

01

Параметры тонкой структуры, зеемановское расщепление, его особенности и гироманнитные отношения конфигураций $1sng$ ($n = 5-10$) атома гелия

© Г.П. Анисимова¹, Ю.И. Анисимов¹, А.П. Горбенко¹, О.А. Долматова²,
И.Р. Крылов¹, Г.А. Цыганкова¹, М. Чоффо³

¹ Санкт-Петербургский государственный университет,
198504 Санкт-Петербург, Петергоф, Россия

² Санкт-Петербургский государственный университет телекоммуникаций им. проф. М.А.Бонч-Бруевича,
193232 Санкт-Петербург, Россия

³ Department of Physics, Faculty of Science, University of Dschang,
Po Box 479 Dschang, Cameroon

e-mail: olgadolmatova@gmail.com

Поступила в редакцию 08.04.2018 г.

В окончательной редакции 26.07.2018 г.

Полуэмпирическим методом выполнен расчет параметров тонкой структуры 6 конфигураций $1sng$ гелия с новыми уточненными энергиями. При диагонализации матрицы оператора энергии второго ранга (уровни 3G_4 и 1G_4) разности между расчетными и экспериментальными энергиями (невязки) оказались практически равными нулю. Основное внимание в работе уделено исследованию зеемановской структуры с целью определения гироманнитных отношений всех четырех уровней конфигураций. Это представляется актуальным, так как для исследуемых конфигураций отсутствуют аналогичные экспериментальные данные. Гироманнитные отношения можно рассчитывать только в линейной области. Эта область установлена для всех рассматриваемых конфигураций. Также изучены особенности зеемановского расщепления — пересечения и антипересечения магнитных подуровней. Полученные данные являются прогнозом для дальнейших экспериментальных исследований.

DOI: 10.21883/OS.2018.12.46930.103-18

Введение

К конфигурациям атома гелия мы обращались ранее ([1–3]), однако весь гелий был пересчитан с новыми уточненными энергиями из [4] — точность 10^{-9} см^{-1} .

Во всех литературных источниках классификация уровней конфигураций $1snl$ гелия дана в приближении LS -связи. Это оправдано для конфигураций $1snp$ и $1snd$ (см. табл. 1 в статье [1]), которые представляют собой узкий триплет и значительно удаленный от него синглетный уровень. При этом расположение уровней в обращенном триплете правильное.

Иная картина у всех высоковозбужденных конфигураций $1snl$ ($l \geq 3$), в том числе $1snf$ [1] и $1sni$ [5]. Спектр конфигураций $1sng$ качественно такой же, как в вышеперечисленных конфигурациях. А именно триплетная система расширяется, а верхний синглетный уровень 1G_4 приближается к ней настолько, что получается квартет. Известно, что уровни с одинаковым значением квантового числа J (полный электронный момент атома) взаимодействуют (отталкиваются). Верхний уровень 1G_4 настолько сильно отталкивает уровень 3G_4 , что последний перемещается на самую нижнюю позицию, нарушая правильное расположение уровней в обращенном триплете. Правда, синглетный уровень 1G_4 все же остается верхним. Квартетная структура характерна для LK -связи, т.е. здесь налицо значительное отступление

от LS -связи, что увидим дальше по коэффициентам промежуточной связи и гироманнитным отношениям. Матрица оператора энергии конфигурации $1fng$ опубликована в [2], зеемановское расщепление двух нижних конфигураций $1s5g$ и $1s6g$ рассмотрено в работе [3], но расчеты были выполнены с другими энергиями с точностью 10^{-4} см^{-1} , поэтому мы повторим матрицу оператора энергии и систему уравнений, из которой определены параметры тонкой структуры.

Матрица оператора энергии и система уравнений для определения параметров тонкой структуры

Расчет матричных элементов для конфигураций с s -электроном не представляет значительных трудностей как в представлении несвязанных моментов [6], так и в $LSJM$ -представлении (подробнее см. [7]), поэтому сразу запишем матрицу оператора энергии в $LSJM$ -представлении и прокомментируем ее. В указанной матрице учтены следующие взаимодействия: электростатическое, спин-орбита (своя и чужая) и спин-спин. Взаимодействие орбита-орбита не удалось учесть отдельно от электростатического, так как в нем прямые радиальные интегралы Марвина отсутствуют, а угловой коэффициент

обменной части такой же, как у обменного радиального интеграла электростатического взаимодействия G_4 .

