

### ЭНЕРГИИ ПЕРЕХОДОВ В НЕ-ПОДОБНЫХ ИОНАХ. КОРРЕЛЯЦИОННЫЕ ЭФФЕКТЫ

Л.А. Вайнштейн, У.И. Сафронова

*Оценена корреляционная поправка к энергиям уровней 3l Не-подобных ионов. Показано, что эта поправка определяет большую часть погрешности расчета методом МКДФ.*

Спектры ионов Не-подобной последовательности (ниже [Ne]) изучаются различными методами. В настоящей работе рассмотрены переходы из состояний  $2s^{-1}3l$  и  $2p^{-1}3l$  в основное состояние  $1s^2 2s^2 2p^6$ . Обозначения  $2p^{-1}$  и  $2s^{-1}$  соответствуют дыркам в оболочках  $2p^6$  и  $2s^2$ . В /1-3/ проведены расчеты энергий на основе модельного (полуэмпирического) потенциала.

Другой подход основан на решении многоконфигурационной системы уравнений Дирака – Фока (МКДФ). К полученным таким образом энергиям добавляются рассчитанные в первом порядке поправки – двухчастичные релятивистские (гамильтониан Брейта) и квантово-электродинамические (КЭД). В /4, 5/ этот метод использован для сопоставления расчетных спектров с экспериментальными, полученными в этих же работах на токамаке PLT для [Ne] с большим атомным номером  $z = 47, 54, 57, 63$ . Точность измерения длин волн оценивается в 0,1 – 0,2 мÅ, что соответствует  $\sim 2 \cdot 10^3 \text{ см}^{-1} = 0,2 \text{ эВ}$ . Расчет спектров проводился в /5/ с учетом взаимодействия конфигураций, принадлежащих одному комплексу, т.е.  $2p^{-1}3s, 2p^{-1}3d, 2s^{-1}3p$ .

Таблица 1

Сравнение экспериментальных и теоретических значений энергий переходов (в ед.  $10^4 \text{ см}^{-1}$ ) для  $z = 47$  и 54;

$$\delta E = E_{\text{эксп}} - E_{\text{теор.}}$$

A $\bar{S}$ L $\bar{J}$	z = 47			z = 54			$\Delta E_2^{\text{соп}}$
	E		$\delta E$	E		$\delta E$	
	эксп.	теория		эксп.	теория		
S335=M2	2485,02	2483,76	1,26	3395,72	3394,66	1,10	0,77
S133=3G	2488,64	2487,49	1,15	3400,09	3399,15	0,94	0,89
P355=E2L	2548,00	2547,26	0,74	3472,41	3471,62	0,79	0,78
P335=E2M	2589,13	2588,30	0,83	3547,84	3547,14	0,70	0,77
S333=3F	2631,64	2630,63	1,03	3664,58	3663,68	0,90	0,77
D133=3D	2689,94	2689,89	0,06	3676,09	3676,44	-0,35	-0,19
P155=E2U	2731,60	2730,46	1,24	3813,70	3812,49	1,21	0,80
D353=3C	2819,79	2819,50	0,29	3917,74	3917,30	0,44	0,78
W133=3B	2902,34	2903,24	-0,90	3991,76	3993,70	-1,94	-1,10
W333=3A	2941,11	2942,43	-1,32	4064,95	4066,64	-1,69	-1,02
V155=E2				4176,92	4178,90	-1,98	-1,15

В табл. 1 приведены измеренные и рассчитанные значения энергии для  $Ag^{37+}$  и  $Xe^{44+}$ . В первом столбце даны обозначения уровня в виде  $A\bar{S}\bar{L}\bar{J}$ , где A — обозначение конфигурации: A = S, P, D соответствует  $2p^{-1}3l$ ;  $l = 0, 1, 2$ ; A = E, W, V соответствует  $2s^{-1}3l$ ;  $l = 0, 1, 2$ ;  $\bar{S}, \bar{L}, \bar{J} = (2S + 1), (2L + 1), (2J + 1)$ . Классификация по LS-связи осуществляется по наибольшему весу состояния LSJ. Обозначения уровней, принятые в работе /5/, приведены в этом же столбце. В следующих столбцах табл. 1 выписаны экспериментальные значения энергий и разности  $\delta E$  экспериментального и вычисленного в /5/ значений энергий уровней. Обсуждению этих разностей и посвящена настоящая работа.

