

Т.А. Флорко, к.ф.-м.н., Л.В. Никола, С.С. Середенко, А.А. Поставая, студ.
Одесский государственный экологический университет

РЕЛЯТИВИСТСКИЙ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ ПОДХОД К ВЫЧИСЛЕНИЮ ВЕРОЯТНОСТЕЙ ЗАПРЕЩЕННЫХ ПЕРЕХОДОВ В АТОМНЫХ СПЕКТРАХ

Изложены основы нового подхода к вычислению вероятностей запрещенных радиационных атомных переходов в сложных системах, базирующемся на энергетическом подходе и КЭД теории возмущений. В качестве иллюстрации возможностей формализма приведены результаты вычисления вероятностей радиационных переходов в ионе ртути.

Ключевые слова: релятивистский энергетический подход, радиационные атомные переходы

Введение. Изучение спектров и спектроскопических характеристик тяжелых атомов и многозарядных ионов традиционно относится к очень актуальному и важному классу задач современной спектроскопии, что стимулируется потребностями широкого круга приложений, в том числе, исследованиями по управляемому термоядерному синтезу и разработке новых схем лазеров в ВУФ и рентгеновских областях спектра и т.д. [1-11]. В последние годы в связи с беспрецедентным прогрессом в развитии экспериментальных методик возникла острая необходимость решения искомых задач на принципиально новом уровне теоретической последовательности и точности. В первую очередь это относится к определению таких важнейших атомных спектроскопических характеристик, как сечения различных элементарных процессов, вероятности радиационных переходов и силы осцилляторов, причем, если в изучении наиболее интенсивных разрешенных (электрических дипольных) радиационных переходов достигнут важный прогресс, то в случае запрещенных атомных переходов (ЗАП), как правило, на несколько порядков менее интенсивных по сравнению с разрешенными, имеет место достаточно критическая ситуация. Очевидно, что без наличия надежной информации о характеристиках ЗАП оказывается в принципе невозможным адекватное решение многих актуальных задач в астрофизике, включая процессы излучения в туманностях и осколках Сверхновой, физике Солнца и полярных сияний, а также относительно новых задач, связанных с выяснением роли слабых взаимодействий в атомной спектроскопии, изучением фонтанов холодных атомов, атомных часов и т.д. Хотя в современной атомной физике имеется широкий круг методов расчета свойств атомов (методы модельного потенциала, функционала плотности, различные варианты теории возмущений (ТВ), наконец, методы ССП Хартри-Фока (ХФ), Дирака-Фока (ДФ) и даже мега-ДФ, реализованные в таких суперсовременных комплексах как “Grasp”, “Dirac”, “Bertha”, “Superstructure”, “Superatom”), тем не менее, большинство из них имеют целый ряд принципиальных недостатков (невыполнение принципа калибровочной инвариантности, использование неоптимизированных базисов, недостаточно полный учет обменно-корреляционных поправок и др.) [1-7]. Особенно остро эти проблемы стоят в теории ЗАП. Результаты расчета вероятностей ЗАП часто отличаются в несколько раз. Итак, в настоящее время можно констатировать острую необходимость развития новой, калибровочно-инвариантной, релятивистской теории ЗАП в спектрах таких существенно релятивистских систем как тяжелые атомы и многозарядные ионы. В данной статье развитый в серии работ [8-11] новый метод определения вероятностей ЗАП в спектрах сложных атомов, базирующийся на энергетическом подходе и КЭД многочастичной ТВ [12-18], применен к изучению радиационных характеристик атома Hg.

Метод. В энергетическом подходе в релятивистской теории распадающихся атомных состояний известна методика [12,15], связанная с диагонализацией собственной матрицы M , для расчета сдвигов энергии ΔE состояний. В релятивистской теории искомый сдвиг полной энергии произвольного состояния представляется в виде

$$\begin{aligned} \Delta E &= \text{Re}\Delta E + i \text{Im}\Delta E, \\ \text{Im} \Delta E &= -P/2, \end{aligned} \quad (1)$$

