



ИПМ им.М.В.Келдыша РАН • Электронная библиотека

Препринты ИПМ • Препринт № 66 за 2021 г.



ISSN 2071-2898 (Print)
ISSN 2071-2901 (Online)

И.Ю. Вичев, Д.А. Ким,
А.Д. Соломянная, А.С. Грушин,
Б.Л. Ярцев

Расчёт положения
спектральных линий в
приближении
промежуточной связи с
учётом взаимодействия
конфигураций

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Расчёт положения спектральных линий в приближении промежуточной связи с учётом взаимодействия конфигураций / И.Ю. Вичев [и др.] // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2021. № 66. 20 с. <https://doi.org/10.20948/prepr-2021-66>
<https://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2021-66>

О р д е н а Л е н и н а
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ
имени М.В.Келдыша
Российской академии наук

**И.Ю. Вичев, Д.А. Ким, А.Д. Соломянная,
А.С. Грушин, Б.Л. Ярцев**

**Расчёт положения спектральных линий
в приближении промежуточной связи
с учётом взаимодействия конфигураций**

Москва — 2021

Вичев И.Ю., Ким Д.А., Соломянная А.Д., Грушин А.С., Ярцев Б.Л.

Расчёт положения спектральных линий в приближении промежуточной связи с учётом взаимодействия конфигураций

При моделировании экспериментальных спектров особое внимание уделяется точности положения спектральных линий, которое в многоэлектронных ионах зависит не только от спин-орбитального и электростатического взаимодействия, но и от взаимодействия конфигураций. С целью усовершенствования комплекса THERMOS на основе связи промежуточного типа был разработан модуль, использующий метод Ритца для вычисления расщепления уровней ионов за счёт спин-орбитального взаимодействия с учётом взаимодействия конфигураций. Проведены сравнения полученных результатов для плазмы лития и железа.

Ключевые слова: спин-орбитальное взаимодействие, взаимодействие конфигураций, теория возмущений, положение спектральной линии, сила осцилляторов

*Ilia Yurievich Vichev, Dmitrii Andreevich Kim,
Anna Dmitrievna Solomyannaya, Alexander Sergeevich Grushin,
Boris Leonidovich Iartsev*

Calculation of the position of spectral lines in the intermediate coupling approximation taking into account the interaction of configurations

When modeling experimental spectra, special attention is paid to the accuracy of the position of spectral lines, which in many-electron ions depends not only on the spin-orbital and electrostatic interaction, but also on the interaction of configurations. In order to improve the THERMOS complex, a module was developed that uses the Ritz method on the basis of an intermediate-type bond to calculate the splitting of ion levels due to the spin-orbit interaction, taking into account the interaction of configurations. Comparisons of the results obtained for lithium and iron plasma are made.

Key words: spin-orbit interaction, interaction of configurations, perturbation theory, spectral line position, oscillator strength

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научных проектов № 20-01-00485 и № 20-31-90085. Вычисления проведены с помощью гибридного суперкомпьютера К-100, установленного в Центре коллективного пользования ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, и МВС-10П (МСЦ РАН).

Введение

На работающих по всему миру экспериментальных установках накоплено огромное количество данных по спектрам излучения и прохождения для различных веществ. Увеличение разрешающей способности спектрографов и ввод в строй ряда современных научных установок, позволяющих существенно повысить концентрацию энергии в экспериментах, дали возможность регистрировать спектры сильно ионизованной плазмы веществ, выделяя отдельные сильные линии с точностью, позволяющей проводить прямые сравнения с результатами моделирования. Для многоэлектронных ионов спектры определяются сечениями поглощения в спектральных линиях [1], число которых велико за счёт реализации огромного числа конфигураций. Как правило, для таких ионов спин-орбитальное и электростатическое взаимодействия являются величинами одного порядка. Кроме того, за счёт перекрытия электронных оболочек на положение спектральных линий оказывает влияние взаимодействие конфигураций [2, 3, 4, 5].

На данный момент в мире насчитывается около десяти научных групп, занимающихся моделированием термодинамических и радиационных свойств излучающей плазмы, начиная с атомных данных, детальных или усреднённых, получаемых с помощью различных квантово-статистических моделей, и заканчивая спектральными функциями поглощения и излучательной способности. Наиболее известными и часто используемыми кодами для получения спектральных характеристик равновесной и неравновесной плазмы являются ATOMIC (Los Alamos, США) [6, 7, 8], CRETIN (Lawrence Livermore, США) [9], SCSF (Sandia, США) [10], DEDALE (CEA, Франция) [11], FLYCHK (МАГАТЭ) [12]. Программный комплекс THERMOS [13, 14], созданный и поддерживаемый в Институте прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН, также входит в число наиболее развитых пакетов для вычисления свойств излучающей плазмы.

В основу программного комплекса THERMOS легли работы А.Ф. Никифорова, В.Б. Уварова и В.Г. Новикова в области квантово-статистических моделей [1]. Комплекс содержит несколько программных модулей, предназначенных для расчёта термодинамических и радиационных характеристик высокотемпературной плазмы как в условиях локального термодинамического равновесия (ЛТР), так и при его отсутствии.

Приближение среднего атома используется для вычисления потенциала, волновых функций и термодинамических характеристик в условиях равновесной плазмы. Расчёты радиационных характеристик проводятся с использованием теории возмущений, причём положение спектральных линий определяется в приближении jj – связи. Для малоплотной плазмы используется заранее подготовленная база атомных данных (БД), учитывающая специфику задачи. На основе БД расчёты характеристик плазмы в случае ЛТР проводятся в приближении Саха-Больцмана, при отсутствии ЛТР используется модель столкновительно-излучательного равновесия (СИР), в которой решается система поуровневой

кинетики в стационарном приближении с фиксированным полем излучения.

В состав комплекса THERMOS входит программа, позволяющая проводить вычисление БД для вещества на основе модели изолированного иона с автоперебором нерелятивистских конфигураций, который определяется условиями поставленной задачи. Полученный набор конфигураций может быть уточнён и дополнен данными из детальных атомных кодов (RCG [15], FAC [16], HULLAC [17]), экспериментов или из других известных источников (NIST [18], Spectr-W3 [19] и др.). Как правило, в случае многоэлектронных атомов экспериментальные данные известны для небольшого числа конфигураций. Расчёты по детальным методикам также имеют ограничение на размерность исходных данных (суммарное число реализующихся уровней). Кроме того, даже в малоплотной плазме наиболее вероятная конфигурация иона может сильно отличаться от основной.

С целью совершенствования комплекса THERMOS был разработан отдельный модуль, позволяющий учитывать спин-орбитальное и электростатическое взаимодействие с учётом взаимодействия конфигураций. Программная реализация основана на методе Ритца [1, 20] с базисом из однодетерминантных волновых функций Слэтера, для построения которых используются одноэлектронные волновые функции модели Хартри-Фока-Слэтера (ХФС). Схема расчёта реализована в представлении $nljm$. Модуль может быть использован как при расчётах в приближении среднего атома, так и при уточнении БД.

С помощью разработанного модуля были проведены расчёты положения спектральных линий и сил осцилляторов для водородоподобного иона лития и некоторых ионов железа. Полученные результаты сравнивались с данными NIST и расчётами по коду FAC. С использованием полученных данных для отдельных ионов железа были проведены расчёты спектров поглощения и прохождения. Проведено их сравнение с расчётами по различным моделям, а также с экспериментальными данными.