Запишем нерелятивистскую часть энергии перехода в виде разложения по степеням  $1/Z$ :

$$E = E_0 Z^2 + \Delta E_1 Z + \Delta E_2 + \dots, \quad E_0 = 1/8 - 1/18.$$

Коэффициенты  $\Delta E_k$  вычислялись по теории возмущений на кулоновском базисе. Аналогичное разложение можно написать для хартри-фоковской энергии с коэффициентами  $\Delta E_k^{HF}$  (подробнее см. /6 — 8/). Разности  $\Delta E_k - \Delta E_k^{HF} = \Delta E_k^{corr}$  называются корреляционными поправками. В табл. 2 приведены коэффициенты  $\Delta E_k^{HF}$  и поправки  $\Delta E_k^{corr}$  ( $k = 1, 2$ ).

Таблица 2

Коэффициенты z-разложения для хартри-фоковской и корреляционной энергий:

$$E_2^{HF} = (S/72)Z^2 + \Delta E_1^{HF} Z + \Delta E_2^{HF}; \quad E_2^{corr} = \Delta E_1^{corr} Z + \Delta E_2^{corr}$$

A, LS	$\Delta E_1^{HF}$	$\Delta E_2^{HF}$	$\Delta E_1^{corr}$	$\Delta E_2^{corr}$	
S	<sup>1</sup> P	-0,85190	2,1059	-0,00078	0,0407
	<sup>3</sup> P	-0,85818	2,1505	-0,00051	0,0350
P	<sup>1</sup> S	-0,74192	1,1076	-0,00052	0,1005
	<sup>3</sup> S	-0,80137	1,6880	-0,00272	0,0585
	<sup>1</sup> P	-0,78583	1,5665	0	0,0286
	<sup>3</sup> P	-0,78583	1,5665	0	0,0351
	<sup>1</sup> D	-0,78662	1,5677	-0,00024	0,0365
	<sup>3</sup> D	-0,79205	1,6168	-0,00026	0,0355
D	<sup>1</sup> P	-0,66133	0,4218	0,00077	-0,0087
	<sup>3</sup> P	-0,71116	1,0508	-0,00096	0,0539
	<sup>1</sup> D	-0,69631	0,9156	0	0,0327
	<sup>3</sup> D	-0,69631	0,9156	0	0,0356
	<sup>1</sup> F	-0,69785	0,9132	0	0,0199
	<sup>3</sup> F	-0,70586	1,0084	0	0,0372
E	<sup>1</sup> S	-0,63705	1,1074	0,00052	-0,0828
	<sup>3</sup> S	-0,65200	1,2002	0,00272	-0,0390
W	<sup>1</sup> P	-0,57792	0,5792	0,00070	-0,0499
	<sup>3</sup> P	-0,53755	0,6376	0,00148	-0,0465
V	<sup>1</sup> D	-0,48284	-0,1714	0,00024	-0,0523
	<sup>3</sup> D	-0,49745	0,0046	0,00026	-0,0407
$1s^2 2s^2 2p^6$	8,770830	-15,479500	0	-0,4278	

Для основного состояния [Ne] комплекс включает одно состояние  $\Delta E_1^{\text{HF}} = \Delta E_1$ . Для возбужденных — несколько состояний, например,  $2p^{-1}3s$ ,  $2p^{-1}3d$ ,  $2s^{-1}3p$ , и истинная поправка  $\Delta E_1$  получается в результате решения секулярного уравнения. Поэтому  $\Delta E_1^{\text{HF}} \neq \Delta E_1$ . Однако в многоконфигурационном методе с одновременным учетом всех состояний комплекса поправка первого порядка учитывается полностью и остается только поправка  $\Delta E_2^{\text{corr}}$ .

Из табл. 2 видно, что эта нерелятивистская поправка ответственна за большую часть погрешности расчета метода МКДФ. Поскольку  $\Delta E_2^{\text{corr}}$  не зависит от  $Z$ , эту же поправку можно внести и во все расчеты для других ионов [Ne].

По той же причине можно ожидать, что разность  $|\delta E - \Delta E_2^{\text{corr}}|$  будет сильнее зависеть от  $Z$ , чем само  $\delta E$ . Из данных табл. 1 видно, что это действительно имеет место.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Ivanova E. P., Glushkov A. V. J. Quant. Spectr. R. Transfer., 36, 127 (1986).
2. Buchet J. P. et al. J. Phys., B, 20, 1703 (1987).
3. Wyart J. F. et al. Physica Scripta, 36, 227 (1987).
4. Beiersdorfer P. et al. Phys. Rev. (в печати).
5. Beiersdorfer P. et al. Phys. Rev., A, 34, 1297 (1986).
6. Vainshtein L. A., Safronova U. I. Nucl. and Atom. Data Tables, 21, 49 (1978).
7. Сафронова У. И., Сенашенко В. С. Теория спектров многозарядных ионов. М., Энергоатомиздат, 1984.
8. Вайнштейн Л. А., Шевелько В. П. Структура и характеристики ионов в горячей плазме. М., Наука, 1986.

Поступила в редакцию 24 февраля 1988 г.