

РАСЧЕТ САТЕЛЛИТНОЙ СТРУКТУРЫ ЛИНИЙ В СПЕКТРАХ He- И Ne-ПОДОБНЫХ ИОНОВ НА ОСНОВЕ РЕЛЯТИВИСТСКОЙ ТЕОРИИ ВОЗМУЩЕНИЙ

Ю.Г.Чернякова

Одесский национальный университет им.И.И.Мечникова,
а/с 116, Одесса-9, 65009

Работа посвящена теоретическому изучению спутниковой структуры He-подобных и Ne-подобных линий. На основе нового метода релятивистской теории возмущений с модельным нулевым приближением для трехквартичных систем [8–10] выполнен теоретический расчет спектроскопических характеристик Li-подобных спутниковых линий в спектрах He-подобных ионов и Na-подобных спутниковых линий в спектрах Ne-подобных ионов.

Необходимость создания новых приборов квантовой электроники, поиска новых активных сред для лазеров коротковолнового диапазона, усовершенствования существующих и развития новых оптимальных методик спектроскопической диагностики плазмы многозарядных ионов как примесей в термоядерных реакторах и т.д. по-прежнему стимулируют значительный интерес к экспериментальному и теоретическому изучению характеристик плазмы многозарядных ионов в малоиндуктивной вакуумной искре (см. напр., [1–11]). Проблема адекватного анализа экспериментальных данных и теоретической интерпретации особенностей излучения плазмы в малоиндуктивной вакуумной остаётся по-прежнему ещё далекой от своего полного разрешения. Данная работа посвящена теоретическому изучению спутниковой структуры линий He-подобных и Ne-подобных ионов. На основе нового метода релятивистской теории возмущений с модельным нулевым приближением для трехквартичных систем [9–11] выполнен теоретический расчет спектроскопических характеристик Li-подобных спутниковых линий в спектрах He-подобных ионов и Na-подобных

спутниковых линий в спектрах Ne-подобных ионов. Остановимся на некоторых деталях метода расчета [9–11].

Полный гамильтониан уравнения Дирака для N -электронной системы имеет вид:

$$H = \sum_i^N h(r_i) + \sum_{i>j}^N V(r_i, r_j)$$

где $h(r)$ – одноэлектронный гамильтониан Дирака для электрона, движущегося в кулоновом поле ядра $-z/r$, $V(r_i, r_j)$ – оператор, описывающий межэлектронное взаимодействие. В качестве гамильтониана нулевого приближения берётся:

$$H_0 = \sum_i^N h(r_i) + \sum_i^N V_c(r_i | b(z))$$

где $V_c(r_i | b(z))$ – центральный потенциал, имитирующий эффективный потенциал остальных электронов. Для его построения используется развитая в [5, 6] неэмпирическая квантово-электродинамическая процедура, исходящая из критерия минимизации калибровочно неинвариантного вклада в радиационную ширину энергетического уровня атома. Это один из ключевых моментов, отличающих нашу версию релятивистской теории возмущений от методов типа [1–3, 7, 8]. Рассмотрим уровни

конфигурации $1s^2 2s^2 2p^5 3l_1 3l_2$ (Наподобный ион). Указанную конфигурацию в нулевом и первом порядке теории возмущений можно считать трехквaziчастичной.

Энергия состояния представима в виде ряда теории возмущений (см.[3, 7, 8, 11]):

$$E(n_1 l_1 j_1 n_2 l_2 j_2 n_3^{-1} l_3^{-1} j_3^{-1}) = E^0 + \Delta E_1 + \Delta E_2 + \dots,$$

где E^0 определяется в нулевом приближении теории возмущений (численное решение уравнения Дирака для внешнего электрона над остовом заполненных электронных оболочек в случае Na, Ne-подобных ионов). При расчете матрицы энергии наиболее трудоемкой задачей является вычисление угловых частей матричных элементов, которые возникают при интегрировании по угловым и суммировании по спиновым переменным. Матричные элементы оператора возмущения строятся на волновых функциях

трехчастичных состояний и выражаются через матричные элементы, рассчитанные между двухчастичными состояниями, причем эти выражения различны в зависимости от того, отличаются или нет квантовые числа в каждой из обкладок (см.[2, 3]). Рассматриваются три возможных типа трехчастичных обкладок: однородно-однородная, однородно-неоднородная и неоднородно-неоднородная электронные конфигурации. В каждом случае выражение для матричного элемента разбивается на два слагаемых: первое слагаемое содержит взаимодействие электрон-электрон, второе- электрон-вакансия (см.[2]). В приведенных ниже формулах γ означает тройку квантовых чисел $h l j$, степень (-1) относится к вакансии, черта над буквой обозначает квантовые числа конечного состояния. Для матричного элемента однородно-однородной конфигурации $\langle \gamma_1^2(J_{12}) \gamma_3^{-1} J | M | \bar{\gamma}_1^2(\bar{J}_{12}) \bar{\gamma}_3^{-1} J \rangle$ имеем

