

РАСЧЕТ ПАРАМЕТРОВ СВЕРХТОНКОЙ СТРУКТУРЫ ДЛЯ АТОМА Li и Li-ПОДОБНЫХ ИОНОВ. НЕРЕЛЯТИВИСТСКОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ

Л. А. Вайнштейн, Е. М. Чуразов

Проведен расчет параметров сверхтонкой структуры в различных вариантах метода Хартри – Фока. Показано, что для достижения точности выше 1% одноконфигурационный метод Хартри – Фока недостаточен как для атомов, так и для многозарядных ионов. При этом необходим учет спиновой поляризации, который можно осуществить с помощью двух конфигураций.

Радиолинии, соответствующие переходам в сверхтонкой структуре (СТС) основных состояний многозарядных ионов, представляют большой интерес для диагностики горячей плазмы в астрофизических объектах [1]. Условия наблюдения таких линий требуют точности предсказания длин волн не хуже 0,1 – 0,3%, а экспериментальные данные для СТС многозарядных ионов отсутствуют. Поэтому необходимы теоретические расчеты с косвенной проверкой их применимости на основе сопоставления экспериментальных данных для нейтральных атомов и результатов различных вариантов расчета. В настоящей работе такой анализ проведен для атомов Li и Li-подобных ионов. Для удобства обсуждения ниже не рассматриваются поправки, связанные с релятивистскими эффектами, конечными размерами ядра и т. д., которые несущественны для атома Li. Разумеется, эти поправки необходимо внести в окончательные результаты для многозарядных ионов.

В нерелятивистском приближении расщепление СТС равно

$$\begin{aligned} \Delta E &= C\mu F\chi/I, \quad \chi = 8\pi a_0^3/z^3 \sum_i \langle m_{S_i} \delta(r) \rangle, \\ C &= (2/3)a^2 (m/m_p) Ry z^3 = 2,1217(z/10)^3, \end{aligned} \quad (1)$$

где μ , I – магнитный момент и спин ядра; F – полный момент системы; $z = z_n - N + 1$; z_n – заряд ядра; N – число электронов; χ относительно слабо зависит от z .

Простейшая оценка основана на полуэмпирической формуле Ферми – Сегре [2,3/ (ФС). Используя квазиклассическое решение одноэлектронного уравнения, можно показать, что

$$\chi \approx \frac{4}{n_*^3} \frac{z_p}{z}, \quad n_* = \left(\frac{z^2}{\epsilon} \right)^{1/2}, \quad (2)$$

где $\epsilon = E/Ry$; E – энергия уровня. Значение, полученное с использованием экспериментального значения ϵ , приведено в табл. 1.

Т а б л и ц а 1

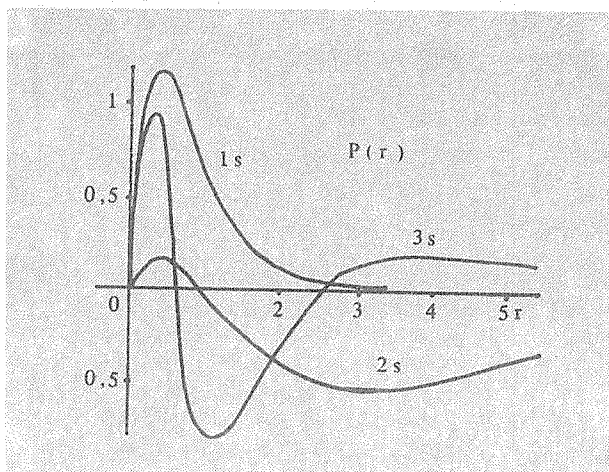
Значения χ , полученные разными методами

Метод \ Элемент	ФС	ХФ	НХФ	МКХФ	Эксперимент
Li	2,99	2,09	3,08	2,74	2,906
Mg	0,674	0,644	0,679	0,677	—
Fe	0,578	0,559	0,572	0,571	—

Более точного значения χ можно было бы ожидать из численного решения уравнения Хартри – Фока (ХФ). Однако расчет для основного состояния Li дает значение χ , которое ниже экспериментального почти на 30%. В то же время параметр ϵ весьма близок к экспериментальному.