где P - вероятность распада атомного состояния. Для вырожденных или почти вырожденных состояний секулярная матрица M записывается в виде ряда ТВ [14]

$$M = M^{(0)} + M^{(1)} + M^{(2)} + M^{(3)} + \dots + M^{(k)}. \quad (2)$$

Здесь k — число квазичастиц (QR: электронов или вакансий с так называемыми корреляционными «шубами»), $M^{(0)}$ — вклад вакуумных диаграмм, $M^{(1)}$ — вклад одно-QR диаграмм, $M^{(2)}$ — вклад двух-QR диаграмм и т.д. Оператор релятивистского межэлектронного взаимодействия записывается в виде [14]

$$\frac{e^2}{4\pi r_{12}} \exp(i|\omega|r_{12}) (1 - \alpha_1 \alpha_2). \quad (3)$$

Второй член в (3) описывает магнитное (брейтовское) взаимодействие, а экспонента учитывает запаздывание взаимодействия. Вклад в мнимую часть (1) может быть вычислен во втором (четвертом) порядке атомной (КЭД) ТВ (в атомных единицах) [12,15,16]

$$\text{Im} \Delta E = -\frac{1}{4\pi} \cdot \sum_{\substack{a \rightarrow n \\ n \rightarrow 1}} V_{anan}^{|\omega_{an}|}, \quad (4)$$

где матричный V элемент (мнимая часть) имеет вид

$$V_{ijkl} = \iint d^3r_1 d^3r_2 \varphi_i^*(r_1) \varphi_j^*(r_2) \frac{\sin|\omega|r_{12}}{r_{12}} \cdot (1 - \alpha_1 \alpha_2) \varphi_k(r_2) \varphi_l(r_1). \quad (5)$$

Здесь функции φ_i — релятивистские биспиноры электронов в соответствующих состояниях, определяемые решением уравнения Дирака. Отдельные члены суммы в (5) представляют собой парциальные вклады различных каналов, соответственно вероятность радиационного перехода α -n определяется матричным элементом $V_{anan}^{|\omega_{an}|}$

$$\Gamma_{\alpha_n} = \frac{1}{4\pi} \cdot V_{\alpha_n \alpha_n}^{|\omega_{\alpha_n}|}. \quad (6)$$

В общем виде матричный элемент релятивистского оператора межэлектронного взаимодействия вид

$$V_{ijkl} = \iint d^3r_1 d^3r_2 \varphi_i^*(r_1) \varphi_j^*(r_2) \frac{\exp(i|\omega|r_{12})}{r_{12}} \cdot (1 - \alpha_1 \alpha_2) \varphi_k(r_2) \varphi_l(r_1). \quad (7)$$

Мнимая часть «потенциала» в (7) $\sim \sin|\omega|r_{12}/r_{12}$ раскладывается в ряд

$$\frac{\sin|\omega|r_{12}}{r_{12}} = \frac{\pi}{2\sqrt{r_1 r_2}} \sum_{\lambda=0}^{\infty} (\lambda) J_{\lambda+1/2}(|\omega|r_1) J_{\lambda+1/2}(|\omega|r_2) P_{\lambda}(\cos r_1 r_2), \quad (8)$$

где J -функция Бесселя первого рода, $(\lambda) = 2\lambda + 1$. Подстановка (8) в матричный элемент межэлектронного взаимодействия (мнимую часть) приводит к выражению [15]

$$V_{1234}^{\omega} = [(j_1)(j_2)(j_3)(j_4)]^{1/2} \sum_{\lambda\mu} (-1)^{\mu} \begin{pmatrix} j_1 j_3 & \lambda \\ m_1 - m_3 & \mu \end{pmatrix} \times \mathbf{Im} Q_{\lambda}(1234), \quad (9)$$

$$Q_{\lambda} = Q_{\lambda}^{\text{Cul}} + Q_{\lambda}^{\text{Br}},$$

где величины Q_{λ}^{Cul} и Q_{λ}^{Br} соответствуют разбиению «потенциала» на кулоновскую, $\frac{\sin|\omega|r_{12}}{r_{12}}$ и брейтовскую – $\frac{\sin|\omega|r_{12}\alpha_1\alpha_2}{r_{12}}$ части. Кулоновская часть Q_{λ}^{Cul} в (9) выражается через радиальные интегралы R_{λ} и угловые коэффициенты S_{λ} [3]

$$\mathbf{Im} Q_{\lambda}^{\text{Cul}} = \frac{1}{Z} \mathbf{Im} \{ R_i(1243) S_{\lambda}(1243) + R_i(\tilde{1}2\tilde{4}\tilde{3}) S_{\lambda}(\tilde{1}2\tilde{4}\tilde{3}) + R_i(1\tilde{2}\tilde{4}\tilde{3}) S_{\lambda}(1\tilde{2}\tilde{4}\tilde{3}) + R_i(\tilde{1}\tilde{2}\tilde{4}\tilde{3}) S_{\lambda}(\tilde{1}\tilde{2}\tilde{4}\tilde{3}) \}, \quad (10)$$

