

РАСЧЕТ ВОЗБУЖДЕННЫХ СОСТОЯНИЙ АЗОТОПОДОБНЫХ ИОНОВ

О. Б. Надыкто¹, Б. А. Надыкто², А. Б. Надыкто¹¹МГТУ «Станкин», 127055, г. Москва, Вадковский пер., д. 1
²ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», 607188, г. Саров Нижегородской обл.

Были рассчитаны электронные энергии одноэлектронных возбужденных состояний $1s^2 2s^2 2p^2 ns^4 P$, $1s^2 2s^2 2p^2 ns^2 P$, $1s^2 2s^2 2p^2 np^4 S$, $1s^2 2s^2 2p^2 np^2 S$, $1s^2 2s^2 2p^2 np^4 P$, $1s^2 2s^2 2p^2 np^2 P$, $1s^2 2s^2 2p^2 np^4 D$, $1s^2 2s^2 2p^2 np^2 D$, $1s^2 2s^2 2p^2 nd^4 P$, $1s^2 2s^2 2p^2 nd^2 P$, $1s^2 2s^2 2p^2 nd^4 D$, $1s^2 2s^2 2p^2 nd^2 D$, $1s^2 2s^2 2p^2 nd^4 F$, $1s^2 2s^2 2p^2 nd^2 F$ азотоподобных ионов с $n = 3 \div 12$ и $Z = 7 \div 50$. Для всех вышеупомянутых электронных конфигураций определены уровни тонкой структуры для состояний с различным полным моментом импульса J . Сравнение теоретических результатов с имеющимися экспериментальными данными показывает, что теория и измерения хорошо согласуются. В частности, относительная точность 10^{-4} была достигнута для электронной энергии N -подобного при $Z > 10$, в то время как типичное отклонение рассчитанных уровней тонкой структуры от экспериментальных данных составляет порядка 10^{-2} .

Ключевые слова: уровни энергии, азотоподобные ионы, возбужденные состояния, тонкое расщепление, многозарядные ионы.

Введение

Знание уровней энергии многозарядных ионов с большим зарядом ядра Z критически важно для решения множества возникающих проблем физики плазмы и астрофизики. Получение точных уровней энергии – непростая задача, поскольку требует одновременного точного учета релятивистских и радиационных эффектов. В литературе существуют соответствующие квантово-механические исследования, касающиеся уровней энергии атомов и других связанных систем, например [1–11]. Исследования посвящены как общетеоретическому подходу [1–5], так и конкретным методам расчета уровней энергии многоэлектронных ионов с изменяющимся Z [6–11]. Большая часть сложности в получении точных уровней энергии связана с тем, что уравнение Шредингера является нерелятивистским, и, таким образом, теоретическое описание ионов с $Z \gg 1$ требует получения релятивистских поправок. Многие считают подход Дирака [3] более подходящим для спектроскопических расчетов. В обоих сценариях необходим учет радиационных эффектов.

Обычно используемые справочники [12, 13] содержат компиляцию экспериментальных данных об уровнях энергии многозарядных ионов с разными Z . Из-за сложности спектроскопических измерений количество ионов, для которых имеются экспериментальные данные, весьма невелико. С другой стороны, прямое квантово-механическое моделирование требует очень больших, а иногда и непомерно высоких вычислительных затрат и сталкивается со значительными трудностями, связанными с использованием ряда приближений. Модифицированная модель Бора [14] позволяет получить большой объем данных об энергиях различных конфигураций многозарядных ионов с изменяющимся Z при почти нулевых вычислительных затратах. В данной работе модифицированная модель Бора [14] используется для получения уровней энергии многозарядных N -подобных ионов. В частности, энергии одноэлектронных возбужденных состояний $1s^2 2s^2 2p^2 ns^4 P$, $1s^2 2s^2 2p^2 ns^2 P$, $1s^2 2s^2 2p^2 np^4 S$, $1s^2 2s^2 2p^2 np^2 S$, $1s^2 2s^2 2p^2 np^4 P$, $1s^2 2s^2 2p^2 np^2 P$, $1s^2 2s^2 2p^2 np^4 D$, $1s^2 2s^2 2p^2 np^2 D$, $1s^2 2s^2 2p^2 nd^4 P$, $1s^2 2s^2 2p^2 nd^2 P$, $1s^2 2s^2 2p^2 nd^4 D$, $1s^2 2s^2 2p^2 nd^2 D$, $1s^2 2s^2 2p^2 nd^4 F$, $1s^2 2s^2 2p^2 nd^2 F$ азо-

топодобных ионов с $n = 3 \div 12$ и $Z = 7 \div 50$ были рассчитаны и сопоставлены с имеющимися экспериментальными данными.

Параметры одноэлектронных возбужденных состояний N -подобных ионов

Модель и метод

Как и энергия основного состояния бороподобных и углеродоподобных ионов [15–17], энергия основного состояния азотоподобных ионов $1s^2 2s^2 2p^3$ описывается в предположении образования гибридного состояния всех пяти внешних электронов $2s^2 2p^3$ с одинаковым параметром волновой функции. Потенциал взаимодействия $2s$ -электронов и $2p$ -электронов с внутренними $1s$ -электронами описывается так же, как в литиеподобных ионах. Параметр гибридизированной волновой функции для основного состояния определяется путем минимизации суммы электронных энергий внешних электронов. Таким образом, мы получаем точные энергии основного состояния ионов при изменении Z . Эмпирическим параметром в этой модели является коэффициент экранирования заряда ядра из-за взаимодействия электронов в конфигурации $2s^2 2p^3$. Возбужденные состояния $1s^2 2s 2p^3$, $1s^2 2p^4$ также рассматриваются как гибридизированные состояния с одинаковым параметром волновой функции внешних электронов.