Энергетический спектр

Рассмотрим нерелятивистскую конфигурацию Q с фиксированными числами заполнения $\{N_{nl}^Q\}$ и статистическим весом g_Q , которая включает в себя набор состояний, отличающихся взаимной ориентацией орбитальных моментов m_ℓ и спинов электронов m_s . Предполагается, что все эти состояния относятся к одному и тому же энергетическому уровню. Такой подход возможен, если пренебречь нецентральной частью электростатического взаимодействия между электронами

$$V_{EL} = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{1}{|r_i - r_j|},$$

а также спин-орбитальным взаимодействием, которое обусловлено взаимодействием магнитного момента электрона с магнитным полем, возникающим

при его орбитальном движении:

$$V_{SO} = \frac{\alpha^2}{2} \sum_i \frac{1}{r_i} \frac{dV(r_i)}{dr_i} (\vec{s}_i, \vec{l}_i),$$

где α – постоянная тонкой структуры. Нецентральная часть электростатического и спин-орбитальное взаимодействия приводят к расщеплению уровня энергии иона на подуровни, относительное расположение которых соответствует определённой схеме сложения моментов \vec{l}_i и \vec{s}_i .

Для совместного рассмотрения обоих взаимодействий воспользуемся методом прямой диагонализации [1], который позволяет получать, выбирая представления для исходных функций, различные приближения: LS -связь, jj -связь, а также связь промежуточного типа. В случае связи промежуточного типа используются одноэлектронные волновые функции в представлении $nljm$. Следовательно, для заданной конфигурации $Q = \{N_{nl}\}$ учитываются все её подконфигурации $q = \{N_{nljm}\}$ ($N_{nljm} = 0$ или 1) такие, что $\sum_{jm} N_{nljm} = N_{nl}$. Волновая функция системы, содержащая N электронов, представляется в виде антисимметризованного произведения одноэлектронных функций $\psi_k(\vec{r}_i, \vec{s}_i)$

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{s}_1, \dots, \vec{r}_N, \vec{s}_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \det[\psi_k(\vec{r}_i, \vec{s}_i)], \quad (1)$$

где $\sum N_{nljm} = N$ – суммарное число электронов в конфигурации, а каждому k поставлены в соответствие квантовые числа $nljm$, определяющие состояние электрона с волновой функцией

$$\psi_{nljm}(\vec{r}, \sigma) = \frac{1}{r} R_{nl}(r) \sum_{m_\ell m_s} C_{\ell m_\ell \frac{1}{2} m_s}^{jm} Y_{\ell, m-m_s}(\vartheta, \varphi) \chi_{\frac{1}{2} m_s}(\sigma),$$

которые получены путём решения уравнений ХФС и являются собственными функциями гамильтониана

$$\hat{H}_0(\vec{r}) = -\frac{1}{2}\Delta - V(r),$$

где учтена лишь главная часть электростатического взаимодействия, описываемая посредством центрально-симметричного самосогласованного потенциала Хартри-Фока-Слэтера $V(r)$. Оставшаяся нецентральная-симметричная часть, а также спин-орбитальное взаимодействие представляют собой поправки к $\hat{H}_0 = \sum_i \hat{H}_0(\vec{r}_i)$ и учитываются по теории возмущений [21, 22].

Однодетерминантная функция Ψ_{qM} будет собственной функцией оператора проекции полного момента на ось z , величина которой определяется по формуле

$$M = \sum_{nljm} m N_{nljm}.$$

В соответствии с теорией возмущений, функция $\Psi_{\tau JM}$ может быть представлена в виде линейной комбинации функций (1):

$$\Psi_{\tau JM} = \sum_q C_{qM}^{\tau J} \Psi_{qM},$$

где дополнительный индекс τ введён для того, чтобы отличать решения с одними и теми же J и M . Коэффициенты разложения получаются путём решения секулярного уравнения

$$\sum_{q'} C_{q'M}^{\tau J} \left(\langle q | \hat{H} | q' \rangle - E \right) = 0, \quad (2)$$

где каждое собственное значение $E = E_{\tau JM}$ и каждый собственный вектор $\{C_{qM}^{\tau J}\}$ отвечают определённым значениям τ , J и M .

Матрица $\langle q | \hat{H} | q' \rangle$ вычисляется следующим образом (см. [23], стр. 171). Если подконфигурации q и q' совпадают (диагональные элементы), то

$$\langle q | \hat{H} | q \rangle = \sum_{\alpha} N_{\alpha} (I_{\alpha} + \Delta E_{\alpha}) + \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta} N_{\alpha} N_{\beta} H_{\alpha\beta}, \quad (3)$$

где $\alpha = \{n\ell jm\}$, $\beta = \{n'\ell'j'm'\}$ – набор квантовых чисел, определяющих положение электрона в приближении jj -связи,

$$\Delta E_{\alpha} = \frac{\zeta_{n\alpha\ell\alpha}}{2} \left[j_{\alpha}(j_{\alpha} + 1) - \ell_{\alpha}(\ell_{\alpha} + 1) - \frac{3}{4} \right] \quad (4)$$

отвечает за сдвиг положения уровней за счёт спин-орбитального взаимодействия

$$\zeta_{n\ell} = -\frac{\alpha^2}{2} \int_0^{r_0} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} R_{n\ell}^2(r) dr. \quad (5)$$

Здесь α – постоянная тонкой структуры, в случае $\ell = 0$ сдвиг $\zeta_{n0} = 0$.

Матричный элемент двухэлектронного взаимодействия определяется выражением

$$H_{\alpha\beta} = \langle \alpha\beta \left| \frac{1}{r_{12}} \right| \alpha\beta \rangle - \langle \alpha\beta \left| \frac{1}{r_{12}} \right| \beta\alpha \rangle, \quad (6)$$

где

$$\langle \alpha\beta \left| \frac{1}{r_{12}} \right| \gamma\delta \rangle = \sum_{\sigma\sigma'} \iint \frac{\psi_{\alpha}^*(\vec{r}_1, \sigma) \psi_{\beta}^*(\vec{r}_2, \sigma') \psi_{\gamma}(\vec{r}_1, \sigma) \psi_{\delta}(\vec{r}_2, \sigma')}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} d\vec{r}_1 d\vec{r}_2.$$

Если подконфигурация q' получена из подконфигурации q перестановкой только одного электрона (пусть в подконфигурации q он занимает состояние α ,

а в подконфигурации q' – состояние γ), тогда

$$\langle q' | \hat{H} | q \rangle = (-1)^P \sum_{\beta} N_{\beta} \left(\langle \alpha\beta \left| \frac{1}{r_{12}} \right| \gamma\beta \rangle - \langle \alpha\beta \left| \frac{1}{r_{12}} \right| \beta\gamma \rangle \right), \quad (7)$$

где P – число соответствующих перестановок для получения из подконфигурации q подконфигурации q' [23]. Если выбрать некоторую нумерацию всех возможных состояний электронов, в которой $\alpha < \beta$, $\gamma < \delta$, то величина P будет равна сумме всех занятых состояний, находящихся как между α и β , так и между γ и δ .

В случае, когда переставлено два электрона ($\alpha \rightarrow \gamma$, $\beta \rightarrow \delta$),

$$\langle q' | \hat{H} | q \rangle = (-1)^P \left(\langle \alpha\beta \left| \frac{1}{r_{12}} \right| \gamma\delta \rangle - \langle \alpha\beta \left| \frac{1}{r_{12}} \right| \delta\gamma \rangle \right), \quad (8)$$

и, наконец, если переставлено более чем два электрона, то $\langle q' | \hat{H} | q \rangle = 0$.

