ [1]	78415	78550	1.397	1.392	1.390	0.075	0.099	−0.307	0.057	−0.085	0.015	0.937	0.051
	$^1D_2$ [2]	80039	80030	0.848	0.851	—	−0.010	−0.008	−0.004	−0.300	0.024	0.023	−0.031	0.953

Таблица 3 (*продолжение*)

	Уровни по Миннхагену	$E_{\text{эксп.}}$ [1]	$E_{\text{расч.}}$, данная работа	$g_{\text{расч.}}$		$g_{\text{эксп.}}$ [7]	Функции промежуточной связи							
				данная работа	[4]									
7p	$^1S_0$ [1]	—	103238	1.333	—	—	0.912	0.001	0.017	0.003	—0.001	0.405	—0.053	—0.001
	$^3P_1$ [2]	82431	82540	1.576	1.559	—	0.027	0.993	—0.059	0.012	—0.016	—0.068	—0.073	0.007
	$^3P_2$ [1]	75621	75684	1.499	1.547	1.483	0.018	0.054	0.777	0.545	0.014	—0.043	0.251	0.175
	$^3P_2$ [2]	75049	75023	1.513	1.476	1.506	—0.027	—0.053	—0.531	0.783	—0.019	0.052	—0.201	0.241
	$^3P_1$ [1]	82424	82277	1.046	1.050	1.27	—0.064	0.029	—0.021	0.005	0.986	0.151	0.021	—
	$^3P_0$ [1]	81722	81553	1.328	1.340	1.39	—0.399	0.075	0.072	—0.019	—0.164	0.896	0.004	—0.013
	$^1D_2$ [1]	—	88295	1.391	—	—	0.045	0.050	—0.323	0.006	—0.030	0.033	0.941	0.058
	$^1D_2$ [2]	—	89423	0.847	—	—	—0.004	—0.006	0.013	—0.299	0.002	0.006	—0.052	0.953
$J=5/2$							$^3P_2$ [2]	$^3P_2$ [3]	$^3P_1$ [2]	$^1D_2$ [2]	$^1D_2$ [3]			
6p	$^3P_2$ [2]	64906	64862	1.508	1.508	1.524	0.916	—0.284	—0.052	0.261	—0.096			
	$^3P_2$ [3]	65644	65685	1.214	1.213	1.217	0.284	0.902	—0.042	0.091	0.311			
	$^3P_1$ [2]	72529	72498	1.385	1.385	1.370	0.053	0.020	0.997	0.043	0.015			
	$^1D_2$ [2]	80125	80134	1.215	1.216	1.050	—0.275	—0.061	—0.027	0.948	0.146			
	$^1D_2$ [3]	78592	78565	0.906	0.907	1.00	0.042	—0.320	—0.004	—0.153	0.934			
7p	$^3P_2$ [2]	74965	74843	1.516	1.513	1.472	0.952	—0.090	—0.037	0.289	—0.030			
	$^3P_2$ [3]	75191	75235	1.197	1.202	1.24	0.091	0.943	—0.008	0.029	0.319			
	$^3P_1$ [2]	82213	82166	1.392	1.392	—	0.033	0.003	0.999	0.024	0.003			
	$^1D_2$ [2]	—	89412	1.226	—	—	—0.291	—0.016	—0.013	0.956	0.041			
	$^1D_2$ [3]	—	88539	0.897	—	—	0.013	—0.320	—0.001	—0.042	0.946			
$J=7/2$							$^3P_2$ [3]	$^1D_2$ [3]						
6p	$^3P_2$ [3]	65670	65663	1.400	1.399	1.420	0.948	0.318						
	$^1D_2$ [3]	79003	78931	1.172	1.172	—	—0.318	0.948						
7p	$^3P_2$ [3]	75194	75233	1.399	1.401	1.42	0.948	0.319						
	$^1D_2$ [3]	—	88591	1.172	—	—	—0.319	0.948						

Литература

[1] J. R. Fuhr, B. J. Miller, G. A. Martin. Bibl. At. Trans. Prob., NBS Spec. Publ., 505, 1978.
[2] L. Minnhagen. Ark. Fys., *21*, 415, 1962.
[3] B. Kjöllerström, N. H. Möller, H. Svensson. Ark. Fys., *29*, 275, 1965.
[4] G. M. Lawrence. Astrophys. J., *148*, 261, 1967.
[5] E. Luc-Koenig, C. Morillon, J. Vergés. Phys. Scr., *12*, 199, 1975.
[6] C. E. Moore. At. En. Levels, III, NBS Spec. Publ., 467, 1958.
[7] А. В. Логинов, П. Ф. Груздев. Опт. и спектр., *43*, 1029, 1977.
[8] C. C. Kiess, C. H. Corliss. J. Res. NBS, *63A*, 1, 1959.

Поступило в Редакцию 16 марта 1981 г.