Результаты и обсуждение

После достижения точного теоретического описания гибридизированных энергетических состояний углеродоподобных ионов мы начинаем моделирование множества одноэлектронных возбуждений N -подобных ионов, где внешний электрон находится в состоянии с $n > 2$. Ионный остов $1s^2 2s^2 2p^2$ дает множество серий одноэлектронных возбужденных состояний N -подобных ионов $1s^2 2s^2 2p^2 nl$ с $n > 2$ и изменяющимися $l = 0, 1, 2, \dots, n-1$. Различные наборы подобных серий $1s^2 2s 2p^3 nl$, $1s^2 2p^4 nl$ реализуются в случае, когда углеродоподобное ядро находится в возбужденных состояниях $1s^2 2s p^3$ или $1s^2 2p^4$. Параметры для расчета энергии одноэлектронных возбужденных состояний азотоподобных ионов приведены в табл. 1.

State	SIGM3	A_{13}	B_{13}	A_{23}	B_{23}
Third shell					
$1s^2 2s^2 2p^2 ({}^3P) ns \ ^4P$	0.0	0.8045	0.15	0.359	0.135
$1s^2 2s^2 2p^2 ({}^3P) ns \ ^2P$	0.0	0.8045	0.15	0.333	0.118
$1s^2 2s^2 2p^2 ({}^3P) np \ ^4P$	0.0	0.2455	-0.084	0.288	0.07
$1s^2 2s^2 2p^2 ({}^3P) np \ ^2P$	0.0	0.2455	-0.084	0.248	0.05
$1s^2 2s^2 2p^2 ({}^3P) np \ ^4D$	0.0	0.2455	-0.084	0.300	0.075
$1s^2 2s^2 2p^2 ({}^3P) np \ ^2D$	0.0	0.2455	-0.084	0.27	0.055
$1s^2 2s^2 2p^2 ({}^3P) nd \ ^4S$	0.0	0.2455	-0.084	0.252	0.075
$1s^2 2s^2 2p^2 ({}^3P) nd \ ^2S$	0.0	0.2455	-0.084	0.322	0.081
$1s^2 2s^2 2p^2 ({}^3P) nd \ ^4P$	0.0	0.0105	-0.003	0.087	-0.055
$1s^2 2s^2 2p^2 ({}^3P) nd \ ^2P$	0.0	0.0105	-0.003	0.130	-0.105
$1s^2 2s^2 2p^2 ({}^3P) nd \ ^4F$	0.0	0.0105	-0.003	0.130	-0.075
$1s^2 2s^2 2p^2 ({}^3P) nd \ ^2F$	0.0	0.0105	-0.003	0.093	-0.065
$1s^2 2s^2 2p^2 ({}^3P) nd \ ^4D$	0.0	0.0105	-0.003	0.088	-0.045
$1s^2 2s^2 2p^2 ({}^3P) nd \ ^2D$	0.0	0.0105	-0.003	0.033	-0.045
$1s^2 2s 2p^3 ({}^5S) 3s \ ^4S$	0.0	0.8045	0.150	0.265	0.218
$1s^2 2s 2p^3 ({}^5S) 3s \ ^6S$	0.0	0.8045	0.150	0.35	0.130
$1s^2 2s 2p^3 ({}^5S) 3p \ ^4P$	0.0	0.2455	-0.084	0.22	0.103
$1s^2 2s 2p^3 ({}^5S) 3p \ ^6P$	0.0	0.2455	-0.084	0.272	0.103
$1s^2 2s 2p^3 ({}^5S) 3d \ ^4D$	0.0	0.0105	-0.003	0.004	-0.022
$1s^2 2s 2p^3 ({}^5S) 3d \ ^6D$	0.0	0.0105	-0.003	0.096	-0.035
$1s^2 2s 2p^3 ({}^5S) 3s \ ^6S$	0.0	0.8045	0.150	0.35	0.130
$1s^2 2s 2p^3 ({}^5S) 3p \ ^4P$	0.0	0.2455	-0.084	0.22	0.103
$1s^2 2s 2p^3 ({}^5S) 3p \ ^6P$	0.0	0.2455	-0.084	0.272	0.103
$1s^2 2s 2p^3 ({}^5S) 3d \ ^4D$	0.0	0.0105	-0.003	0.004	-0.022

Энергии $1s^2 2s^2 2p^2 ({}^3P) nl \ ^{4,2}L$ состояний азотоподобных ионов. Константы взаимодействия $2s$ и $2p$ электронов с $1s$ электронами взяты в расчете такими же, как в состояниях литиеподобных ионов $1s^2 2s \ ^2S$ и $1s^2 2p \ ^2P$ соответственно (или $1s^2 2s^2 2p^2 \ ^3P$ состоянии углеродоподобных ионов). Электрон в состояниях ns взаимодействует с $1s^2$ оболочкой так же, как в литиеподобных ионах. Для ns состояний подбираются параметры взаимодействия электронов второй и третьей оболочек. Расчетные значения энергии $1s^2 2s^2 2p^2 ({}^3P) 3s \ ^4P_{5/2} - 1s^2 2s^2 2p^3 \ ^4S_{3/2}$ и тонкого расщепления $1s^2 2s^2 2p^2 3s \ ^4P_{5/2} - 1s^2 2s^2 2p^2 3s \ ^4P_{1/2}$ для ионов с $Z = 7 \div 20$ приведены в табл. 2. В этой же таблице приведено сравнение рассчитанных значений с экспериментальными данными, взятыми из справочников [12, 13]. Расчетные значения энергии и тонкого расщепления достаточно хорошо соответствуют эксперименту. Интервал тонкого расщепления $1s^2 2s^2 2p^2 3s \ ^4P_{5/2} - 1s^2 2s^2 2p^2 3s \ ^4P_{1/2}$ равен интервалу $1s^2 2s^2 2p^2 \ ^3P_2$

$-1s^22s^22p^2\ ^3P_0$, рассчитанному с учетом влияния электрона третьей оболочки на состояние электронов второй оболочки. С увеличением главного квантового числа n электрона третьей оболочки увеличивается интервал $1s^22s^22p^2ns\ ^4P_{5/2} - 1s^22s^22p^2ns\ ^4P_{1/2}$, приближаясь к значению интервала $1s^22s^22p^2\ ^3P_2 - 1s^22s^22p^2\ ^3P_0$ для углеродоподобных ионов. Интервал $1s^22s^22p^2ns\ ^4P_{5/2} - 1s^22s^22p^2ns\ ^4P_{1/2}$ для $Z = 18$, по-видимому, измерен с большой ошибкой.

