

О НАЛОЖЕНИИ КОНФИГУРАЦИЙ В ТЕОРИИ ЭКРАНИРОВАНИЯ

А. В. Виноградов и У. И. Сафронова

В работе [1] исследовался простой, универсальный и в то же время достаточно точный метод определения энергий уровней многозарядных ионов, основанный на описании электронов атомных оболочек с помощью констант кулоновского экранирования. Было показано, что этот метод позволяет легко определять поправки второго порядка теории возмущений к энергии невырожденных атомных уровней с точностью $\sim 1-10\%$, однако не было уделено должного внимания учету взаимодействия конфигураций. Имея в виду распространить указанный метод на случай вырожденных состояний, будем, как и в [1], предполагать известной энергию первого порядка теории возмущений.

$$E = Z^2 E_0 + Z E_1,$$

где E_0 и E_1 — соответствующие поправки нулевого и первого порядков, причем последняя получается путем диагонализации секулярного уравнения [2].

Численные значения E_2 , λ_2

$$E(1s^{n_1} 2s^{n_2} 2p^{n_3} LS) = -\frac{n_1}{2} (Z - 0.3125\sigma_{n_1,2})^2 - \frac{n_2 + n_3}{8} (Z - \lambda'_2)^2,$$

$$E(1s^{n_1} 2s^{n_2} 2p^{n_3} LS) = -\frac{n_1}{2} (Z - 0.3125\sigma_{n_1,2})^2 - \frac{n_2 + n_3}{8} (Z - \lambda''_2)^2$$

Конфигурация	Терм	E_2	E'_2	λ'_2	E''_2	λ''_2
$1s^2 2s^2$	$1S$	-0.8775	-0.9705	1.86855	-0.9926	1.8920
$1s^2 2p^2$	$1S$	-1.3850	-1.4562	2.3312	-1.4290	2.3077
$1s^2 2s^2 2p$	$2P$	-1.8349	-2.0301	2.2700	-2.0458	2.2793
$1s^2 2p^3$	$2P$	-2.5084	-2.6525	2.6099	-2.6340	2.6007
$1s^2 2s^2 2p^2$	$3P$	-3.2490	-3.5713	2.6339	-3.5744	2.6370
	$1D$	-3.3185	-3.6221	2.6550	-3.6303	2.6581
	$1S$	-3.3844	-3.6827	2.6777	-3.7149	2.6897
$1s^2 2p^4$	$3P$	-4.1245	-4.3443	2.9143	-4.3353	2.9112
	$1D$	-4.2330	-4.4060	2.9354	-4.3969	2.9323
	$1S$	-4.3300	-4.5258	2.9759	-4.4902	2.6939
$1s^2 2s^2 2p^3$	$2P$	-5.3683	-5.8002	3.0206	-5.8168	3.0250
$1s^2 2p^5$	$2P$	-6.5604	-6.8027	3.2754	-6.7847	3.2710
$1s^2 2s^2 2p^4$	$1S$	-8.1616	-8.7074	3.3882	-8.7325	3.3931
$1s^2 2p^6$	$1S$	-9.7033	-9.9538	3.6551	-9.8294	3.6202
$1s 2s^2$	$2S$	-0.2440	-0.2824	1.0629	-0.3005	1.0964
$1s 2p^2$	$2S$	-0.4903	-0.4929	1.4041	-0.4697	1.3706
$1s 2s^2 2p$	$3P$	-0.6897	-0.7481	1.4124	-0.7616	1.4251
	$1P$	-0.7970	-0.7971	1.4579	-0.8111	1.4706
$1s 2p^3$	$3P$	-1.0269	-1.0395	1.6650	-1.0237	1.6522
	$1P$	-1.1586	-1.0972	1.7105	-1.0809	1.6978
$1s 2s^2 2p^2$	$2P$	-1.6267	-1.6211	1.8006	-1.6286	1.8048
	$4P$	-1.4301	-1.302	1.7494	-1.5375	1.7536
	$2D$	-1.5513	-1.5977	1.7876	-1.6051	1.7917
	$2S$	-1.5892	-1.6338	1.8077	-1.6623	1.8234
$1s 2p^4$	$2P$	-2.1393	-2.0249	2.0124	-2.0166	2.0083
	$4P$	-1.9036	-1.9232	1.9612	-1.9151	1.9571
	$2D$	-2.0615	-1.9988	1.9994	-1.9905	1.9953
	$2S$	-2.1418	-2.0860	2.0425	-2.0542	2.0269
$1s 2s^2 2p^3$	$3P$	-2.7652	-2.8411	2.1321	-2.8561	2.1377
	$1P$	-2.9210	-2.9144	2.1594	-2.9296	2.1650
$1s 2p^5$	$3P$	-3.4945	-3.4010	2.3327	-3.3846	2.3271
	$1P$	-3.6759	-3.4811	2.3600	-3.4645	2.3544
$1s 2s^2 2p^4$	$2S$	-4.6431	-4.6764	2.4970	-4.6995	2.5032
$1s 2p^6$	$2S$	-5.6662	-5.4242	2.6893	-5.3995	2.6831