При вычислении матричных элементов $\langle \alpha\beta \left| \frac{1}{r_{12}} \right| \gamma\delta \rangle$ проводится интегрирование по угловым переменным и суммирование по спиновой переменной σ . В результате получается следующая формула

$$\begin{aligned} \langle \alpha\beta \left| \frac{1}{r_{12}} \right| \gamma\delta \rangle &= \sum_{m_s m'_s} \sum_{\tilde{m}_\alpha \tilde{m}_\beta \tilde{m}_\gamma \tilde{m}_\delta} \delta_{m_\alpha - m_\gamma, m_\delta - m_\beta} (-1)^{m_\alpha + m_\delta - m_s - m'_s} C_{\ell_\alpha \tilde{m}_\alpha \frac{1}{2} m_s}^{j_\alpha m_\alpha} \cdot \\ &\cdot C_{\ell_\beta \tilde{m}_\beta \frac{1}{2} m'_s}^{j_\beta m_\beta} C_{\ell_\gamma \tilde{m}_\gamma \frac{1}{2} m_s}^{j_\gamma m_\gamma} C_{\ell_\delta \tilde{m}_\delta \frac{1}{2} m'_s}^{j_\delta m_\delta} \sum_k D_{\ell_\alpha, m_\alpha - m_s; \ell_\gamma, m_\gamma - m_s}^k D_{\ell_\beta, m_\beta - m'_s; \ell_\delta, m_\delta - m'_s}^k R_{\alpha\beta\gamma\delta}^{(k)}, \end{aligned} \quad (9)$$

где

$$D_{\ell\tilde{m}, \ell'\tilde{m}'}^k = (-1)^{\tilde{m} - \tilde{m}'} \sqrt{(2\ell + 1)(2\ell' + 1)} \begin{pmatrix} \ell & k & \ell' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \ell & k & \ell' \\ -\tilde{m} & \tilde{m} - \tilde{m}' & \tilde{m}' \end{pmatrix}.$$

При интегрировании радиальной части волновых функций используется

$$R_{\alpha\beta\gamma\delta}^{(k)} = \iint \frac{r_{<}^k}{r_{>}^{k+1}} R_{n_\alpha \ell_\alpha}(r_1) R_{n_\beta \ell_\beta}(r_2) R_{n_\gamma \ell_\gamma}(r_1) R_{n_\delta \ell_\delta}(r_2) dr_1 dr_2, \quad (10)$$

где

$$r_{>} = \max(r_1, r_2), \quad r_{<} = \min(r_1, r_2).$$

Для прямого $F_{\mu\nu}^{(k)} = R_{\alpha\beta\alpha\beta}^{(k)}$ и обменного $G_{\mu\nu}^{(k)} = R_{\alpha\beta\beta\alpha}^{(k)}$ слэтеровских интегралов введены обозначения:

$$F_{\mu\nu}^{(k)} = \iint R_\mu^2(r_1) \frac{r_{<}^k}{r_{>}^{k+1}} R_\nu^2(r_2) dr_1 dr_2, \quad (11)$$

$$G_{\mu\nu}^{(k)} = \int \int R_{\mu}(r_1) R_{\nu}(r_1) \frac{r_{\leq}^k}{r_{>}^{k+1}} R_{\mu}(r_2) R_{\nu}(r_2) dr_1 dr_2. \quad (12)$$

Обобщим получившиеся выражения на случай заданного набора конфигураций для иона с фиксированной кратностью ионизации. Предполагаем, что радиальные волновые функции $R_{n\ell}(r)$ заранее известны. Тогда выражения (1) – (5) не изменятся. Рассмотрим, что произойдет с матричными элементами двухэлектронного взаимодействия (6) – (8). В первом приближении, когда конфигурации отличаются положением одного электрона (7), матричный элемент двухэлектронного взаимодействия будет равен нулю. Когда конфигурации отличаются положением двух электронов (8), матричный элемент двухэлектронного взаимодействия будет определяться обменным интегралом $G_{\mu\nu}$, который будет отличен от нуля в случае, если одновременно два электрона с оболочки μ переходят на оболочку ν . Таким образом, взаимодействие происходит между конфигурациями одной чётности.

При построении системы уравнений (2) для каждой конфигурации Q перебираются все подконфигурации q с числами заполнения N_{nljm} . Число таких подконфигураций определяется статистическим весом g_Q . Учитываются только подконфигурации с $M \geq 0$, поскольку для отрицательных значений M матрицы для поиска коэффициентов $C_{q'M}^{\tau J}$ будут аналогичны. Так как матрица симметрична, для вычисления собственных значений и собственных векторов используется итерационный метод Якоби.

Силы осцилляторов

Выведем формулу расчёта силы осциллятора в дипольном приближении для перехода между уровнями $\tau J \rightarrow \tau' J'$. Обозначим наборы начального и конечного состояний как a и b , тогда для силы осциллятора перехода между ними запишем выражение

$$f_{ab} = \omega_{ba} \left| \left\langle a \left| \sum_j \vec{r}_j \right| b \right\rangle \right|^2,$$

где наборы состояний τJM определяются как

$$|a\rangle \equiv |\tau JM\rangle = \sum_q C_{qM}^a \Psi_{qM}^a, \quad |b\rangle \equiv |\tau' J' M'\rangle = \sum_{q'} C_{q'M'}^b \Psi_{q'M'}^b.$$

Дипольный переход электрона с уровня $\alpha \equiv n\ell jm$ из подконфигурации q на уровень $\beta \equiv n'\ell' j'm'$ подконфигурации q' однозначно определяет переход между конфигурациями $Q \rightarrow Q'$.

$$f_{ab} = \omega_{ba} \sum_{QQ'} \left(\sum_{q \in Q, q' \in Q'} (C_{q'M'}^b)^* C_{qM}^a |\vec{r}_{\alpha\beta}| \right)^2.$$

Оператор \vec{r} действует на координаты одного электрона, поэтому отличные от нуля члены, входящие в f_{ab} , будут существовать, если подконфигурации q и q' отличаются положением одного электрона ($\alpha: n\ell jm \rightarrow \beta: n'\ell'j'm'$)

$$\vec{r}_{\alpha\beta} = \sum_{\sigma, \sigma'} \int \psi_{\alpha}^*(\vec{r}, \sigma) \vec{r} \psi_{\beta}(\vec{r}, \sigma') d\vec{r}.$$

За счёт ортогональности спиновых компонент волновых функций получаем

$$\vec{r}_{\alpha\beta} = r_{n\ell, n'\ell'} \sum_{m_s} C_{\ell m_{\ell} \frac{1}{2} m_s}^{jm} C_{\ell' m_{\ell'} \frac{1}{2} m_s}^{j'm'} \langle Y_{\ell' m_{\ell'}}(\vartheta, \varphi) | \vec{n} | Y_{\ell m_{\ell}}(\vartheta, \varphi) \rangle,$$

где для удобства введены обозначения $\vec{n} = \vec{r}/r$, $m_{\ell} = m - m_s$, $m_{\ell'} = m' - m_s$,

$$r_{n\ell, n'\ell'} = \int R_{n\ell}(r) r R_{n'\ell'}(r) dr. \quad (13)$$

Учитывая соотношения для сферических компонент \vec{n} , можно записать

$$\langle Y_{\ell' m_{\ell'}}(\vartheta, \varphi) | n_{\tau} | Y_{\ell m_{\ell}}(\vartheta, \varphi) \rangle = \sqrt{\frac{2\ell + 1}{2\ell' + 1}} C_{\ell' 0}^{\ell' 0} C_{\ell m_{\ell}, 1 m_{\ell} - m_{\ell'}}^{\ell' m_{\ell}'}$$