Сравнение с экспериментом [12, 13] расчетных значений энергии $1s^22s^22p^2(^3P)3p\ ^4D_{7/2}$, $1s^22s^22p^2(^3P)3p\ ^4P_{5/2}$ состояний азотоподобных ионов и тонкого расщепления $1s^22s^22p^23p\ ^4D_{7/2} -$

$1s^22s^22p^23p\ ^4D_{1/2}$ и $1s^22s^22p^23p\ ^4P_{5/2} - 1s^22s^22p^23p\ ^4P_{1/2}$ дано в табл. 3 и 4. Интервал тонкого расщепления $1s^22s^22p^23p\ ^4D_{7/2} - 1s^22s^22p^23p\ ^4D_{1/2}$ равен интервалу $1s^22s^22p^2\ ^3P_2 - 1s^22s^22p^2\ ^3P_0$, рассчитанному с учетом влияния электрона третьей оболочки на состояние электронов второй оболочки. Небольшое отличие его от интервала $1s^22s^22p^23s\ ^4P_{5/2} - 1s^22s^22p^23s\ ^4P_{1/2}$ объясняется различным влиянием $3p$ и $3s$ электронов на состояние $2s^22p^2$ электронов. Интервал тонкого расщепления $1s^22s^22p^23p\ ^4P_{5/2} - 1s^22s^22p^23p\ ^4P_{1/2}$ равен половине интервала $1s^22s^22p^2\ ^3P_2 - 1s^22s^22p^2\ ^3P_0$, рассчитанного с учетом влияния электрона третьей оболочки на состояние электронов второй оболочки.

Таблица 2

Сравнение с экспериментом [12, 13] расчетных значений энергии (в эВ) $1s^22s^22p^2(^3P)3s\ ^4P_{5/2}$ состояний азотоподобных ионов и тонкого расщепления $1s^22s^22p^23s\ ^4P_{5/2} - 1s^22s^22p^23s\ ^4P_{1/2}$

Z	$1s^22s^22p^2(^3P)3s\ ^4P_{5/2} - 1s^22s^22p^23s\ ^4S_{3/2}$			$1s^22s^22p^23s\ ^4P_{5/2} - 1s^22s^22p^23s\ ^4P_{1/2}$		
	$E_{\text{расч}}$	$E_{\text{эксп}}$	$E_{\text{расч}} - E_{\text{эксп}}$	$E_{\text{расч}}$	$E_{\text{эксп}}$	$E_{\text{расч}} - E_{\text{эксп}}$
7	10.2754	10.3362	-0.06073	0.01335	0.00998	0.00337
8	22.9071	22.9992	-0.09210	0.03171	0.03271	-0.00101
9	39.3130	39.3328	-0.01984	0.06472	0.06549	-0.00077
10	59.4422	59.4696	-0.02738	0.11870	0.11779	0.00091
11	83.4252	83.4119	0.01329	0.20102	0.20098	0.00004
12	111.176	111.146	0.03021	0.32021	0.30996	0.01025
13	142.709	142.697	0.01227	0.48589	0.47362	0.01226
14	178.048	178.058	-0.01004	0.70881	0.69556	0.01326
15	217.199	217.203	-0.00494	1.00091	0.97328	0.02762
16	260.143	260.178	-0.03502	1.37523	1.36384	0.01139
17	306.913	306.955	-0.04234	1.84603		
18	357.497	357.611	-0.11390	2.42873	2.14494	0.28379
19	411.889			3.13996		
20	470.116			3.99758		

Таблица 3

Сравнение с экспериментом [12, 13] расчетных значений энергии (в эВ) $1s^22s^22p^2(^3P)3p\ ^4D_{7/2}$ состояний азотоподобных ионов и тонкого расщепления $1s^22s^22p^23p\ ^4D_{7/2} - 1s^22s^22p^23p\ ^4D_{1/2}$

Z	$1s^22s^22p^2(^3P)3p\ ^4D_{7/2} - 1s^22s^22p^23s\ ^4S_{3/2}$			$1s^22s^22p^23p\ ^4D_{7/2} - 1s^22s^22p^23p\ ^4D_{1/2}$		
	$E_{\text{расч}}$	$E_{\text{эксп}}$	$E_{\text{расч}} - E_{\text{эксп}}$	$E_{\text{расч}}$	$E_{\text{эксп}}$	$E_{\text{расч}} - E_{\text{эксп}}$
7	11.7395	11.7639	-0.02447	0.01374	0.01375	-0.00002
8	25.6715	25.6652	0.00628	0.03270	0.03369	-0.00099
9	43.3078	43.3036	0.004197	0.06657	0.06987	-0.00329
10	64.6054			0.12165		
11	89.7067			0.20534		
12	118.533			0.32618		
13	151.100			0.49382		
14	187.432			0.71906		
15	227.531			1.01383		
16	271.376			1.39123		
17	318.993			1.86552		
18	370.363			2.45217		
19	425.474			3.16782		

Таблица 4

Сравнение с экспериментом [12, 13] расчетных значений энергии (в эВ) $1s^2 2s^2 2p^2 ({}^3P) 3p^4 P_{5/2}$ состояний азотоподобных ионов и тонкого расщепления $1s^2 2s^2 2p^2 3p^4 P_{5/2} - 1s^2 2s^2 2p^2 3p^4 P_{1/2}$

Z	$1s^2 2s^2 2p^2 ({}^3P) 3p^4 P_{5/2} - 1s^2 2s^2 2p^3 {}^4S_{3/2}$			$1s^2 2s^2 2p^2 3p^4 P_{5/2} - 1s^2 2s^2 2p^2 3p^4 P_{1/2}$		
	$E_{\text{расч}}$	$E_{\text{эксп}}$	$E_{\text{расч}} - E_{\text{эксп}}$	$E_{\text{расч}}$	$E_{\text{эксп}}$	$E_{\text{расч}} - E_{\text{эксп}}$
7	11.8377	11.8447	-0.00697	0.00689	0.00703	-0.00014
8	25.8834	25.8490	0.03446	0.01641	0.01712	-0.00071
9	43.6356	43.5829	0.05272	0.03340	0.03509	-0.00168
10	65.0483	65.0943	-0.04608	0.06102	0.07761	-0.01659
11	90.2631			0.10298		
12	119.201			0.16353		
13	151.880			0.24753		
14	188.321			0.36035		
15	228.531			0.50798		
16	272.485			0.69696		
17	320.210			0.93444		
18	371.688			1.22814		
19	426.908			1.58640		
20	485.886			2.01816		

Сравнение с экспериментом [12, 13] расчетных значений энергии $1s^2 2s^2 2p^2 ({}^3P) 3p^2 S_{1/2}$ и $1s^2 2s^2 2p^2 ({}^3P) 3p^4 S_{3/2}$ состояний азотоподобных ионов приведено в табл. 5.