а) электрон-электронная часть: $\langle \gamma_1^2(J_{12}) M | \bar{\gamma}_1^2(J_{12}) \rangle \delta(\gamma_3, \bar{\gamma}_3) \delta(J_{12}, \bar{J}_{12})$

б) электрон-вакансионная часть

$$2 \sum_{J_{12}} \langle \gamma_1 \gamma_3^{-1}(J_{12}) M | \gamma_1 \bar{\gamma}_3^{-1}(J_{12}) \rangle \delta(\gamma_1 \bar{\gamma}_1) (-1)^{j_{12} + j_3 + \bar{j}_3 + j_1 + \bar{j}_1} \cdot \begin{Bmatrix} J_{12} & j_3 & J \\ J_{13} & j_1 & j_1 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} \bar{J}_{12} & \bar{j}_3 & J \\ J_{13} & \bar{j}_1 & \bar{j}_1 \end{Bmatrix}$$

Матричный элемент типа $\langle \gamma_1^2(J_{12}) \gamma_3^{-1} J | M | \bar{\gamma}_1 \bar{\gamma}_2(\bar{J}_{12}) \bar{\gamma}_3^{-1} J \rangle$ однородно-неоднородной электронной конфигурации содержит два слагаемых:

а) электрон электронная часть: $\langle \gamma_1^2(J_{12}) M | \bar{\gamma}_1 \bar{\gamma}_2(\bar{J}_{12}) \rangle \delta(\gamma_3, \bar{\gamma}_3) \delta(J_{12}, \bar{J}_{12}) \delta(\pi_1 \pi_2)$,

где $\pi_1 = (-1)^{j_2}$

б) электрон-вакансионная часть

$$\delta(\pi_{13}, \pi_{13}) \sum_{J_{13}} \gamma_1 \gamma_3^{-1}(J_{13}) M | \gamma_1 \bar{\gamma}_3^{-1}(J_{13}) \rangle \delta(\gamma_1 \bar{\gamma}_2) (-1)^{j_{12} + j_3 + \bar{j}_3 + j_1 + j_2} \cdot \begin{Bmatrix} J_{12} & j_3 & J \\ J_{13} & j_1 & j_1 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} J_{12} & j_3 & J \\ J_{13} & j_1 & j_2 \end{Bmatrix} +$$

$$\delta(\pi_{13}, \bar{\pi}_{23}) \sum_{J_{13}} \langle \gamma_1 \gamma_3^{-1}(J_{13}) M | \bar{\gamma}_1 \bar{\gamma}_3^{-1}(J_{13}) \rangle \delta(\gamma_1 \bar{\gamma}_1) (-1)^{j_{12} + j_3 + \bar{j}_3 + j_1 + j_2} \cdot \begin{Bmatrix} J_{12} & j_3 & J \\ J_{13} & j_1 & j_1 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} \bar{J}_{12} & \bar{j}_3 & J \\ J_{13} & \bar{j}_2 & \bar{j}_1 \end{Bmatrix} \cdot (J_{13}) \sqrt{2(J_{12})(\bar{J}_{12})}$$

где $\pi_y = (-1)^{l_y + l}$. Для неоднородно-неоднородной электронной конфигурации $\langle \gamma_1 \gamma_2 (J_{12}) \gamma_3^{-1} \parallel M \parallel \bar{\gamma}_1 \bar{\gamma}_2 (\bar{J}_{12}) \bar{\gamma}_3^{-1} J \rangle$ можно записать:

а) электрон-электронная часть: $\langle \gamma_1 \gamma_2 (J_{12}) \parallel M \parallel \bar{\gamma}_1 \bar{\gamma}_2 (J_{12}) \rangle \delta(\gamma_3, \bar{\gamma}_3) \delta(J_{12}, \bar{J}_{12})$

б) электрон-вакансионная часть

$$\sum_{J_{13}} \langle \gamma_1 \gamma_3^{-1} (J_{13}) \parallel M \parallel \bar{\gamma}_1 \bar{\gamma}_3^{-1} (J_{13}) \rangle \delta(\gamma_2 \bar{\gamma}_2) (-1)^{J_{12} + \bar{J}_{12} + j_3 + \bar{j}_3 + 1} \cdot \begin{Bmatrix} J_{12} & j_3 & J \\ J_{13} & j_2 & j_1 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} \bar{J}_{12} & \bar{j}_3 & J \\ J_{13} & \bar{j}_2 & \bar{j}_1 \end{Bmatrix} \cdot (J_{13}) \sqrt{(J_{12})(\bar{J}_{12})} +$$