и получить выражение силы осциллятора для одноэлектронного перехода

$$f_{ab} = \omega_{ba} \sum_{QQ'} \left(\sum_{q \in Q, q' \in Q'} (C_{q'M'}^b)^* C_{qM}^a D(q, q') \right)^2, \quad (14)$$

где введено обозначение

$$D(q, q') = (-1)^P C_{\ell' 0}^{\ell' 0} r_{n\ell, n'\ell'} \sqrt{\frac{2\ell + 1}{2\ell' + 1}} \left(\sum_{m_s} C_{\ell m_{\ell}, 1 m_{\ell} - m_{\ell'}}^{\ell' m_{\ell}' } C_{\ell m_{\ell}, \frac{1}{2} m_s}^{jm} C_{\ell' m_{\ell'} \frac{1}{2} m_s}^{j'm'} \right). \quad (15)$$

P – число соответствующих перестановок для получения из подконфигурации q подконфигурации q' . Схема вычисления силы осциллятора для перехода между уровнями $\tau JM \rightarrow \tau' J'M'$ приведена на рис. 1.

Поскольку начальный a и конечный b уровни представляют собой сумму конфигураций, при расчёте по формуле (14) выражения (15) удобнее вычислить предварительно для всех разрешенных правилами отбора пар подконфигураций q, q' .

При вычислении силы осциллятора перехода между фиксированными уровнями $\tau J \rightarrow \tau' J'$, нужно провести суммирование по конечным состояниям, и усреднение по начальным

$$f(\tau J \rightarrow \tau' J') = \frac{1}{2J + 1} \sum_{M=-J}^J \sum_{M'=M-1}^{M+1} f_{ab} \quad (16)$$

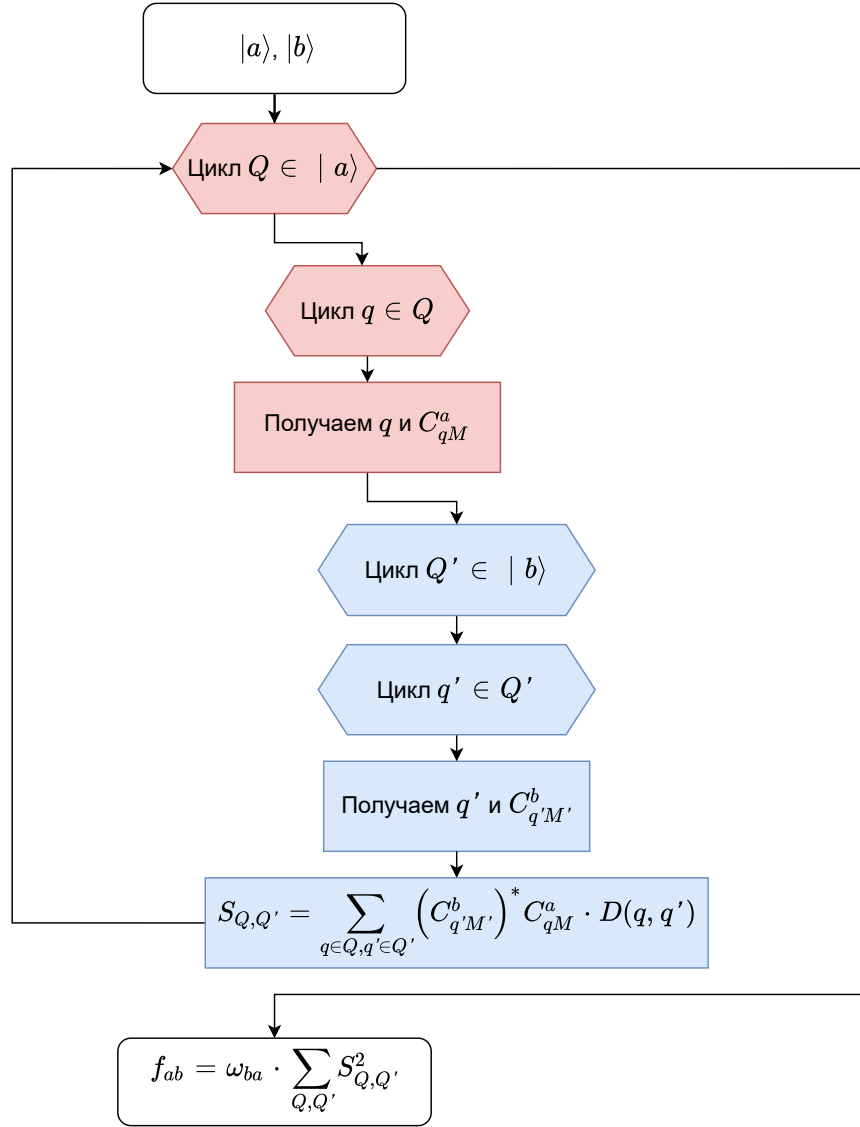


Рис. 1. Расчёт силы осциллятора для перехода между уровнями $\tau J M \rightarrow \tau' J' M'$

Схема вычисления силы осциллятора для перехода между уровнями $\tau J \rightarrow \tau' J'$ приведена на рис. 2.

Поиск собственных векторов и собственных чисел матрицы (2) проводится только для неотрицательных значений проекции суммарного момента $M \geq 0$, поэтому при суммировании в формуле (16) учитываем симметрию для конфигураций

$$C_{q'M'}^b = C_{q'',-M'}^b, \quad N_{nljm}^{q'} = N_{nlj,-m}^{q''}$$

что позволяет использовать

$$f(\tau J \rightarrow \tau' J') = \frac{1}{2J+1} \sum_{M \geq 0}^J (2 - \delta_{M0}) \sum_{M'=M-1}^{M+1} f_{ab}, \quad (17)$$

где через δ_{M0} обозначен символ Кронекера. Если $M = 0$ или $1/2$, в сумму (17)