Сравнение с экспериментом [12, 13] расчетных значений энергии $1s^2 2s^2 2p^2 ({}^3P) 3p^2 D_{5/2}$ состояний азотоподобных ионов и тонкого расщепления $1s^2 2s^2 2p^2 3p^2 D_{5/2} - 1s^2 2s^2 2p^2 3p^2 D_{3/2}$ приведено в табл. 6. Интервал тонкого расщепления $1s^2 2s^2 2p^2 3p^2 D_{5/2} - 1s^2 2s^2 2p^2 3p^2 D_{3/2}$ равен 0.67 (2/3) интервала $1s^2 2s^2 2p^2 {}^3P_2 - 1s^2 2s^2 2p^2 {}^3P_0$, рассчитанного с учетом влияния электрона третьей оболочки на состояние электронов второй оболочки.

Сравнение с экспериментом [12-13] расчетных значений энергии $1s^2 2s^2 2p^2 ({}^3P) 3p^2 P_{3/2}$ состояний азотоподобных ионов и тонкого расщепления $1s^2 2s^2 2p^2 3p^2 P_{3/2} - 1s^2 2s^2 2p^2 3p^2 P_{1/2}$ приведено в табл. 7. Интервал тонкого расщепления $1s^2 2s^2 2p^2 3p^2 P_{3/2} - 1s^2 2s^2 2p^2 3p^2 P_{1/2}$ равен 0.33 (1/3) интервала $1s^2 2s^2 2p^2 {}^3P_2 - 1s^2 2s^2 2p^2 {}^3P_0$, рассчитанного с учетом влияния электрона третьей оболочки на состояние электронов второй оболочки.

Рассчитаны энергии $1s^2 2s^2 2p^2 ({}^3P) 3d^4 {}^2F$, $1s^2 2s^2 2p^2 ({}^3P) 3d^4 {}^2D$, $1s^2 2s^2 2p^2 ({}^3P) 3d^4 {}^4P$ состояний азотоподобных ионов. Константы взаимодействия

$2s$ и $2p$ электронов с $1s$ электронами взяты в расчете такими же, как в состояниях литиеподобных ионов $1s^2 2s^2 S$ и $1s^2 2p^2 P$ соответственно (или $1s^2 2s^2 2p^2 {}^3P$ состоянии углеродоподобных ионов). Электрон в состояниях nd взаимодействует с $1s^2$ оболочкой так же, как в литиеподобных ионах. Для nd состояний подбираются параметры взаимодействия электронов второй и третьей оболочек. Расчетные значения энергии $1s^2 2s^2 2p^2 ({}^3P) 3d^4 F_{9/2} - 1s^2 2s^2 2p^3 {}^4S_{3/2}$ и тонкого расщепления $1s^2 2s^2 2p^2 3d^4 F_{9/2} - 1s^2 2s^2 2p^2 3d^4 F_{3/2}$ для ионов с $Z = 7 \div 20$ приведены в табл. 8. В этой же таблице приведено сравнение рассчитанных значений с экспериментальными данными, взятыми из справочников [12, 13]. Расчетные значения достаточно хорошо соответствуют эксперименту. Интервал тонкого расщепления $1s^2 2s^2 2p^2 3d^4 F_{9/2} - 1s^2 2s^2 2p^2 3d^4 F_{3/2}$ равен интервалу $1s^2 2s^2 2p^2 {}^3P_2 - 1s^2 2s^2 2p^2 {}^3P_0$, рассчитанному с учетом влияния электрона третьей оболочки на состояние электронов второй оболочки. Небольшое отличие его от интервала $1s^2 2s^2 2p^2 3s^4 P_{5/2} - 1s^2 2s^2 2p^2 3s^4 P_{1/2}$ объясняется различным влиянием $3d$ и $3s$ электронов на состояние $2s^2 2p^2$ электронов.

Таблица 5

Сравнение с экспериментом [12, 13] расчетных значений энергии (в эВ) $1s^2 2s^2 2p^2 ({}^3P) 3p^2 S_{1/2}$ и $1s^2 2s^2 2p^2 ({}^3P) 3p^4 S_{3/2}$ состояний азотоподобных ионов

Z	$1s^2 2s^2 2p^2 3p^2 S_{1/2} - 1s^2 2s^2 2p^3 {}^4S_{3/2}$			$1s^2 2s^2 2p^2 3p^4 S_{3/2} - 1s^2 2s^2 2p^3 {}^4S_{3/2}$		
	$E_{\text{расч}}$	$E_{\text{эксп}}$	$E_{\text{расч}} - E_{\text{эксп}}$	$E_{\text{расч}}$	$E_{\text{эксп}}$	$E_{\text{расч}} - E_{\text{эксп}}$
7	11.5665	11.6027	-0.03619	11.9957	11.9958	-0.00011
8	25.2895	25.2858	0.00371	26.3050	26.3049	0.00001
9	42.7118	42.7053	0.00658	44.3600	44.3219	0.03817
10	63.7976			66.0871	66.0814	0.00572
11	88.6902			91.6207		
12	117.310			120.879		
13	149.674			153.879		
14	185.803			190.641		
15	225.701			231.171		
16	269.346			275.446		
17	316.763			323.491		
18	367.934			375.290		
19	422.847			430.830		
20	481.519			490.129		