В $LSJM$ -представлении (приближение LS -связи) матрица оператора энергии конфигураций $nsn'g$ имеет вид

$$\begin{aligned} {}^3G_4^3G_4 &= F_0 - \frac{1}{9}G_4 - \frac{1}{2}\xi_g + 3S_2^* \\ &\quad - 2S_2 + \frac{2}{3}S_4 - \frac{1}{9}(I + II) = C_1, \\ {}^3G_5^3G_5 &= F_0 - \frac{1}{9}G_4 - 2\xi_g - 12S_2^* \\ &\quad + \frac{8}{11}S_2 - \frac{8}{3}S_4 - \frac{1}{9}(I + II) = C_2, \\ {}^3G_3^3G_3 &= F_0 - \frac{1}{9}G_4 - \frac{5}{2}\xi_g + 15S_2^* \\ &\quad + \frac{10}{7}S_2 + \frac{10}{3}S_4 - \frac{1}{9}(I + II) = C_3, \\ {}^1G_4^1G_4 &= F_0 + \frac{1}{9}G_4 + \frac{1}{9}(I + II) = C_4, \\ {}^3G_4^1G_4 &= -\sqrt{5}(\xi_g + 2S_2^*) = C_5. \end{aligned} \quad (1)$$

Здесь F_0 и G_4 — прямой и обменный радиальные интегралы Слэтера соответственно (электростатическое взаимодействие), ξ_g — параметр взаимодействия спин-своя орбита, S_2 — прямой радиальный интеграл Марвина $M_{k-1}(n'l', nl)$ при $k = 1$, относящийся к взаимодействиям спин-чужая орбита (помечен звездочкой) и спин-спин, S_4 — обменный радиальный интеграл Марвина K_k [6], относящийся только к взаимодействию спин-чужая орбита. Последнее слагаемое в матричных элементах (1) с римскими цифрами — это совокупность радиальных интегралов, относящихся к взаимодействию орбита-орбита. Из (1) видно, что угловые коэффициенты при радиальных интегралах G_4 и $(I + II)$ с точностью до множителя одинаковы, поэтому в полуэмпирическом расчете параметров тонкой структуры взаимодействие орбита-орбита нельзя учесть отдельно от электростатического. В диагональных матричных элементах S_2 и S_2^* — это один и тот же прямой радиальный интеграл Марвина, поэтому их нужно объединить.

В основу численного расчета параметров тонкой структуры положена матрица оператора энергии (1). Так как параметров тонкой структуры 5 (F_0 , G_4 , ξ_g , S_2 и S_4), а уровней исследуемой конфигурации 4, то в численном расчете использовалась следующая система уравнений:

$$\begin{aligned} C_1 + C_2 - (\varepsilon_1 + \varepsilon_4) &= 0, \\ C_2 - \varepsilon_2 &= 0, \\ C_3 - \varepsilon_3 &= 0, \\ C_1C_4 - C_5^2 - \varepsilon_1\varepsilon_4 &= 0, \\ \alpha_{11}(C_1 - \varepsilon_1) + \alpha_{12}C_5 &= 0, \\ \alpha_{12}(C_1 - \varepsilon_4) - \alpha_{11}C_5 &= 0, \\ \alpha_{11}^2 + \alpha_{12}^2 &= 1. \end{aligned} \quad (2)$$

Здесь ε_i — экспериментальные энергии, C_1 и C_5 — элементы недиагональной эрмитовой матрицы (1).

Четырехуровневая система с s -электроном является самой удобной для численного расчета параметров тонкой структуры, так как в системе (2) первые три уравнения на правило сумм диагональных элементов Слэтера, из которых сразу можно определить три основных параметра: F_0 , G_4 и ξ_g . Четвертое уравнение — парное произведение корней векового уравнения второй степени (теорема Виета). Поскольку неизвестных величин 5, то пришлось ввести два аналитических уравнения (пятое и шестое в (2)) на унитарное преобразование недиагональной эрмитовой матрицы 2-го ранга к диагональному виду [1]. При этом появились еще две неизвестные величины — коэффициенты унитарного преобразования α_{11} и α_{12} . Для соответствия числа уравнений числу неизвестных введено уравнение нормировки коэффициентов связи (седьмое в (2)).

Система уравнений (2) решалась по методу итераций Ньютона, которому требуются нулевые приближения. Нулевые приближения получены из первых трех линейных уравнений, для параметров F_0 , G_4 и ξ_g . Затем значения этих параметров подставлялись в матрицу второго ранга, и проводилась ее диагонализация, в результате которой определяются не только энергии уровней тонкой структуры (собственные числа), но и собственные векторы (коэффициенты связи). Поэтому можно определить численные значения величин C_1 (пятое и шестое уравнения в системе (2)). В результате получим систему 6 линейных уравнений для 5 неизвестных параметров тонкой структуры. Эта система решалась методом наименьших квадратов (МНК), из которой найдены нулевые приближения для двух остальных параметров тонкой структуры: S_2 и S_4 . Итераций МНК требовалось немного: 1–2, после чего метод итераций Ньютона быстро сходил. Определенные таким образом параметры тонкой структуры (радиальные интегралы) представлены в табл. 1. Из табл. 1 видно, что с ростом главного квантового числа g -электрона изменение всех параметров плавное. Это говорит о том, что наложение конфигураций отсутствует. Коэффициенты связи и гироманнитные отношения в табл. 3 показывают значительное отступление от LS -связи.

Расчетные энергии с параметрами тонкой структуры из табл. 1 представлены в табл. 2, а коэффициенты промежуточной связи и гироманнитные отношения в отсутствие магнитного поля — в табл. 3.