Возможное объяснение большой погрешности метода ХФ состоит в том, что в этом приближении заполненная оболочка $1s^2$ не дает вклада в χ . В то же время для одного электрона $\chi(1s) \gg \chi(2s)$. Если не требовать совпадения радиальных функций $P_{\pm}(1s)$, соответствующих проекциям спина $m_s = \pm 1/2$ (так называемый неограниченный метод ХФ или НХФ [4/), то даже при небольшом отличии P_+ и P_- возможно существенное изменение χ . Отличие функций связано с тем, что обменное взаимодействие электронов $1s$ и $2s$ возможно лишь при параллельных спинах. Результаты расчета этим методом (считалось, что $P_{\pm}(1s)$ и $P(2s)$ ортогональны) гораздо лучше согласуются с экспериментом (табл. 1).

Более последовательным обобщением метода ХФ является многоконфигурационное приближение МКХФ. Учитывая успех метода НХФ, примешаем к исходной конфигурации $1s^2 2s$ конфигурацию $1s3s(^3S)2s$, в которой элект-



Р и с. 1. Радиальные функции 1s-, 2s- и 3s-электронов.

роны 1s и 3s имеют параллельные спины (поправка на спиновую поляризацию /5/). В дальнейшем этот метод обозначаем как МКХФ. Функции $P(1s)$, $P(2s)$ были зафиксированы на их хартри-фоковских значениях, а $P(3s)$ находилась из уравнений многоконфигурационного приближения /6/. На рис. 1 приведены функции $P(r)$ 1s-, 2s-, 3s-электронов. Видно, что $dP/dr|_{r \rightarrow 0}$ для 3s близко к соответствующему значению для 1s, а общая протяженность $P(r)$ не превосходит протяженности $P(r)$ для 2s. Энергия состояния $1s^2 2s$ в приближении МКХФ меняется всего на $\Delta E \sim 10^{-5} E$, в то время как величина χ изменяется весьма существенно (табл. 1).

Как видно из табл. 1, погрешность методов НХФ и МКХФ примерно одинакова ($\sim 6\%$) и намного меньше, чем для обычного метода ХФ. Если допустить, что различие данных НХФ и МКХФ характеризует величину погрешности в случае многозарядных ионов так же, как и для нейтральных атомов, то для Fe XXIV можно ожидать точности $\sim 0,2\%$. Как уже отмечалось, для получения реальной СТС необходимо добавить релятивистскую поправку и эффекты конечных размеров ядра.

Из табл. 1 видно, что даже при $z = 24$ одноконфигурационное приближение ХФ дает погрешность $\sim 2\%$, т. е. не обеспечивает требований точности астрофизических экспериментов. Остается неясной причина неожиданно хорошего качества расчетов по простой формуле Ферми + Сегре /1/. Можно продемонстрировать, что это имеет место и для других атомов и ионов.

Расчеты производились на Базовой ЭВМ ФИАН с помощью общей программы МКХФ.

ЛИТЕРАТУРА

1. Сюняев Р. А., Чуратов Е. М. Письма в астрономический журнал, 10, № 7, 483 (1984).
2. Foldy L. L. Phys. Rev., 111, 1093 (1958).
3. Собельман И. И. Введение в теорию атомных спектров. М., Наука, 1977.
4. Pratt I. W., Jr. Phys. Rev., 102, 1303 (1956).
5. Fischer C. F. The Hartree-Fock method for atoms. J. Wiley & Sons, 1977.
6. Юцис А. П. ЖЭТФ, 23, 129 (1952).

Поступила в редакцию 11 июля 1985 г.