Таблица 6

Сравнение с экспериментом [12, 13] расчетных значений энергии (в эВ) $1s^2 2s^2 2p^2 ({}^3P) 3p^2 D_{5/2}$ состояний азотоподобных ионов и тонкого расщепления $1s^2 2s^2 2p^2 3p^2 D_{5/2} - 1s^2 2s^2 2p^2 3p^2 D_{3/2}$

Z	$1s^2 2s^2 2p^2 ({}^3P) 3p^2 D_{5/2} - 1s^2 2s^2 2p^3 {}^4S_{3/2}$			$1s^2 2s^2 2p^2 3p^2 D_{5/2} - 1s^2 2s^2 2p^2 3p^2 D_{3/2}$		
	$E_{\text{расч}}$	$E_{\text{эксп}}$	$E_{\text{расч}} - E_{\text{эксп}}$	$E_{\text{расч}}$	$E_{\text{эксп}}$	$E_{\text{расч}} - E_{\text{эксп}}$
7	12.0203	12.0097	0.01063	0.00920	0.00947	-0.00026
8	26.2501	26.2492	0.00088	0.02194	0.01124	0.01070
9	44.1840	44.1846	-0.00063	0.04467	0.04840	-0.00373
10	65.7740			0.08159		
11	91.1626			0.13767		
12	120.271			0.21858		
13	153.119			0.33078		
14	189.727			0.48147		
15	230.102			0.67862		
16	274.221			0.93096		
17	322.110			1.24802		
18	373.752			1.64011		
19	429.134			2.11834		
20	488.275			2.69464		

Таблица 7

Сравнение с экспериментом [12, 13] расчетных значений энергии (в эВ) $1s^2 2s^2 2p^2 ({}^3P) 3p^2 P_{3/2}$ состояний азотоподобных ионов и тонкого расщепления $1s^2 2s^2 2p^2 3p^2 P_{3/2} - 1s^2 2s^2 2p^2 3p^2 P_{1/2}$

Z	$1s^2 2s^2 2p^2 ({}^3P) 3p^2 P_{3/2} - 1s^2 2s^2 2p^3 {}^4S_{3/2}$			$1s^2 2s^2 2p^2 3p^2 P_{3/2} - 1s^2 2s^2 2p^2 3p^2 P_{1/2}$		
	$E_{\text{расч}}$	$E_{\text{эксп}}$	$E_{\text{расч}} - E_{\text{эксп}}$	$E_{\text{расч}}$	$E_{\text{эксп}}$	$E_{\text{расч}} - E_{\text{эксп}}$
7	12.1506	12.1265	0.02418	0.00461	0.00443	0.00019
8	26.5607	26.5613	-0.00057	0.01101	0.00741	0.00360
9	44.6888	44.6884	0.00040	0.02241	0.01077	0.01164
10	66.4770			0.04094		
11	92.0647			0.06906		
12	121.372			0.10964		
13	154.419			0.16588		
14	191.225			0.24140		
15	231.798			0.34019		
16	276.114			0.46661		
17	324.200			0.62543		
18	376.038			0.82181		
19	431.618			1.06132		
20	490.955			1.34991		

Таблица 8

Сравнение с экспериментом [12, 13] расчетных значений энергии (в эВ) $1s^2 2s^2 2p^2 ({}^3P) 3d^4 F_{9/2}$ состояний азотоподобных ионов и тонкого расщепления $1s^2 2s^2 2p^2 3d^4 F_{9/2} - 1s^2 2s^2 2p^2 3d^4 F_{3/2}$

Z	$1s^2 2s^2 2p^2 ({}^3P) 3d^4 F_{9/2} - 1s^2 2s^2 2p^3 {}^4S_{3/2}$			$1s^2 2s^2 2p^2 3d^4 F_{9/2} - 1s^2 2s^2 2p^2 3d^4 F_{3/2}$		
	$E_{\text{расч}}$	$E_{\text{эксп}}$	$E_{\text{расч}} - E_{\text{эксп}}$	$E_{\text{расч}}$	$E_{\text{эксп}}$	$E_{\text{расч}} - E_{\text{эксп}}$
7	13.1289	12.9896	0.13938	0.01401	0.01265	0.00136
8	28.7120	28.6939	0.01808	0.03357	0.01664	0.01693
9	48.0746	48.0722	0.00240	0.06844	0.05805	0.01039
10	71.1253			0.12498		
11	97.9919			0.21067		
12	128.591			0.33412		
13	162.941			0.50505		
14	201.064			0.73432		
15	242.968			1.03395		
16	288.635			1.41711		
17	338.093			1.89813		
18	391.329			2.49255		
19	448.335			3.21711		
20	509.133			4.08975		

Сравнение с экспериментом [12, 13] расчетных значений энергии $1s^2 2s^2 2p^2 ({}^3P) 3d^4 D_{7/2} - 1s^2 2s^2 2p^3 {}^4S_{3/2}$ состояний азотоподобных ионов и тонкого расщепления $1s^2 2s^2 2p^2 3d^4 D_{7/2} - 1s^2 2s^2 2p^2 3d^4 D_{1/2}$ приведено в табл. 9. Интервал

тонкого расщепления $1s^2 2s^2 2p^2 3d^4 D_{7/2} - 1s^2 2s^2 2p^2 3d^4 D_{1/2}$ равен 0.33 (1/3) интервала $1s^2 2s^2 2p^2 {}^3P_2 - 1s^2 2s^2 2p^2 {}^3P_0$, рассчитанного с учетом влияния электрона третьей оболочки на состояние электронов второй оболочки.