где обозначение 1 (2,3,4) соответствует большой компоненте f дираковской функции электрона, а $\tilde{1}(\tilde{2},\tilde{3},\tilde{4})$ - малой компоненте g дираковской функции. Для примера приведем определение одного из радиальных интегралов в (10)

$$R_{\lambda}(1243) = \iint dr_1 r_1^2 r_2^2 f_1(r_1) f_3(r_1) f_2(r_2) f_4(r_2) Z_{\lambda}^{(1)}(r_{<}) Z_{\lambda}^{(1)}(r_{>}), \quad (11)$$

где f -большая компонента радиальной части дираковской функции одноэлектронного состояния, а функция Z выражается через бесселевские функции

$$Z_{\lambda}^{(1)} = \left[\frac{2}{|\omega_{13}| \alpha Z} \right]^{\lambda+1/2} \frac{J_{\lambda+1/2}(\alpha|\omega_{13}|r)}{r^{\lambda} \Gamma(\lambda + 3/2)}. \quad (12)$$

Остальные слагаемые в (10) включают малые компоненты функций Дирака, причем знак «~» обозначает, что в (11) большую радиальную компоненту f_i следует заменить на малую g_i , а в угловых множителях l_i следует заменить на $\tilde{l}_i = l_i - 1$ для $\alpha_i > 0$ и $l_i + 1$ для $\alpha_i < 0$. Согласно [14], брейтовская часть величины Q определяется как

$$Q_{\lambda}^{\text{Br}} = Q_{\lambda,\lambda-1}^{\text{Br}} + Q_{\lambda,\lambda}^{\text{Br}} + Q_{\lambda,\lambda+1}^{\text{Br}}, \quad (13)$$

где соответствующие вклады определяются выражением, аналогичным (10).

Полная вероятность λ -польного перехода обычно представляется как сумма электрической (электрическое мультипольное разложение) P_{λ}^E и магнитной (магнитное мультипольное разложение) P_{λ}^M частей. Можно показать, что в случае распада одно-QP состояния соответствующие выражения для вероятностей электрического и магнитного λ -польного перехода $\gamma \rightarrow \delta$ равны

$$P_{\lambda}^E(\gamma \rightarrow \delta) = 2(2j+1) Q_{\lambda}^E(\gamma\delta; \gamma\delta) \quad Q_{\lambda}^E = Q_{\lambda}^{\text{Cul}} + Q_{\lambda,\lambda-1}^{\text{Br}} + Q_{\lambda,\lambda+1}^{\text{Br}}$$

$$P_{\lambda}^M(\gamma \rightarrow \delta) = 2(2j+1) Q_{\lambda}^M(\gamma\delta; \gamma\delta) \quad Q_{\lambda}^M = Q_{\lambda,\lambda}^{\text{Br}}. \quad (14)$$

В случае более сложного двух-QP состояния для вероятности λ -польного одно-QP перехода, скажем, $j_1 j_2 [J] \rightarrow \bar{j}_1 \bar{j}_2 [\bar{J}]$ имеем

$$P(\lambda | j_1 j_2 [J], \bar{j}_1 \bar{j}_2 [\bar{J}]) = (\bar{J}) \left\{ \begin{matrix} \lambda \dots J \dots \bar{J} \\ j_2 \dots \bar{j}_1 \dots j_1 \end{matrix} \right\} P(\lambda | 1\bar{1})(\bar{j}_1), \quad (15)$$

