

Т.А. Флорко, к.ф.-м.н. доц., Ю.Г. Чернякова, к.ф.-м.н., доц., Л.В. Никола, ст. преп.
Одесский государственный экологический университет

РЕЛЯТИВИСТСКИЙ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ ПОДХОД К ВЫЧИСЛЕНИЮ СИЛ ОСЦИЛЛЯТОРОВ РАДИАЦИОННЫХ ПЕРЕХОДОВ В СПЕКТРАХ Z_n - ПОДОБНЫХ ИОНОВ

На основе нового подхода к вычислению параметров радиационных атомных переходов в сложных системах, базирующегося на энергетическом подходе и КЭД теории возмущений, выполнен расчет сил осцилляторов для переходов в спектрах различных Z_n -подобных ионов.

Ключевые слова: релятивистский энергетический подход, радиационные переходы, Z_n -подобные ионы

Введение. Исследование спектральных характеристик многозарядных ионов в настоящее время представляет собой крайне важную как с теоретической, так и практической точек зрения задачу современной теоретической атомной физики, вычислительной математики и прикладной спектроскопии и стимулируется потребностями различных приложений. На протяжении всей истории атомной спектроскопии класс задач, связанных с изучением (поглощением) фотонов вследствие радиационных переходов в спектрах атомов, традиционно занимает одно из доминирующих мест [1-11]. Особенный интерес представляет теоретическое определение характеристик так называемых запрещенных атомных переходов (ЗАП). Известно, что вероятности ЗАП оказываются, как правило, на несколько порядков менее интенсивными по сравнению с традиционными разрешенными переходами. 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]. В данной статье развитый ранее [8-11] эффективный метод определения сил осцилляторов ЗАП в спектрах сложных атомов, базирующийся на энергетическом подходе и калибровочно-инвариантной КЭД ТВ [12-18], применен к изучению сил осцилляторов переходов в спектрах различных Z_n -подобных ионов.

Метод. Остановимся кратко на ключевых идеях метода. В релятивистском энергетическом подходе вероятность распада атомных состояний связана с мнимой частью сдвига энергии системы [13-15], причем искомым энергетическим сдвигом полной энергии произвольного состояния представляется в виде

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

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]

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

где матричный V элемент (мнимая часть) имеет вид

$$V_{ijkl} = \iint d^3r_1 d^3r_2 \phi_l^*(r_1) \phi_j^*(r_2) \frac{\sin|\omega|r_{12}}{r_{12}} \cdot (1 - \alpha_1 \alpha_2) \phi_k(r_2) \phi_i(r_1). \quad (5)$$

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 $V_{\hat{\sigma}_n \alpha_n}^{|\omega_{\hat{\sigma}_n}|}$

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

Мнимая часть «потенциала» в (5) $\sim \sin|\omega|r_{12}/r_{12}$ раскладывается в ряд

$$\frac{\sin|\omega|r_{12}}{r_{12}} = \frac{\pi}{2\sqrt{r_1 r_2}} \sum_{\lambda=0}^{\infty} (\lambda) J_{\lambda+1/2}(|\omega|r_1) J_{\lambda+1/2}(|\omega|r_2) P_{\lambda}(\cos \widehat{\mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2}), \quad (7)$$

где J -функция Бесселя первого рода, $(\lambda) = 2\lambda + 1$. Подстановка (7) в матричный элемент межэлектронного взаимодействия (мнимую часть) приводит к выражению [15]

$$V_{1234}^{\omega} = [(j_1)(j_2)(j_3)(j_4)]^{1/2} \sum_{\lambda\mu} (-1)^{\mu} \begin{pmatrix} j_1 j_3 & \lambda \\ m_1 - m_3 & \mu \end{pmatrix} \times \text{Im} Q_{\lambda}(1234), \quad (8)$$

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

где величины Q_{λ}^{Qul} 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}^{Qul} в (9) выражается через радиальные интегралы R_{λ} и угловые коэффициенты S_{λ} [3]

$$\text{Im} Q_{\lambda}^{\text{Qul}} = \frac{1}{Z} \text{Im} \{ R_l(1243) S_{\lambda}(1243) + R_l(\tilde{1}24\tilde{3}) S_{\lambda}(\tilde{1}24\tilde{3}) + R_l(1\tilde{2}\tilde{4}3) S_{\lambda}(1\tilde{2}\tilde{4}3) + R_l(\tilde{1}\tilde{2}\tilde{4}\tilde{3}) S_{\lambda}(\tilde{1}\tilde{2}\tilde{4}\tilde{3}) \}, \quad (9)$$

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. Аналогичным образом определяется и брейтовская часть Q (см., напр., [14]).

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:

$$\begin{aligned} P_\lambda^E(\gamma \rightarrow \delta) &= 2(2j+1)Q_\lambda^E(\gamma\delta; \gamma\delta), & Q_\lambda^E &= Q_\lambda^{Cul} + Q_{\lambda,\lambda-1}^{Br} + Q_{\lambda,\lambda+1}^E, \\ P_\lambda^M(\gamma \rightarrow \delta) &= 2(2j+1)Q_\lambda^M(\gamma\delta; \gamma\delta), & Q_\lambda^M &= Q_{\lambda,\lambda}^{Br}. \end{aligned} \quad (10)$$

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

$$P(\lambda | j_1 j_2 [J], \bar{j}_1 \bar{j}_2 [\bar{J}]) = (\bar{J}) \left\{ \begin{matrix} \lambda \dots J \dots \bar{J} \\ j_2 \dots \bar{j}_1 \dots j_1 \end{matrix} \right\} P(\lambda | 1 \bar{1})(\bar{j}_1), \quad (11)$$

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 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. детали, напр., в [14]).