Таблица 9

Сравнение с экспериментом [12, 13] расчетных значений энергии (в эВ)
 $1s^2 2s^2 2p^2 ({}^3P) 3d^4 D_{7/2} - 1s^2 2s^2 2p^3 {}^4S_{3/2}$ состояний азотоподобных ионов
 и тонкого расщепления $1s^2 2s^2 2p^2 3d^4 D_{7/2} - 1s^2 2s^2 2p^2 3d^4 D_{1/2}$

Z	$1s^2 2s^2 2p^2 ({}^3P) 3d^4 D_{7/2} - 1s^2 2s^2 2p^3 {}^4S_{3/2}$			$1s^2 2s^2 2p^2 3d^4 D_{7/2} - 1s^2 2s^2 2p^2 3d^4 D_{1/2}$		
	$E_{\text{расч}}$	$E_{\text{эксп}}$	$E_{\text{расч}} - E_{\text{эксп}}$	$E_{\text{расч}}$	$E_{\text{эксп}}$	$E_{\text{расч}} - E_{\text{эксп}}$
7	13.1004	13.0209	0.07945	0.00467	0.00409	0.00058
8	28.8158	28.8580	-0.04222	0.01120	0.00523	0.00597
9	48.3931	48.3801	0.01301	0.02285	0.01116	0.01169
10	71.7037			0.04175		
11	98.8576			0.07040		
12	129.762			0.11167		
13	164.429			0.16880		
14	202.878			0.24544		
15	245.115			0.34558		
16	291.119			0.47362		
17	340.917			0.63436		
18	394.496			0.83296		
19	451.847			1.07502		
20	512.992			1.36653		

Состояния $1s^2 2s 2p^3 ({}^5S) nl {}^6L$ азотоподобных ионов. Проводился подбор параметров и расчет энергии одноэлектронных возбужденных $1s^2 2s 2p^3 ({}^5S) nl {}^6L$ состояний азотоподобных ионов. Параметры взаимодействия электронов второй и третьей оболочек таких ионов приведены в табл. 1. Рассчитаны энергии $1s^2 2s 2p^3 ({}^5S) ns {}^6L$, $1s^2 2s 2p^3 ({}^5S) np {}^6L$, $1s^2 2s 2p^3 ({}^5S) nd {}^6L$ состояний азотоподобных ионов. Константы взаимодействия $2s$ и $2p$ электронов с $1s$ электронами взяты в расчете такими же, как в состояниях литиеподобных ионов $1s^2 2s {}^2S$ и $1s^2 2p {}^2P$ соответственно. Электрон в состояниях nl взаимодействует с $1s^2$ оболочкой так же, как в литиеподобных ионах. Для nl состояний подбираются параметры взаимодействия электронов второй и третьей оболочек. Расчетные значения энергии $1s^2 2s 2p^3 ({}^5S) 3s {}^4S_{3/2}$ и $1s^2 2s 2p^3 ({}^5S) 3s {}^6S_{5/2}$ состояний для азотоподобных ионов с $Z = 7 \div 20$ приведены в табл. 10. В этой же таблице приведено сравнение рассчитанных зна-

чений с экспериментальными данными, взятыми из справочников [12, 13]. Расчетные значения для состояний 4S достаточно хорошо соответствуют эксперименту. Для состояния 6S очень мало экспериментальных точек, но подобранные параметры взаимодействия электронов позволяют получить надежные расчетные значения, по крайней мере, в окрестности экспериментальных точек.

Сравнение с экспериментом расчетных значений энергии $1s^2 2s 2p^3 ({}^5S) 3p {}^4P_{1/2}$ и $1s^2 2s 2p^3 ({}^5S) 3p {}^6P_{7/2}$ состояний азотоподобных ионов приведено в табл. 11. Тонкое расщепление 4P и 6P состояний экспериментально не определено, по-видимому, из-за малого спин-орбитального взаимодействия электрона третьей оболочке.

Сравнение с экспериментом расчетных значений энергии $1s^2 2s 2p^3 ({}^5S) 3p {}^4D_{1/2}$ и $1s^2 2s 2p^3 ({}^5S) 3p {}^6D_{7/2}$ состояний азотоподобных ионов приведено в табл. 12. Во всех случаях удается получить хорошее расчетное описание экспериментальных данных.

Таблица 10

Сравнение с экспериментом расчетных значений энергии (в эВ)
 $1s^2 2s 2p^3 ({}^5S) 3s^4 S_{3/2}$ и $1s^2 2s 2p^3 ({}^5S) 3s^6 S_{5/2}$ состояний азотоподобных ионов

Z	$1s^2 2s 2p^3 ({}^5S) 3s^4 S_{3/2} - 1s^2 2s^2 2p^3 {}^3P_2$		$1s^2 2s 2p^3 ({}^5S) 3s^6 S_{5/2} - 1s^2 2s^2 2p^3 {}^3P_2$	
	$E_{\text{расч}}$	$E_{\text{эксп}}$	$E_{\text{расч}}$	$E_{\text{эксп}}$
7	16.2182		16.0954	16.2421
8	31.2495	31.6140	30.4411	30.4254
9	50.1666	50.1865	48.6036	48.5937
10	72.8521	72.9059	70.5214	
11	99.4188	99.4299	96.3195	
12	129.776	129.767	125.910	
13	163.939	163.931	159.308	
14	201.929	201.930	196.535	
15	243.758	243.751	237.602	
16	289.407		282.490	
17	338.910		331.232	
18	392.260		383.821	
19	449.452		440.252	
20	510.516		500.553	

Таблица 11

Сравнение с экспериментом расчетных значений энергии (в эВ)
 $1s^2 2s 2p^3 ({}^5S) 3p^4 P_{1/2}$ и $1s^2 2s 2p^3 ({}^5S) 3p^6 P_{7/2}$ состояний азотоподобных ионов

Z	$1s^2 2s 2p^3 ({}^5S) 3p^4 P_{1/2} - 1s^2 2s^2 2p^3 {}^3P_2$		$1s^2 2s 2p^3 ({}^5S) 3p^6 P_{7/2} - 1s^2 2s^2 2p^3 {}^3P_2$	
	$E_{\text{расч}}$	$E_{\text{эксп}}$	$E_{\text{расч}}$	$E_{\text{эксп}}$
7	17.7442		17.47269	17.70525
8	33.8731		33.20271	33.20118
9	53.8398	53.8817	52.73022	52.73324
10	77.5438		75.98059	
11	105.108	105.082	103.0857	
12	136.449	136.402	133.9644	
13	171.583	171.558	168.6368	
14	210.538	210.555	207.1289	
15	253.325	253.420	249.4525	
16	299.927		295.5919	
17	350.381		345.582	
18	404.678		399.4148	
19	462.815		457.0878	
20	524.821		518.6299	