где электрическая и магнитная части $P(\lambda | 1\bar{1})$ определены выше. Следует, однако, заметить, что обычно состояния двух-QP систем, отличающиеся только значениям $j_1 j_2$, являются почти вырожденными. Более того, для интересных в теоретическом отношении и крайне важных с практической точки зрения многозарядных ионов спектры содержат, как правило, конгломераты линий, соответствующих почти вырожденным атомным состояниям [3,12]. Естественно, это приводит к плохой сходимости ряда ТВ. Для получения комплексных энергий в рамках ТВ для почти вырожденных состояний требуется диагонализация комплексной секулярной матрицы (2). В низшем, скажем, втором порядке ТВ, секулярная матрица совпадает с обычной энергетической матрицей. Полная реализация процедуры диагонализации комплексной матрицы M связана с известными вычислительными трудностями, однако, как известно, практически без потери точности вычисления искомая процедура может быть существенно упрощена (см., напр., [14]). В теории спектров многоэлектронных атомов хорошо известна процедура перехода от представления чистой j - j схемы связи моментов к представлению промежуточной схемы связи, позволяющая преодолеть указанную проблему. Этот подход реализуется диагонализацией комплексной секулярной матрицы $M = ReM + iImM$, вычисленной между группой почти вырожденных состояний с одинаковым набором квантовых чисел $n_1 l_1 j_1, n_2 l_2 j_2, J$. Тогда

$$Im M_J(mm') = \sum_{j_1, j_2, \bar{j}_1, \bar{j}_2} C_J^*(j_1 j_2 m) Im M_J(j_1 j_2 j_1' j_2') C_J(j_1' j_2' m'), \quad (16)$$

где $M_J(j_1 j_2 j_1' j_2'), M_J(mm')$ - соответственно секулярные матрицы в старом представлении с jj схемой связывания одноэлектронных моментов и в новом представлении с промежуточной схемой связи. Коэффициенты C_J в низшем порядке ТВ определяются диагонализацией энергетической матрицы второго порядка. Матрица M_J рассчитывается по тем же диаграммам, что и ΔE . Полная ширина уровня mJ тогда равна $Im M_J(mm')$. Матрицы $M_J(j_1 j_2 j_1' j_2')$ и $M_J(mm')$ представляются в виде суммы по квантовым числам виртуальных одно-QP состояний, выделяя в которой члены с определенной электронной конфигурацией $j_1 j_2$ можно получить суммарную вероятность перехода состояния mJ в состояние с этой электронной конфигурацией.

Результаты и выводы. В качестве иллюстрации возможностей изложенного аппарата выполнены вычисления вероятностей ряда дипольных и ЗАП в тяжелом ионе Hg^+ (на основе известного РС комплекса “Superatom” [12-16]). Возбужденные состояния иона Hg^+ в рамках КЭД ТВ [13] интерпретируются как одно- и трех-QP состояния электронов ($6s$) (вакансии $5d^{-1}$) над остовом заполненных электронных оболочек $5d^{10}6s^2$. Взаимодействие QP-остов описывается ДФ потенциалом самосогласованного поля, уточненным в рамках КЭД ТВ [16]. Эффекты поляризационного взаимодействия QP через поляризуемый остов и экранировочного (антиэкранировочного в случае пары электрон-вакансия) взаимодействия учтены в рамках методики [14]. В табл. 1 представлены результаты теоретического вычисления энергий и вероятностей дипольных E1 (для теста) переходов $5d^{10}7p(P_{1/2}, P_{3/2})-5d^{10}6s(S_{1/2})$, $5d^{10}7p(P_{1/2}, P_{3/2})-5d^{10}7s(S_{1/2})$ и электрического E2 квадрупольного перехода $5d^9 6s^2(D_{5/2}, D_{3/2})-5d^{10}6s(S_{1/2})$ в Hg^+ (ХФ- хартри-фоковские данные, ДФ – дирак-фоковские данные, ДФ (эксп.) – ДФ

данные с использованием экспериментальной энергии перехода, ЭП– наш расчет) и достаточно надежные экспериментальные данные Moore (NBS, Washington) [11,19-22].

Таблица 1 - Вероятности E1 и E2 $5d^9 6s^2(D_{5/2}, D_{3/2})- 5d^{10} 6s(S_{1/2})$ переходов в Hg^+ (в c^{-1}): ХФ- хартри-фоковские данные, ДФ – дирак-фоковские данные , ДФ (эксп.) – ДФ данные с использованием эксп. энергии перехода, ЭП – наши данные); эксперимент - Moore (NBS)