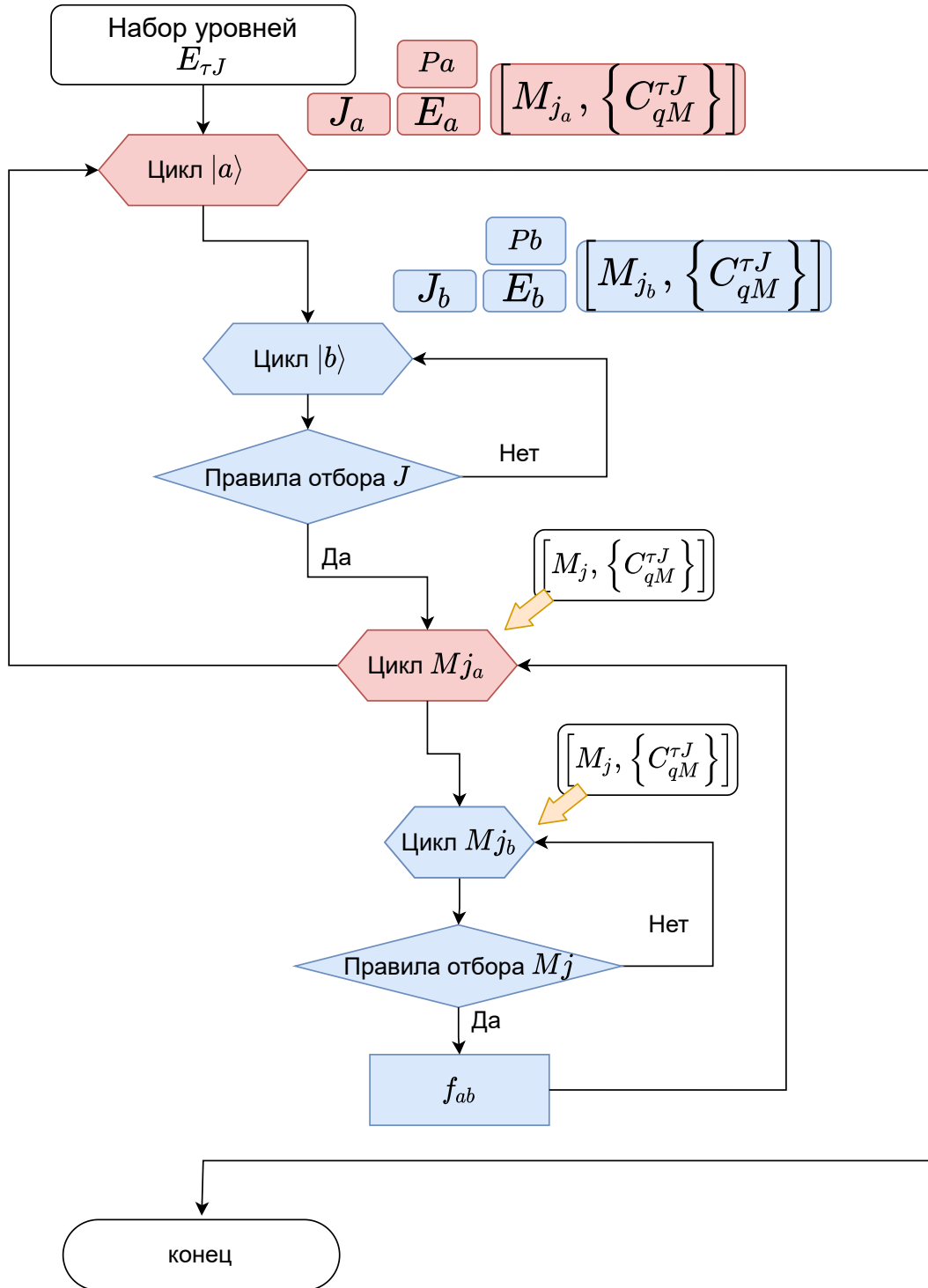


Рис. 2. Расчёт силы осциллятора для перехода между уровнями $\tau J \rightarrow \tau' J'$

входят члены с $M' < 0$ ($M' = -1$ или $-1/2$), и расчёт выполняется по формуле

$$f(\tau J \rightarrow \tau' J') = \frac{1}{2J+1} \sum_{M \geq 0}^J (2 - \delta_{M,0}) \times \\ \times \sum_{M'=M-1}^{M+1} \Big|_{M' \geq 0, M' \leq J'} (1 + \delta_{M,0} \delta_{M',1} + \delta_{M,1/2} \delta_{M',1/2}) f_{ab}. \quad (18)$$

Результаты расчётов

Водородоподобный литий

Верификация кода проводилась на водородоподобном литии. В этом случае исключается основная погрешность, связанная с вычислением внутриатомного потенциала и волновых функций. В потенциале $V(r) = -Z/r$ на основе нерелятивистских волновых функций проводился расчёт сдвига положения уровней за счёт спин-орбитального взаимодействия (4), интегралов Слэтера (10) и радиальной части сил осцилляторов (13). Было проведено сравнение положения уровней и характеристик основных спектральных линий с результатами, полученными по коду FAC [16], и экспериментальными данными библиотеки NIST [18]. Для оценки работы кода мы ограничились уровнями с главным квантовым числом $n \leq 3$.

В таб. 1 приведены положения уровней в ионе лития Li^{2+} , вычисленные по программам THERMOS и FAC, по сравнению с экспериментальными данными. Как можно видеть из таблицы, результаты, полученные по коду THERMOS, согласуются с другими данными с погрешностью менее 0,1%. Но стоит отдельно отметить, что результаты расчёта положения энергии уровней по программе FAC оказываются ближе к БД NIST, так как при расчёте используются релятивистские волновые функции.

Таблица 1

Положение уровней в ионе лития Li^{2+}

Уровень: терм	Энергия уровня, эВ		
	THERMOS	FAC	NIST
$1s: {}^2S_{1/2}$	0,0	0,0	0,0
$2s: {}^2S_{1/2}$	91,8371	91,8392	91,8396
$2p: {}^2P_{1/2}$	91,8347	91,8389	91,8393
$2p: {}^2P_{3/2}$	91,8383	91,8426	91,8430
$3s: {}^2S_{1/2}$	108,8440	108,8478	108,8482
$3p: {}^2P_{1/2}$	108,8432	108,8477	108,8481
$3p: {}^2P_{3/2}$	108,8444	108,8488	108,8492
$3d: {}^2D_{3/2}$	108,8438	108,8488	108,8492
$3d: {}^2D_{5/2}$	108,8441	108,8491	108,8495

Как правило, в базах данных, содержащих информацию о спектральных линиях,

содержится не сила осциллятора $f(\tau J \rightarrow \tau' J')$, а симметризованная величина

$$gf = (2J + 1)f(\tau J \rightarrow \tau' J') = (2J' + 1)f(\tau' J' \rightarrow \tau J),$$

получающаяся путем домножения силы осциллятора на статистический вес начального уровня. В таб. 2 приведены положения центров спектральных линий $\omega = E_{\tau' J'} - E_{\tau J}$ и значения gf в ионе лития Li^{2+} , вычисленные по программам THERMOS и FAC, по сравнению с БД NIST. Точность расчёта положения спектральных линий в этом случае определяется точностью расчёта положения уровней, между которыми происходит переход, а расщепление сил осцилляторов в мультиплетах определяется соотношением угловых коэффициентов. Как можно видеть из данных, представленных в таблице, результаты, полученные по коду THERMOS, согласуются с другими данными в пределах относительной погрешности менее 0,1%.

Для водородоподобного иона лития взаимодействие конфигураций отсутствует, поэтому из сравнительного анализа представленных результатов можно сделать вывод, что программа работает корректно.

Таблица 2

Положение ω и величина gf спектральных линий, соответствующих переходам $J \rightarrow J'$ в ионе лития Li^{2+}

Переход $J \rightarrow J'$	THERMOS		FAC		NIST	
	ω , эВ	gf	ω , эВ	gf	ω , эВ	gf
$1s: {}^2S_{1/2} - 2p: {}^2P_{1/2}$	91,8347	0,2774	91,8389	0,2774	91,8393	0,2775
$1s: {}^2S_{1/2} - 2p: {}^2P_{3/2}$	91,8383	0,5549	91,8426	0,5549	91,8430	0,5550
$1s: {}^2S_{1/2} - 3p: {}^2P_{1/2}$	108,8432	0,0527	108,8477	0,0527	108,8481	0,0527
$1s: {}^2S_{1/2} - 3p: {}^2P_{3/2}$	108,8444	0,1055	108,8492	0,1055	108,8492	0,1055
$2s: {}^2S_{1/2} - 3p: {}^2P_{1/2}$	17,0062	0,2899	17,0084	0,2900	17,0085	0,2900
$2s: {}^2S_{1/2} - 3p: {}^2P_{3/2}$	17,0072	0,5798	17,0095	0,5797	17,0096	0,5800
$2p: {}^2P_{1/2} - 3s: {}^2S_{1/2}$	17,0093	0,0272	17,0088	0,0272	17,0089	0,0272
$2p: {}^2P_{3/2} - 3s: {}^2S_{1/2}$	17,0056	0,0544	17,0052	0,0545	17,0052	0,0544
$2p: {}^2P_{1/2} - 3d: {}^2D_{3/2}$	17,0091	1,3918	17,0098	1,3915	17,0099	1,3919
$2p: {}^2P_{3/2} - 3d: {}^2D_{3/2}$	17,0054	0,2783	17,0062	0,2783	17,0062	0,2783
$2p: {}^2P_{3/2} - 3d: {}^2D_{5/2}$	17,0058	2,5048	17,0065	2,5052	17,0065	2,5050

Плазма железа

Расчётам непрозрачности плазмы железа уделяется достаточно много внимания в связи с астрофизическими исследованиями (например, [2, 3, 24]). Основные проблемы при вычислениях спектральных коэффициентов поглощения и излучения связаны с положением и силой спектральных линий при переходах внутри оболочки с главным квантовым числом $n = 3$. При моделировании экспериментальных спектров важен учёт не только спин-орбитального и электростатического взаимодействия, но и взаимодействия конфигураций.