Таблица 12

Сравнение с экспериментом расчетных значений энергии (в эВ)
 $1s^2 2s 2p^3(^5S) 3d^4 D_{1/2}$ и $1s^2 2s 2p^3(^5S) 3p^6 D_{1/2}$ состояний азотоподобных ионов

Z	$1s^2 2s 2p^3(^5S) 3d^4 D_{1/2} - 1s^2 2s^2 2p^3 ^3P_2$		$1s^2 2s 2p^3(^5S) 3d^6 D_{1/2} - 1s^2 2s^2 2p^4 ^3P_2$	
	$E_{\text{расч}}$	$E_{\text{эксп}}$	$E_{\text{расч}}$	$E_{\text{эксп}}$
7	18.9143		18.8498	
8	36.4773		36.1799	36.1913
9	58.0200	58.0090	57.4056	57.4008
10	83.3780	83.4171	82.3988	
11	112.646	112.667	111.272	
12	145.726	145.732	143.937	
13	182.629	182.638	180.411	
14	223.377	223.385	220.720	
15	267.982	267.980	264.879	
16	316.428		312.873	
17	368.752		364.740	
18	424.949		420.477	
19	485.018		480.085	
20	548.994		543.597	

Заклучение

Рассчитаны значения энергии одноэлектронных возбужденных $1s^2 2s^2 2p^2 ns^4 P$, $1s^2 2s^2 2p^2 ns^2 P$, $1s^2 2s^2 2p^2 np^4 S$, $1s^2 2s^2 2p^2 np^2 S$, $1s^2 2s^2 2p^2 np^4 P$, $1s^2 2s^2 2p^2 np^2 P$, $1s^2 2s^2 2p^2 np^4 D$, $1s^2 2s^2 2p^2 np^2 D$, $1s^2 2s^2 2p^2 nd^4 P$, $1s^2 2s^2 2p^2 nd^2 P$, $1s^2 2s^2 2p^2 nd^4 D$, $1s^2 2s^2 2p^2 nd^2 D$, $1s^2 2s^2 2p^2 nd^4 F$, $1s^2 2s^2 2p^2 nd^2 F$ состояний ионов электронной последовательности азота с $n = 3 \div 12$ и $Z = 7 \div 50$. Рассчитаны значения энергий $1s^2 2s 2p^3(^5S) ns^6 S$, $1s^2 2s 2p^3(^5S) ns^4 S$, $1s^2 2s 2p^3(^5S) np^6 P$, $1s^2 2s 2p^3(^5S) np^4 P$, $1s^2 2s 2p^3(^5S) nd^6 D$, $1s^2 2s 2p^3(^5S) nd^4 D$ состояний ионов электронной последовательности азота с $n = 3 \div 12$ и $Z = 7 \div 50$. Для всех электронных конфигураций рассчитаны величины тонкого расщепления энергии состояний с различными значениями полного момента J . Сравнение с имеющимися экспериментальными данными показывает высокую точность теоретических величин: для энергии 10^{-4} при $Z > 10$, для тонкого расщепления – несколько процентов.

Определены закономерности изменения интервалов тонкой структуры в ряде конфигураций азотоподобных ионов в зависимости от заряда ядра Z и главного квантового числа n . Интервал тонкого расщепления $1s^2 2s^2 2p^2 3s^4 P_{5/2} - 1s^2 2s^2 2p^2 3s^4 P_{1/2}$ энергии N -подобных ионов равен интервалу $1s^2 2s^2 2p^2 ^3P_2 - 1s^2 2s^2 2p^2 ^3P_0$ энергии C -подобных ионов, рассчитанному с учетом влияния электрона

третьей оболочки на состояние электронов второй оболочки. С увеличением главного квантового числа n электрона третьей оболочки интервал $1s^2 2s^2 2p^2 ns^4 P_{5/2} - 1s^2 2s^2 2p^2 ns^4 P_{1/2}$ немного увеличивается, приближаясь к значению интервал $1s^2 2s^2 2p^2 ^3P_2 - 1s^2 2s^2 2p^2 ^3P_0$ для углеродоподобных ионов. Интервал $1s^2 2s^2 2p^2 3p^4 P_{5/2} - 1s^2 2s^2 2p^2 3p^4 P_{1/2}$ равен половине интервала $1s^2 2s^2 2p^2 ^3P_2 - 1s^2 2s^2 2p^2 ^3P_0$. Интервал $1s^2 2s^2 2p^2 3p^2 D_{5/2} - 1s^2 2s^2 2p^2 3p^2 D_{3/2}$ равен 2/3 интервала $1s^2 2s^2 2p^2 ^3P_2 - 1s^2 2s^2 2p^2 ^3P_0$. Интервал $1s^2 2s^2 2p^2 3p^2 P_{3/2} - 1s^2 2s^2 2p^2 3p^2 P_{1/2}$ равен 0.33 (1/3) интервала $1s^2 2s^2 2p^2 ^3P_2 - 1s^2 2s^2 2p^2 ^3P_0$. Интервал $1s^2 2s^2 2p^2 3d^4 F_{9/2} - 1s^2 2s^2 2p^2 3d^4 F_{3/2}$ равен интервалу $1s^2 2s^2 2p^2 ^3P_2 - 1s^2 2s^2 2p^2 ^3P_0$. Небольшое отличие его от интервала $1s^2 2s^2 2p^2 3s^4 P_{5/2} - 1s^2 2s^2 2p^2 3s^4 P_{1/2}$ объясняется различным влиянием $3d$ и $3s$ электронов на состояние $2s^2 2p^2$ электронов. Интервал $1s^2 2s^2 2p^2 3d^4 D_{7/2} - 1s^2 2s^2 2p^2 3d^4 D_{1/2}$ равен 0.33 (1/3) интервала $1s^2 2s^2 2p^2 ^3P_2 - 1s^2 2s^2 2p^2 ^3P_0$. Интервал $1s^2 2s^2 2p^2 3d^4 P_{5/2} - 1s^2 2s^2 2p^2 3d^4 P_{1/2}$ равен половине интервала $1s^2 2s^2 2p^2 ^3P_2 - 1s^2 2s^2 2p^2 ^3P_0$. Интервал $1s^2 2s^2 2p^2 3d^2 D_{5/2} - 1s^2 2s^2 2p^2 3d^2 D_{3/2}$ равен 0.2 интервала $1s^2 2s^2 2p^2 ^3P_2 - 1s^2 2s^2 2p^2 ^3P_0$. Тонкое расщепление состояния $1s^2 2s^2 2p^2 3d^2 P$ имеет обращенный характер (энергия состояния $1s^2 2s^2 2p^2 3d^2 P_{3/2}$ ниже $1s^2 2s^2 2p^2 3d^2 P_{1/2}$) и величина интервала $1s^2 2s^2 2p^2 3d^2 P_{1/2} - 1s^2 2s^2 2p^2 3d^2 P_{3/2}$ равна 0.33 (1/3) интервала $1s^2 2s^2 2p^2 ^3P_2 - 1s^2 2s^2 2p^2 ^3P_0$.

