

АСИМПТОТИЧЕСКОЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЕ
МЕТОДА ТЕОРИИ ВОЗМУЩЕНИЙ ПО $1/Z$

Л. А. Вайнштейн, У. И. Сафронова

УДК 539.182

Коэффициенты разложения матрицы энергии по степеням $1/Z$ разбиваются на сумму вкладов атомного остатка и оптического электрона. Для последнего даны формулы, позволяющие определить коэффициенты для состояния $n1$ по известным коэффициентам для $n = n_0$.

Метод теории возмущений на водородном базисе (разложение по обратным степеням заряда ядра Z) неоднократно применялся для расчета энергий и других элементарных характеристик многозарядных ионов $/I/$. Важным преимуществом метода является возможность одновременного расчета характеристик ионов всей изоэлектронной последовательности. Однако расчет коэффициентов разложения является весьма трудоемкой задачей. В этой связи представляется полезным развитие приближенных методов, в которых данные для уже найденных коэффициентов используются для расчета других коэффициентов. В настоящей работе рассмотрен такой подход для состояний с большими n .

Ниже используются атомные единицы $e = \hbar = m = 1$; $e^2/\hbar c = 1/137$. Состояние иона с N электронами и зарядом ядра Z будем определять квантовыми числами $aLSJ$. Если состояние описывается в генеалогической схеме, то $a = cL_c S_c n1$, где $cL_c S_c$ - состояние остова, $n1$ - состояние оптического электрона. Введем также величины

$$\delta(m_1 m_2 \dots, m_1' m_2' \dots) = \delta_{m_1 m_1'} \delta_{m_2 m_2'} \dots, \quad (I)$$

$$P(j_1 j_2 \dots) = (2j_1 + 1)^{1/2} (2j_2 + 1)^{1/2} \dots$$

Матрица энергии записывается в виде:

$$\begin{aligned}
 H(a_1 L_1 S_1 J, a_2 L_2 S_2 J) = & \left[E_0 \delta(a_1, a_2) Z^2 + E_1 Z + E_2 \right] \delta(L_1 S_1, L_2 S_2) + \\
 & + \frac{Z^3}{4 \cdot 137^2} \left[\epsilon_0 \delta(a_1, a_2) Z + \epsilon_1 \right] \delta(L_1 S_1, L_2 S_2) + \\
 & + \frac{(Z - A)^3}{4 \cdot 137^2} \left[(\epsilon_{s1} Z + \epsilon'_{s1}) Q_1 + \epsilon_{ss} Q_2 \right], \quad (2)
 \end{aligned}$$

$$Q_k = (-1)^{J+L_2+S_2} \begin{vmatrix} L_1 & S_1 & J \\ S_2 & L_2 & k \end{vmatrix}.$$

Здесь E_k и ϵ_k - коэффициенты разложения по степеням $1/Z$ нерелятивистской и релятивистской (оператора Брейта) частей матрицы энергии; ϵ_0 и ϵ_1 соответствуют кинематической (независимой от спина) части, ϵ_{s1} , ϵ'_{s1} и A - спин-орбитальному взаимодействию, ϵ_{ss} - спин-спиновому. Часть спин-орбитального взаимодействия записана в форме параметра экранирования A (см. подробнее /1/).

Коэффициенты нулевого порядка E_0 и ϵ_0 даются простыми формулами:

$$E_0 = - \sum_{nl} \frac{N_{nl}}{2n^2}, \quad \epsilon_0 = - \sum_{nl} \left[\frac{4}{2l+1} - \frac{3}{2n} - 2\delta(1,0) \right] \frac{N_{nl}}{n^3}, \quad (3)$$

где N_{nl} - число электронов в оболочке nl . Для ϵ_{s1} выражение несколько сложнее (см. ниже). Коэффициенты E_k , ϵ_k вычислялись для ряда конфигураций с $N \leq 10$, $n \leq 3$. Если эти коэффициенты известны, то, диагностируя матрицу H , определяем энергии всех состояний и коэффициенты их разложения $C_J(aLS, a_1 L_1 S_1)$ по водородному базису в промежуточной схеме связи с учетом взаимодействия конфигураций с различными l_1 при заданном наборе чисел n_1 . Для проведения этой стадии расчета, включая расчет вероятностей оптических переходов и сечений возбуждения электронным ударом, в ФИАНе имеется программа для ЭМ PDP-11/70.

Поскольку задача расчета самих коэффициентов E_k , ϵ_k (особенно E_2 , ϵ_1 , ϵ'_{s1}) чрезвычайно трудоемка, представляется по-

лезным использовать уже найденные коэффициенты для расчета коэффициентов для других конфигураций. В частности, для возбужденных состояний можно воспользоваться асимптотическими по n формулами для радиальных интегралов и выразить $E_k(n)$, $\epsilon_k(n)$ для $n > n_0$ через $E_k(n_0)$, $\epsilon_k(n_0)$.