Результаты и выводы. Ниже приведены результаты расчета энергий и сил осцилляторов различных типов радиационных переходов между уровнями конфигураций $4s^2(^1S_0)$, $4s4p(^1P^0_1)$, $4s4d(^1D^0_1)$ в спектре ионов с зарядом ядра $Z=32-92$ изоэлектронной последовательности ZnI (на основе известного РС комплекса "Superatom" [12-17]). Указанные выше состояния Zn -подобных ионов в рамках ТВ формализма трактуются как двух-QP состояния электронов ($n1, n'1'$) над остовом заполненных электронных оболочек $3p^6 3d^{10}$. Взаимодействие QP-остов описывается потенциалом, фактически имитирующим ДФ потенциал самосогласованного поля. Эффекты поляризационного взаимодействия QP через поляризуемый остов и экранировочного взаимодействия учитывались в рамках методики [3]. В табл. 1 представлены результаты теоретического вычисления энергий и сил осцилляторов перехода $4s^2(^1S_0) - 4s4p(^1P^0_1)$ на основе различных теорий, в частности, ХФ данные, ДФ данные, ДФ данные с использованием экспериментальной энергии перехода, результаты расчета методом эмпирического модельного потенциала (МП), данные расчета в рамках КЭД ТВ (наш расчет), а также имеющиеся в литературе экспериментальные данные [8,12,19].

Таблица 1 - Экспериментальные (эксп.) и теоретические энергии (в атомных ед.) и силы осцилляторов для перехода $4s^2(^1S_0) - 4s4p(^1P^0_1)$ в спектрах различных Zn-подобных ионов: методы -ХФ, ДФ, ДФ с использованием экспериментальной энергии перехода, МП, ТВ (наш расчет).

Ион	Метод	ΔE	f_L	f_V
Ga^+	ДФ	0.3351	1.89	1.98
	ХФ	0.2984	2.30	2.01
	ДФ _{эксп}	0.3221	1.97	1.95
	МП	0.3076	1.68	1.73
	ТВ	0.3220	1.862	1.861
	Эксп.	0.3221	1.85 ± 0.15	1.85 ± 0.15
As^{3+}	ДФ	0.5247	1.87	1.86
	ТВ	0.5142	1.575	1.574
	Эксп.	0.5141	1.56 ± 0.23	1.56 ± 0.23
Kr^{6+}	ДФ	0.7960	1.75	1.71
	ТВ	0.7845	1.462	1.463
Gd^{34+}	ДФ	4.6685	1.12	1.10
	ТВ	4.6294	1.01	0.99
Yb^{40+}	ДФ	6.2564	1.12	1.10
	ТВ	5.1788	0.97	0.96
Au^{40+}	ДФ	9.6361	1.18	1.15
	ТВ	9,5256	1.02	1.01
Pb^{52+}	ДФ	11.1153	1.21	1.18
	ТВ	10.9715	1.13	1.13
U^{62+}	ДФ	17.8584	1.37	1.36
	ХФ	17.6087	1.41	1.47
	ТВ	17.6285	1.33	1.33
	Эксп.	-	1.31 ± 0.05	1.31 ± 0.05

Анализ результатов показывает, что данные ХФ, ДФ расчетов с использованием различных калибровок фотонного пропагатора (оператор перехода в форме длины и скорости) отличаются друг от друга в среднем до 15%, в то время как в нашей теории отличие данных по силам осцилляторов не превышает 0,1% (для кулоновой калибровки и калибровки Бабушкина). Разумеется, для изученных ионов важную роль играет учет эффектов межэлектронной корреляции (поляризационного и экранировочного взаимодействий) как эффектов второго и выше порядков ТВ. Обращает на себя внимание резкий рост величины силы осцилляторов для как E2, так и M1 переходов, с увеличением заряда ядра иона Z . В целом согласие результатов, полученных в рамках нашей теории, с экспериментом является достаточно хорошим.

В заключение автор выражает глубокую благодарность проф. Глушкову А.В. за полезные обсуждения и 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.-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. *Koc K.* 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.L305–311.
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. *Moore C.* NBS Spectra Database.-Washington: NBS.-1987.
13. *Ivanova E.P., Grant I.P.* Oscillator strength anomalies in Ne isoelectronic sequence with applications to X-ray laser modeling// *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. *Anderson E.K., Anderson E.M.* Calculation of parameters for some E1,E2,E3,M1,M2 transitions in isoelectronic sequence Zn// *Opt. Spectr.*-1983.-Vol.54.-P.955-960.

Релятивістський енергетичний підхід до розрахунку сил осциляторів радіаційних переходів у спектрах Zn-подібних іонів. Флоро Т.О., Чернякова Ю.Г., Никола Л.В.

На основі нового підходу до розрахунку параметрів радіаційних атомних переходів у складних системах, який базується на енергетичному підході та КЕД теорії збурень, виконано розрахунок сил осциляторів для переходів в спектрах різноманітних Zn-подібних іонів.

Ключові слова: релятивістський енергетичний підхід, радіаційні переходи, Zn-подібні іони

Relativistic energy approach to calculating radiation transition oscillator strengths in spectra of Zn-like ions.

Florko T.O., Chernyakova Yu.G., Nikola L.V.

There are calculated the radiative transition oscillator strengths in spectra of different Zn-like ions on the basis of a new approach to calculating radiative atomic transition parameters for complex systems. The method is based on the energy approach and QED perturbation theory.

Keywords: relativistic energy approach, radiative transitions, Zn-like ions