| Метод | $7P_{3/2}-6S_{1/2}$ | $7P_{1/2}- 6S_{1/2}$ | $7P_{3/2}- 7S_{1/2}$ | $7P_{1/2}- 7S_{1/2}$ | $D_{3/2}- S_{1/2}$ | $D_{5/2}- S_{1/2}$ |
|-----------------------|---------------------|----------------------|----------------------|----------------------|--------------------|--------------------|
| ХФ | $4.75 \cdot 10^6$ | $4.75 \cdot 10^6$ | $3.65 \cdot 10^7$ | $3.65 \cdot 10^7$ | 1360 | 1360 |
| ДФ | $8.45 \cdot 10^7$ | $1.67 \cdot 10^7$ | $6.89 \cdot 10^7$ | $4.71 \cdot 10^7$ | 257.0 | 77.4 |
| ДФ- $E_{\text{эксп}}$ | $1.17 \cdot 10^8$ | $2.04 \cdot 10^7$ | $1.10 \cdot 10^8$ | $5.52 \cdot 10^7$ | 63.9 | 13.3 |
| ЭП | $1.49 \cdot 10^8$ | $2.31 \cdot 10^7$ | $1.41 \cdot 10^8$ | $6.33 \cdot 10^7$ | 54.53(0,2%) | 11.84 (0,2%) |
| Эксп. | $1.53 \cdot 10^8$ | $2.35 \cdot 10^7$ | $1.44 \cdot 10^8$ | $6.37 \cdot 10^7$ | 53.5 ± 2.0 | 11.6 ± 0.4 |

Как видно из сравнения приведенных в таблицах данных, стандартные методы ХФ и ДФ в одноконфигурационном приближении дают крайне неточные данные по вероятностям переходов. Уточнение ДФ результата получается при использовании экспериментального значения энергии, что фактически означает эмпирический учет крайне важных с количественной точки зрения эффектов межэлектронных корреляций. В рамках изложенной теории искомые эффекты поляризационного взаимодействия QR через поляризуемый остов (в многоконфигурационном приближении это эффект отвечает учету виртуальных возбуждений остова; квазичастицы “заморожены”) и эффекты взаимного экранирования QR (остов “заморожен”, квазичастицы виртуально возбуждаются) учтены достаточно полно, что приводит к приемлемой точности расчета. Поправка на учет поляризации остова внешними квазичастицами оказывается существенной, изменяющей значения вероятностей дипольных переходов на 15-30%. Также следует обратить внимание на практически нулевое значение калибровочно-неинвариантного вклада [16] в вероятность перехода ($\sim 0,2\%$; в табл. 1 в скобках в строке ЭП), что на традиционном языке означает эквивалентность результатов расчётов вероятностей в схемах с оператором в форме длины и скорости (разные калибровки фотонного пропагатора) и является свидетельством оптимального выбора нулевого приближения ТВ и достаточно полного эффективного учета многочастичных корреляционных эффектов.

В заключение автор выражает глубокую благодарность проф. Глушкову А.В. за постановку задачи, полезные обсуждения, советы, а также критические замечания.

Список литературы

1. *Собельман И.И.* Введение в теорию атомных спектров. -М.: Наука, 1977.-370с.
2. *Grant I.P.* Relativistic Quantum Theory of Atoms and Molecules/ Grant I.P.-Oxford, 2008.-650p.
3. *Глушков А.В.* Релятивистская квантовая теория. Квантовая механика атомных систем.- Одесса: Астропринт, 2008.- 900с.
4. *Froese Fischer C., Tachiev G.* Breit–Pauli energy levels, lifetimes, and transition probabilities for the beryllium-like to neon-like sequences// Atomic Data and Nuclear Data Tables.-2004.-Vol.87.- P.1–184.
5. *Кос К.* Multi-reference relativistic configuration interaction calculations for $2s^2 2p^2 P_{3/2}-^2P_{1/2}$ M1 and E2 transitions in boron isoelectronic sequence// J.Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.-2003.-Vol.36.- P.93-98.
6. *Trabert E., Saathoff G., Wolf A.* M1/E2 decay rates in CoXI, NiXII, CuXIII measured at heavy-ion storage ring/ //J.Phys.B.:At.Mol.Opt.Phys.-2004.-Vol.37.-P.945-952.