$$\sum_{J_{13}} \langle \gamma_2 \gamma_3^{-1} (J_{13}) \parallel M \parallel \bar{\gamma}_2 \bar{\gamma}_3^{-1} (J_{13}) \rangle \delta(\gamma_1 \bar{\gamma}_1) (-1)^{J_{12} + j_3 + \bar{j}_2 + \bar{j}_3} \cdot \begin{Bmatrix} J_{12} & j_3 & J \\ J_{13} & j_1 & j_2 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} \bar{J}_{12} & \bar{j}_3 & J \\ J_{13} & \bar{j}_1 & \bar{j}_2 \end{Bmatrix} \cdot (J_{13}) \sqrt{(J_{12})(\bar{J}_{12})} +$$

$$\sum_{J_{13}} \langle \gamma_1 \gamma_3^{-1} (J_{13}) \parallel M \parallel \bar{\gamma}_2 \bar{\gamma}_3^{-1} (J_{13}) \rangle \delta(\gamma_2 \bar{\gamma}_1) (-1)^{J_{12} + \bar{J}_{12} + \bar{j}_3 + \bar{j}_2 + j_2} \cdot \begin{Bmatrix} J_{12} & j_3 & J \\ J_{13} & j_2 & j_1 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} \bar{J}_{12} & \bar{j}_3 & J \\ J_{13} & \bar{j}_1 & \bar{j}_2 \end{Bmatrix} \cdot (J_{13}) \sqrt{(J_{12})(\bar{J}_{12})} +$$

$$\sum_{J_{13}} \langle \gamma_1 \gamma_3^{-1} (J_{13}) \parallel M \parallel \bar{\gamma}_1 \bar{\gamma}_3^{-1} (J_{13}) \rangle \delta(\gamma_1 \bar{\gamma}_2) (-1)^{\bar{J}_{12} + j_3 + \bar{j}_3 + j_2 + \bar{j}_2} \cdot \begin{Bmatrix} J_{12} & j_3 & J \\ J_{13} & j_1 & j_2 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} \bar{J}_{12} & \bar{j}_3 & J \\ J_{13} & \bar{j}_2 & \bar{j}_1 \end{Bmatrix} \cdot (J_{13}) \sqrt{(J_{12})(\bar{J}_{12})}.$$

Процедура эффективного учета поправок второго и высших порядков теории возмущений (взаимодействие частиц через поляризуемый остов и взаимная экранировка квазичастиц) описаны в [7–11]. Отметим лишь, что учет поляризации остова приводит к поправке в радиальных интегралах, а учет взаимной экранировки частиц достигается введением в неэмпирический нулевой гамильтониан дополнительного одночастичного потенциала. Разработанный нами неэмпирический метод релятивистской теории возмущений был применен в расчетах спектроскопических характеристик Li-подобных сателлитных линий в спектрах Ne-подобных ионов и Na-подобных сател-

литных линий в спектрах Ne-подобных ионов. В таблице 1 представлены результаты расчета диэлектронных сателлитов для Li-подобных ионов (длин волн, в Å; вероятностей переходов, в 10^{13} c^{-1}) к линии излучения $1s^2 1S_0 - 1s3p^1 P_1$ в плазме Си в низкоиндуктивной вакуумной искре:

В таблице 2 приведены значения энергий уровней конфигурации $2p^5 3s3p$, $2p^5 3p^2$ в Na-подобном ионе CIVII (в ед. 1000 см^{-1} ; полный угловой момент: $J=3/2$). Вследствие сильного перемешивания состояний в промежуточной схеме связи определенные конфигурации мы не указываем, а пишем лишь конфигурации, дающие наибольший вклад. Наши теоре-

тические данные (колонка с в таблице 2) сравниваются с данными, полученными на основе расчета в рамках релятивистской теории возмущений с эмпирическим модельным нулевым приближением Ива-

новой-Гогавы (см. [3]; колонка б) и экспериментальными данными (колонка d). Отметим хорошее согласие наших данных с экспериментальными данными.

Таблица 1. Результаты расчета диэлектронных сателлитов для Li-подобных ионов (длины волн, в Å; вероятностей переходов, в $10^{13} c^{-1}$) к линии излучения $1s^2 1S_0 - 1s3p^1 P_1$ в плазме Си в низкоиндуктивной вакуумной искре: А- эксперимент (см.[2]), В- расчет на основе теории возмущений по $1/Z$; С- расчет методом AUTOJOLS [2]; D- настоящая работа.