Для сравнения был выбран ион Fe^{12+} . Расчёт волновых функций, радиальных матричных элементов и интегралов Слэтера проводился в центрально-симметричном самосогласованном потенциале среднего атома в приближении изолированного иона. При тестировании использовался набор из 9 конфигураций с полностью заполненными оболочками $1s^2 2s^2 2p^6$:

$$3s^2 3p^2, 3p^4, 3s^2 3d^2, 3p^2 3d^2, 3s 3p^3, 3s^2 3p 3d, 3s 3p^2 3d, 3s 3p 3d^2, 3p^3 3d.$$

В выбранном наборе первые 4 конфигурации (чётные) будут взаимодействовать друг с другом, в то время как в оставшихся (нечётных) в используемом приближении взаимодействие будет только между парами $3s 3p^3 \leftrightarrow 3s 3p 3d^2$ и $3s^2 3p 3d \leftrightarrow 3p^3 3d$. В примере не учтены возбуждения с оболочки с главным квантовым числом $n = 2$ и на оболочку с $n = 4$, что может оказывать влияние на результаты расчётов.

В таб. 3 приведены уровни энергии нескольких конфигураций иона Fe^{12+} , полученные в различных приближениях с учётом многоконфигурационного взаимодействия (THERMOS on и FAC), без учёта (THERMOS off) по сравнению с данными NIST. Энергии уровней, отсутствующие в БД NIST, пропущены. Как можно видеть из результатов, представленных в таблице, положения большей части уровней, полученные по программе, близки к данным расчётов по коду FAC и экспериментальным данным. Однако взаимодействие конфигураций оказывает существенное влияние на энергии изолированных термов, для которых наблюдается наиболее сильное отличие от данных NIST: 1S_0 в конфигурации $3s^2 3p^2$, 5S_0 и 1D_2 в конфигурации $3s 3p^3$, 1D_2 в конфигурации $3s^2 3p 3d$. Как можно видеть, отличие в положении перечисленных термов наблюдается и в результатах, полученных по программе FAC, что может быть объяснено неполнотой списка учитываемых конфигураций.

Таблица 3

Уровни энергии конфигураций иона Fe¹²⁺

Конфигурация	Терм	Положение уровня, эВ			
		THERMOS off	THERMOS on	FAC	NIST
$3s^23p^2$	3P_0	0,0	0,0	0,0	0,0
	3P_1	1,1761	1,2895	1,0867	1,1534
	3P_2	2,4177	2,5068	2,1276	2,3013
	1D_2	6,5135	6,5373	6,3248	5,9597
	1S_0	12,9213	9,7381	11,6501	11,3455
$3s3p^3$	5S_0	21,5434	21,9135	23,6662	26,6080
	3D_1	35,2200	35,4313	35,7906	35,6089
	3D_2	35,2770	35,5129	36,8684	35,6281
	3D_3	35,6105	35,9043	38,5602	35,9815
	3P_1	39,9998	39,3711	40,6733	40,8710
	3P_2	40,2510	39,6732	41,1859	40,9494
	1D_2	50,9035	51,1340	48,4625	44,9232
	3S_1	51,6368	51,7532	48,4838	51,5107
	1P_1	55,5919	55,0044	52,6336	54,3113
$3s^23p3d$	3P_2	58,3630	58,2472	60,0470	60,3007
	3P_1	58,3590	58,2617	61,9464	61,3650
	3P_0	59,5851	59,4166	59,7561	62,4062
	1D_2	53,9638	53,9125	56,2497	61,8520
	3D_1	59,7826	59,6355	59,3374	62,7982
	3D_2	59,9953	59,8632	58,5689	63,1390
	3D_3	59,8929	59,8929	58,6632	63,1298
	1F_3	69,4308	69,2376	67,4224	69,0431
	1P_1	68,5467	68,5399	69,2695	70,7565

На рис. 3 приведены спектральные коэффициенты поглощения в линиях для выбранного набора конфигураций в ионе железа Fe^{12+} . Вероятности уровней вычислялись при электронной температуре 50 эВ и плотности вещества $0,01 \text{ г/см}^3$ в приближении ЛТР. Синей кривой обозначены результаты расчётов на основе базы атомных данных, полученной по методике, описанной в препринте, с учётом многоконфигурационного взаимодействия. Зелёной кривой – на основе БД ФАС. Из рисунка видно, что структура переходов, полученных в разных приближениях для одного и того же набора конфигураций, близка в диапазоне энергий ниже 60 эВ, где основной вклад определяется спектральными линиями, соответствующими переходу $3s \rightarrow 3p$ (см. таб. 3). В диапазоне энергий фотонов выше 60 эВ, где преобладают спектральные линии, соответствующие переходу $3p \rightarrow 3d$, описанный в препринте подход приводит к более узкому распределению из-за использования средних значений интегралов Слэтера.

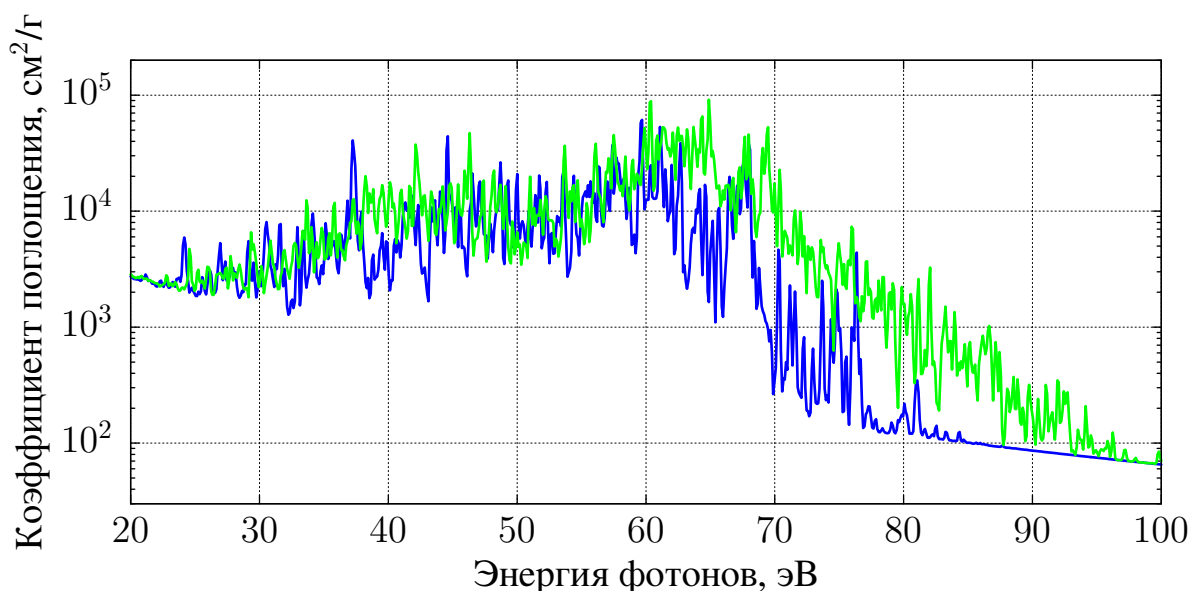


Рис. 3. Коэффициент поглощения в спектральных линиях для заданного набора конфигураций в ионе Fe^{12+} . Расчёт выполнен при температуре электронов 50 эВ и плотности вещества $0,01 \text{ г/см}^3$ по программе TH_SANA: синяя кривая – с базой атомных данных THERMOS on с учётом многоконфигурационного взаимодействия, зелёная – с базой атомных данных ФАС