Экспериментальные данные для состояний внешнего электрона N -подобных ионов с главным квантовым числом $n > 3$ весьма ограничены. Однако в совокупности они подтверждают правильность теоретического подхода, более подробно проверенного в случае $n = 3$. Для многих состояний тонкое расщепление N -подобных ионов связано с расщеплением энергии состояния $1s^2 2s^2 2p^2$ C -подобных ионов и не уменьшается с увеличением n , а немного растет, приближаясь к значению интервал $1s^2 2s^2 2p^2 \ ^3P_2 - 1s^2 2s^2 2p^2 \ ^3P_0$ для углеродоподобных ионов. Тонкое расщепление состояний энергии непосредственно nl электронов мало по сравнению с интервалом $1s^2 2s^2 2p^2 \ ^3P_2 - 1s^2 2s^2 2p^2 \ ^3P_0$. Оно резко уменьшается с увеличением n .

Список литературы

1. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика. Нерелятивистская теория. М.: Наука, 1974.
2. Бете Г, Солпитер Э. Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами. М.: ГИФМЛ, 1960.
3. Дирак П.. Принципы квантовой механики. М.: ГИФМЛ, 1960.
4. Кондон Е., Шортли Г. Теория атомных спектров. М.: ИИЛ, 1949.
5. Собельман И. И. Введение в теорию атомных спектров. М.: Наука, 1977.
6. Froese-Fischer C. The Hartree – Fock Method for Atoms. New York, Wiley, 1977.
7. Cowan R. D. The Theory of electron structure and spectra. Los Alamos series in bases and applied science, 1981.
8. Никитин А. А., Рудзикас З. Б. Основы теории спектров атомов и ионов. М.: Наука, 1983.
9. Сафронова У. И., Сенащенко В. С. Теория спектров многозарядных ионов. М.: Энергоатомиздат, 1984.
10. Браун М. А., Гурчумелия А. Д., Сафронова У. И. Релятивистская теория атома М.: Наука, 1984.
11. Вайнштейн Л. А., Шевелько В. П. Структура и характеристики ионов в горячей плазме. М.: Наука, 1986.
12. Moore Ch. E. Atomic Energy Levels. 34, 16, 1949.
13. Bashkin S., Stoner J. O. Atomic Energy Level and Grotrian Diagrams. New York, NHPC, 1975.
14. Надыкто Б. А. // УФН. 1993, Т. 163, № 37.
15. Надыкто Б. А., Надыкто О. Б. О гибридизации состояний электронов с одинаковым значением главного квантового числа в свободных атомах // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Теоретическая и прикладная физика. 2007. Вып. 1. С. 3–12 .
16. Надыкто Б. А., Надыкто О. Б. Расчет энергии возбужденных $1s^2 2s 2p(^3P)nl$ состояний бороподобных ионов // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Теоретическая и прикладная физика. 2007. Вып. 1. С. 13–50 .
17. Надыкто Б. А., Надыкто О. Б. Расчет энергии возбужденных $1s^2 2s 2p 2(^4P)nl$ состояний углеродоподобных ионов // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Теоретическая и прикладная физика. 2007. Вып. 1. С. 51–99.
18. Tachiev, G. I., & Fischer, C. F. (2002). Breit-Pauli energy levels and transition rates for nitrogen-like and oxygen-like sequences. *Astronomy & Astrophysics*, 385(2), 716-723. DOI: 10.1051/0004-6361:20011816
19. Radžiūtė, L., Ekman, J., Jönsson, P., & Gaigalas, G. (2015). Extended calculations of level and transition properties in the nitrogen isoelectronic sequence: Cr XVIII, Fe XX, Ni XXII, and Zn XXIV. *Astronomy & Astrophysics*, 582, A61. <http://dx.doi.org/10.1051/0004-6361/201526708>.
20. Träbert, E. (2014). Critical assessment of theoretical calculations of atomic structure and transition probabilities: an experimenter's view. *Atoms*, 2(1), 15-85. [do10.3390/atoms2010015](https://doi.org/10.3390/atoms2010015)
21. Wang, K., Jönsson, P., Ekman, J., Si, R., Chen, Z. B., Li, Y. G., ... & Yan, J. (2017). Extended calculations of energy levels, radiative properties, AJ, BJ hyperfine interaction constants, and Landé gJ-factors for oxygen-like Kr XXIX. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 194, 108-112. <https://doi.org/10.1016/j.jqsrt.2017.03.014>
22. Wang, K., Li, S., Jönsson, P., Fu, N., Dang, W., Guo, X. L., ... & Si, R. (2017). Calculations with spectroscopic accuracy for energies, transition rates, hyperfine interaction constants, and Landé gJ-factors in nitrogen-like Kr XXX. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 187, 375-402. <https://doi.org/10.1016/j.jqsrt.2016.10.011>
23. Wang, K., Si, R., Dang, W., Jönsson, P., Guo, X. L., Li, S., ... & Li, D. F. (2016). Calculations with spectroscopic accuracy: Energies and transition rates in the nitrogen isoelectronic sequence from Ar XII to Zn XXIV. *The Astrophysical Journal Supplement Series*, 223(1), 3. <http://dx.doi.org/10.3847/0067-0049/223/1/3>

Статья поступила в редакцию 21.01.2021