Подобно [1], приближенную формулу для поправки второго порядка теории возмущений естественно записать в виде

$$E_2' = - \sum_n \frac{q_n (\lambda_n')^2}{2n^2}, \quad (2)$$

где n — главное квантовое число, q_n — число электронов в n -оболочке, λ_n' — константа оболочечного экранирования, которая может быть выражена через поправку первого порядка E_1 [1]. В таблице приведены приближенные (формула (2)) и точные значения поправки второго порядка теории возмущений для состояний типа $1s^2 2s^2 2p^n$, $1s^2 2p^{n+2}$, $1s 2s^2 2p^n$, $1s 2p^{n+2}$. Как видно, приближенные и точные E_2 [2] согласуются в пределах 10%.

Если по каким-либо причинам решение секулярного уравнения затруднено, и, следовательно, точное значение E_1 неизвестно, то вместо (1) имеем в первом порядке без учета наложения конфигураций

$$E = Z^2 E_0 + Z V_{11}, \quad (3)$$

где V_{11} — диагональный матричный элемент электростатического взаимодействия электронов. Можно попытаться улучшить точность формулы (3) за счет использования теории экранирования, добавляя

$$E_2'' = - \sum_n \frac{q_n (\lambda_n'')^2}{2n^2}. \quad (4)$$

Значения констант λ_n'' и поправки второго порядка E_2'' будут отличаться от приведенных ранее. Как видно из таблицы, величины E_2' и E_2'' значительно меньше отличаются друг от друга, чем от точного значения E_2 , и, следовательно, неучет наложения конфигураций не очень сильно сказывается на эмпирических значениях E_2' .

Таким образом, метод экранирования, развитый в [1], дает возможность получать удовлетворительные значения энергий, не обращаясь к трудоемким расчетам поправок второго порядка теории возмущений как для невырожденных, так и для квазивырожденных состояний атомных систем.

Литература

- [1] Л. А. Вайнштейн, А. В. Виноградов, И. С. Рублев, У. И. Сафронова. Опт. и спектр., 28, 424, 1980.
 [2] У. И. Сафронова, А. Н. Иванова, В. В. Толмачев. Лит. физ. сб., 7, 303, 1967.

Поступило в Редакцию 16 декабря 1981 г.

УДК 535.36

РАССЕЯНИЕ И ОСЛАБЛЕНИЕ ИЗЛУЧЕНИЯ «МЯГКИМИ» ЦИЛИНДРАМИ КОНЕЧНОЙ ДЛИНЫ

А. Г. Петрушин

Ослабление и рассеяние излучения «мягкими» несферическими частицами изучалось в работах [1-5]. Однако только в одной из них получены выражения для факторов эффективности ослабления, рассеяния и поглощения поглощающей несферической частицей конечного объема (эллипсоида вращения) с произвольной ориентацией относительно направления распространения падающего излучения [5], этого недостаточно для выявления влияния формы «мягких» частиц на ослабление и рассеяние излучения.

В настоящей работе рассмотрено ослабление и рассеяние излучения поглощающим «мягким» круговым цилиндром конечной длины с произвольным отно-