7. *Bieron J., Froese-Fischer C., Fritzsche S., Pachucki K.* Lifetime and hyperfine structure of the 3D_2 state of radium // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*-2004.-Vol.37.-P.305-311.
8. *Florko T.A., Loboda A.V., Svinarenko A.A.* Sensing forbidden transitions in spectra of some heavy atoms and multicharged ions: new theoretical scheme // *Sensor Electronics and Microsyst. Techn.*-2009.-N3.-P.21-26.
9. *Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Loboda A.V., Florko T.A., Sukharev D.E., Gurnitskaya E.P., Lovett L.* Gauge-invariant QED perturbation theory approach to calculating nuclear electric quadrupole moments, hyperfine structure constants for heavy atoms and ions // *Frontiers in Quantum Systems in Chemistry and Physics (Berlin, Springer)*.-2008.-Vol.18.- P.507-522.
10. *Glushkov A.V., Florko T.A., Khetselius O.Yu., Malinovskaya S.V., Mischenko E.V., Svinarenko A.A.* Optimized perturbation theory scheme for calculating the interatomic potentials and hyperfine lines shift for heavy atoms in the buffer inert gas // *Internat. Journal of Quantum Chemistry*.-2009.-Vol.109.-P.3325-3329.
11. *Florko T.A.* Theoretical determination of oscillator strengths of some transitions in rare-earth atom of Eu // *Photoelectronics*.-2007.-N16.-P.98-101.
12. *Ivanova E.P.* Modern Trends in Spectroscopy of multi-charged Ions/ *Ivanova E.P., Ivanov L.N., Aglitsky E.V.* // *Physics Rep.*-1988.-Vol.166,N6.-P.315-390.
13. *Ivanova E.P.* Oscillator strength anomalies in Ne isoelectronic sequence with applications to X-ray laser modeling/ *Ivanova E.P., Grant I.P.* // *J. Phys. B.*-1998.-Vol.31.-P.2871-2883.
14. *Ivanova E.P., Ivanov L.N., Glushkov A.V., Kramida A.E.* High order corrections in the Relativistic Perturbation Theory with the model Zeroth Approximation, Mg-like and Ne-like ions // *Phys. Scripta* -1985.-Vol.32,N4.-P.512-524.
15. *Глушков А.В., Иванов Л.Н., Иванова Е.П.* Радиационный распад атомных состояний. Обобщенный энергетический подход // В кн.: Автоионизационные явления в атомах.- М.: Изд-во МГУ, 1986.-С.58-160.
16. *Glushkov A.V., Ivanov L.N.* Radiation Decay of Atomic States: atomic residue and gauge non-invariant contributions // *Phys. Lett. A.*-1992.-Vol.170,N1.-P.33-37.
17. *Glushkov A.V.* Relativistic calculation and extrapolation of oscillator strengths in Fr-like ions by model potential method // *Opt. Spectr.*-1991.-Vol.70.-P.952-955.
18. *Glushkov A.V.* New method of accounting for polarization effects in determination of probabilities of the atomic transitions // *Opt. Spectr.*-1991.-Vol.71.-P.395-397.
19. *Ostrovsky V.N., Sheynerman S.A.* Radiation transitions in the external shells of ion Hg^+ // *Opt. Spectr.*-1989.-Vol.67.-P.16-22.
20. *Kotochigova S.A.* Identification of VUV absorption spectrum of EuI 1. Calculation of $4f^7 5d^1 (^9D)np$ - states // *Opt. Spectr.*-1983.-Vol.55.-P.422-428.
21. *Kunisz M.D.* Coulomb approximation oscillator strengths for some transitions in rare earths // *Acta Phys. Polon.*-1982.-Vol. a62.-P.285-296.
22. *Moore C.* NBS Spectra Database.-Washington: NBS, 1987.-P.302-307.

Релятивістський енергетичний підхід до розрахунку ймовірностей заборонених переходів у атомних спектрах. Флорко Т.О., Нікола Л.В., Середенко С.С., Постава Г. О.

Викладені основи нового підходу до розрахунку ймовірностей заборонених радіаційних атомних переходів у складних системах, який базується на енергетичному підході та КЕД теорії збурень. В якості ілюстрації можливостей апарату наведені результати розрахунку ймовірностей радіаційних переходів в іону Hg.

Ключові слова: релятивістський енергетичний підхід, радіаційні атомні переходи

Relativistic energy approach to calculating the forbidden transition probabilities in atomic spectra.

Florko T.O., Nikola L.V., Seredenko S.S., Postava A. A.

The bases of a new approach to calculating forbidden radiative atomic transition probabilities for complex systems are presented. The method is based on the energy approach and QED perturbation theory. In order to show the possibilities of the formalism there are presented the calculation data on the radiative transition probabilities in the ion of Hg.

Keywords: relativistic energy approach, radiative atomic transitions