Проведём сравнение с экспериментальным спектром поглощения плазмы железа из статьи [24]. Параметры плазмы, по оценкам авторов статьи: температура $T_e = 25 \text{ эВ}$ и плотность вещества $\rho = 0,008 \text{ г/см}^3$ ($\rho \times L = 20 \text{ мкг/см}^2$). Диапазон экспериментальных измерений – от 50 до 130 эВ, и включает в себя область спектральных линий, соответствующих переходам с оболочки с главным квантовым числом $n = 3$.

Средний заряд плазмы из оценок по модели МХФС [1] составляет $Z_0 \approx 7,4$. На рис. 4 приведены спектральные коэффициенты прохождения электромагнитного излучения через плазму железа ($\rho \times L = 20 \text{ мкг/см}^2$) с температурой электронов

$T_e = 25$ эВ и плотностью вещества $\rho = 0,008$ г/см³, полученные по модели МХФС (синяя кривая), в сравнении с экспериментальными данными [24] (красная кривая). Кроме того, цветными кривыми обозначены вклады от наиболее вероятных ионов ($P(\text{Fe}^{7+}) = 0,31$, $P(\text{Fe}^{8+}) = 0,44$, $P(\text{Fe}^{9+}) = 0,15$).

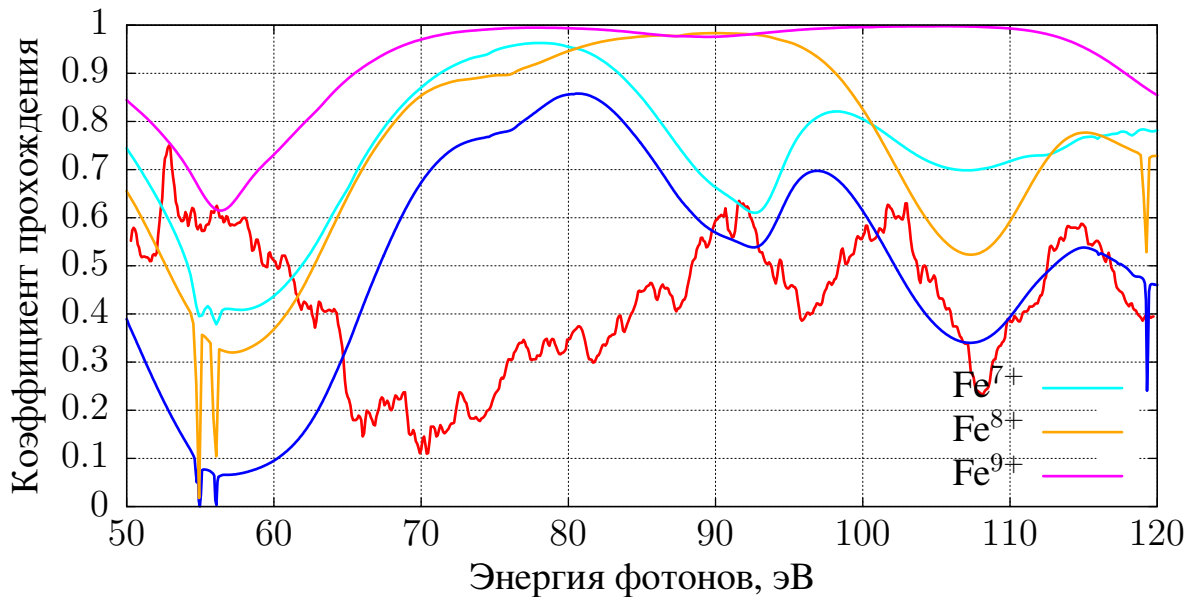


Рис. 4. Коэффициент прохождения электромагнитного излучения через плазму железа ($\rho \times L = 20$ мкг/см²) при температуре электронов $T_e = 25$ эВ и плотности вещества $\rho = 0,008$ г/см³. Красная кривая – данные эксперимента [24], синяя кривая – расчёт по модели МХФС. Цветными кривыми обозначены вклады наиболее вероятных ионов

Основной вклад в поглощение для диапазона энергий фотонов ниже 90 эВ определяется ионом Fe^{8+} . С учётом средних чисел заполнения уровней $3s^{1.8}3p^{4.1}3d^{2.0}$ при сравнении спектров использовался набор из 9 конфигураций с полностью заполненными оболочками $1s^22s^22p^6$:

$$3s^23p^6, 3s^23p^53d, 3s3p^53d, 3s^23p^43d^2, 3s3p^53d^2, 3p^63d^2, 3s^23p^33d^3, 3s3p^43d^3, 3p^53d^3.$$

Расчёт волновых функций, радиальных матричных элементов и интегралов Слэтера проводился в центрально-симметричном самосогласованном потенциале среднего атома, вычисленном в приближении МХФС при температуре электронов $T_e = 25$ эВ и плотности вещества $\rho = 0,008$ г/см³. На рис. 5 приведены спектральные коэффициенты прохождения электромагнитного излучения через плазму железа ($\rho \times L = 20$ мкг/см²) с температурой электронов $T_e = 25$ эВ и плотностью вещества $\rho = 0,008$ г/см³, полученные по описанной в препринте модели (синяя кривая), в сравнении с экспериментальными данными [24] (красная кривая). Кроме того, оранжевой кривой обозначен вклад иона Fe^{8+} , рассчитанный по модели МХФС. Из представленных результатов видно, что в диапазоне энергий фотонов от 60 до 80 эВ имеется хорошее согласие расчётов спектров пропускания фотонов, полученных по программе THERMOS с учётом взаимодействия конфигураций, с данными эксперимента и расчётами по БД FAC (зелёная кривая). Это позволяет сделать