Для состояний с заданной генеалогической схемой $a = cL_c S_c$ имеем

$$E_k = E_k^c \delta(n_1 l_1, n_2 l_2) + E_k^n, \quad k = 0, 1, 2;$$

$$\epsilon_k = \epsilon_k^c \delta(n_1 l_1, n_2 l_2) + \epsilon_k^n, \quad k = 0, 1,$$

где E_k^c , ϵ_k^c - соответствующие коэффициенты для остова, а E_k^n и ϵ_k^n определяют энергию оптического электрона nl и его взаимодействие с остовом. Для взаимодействия спин-орбита и спин-спин, ввиду их векторного характера, выделение остова несколько сложнее:

$$\epsilon_{s1}^c = \epsilon_{s1}^c Q_1^c + \epsilon_{s1}^n Q_1^n, \quad \epsilon_{s1}^n = \epsilon_{s1}^c Q_1^c + \epsilon_{s1}^n Q_1^n; \quad \epsilon_{ss} = \epsilon_{ss}^c Q_2^c + \epsilon_{ss}^n Q_2^n$$

$$Q_k^c = (-1)^{L_{c1} + S_{c1} + L_2 + S_2 + 1 + 1/2} \cdot \Pi(L_1 L_2 S_1 S_2) \begin{Bmatrix} L_1 & L_{c1} & 1 \\ L_{c2} & L_2 & k \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} S_1 & S_{c1} & 1/2 \\ S_{c2} & S_2 & k \end{Bmatrix}$$

$$Q_k^n = (-1)^{L_c + S_c + L_1 + S_1 + 1 + 1/2} \Pi(L_1 L_2 S_1 S_2) \begin{Bmatrix} L_1 & 1 & L_c \\ 1 & L_2 & k \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} S_1 & 1/2 & S_c \\ 1/2 & S_2 & k \end{Bmatrix} \times$$

$$\times \delta(L_{c1} S_{c1}, L_{c2} S_{c2}).$$

При этом ϵ_{s1}^n дается простой формулой

$$\epsilon_{s1}^n = \frac{2}{n^3} \left[\frac{6}{1(1+1)(21+1)} \right]^{1/2}, \quad (1 \neq 0); \quad \epsilon_{s1}^n = 0, \quad (1 = 0) \quad (4)$$

Величины E_1^c , ..., очевидно, не зависят от n . Формулы (3) и (4) дают явную зависимость E_0 , ϵ_0 и ϵ_{s1}^n от n . Для остальных коэффициентов воспользуемся асимптотическими формулами.

Используя известную асимптотику радиальных интегралов на водородных функциях, а также формулу суммирования кулоновских интегралов в члене второго порядка /2/, можно в явной форме вы- делить в E_1 и E_2 члены $\sim n^{-2}$. Все остальные коэффициенты $\sim n^{-3}$ при $n \rightarrow \infty$.

Пусть коэффициенты для остова и для оптического электрона при $n = n_0$ известны. Обозначим через E_1^0 и E_2^0 величины

$$E_1^0 = E_1^n - \frac{N-1}{n_0^2} \delta(a_1, a_2), \quad E_2^0 = E_2^n - \frac{(N-1)^2}{2n_0^2} \delta(a_1, a_2); \quad (5)$$

$$(n = n_0)$$

и через ϵ_k^0 , A^0 значения ϵ_k и A при $n = n_0$. Тогда формулу (2) для матрицы H при любом $n \geq n_0$ можно приближенно записать в виде:

$$H = H_c^0 \delta(n_1 l_1, n_2 l_2) + H_n, \quad (6)$$

$$H_n = \left[- \frac{(Z - N + 1)}{2n^2} \delta(a_1, a_2) + (E_1^0 Z + E_2^0 X) \right] \delta(L_1 S_1, L_2 S_2) +$$

$$+ \frac{Z^3}{4 \cdot 137^2} [\epsilon_0^n \delta(a_1, a_2) Z + \epsilon_{1X}^n] \delta(L_1 S_1, L_2 S_2) +$$

$$+ \frac{(Z - A)^3}{4 \cdot 137^2} [(\epsilon_{s1}^n Z + \epsilon_{s1X}^0) Q_1^n Q_1 + \epsilon_{ss}^0 X Q_2^n Q_2], \quad (7)$$

$$A = A^c + (A^0 - A^c) X \frac{\epsilon_{s1}^c + \epsilon_{s1}^0}{\epsilon_{s1}^c + \epsilon_{s1}^n}, \quad X = \left(\frac{n_0}{n} \right)^3.$$

Здесь H_c^0 отличается от матрицы энергии остова $H_c(c_1 L_{c1} S_{c1}, c_2 L_{c2} S_{c2})$ заменой $\epsilon_{s1}^c, \epsilon_{s1}^{c'}, \epsilon_{ss}^c$ на $\epsilon_{s1}^c Q_1^c, \epsilon_{s1}^{c'} Q_1^c, \epsilon_{ss}^c Q_2^c$ и A^c на A .

Формулы (5) - (7) позволяют определить матрицу энергии для $n > n_0$ по известным коэффициентам для $n = n_0$. Для иллюстрации качества экстраполяции в табл. I приведены энергии ионизации

Таблица I.

Энергии ионизации (10^6 см^{-1}) из состояний $1s^2 3l$

	Z = 12		Z = 26	
	расчет по формуле (2)	расчет по формулам (5), (7) $n_0 = 2$	расчет по формуле (2)	расчет по формулам (5) - (7) $n_0 = 2$
$1s^2 3s_{1/2}$	I,2809	I,2850	7,2300	7,2416
$1s^2 3p_{3/2}$	I,2355	I,2359	7,0828	7,0867
$1s^2 3p_{1/2}$	I,2367	I,2371	7,1201	7,1242

Li-подобных ионов в состояниях $3s$ и $3p$, рассчитанные с помощью точных и экстраполированных (по $n_0 = 2$) коэффициентов. Очевидно, что экстраполяция для $n > 3$ по $n_0 = 3$ будет еще точнее.

Поступила в редакцию
16 августа 1982 г.

Л и т е р а т у р а

1. Л. А. Вайнштейна, У. И. Сафронова, Препринт ФИАН № 6, М., 1975 г; L. A. Vainshtein, U. I. Safronova, Atomic Data, 21, 49 (1978).
2. Л. А. Вайнштейн, Краткие сообщения по физике ФИАН № II, 22 (1982).