Переход	Вероятность перехода			Длина волны			Длина волны А
	В	С	Д	В	С	Д	
$1s^2 2p^2 P_{1/2} - 1s2p3p^2 D_{3/2}$	58,8+1	55,7+1	56,5+1	1,2702	1,2700	1,2701	1,2700± 0,0010
$1s^2 2p^2 P_{3/2} - 1s2p3p^4 D_{5/2}$	86,4+1	88,6+1	88,0+1	1,2702	1,2703	1,2702	
$1s^2 2p^2 P_{3/2} - 1s2p3p^4 S_{3/2}$	24,00	1,80	5,80	1,2713	1,2750	1,2731	
$1s^2 2p^2 P_{3/2} - 1s2p3p^4 P_{3/2}$	14,10	12,0	13,1	1,2718	1,2719	1,2717	

Таблица 2. Энергии уровней конфигурации $2p^5 3s3p$, $2p^5 3p^2$ в ионе CIVII

Конфигурация уровня	b	c	d
$a1(p'sp'2)a2(p'sp1)a3(p'sp0)$	1727	1710	1710
$a1(p'sp0)a2(p'sp1)$	1743	1727	1728
$a1(p'sp'2)a2(p'sp1)a3(p'sp'1)$	1753	1739	1738
$a1(p'sp'1)a2(p'sp1)a3(p'sp0)$	1759	1746	1744
$a1(p'sp'2)a2(p'sp1)a3(p'sp'2)$	1765	1749	1750
$a1(p'sp'1)a2(p'sp1)$	1812	1802	1805
$a1(p'sp'1)a2(p'sp1)a3(p'sp'1)$	1822	1813	1814
$a1(p'ss0)$	1643	1640	1641
$a1(p'pp0)a2(p'pp'1)a3(p'p'p'0)$	1877	1874	
$a1(p'pp'1)a2(p'pp0)a3(p'p'p'2)$	1888	1885	
$a1(p'pp'2)a2(p'p'p'0)$	1889	1886	
$a1(p'pp'1)a2(p'pp'2)a3(p'pp'1)$	1898	1895	
$a1(p'p'p'2)a2(p'p'p'2)a3(p'p'p'2)$	1904	1901	
$a1(p'p'p'2)a2(p'pp'2)a3(p'p'p'2)$	1920	1916	
$a1(p'p'p'0)a2(p'pp0)a3(p'pp'2)$	1944	1939	
$a1(p'p'p'2)a2(p'pp'2)a3(p'pp'1)$	1975	1978	

Литература

1. У.И.Сафронова, Е.В.Аглицкий. *Спектроскопия автоионизационных состояний* (Атомиздат, Москва. 1992.)
2. Е.Р.Ivanova, А.V.Gulov, *At. Data Nucl. Data Tables.* **45**, 3 (1991).

3. Е.П.Иванова, А.Л.Гогава, в кн: *Спектроскопия автоионизационных состояний атомов и ионов*. Под ред. У.И.Сафроновой (Наука, Москва, 1988), с.71–88.
4. E.V.Aglitskii, A.S.Panin, U.I.Safronova et al, *Journ.de Phys.* **49**, 267 (1988).
5. A.V.Glushkov, L.N.Ivanov, *Phys.Lett.A* **170**, 33 (1992).
6. S.V.Malinovskaya, *Наук. вісник Ужг. унів. Сер. Фіз.* **8**, 387 (2000).
7. L.N.Ivanov, E.P.Ivanova, E.V.Aglitsky, *Phys.Rep.* **164**, 317 (1988).
8. E.P.Ivanova, L.N.Ivanov, A.V.Glushkov, A.E.Kramida, *Phys.Scr.* **32**, 512 (1985).
9. S.V.Malinovskaya, Yu.G.Chernyakova, in *Proc. VII Intern. Conf. on Atomic Physics* (EPS, Firenze, 2000), p.357.
10. S.V.Malinovskaya, Yu.G.Chernyakova, in *Proc. 5th Int. Workshop "Quantum Systems in Chemistry and Physics"* (Univ.Uppsala,Uppsala, 2000), p.125.
11. Yu.G.Chernyakova, I.I.Shumlyansky, *Наук. вісник Ужг. унів. Сер. Фіз.* **8**, 251 (2000).

RELATIVISTIC PERTURBATION THEORY CALCULATION OF THE SATELLITE LINES STRUCTURE IN SPECTRA OF He- AND Ne-LIKE IONS

Yu.G.Chernyakova

Odesa National University, P.O.Box 116, Odesa-9, 65009
e-mail: glushkov@paco.net

The paper is devoted to theoretical studies of the satellite structure of He- and Ne-like lines. On the basis of a new method – relativistic perturbation theory with *ab initio* model zeroth approximation for three-quasiparticle systems the calculation of spectroscopic characteristics for Li-like satellite lines in spectra of He-like ions and Na-like satellite lines in spectra of Ne-like ions is carried out.