

Расчет длин волн и сил осцилляторов в атомах P, S, Cl, Ar

.Пахомова Т.Е.

старший преподаватель

Якутский государственный университет, физический факультет, Якутск

taniu@bk.ru

Одним из эффективных вариантов учета взаимодействия конфигураций (CI) при расчете спектральных характеристик атомов и ионов является суперпозиция конфигураций, описанных с использованием базиса трансформированных радиальных орбиталей с варьируемым параметром (TRO) [1].

Рассчитывались обычные уравнения Хартри-Фока, представляющие собой систему интегро-дифференциальных уравнений второго порядка:

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} - 2\varphi(nl|r) - \frac{l(l+1)}{r^2} - E_{nl,nl} \right] P(nl|r) - \chi(nl|r) - \sum_{n'l'} E_{nl,n'l'} P(n'l) = 0 \quad (1 \text{ а})$$

При его решении на $P(nl|r)$ накладываются граничные условия

$$P(nl|0) = P(nl|\infty) = 0 \quad (1 \text{ б}) \text{ и условие нормировки } \int_0^\infty P^2(nl|r) dr = 1 \quad (1 \text{ в})$$

Уравнение (1 а) записывается для каждой функции $P(nl|r)$, описывающей оболочку nl^{Nnl} , входящую в рассчитываемую конфигурацию. Прямая $\varphi(nl|r)$ и обменная $\chi(nl|r)$ части потенциала определяются следующим образом:

$$\varphi(nl|r) = \frac{-Z + Y(nl|r)}{r} \quad (2)$$

$$\chi(nl|r) = \frac{2}{r} \sum_{n'l' \neq nl} \sum_k \frac{g_k(nl, n'l')}{N_{nl}} * Y_k(nl, n'l'|r) P(n'l'|r) \quad (3)$$

$$Y(nl|r) = \sum_{n'l'} \frac{1 + \delta(nl, n'l')}{N_{nl}} * \sum_k f_k(nl, n'l') Y(n'l', n'l'|r) \quad (4)$$

$$Y_k(nl, n'l'|r) = r^{-k} \int_0^k r_1^k P(nl|r_1) P(n'l'|r_1) dr_1 + r^{k+1} \int_r^\infty r_1^{-k-1} P(nl|r_1) P(n'l'|r_1) dr_1. \quad (5)$$

Базис хартри-фоковских радиальных орбиталей, описывающей конкретную конфигурацию, дополнялся радиальными орбиталями (РО). Дальнейшее расширение базиса производилось за счет использования трансформированных радиальных орбиталей (TRO) $P_T(nl|r) = Nf(r)P_{HF}(n'l'|r)$ с варьируемым параметром, как это предложено в работах [1,2]. В полученном базисе РО возможно создание большого количества поправочных конфигураций, суммарное число термов которых очень велико. Поправочные конфигурации отбирались с помощью программы, оценивающей их влияние во втором порядке теории возмущений и включались в матрицу энергии. Все релятивистские эффекты учитывались в рамках оператора Брейта с точностью до квадрата постоянной тонкой структуры, т.е. в приближении Хартри-Фока-Паули. Только одновременный учет всех поправок позволил достичь высокой точности длин волн. Полученные результаты сравнены с имеющимися экспериментальными данными и результатами полуэмпирических расчетов.

ЛИТЕРАТУРА

1. P. Bogdanovich and R. Karpuskiene, ECAMP VI, Abstracts, 1-20, Siena, 1998.
2. P. Bogdanovich and R. Karpuskiene, «Transformed radial orbitals wits a variable

parameter for the configuration interaction,» Comput. Phys.Com.(submitted).