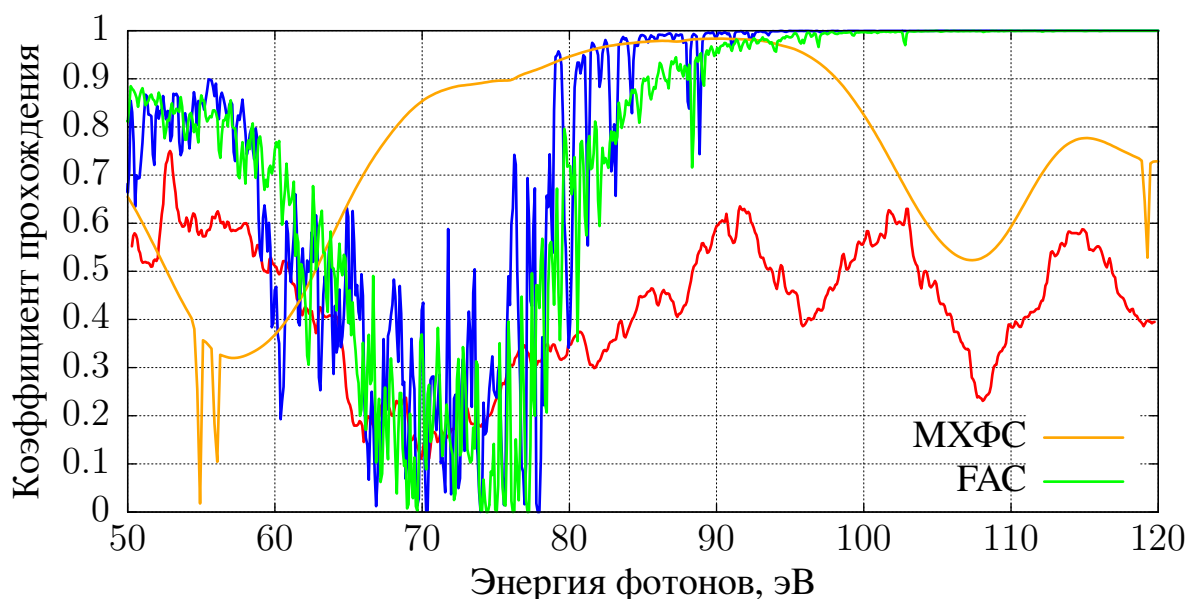


Рис. 5. Коэффициент прохождения электромагнитного излучения через плазму железа ($\rho \times L = 20$ мкг/см²) при температуре электронов $T_e = 25$ эВ и плотности вещества $\rho = 0,008$ г/см³. Красная кривая – данные эксперимента [24], синей кривой обозначен вклад иона Fe⁸⁺, рассчитанный по модели, изложенной в препринте. Оранжевая и зелёная кривые – вклад иона Fe⁸⁺, рассчитанный по модели МХФС, и коду FAS, соответственно

вывод, что при рассмотрении достаточного числа конфигураций и взаимодействия между ними предложенная методика позволит усовершенствовать расчёт положения и сил спектральных линий с точностью, сравнимой с результатами кода FAS в более широком диапазоне энергий фотонов, и лучше описывать экспериментальные данные.

Заключение

Разработана и протестирована методика расчёта положения спектральных линий и сил осцилляторов с учётом межконфигурационного взаимодействия в приближении промежуточной связи. Результаты сравнения с экспериментальными данными и данными, полученными по программе FAS, показали хорошую точность. Разработанный модуль может быть использован для уточнения характеристик спектральных линий как при вычислении баз атомных данных, так и в модели МХФС комплекса программ THERMOS.

Библиографический список

1. Никифоров А.Ф., Уваров В.Б., Новиков В.Г. Квантово-статистические модели высокотемпературной плазмы и методы расчёта росселандовых пробегов и

уравнений состояния. М.: Физматлит, 2000. С. 400. ISBN: 978-5-9221-0052-6.

2. Winhart G., Eidmann K., Iglesias C. A., Bar-Shalom A. Measurements of extreme UV opacities in hot dense Al, Fe, and Ho // *Physical Review E*. 1996. Vol. 53, no. 2. P. R1332–R1335.
3. Winhart G., Eidmann K., Iglesias C.A. et al. XUV opacity measurements and comparison with models // *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*. 1995. Vol. 54, no. 1-2. P. 437–446.
4. Eidmann K., Bar-Shalom A., Saemann A., Winhart G. Measurement of the extreme UV opacity of a hot dense gold plasma // *Europhysics Letters (EPL)*. 1998. Vol. 44, no. 4. P. 459–464.
5. Turck-Chièze S., Loisel G., Gilles D. et al. Theoretical and experimental activities on opacities for a good interpretation of seismic stellar probes // *Journal of Physics: Conference Series*. 2011. Vol. 271. P. 012035.
6. Hakel P., Sherrill M.E., Mazevet S. et al. The new Los Alamos opacity code ATOMIC // *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*. 2006. Vol. 99, no. 1-3. P. 265–271.
7. Fontes C.J., Zhang H.L., Abdallah Jr. J. et al. The Los Alamos suite of relativistic atomic physics codes // *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*. 2015. Vol. 48, no. 14. P. 144014.
8. Colgan J., Kilcrease D.P., Magee N.H. et al. A NEW GENERATION OF LOS ALAMOS OPACITY TABLES // *The Astrophysical Journal*. 2016. Vol. 817, no. 2. P. 116.
9. Scott H.A. CRETIN—a radiative transfer capability for laboratory plasmas // *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*. 2001. Vol. 71, no. 2-6. P. 689–701.
10. Hansen S.B., Bauche J., Bauche-Arnoult C. Superconfiguration widths and their effects on atomic models // *High Energy Density Physics*. 2011. Vol. 7, no. 1. P. 27–37.
11. Gilleron F., Piron R. The fast non-LTE code DEDALE // *High Energy Density Physics*. 2015. Vol. 17. P. 219–230.
12. Chung H.-K., Chen M.H., Morgan W.L. et al. FLYCHK: Generalized population kinetics and spectral model for rapid spectroscopic analysis for all elements // *High Energy Density Physics*. 2005. Vol. 1, no. 1. P. 3–12.

13. Novikov V.G. Average Atom Approximation in Non-LTE Level Kinetics // Modern Methods in Collisional-Radiative Modeling of Plasmas / Ed. by Y. Ralchenko. Switzerland: Springer International Publishing, 2016. P. 105–126.
14. Vichev I.Yu., Solomyannaya A.D., Grushin A.S., Kim D.A. On certain aspects of the THERMOS toolkit for modeling experiments // High Energy Density Physics. 2019. P. 100713. 1903.04914.
15. Cowan R.D. The theory of atomic structure and spectra / Ed. by R. Cowan. 1981.
16. Gu M.F. The flexible atomic code // Canadian Journal of Physics. 2008. Vol. 86, no. 5. P. 675–689.
17. Bar-Shalom A., Klapisch M., Oreg J. HULLAC, an integrated computer package for atomic processes in plasmas // Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer. 2001. Vol. 71, no. 2-6. P. 169–188.
18. Ralchenko Yu., Kramida A.E., Reader J., Team NIST ASD. NIST Atomic Spectra Database (version 4.0). [Online]. 2011. URL: <http://physics.nist.gov/asd>.
19. Skobelev Yu.I., Loboda P.A., Faenov A.Ya. et al. Spectr-W 3 online database on atomic properties of multicharged ions // J. Phys.: Conf. Ser. Vol. 653.
20. Новиков В.Г., Соломянная А.Д. Расчет спектров многозарядных ионов по модели Хартри-Фока-Слэтера в приближении связи промежуточного типа. 2001. URL: <https://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2001-65>.
21. Собельман И.И. Введение в теорию атомных спектров. Мир, 1963.
22. Никитин А.А., Рудзикас З.Б. Основы теории спектров атомов и ионов. ФМЛ, 1983.
23. Кондон Е., Шортли Г. Теория атомных спектров. ИЛ, 1949.
24. Da Silva L.B., MacGowan B.J., Kania D.R. et al. Absorption measurements demonstrating the importance of $dn=0$ transitions in the opacity of iron // Physical Review Letters. 1992. Vol. 69, no. 3. P. 438–441.

Оглавление

Введение	3
Энергетический спектр	4
Силы осцилляторов	8
Результаты расчётов	12
Заключение	18
Библиографический список	18