Зеемановское расщепление, его особенности и гироманнитные отношения

Магнитное поле полностью снимает вырождение уровней по квантовому числу M . Взаимодействие атома с магнитным полем имеет вид [8]:

$$W = -\mu H. \quad (3)$$

Таблица 1. Параметры тонкой структуры (в см^{-1}) конфигураций $1sng$ ($n = 5-10$)

	1s5g	1s6g	1s7g	1s8g	1s9g	1s10g
F_0	0.0041321795	0.0023899967	0.0015043740	0.0010074281	0.0007073097	0.0005155085
G_4	0.0010220906	0.0005903345	0.0003710716	0.0002481712	0.0001740040	0.0001267103
ξ_g	-0.0028748975	-0.0016617176	-0.0010454096	-0.0006997816	-0.0004911404	-0.0003578687
S_2	0.0007506887	0.0004331137	0.0002720567	0.0001818765	0.0001275031	0.0000928318
S_4	-0.0052022018	-0.0030029998	-0.0018871432	-0.0012620663	-0.0008850551	-0.0006445323

Таблица 2. Расчетные энергии уровней тонкой структуры (в см^{-1})

	Абсолютные энергии					
	1s5g	1s6g	1s7g	1s8g	1s9g	1s10g
3G_4	193921.614948739	195262.723082377	196071.368738129	196596.209 656481	196956.03786250	197213.420160634
3G_5	193921.617719262	195262.724684231	196071.369746173	196596.210 331441	196956.038337114	197213.420505980
3G_3	193921.620238142	195262.726141773	196071.370663981	196596.210 946275	196956.038768917	197213.420820757
1G_4	193921.621933101	195262.727124343	196071.371283543	196596.211 361727	196956.039060906	197213.421033729
Относительные энергии (интервалы)						
	1s5g	1s6g	1s7g	1s8g	1s9g	1s10g
3G_4	0	0	0	0	0	0
3G_5	0.002770523	0.001601854	0.001008044	0.000674960	0.000473864	0.000345346
3G_3	0.005289403	0.003059396	0.001925852	0.001289794	0.000905667	0.000660123
1G_4	0.006984362	0.004041966	0.002545414	0.001705246	0.001197656	0.000873095
Невязки						
	1s5g	1s6g	1s7g	1s8g	1s9g	1s10g
3G_4	$2.9E - 11$	$3.1E - 11$	$-2.0E - 11$	$-3.5E - 11$	$-2.4E - 11$	$2.5E - 11$
3G_5	$5.15E - 11$	$-1.5E - 10$	$8.5E - 11$	$-3.5E - 10$	$1.6E - 10$	$3.6E - 11$
3G_3	$-8.8E - 11$	$2.2E - 10$	$-4.8E - 12$	$3.0E - 10$	$-1.8E - 10$	$-1.9E - 10$
1G_4	$-1.1E - 10$	$2.3E - 12$	$5.3E - 11$	$2.0E - 12$	$-9.5E - 12$	$-7.5E - 11$

Таблица 3. Коэффициенты связи и гиромагнитные отношения в отсутствие поля

	3G_4		1G_4	
	α_{11}	g	α_{12}	g
1s5g	0.8590535154	1.036984252	-0.5118857858	1.013131748
1s6g	0.858689072	1.0369528784	-0.5124969051	1.0131631216
1s7g	0.8583670094	1.0369251642	-0.5130361364	1.0131908358
1s8g	0.8580883665	1.0369011948	-0.5135020499	1.0132148052
1s9g	0.8578260226	1.0368786346	-0.5139401862	1.0132373654
1s10g	0.85765113453	1.0368636171	-0.5142316305	1.0132523829

Примечание. $g^{LS}(^3G_4) = 1.050116$; $g^{LS}(^1G_4) = 1.0$.

Пренебрегая ядерным магнитным моментом из-за его малости, для магнитного момента атома μ можно записать

$$\mu = -\mu_0 g J, \quad (4)$$

где μ_0 — магнетон Бора, выполняющий роль радиального интеграла; J — полный электронный момент атома. Если направить ось z по направлению поля H , то по-

лучим, что энергия взаимодействия атома с магнитным полем имеет вид:

$$W = \mu_0 g J H. \quad (5)$$

Матричные элементы оператора (5) в $LSJM$ -представлении взяты из [9]. Выпишем их.

Диагональные матричные элементы: $\Delta J = \Delta S = \Delta L = 0$.

$$|W_{ii}| = \left(\frac{J(J+1) + L(L+1) - S(S+1)}{2J(J+1)} g_l + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)} g_s \right) \mu_0 H M. \quad (6)$$

Недиагональные матричные элементы: $\Delta S = \Delta L = 0$, $\Delta J = \pm 1$.

$$|W_{ij}| = \sqrt{\frac{(J-L+S+1)(J+L-S+1) \times (J+L+S+2)(L+S-J)}{4(J+1)^2(2J+1)(2J+3)}} \times \sqrt{[(J+1)^2 - M^2]} (g_l - g_s) \mu_0 H. \quad (7)$$

В [9] у недиагонального матричного элемента нет множителя $(g_l - g_s)$, а у квадратного корня нет знака. Указанный множитель появился в результате расчета матричных элементов в представлении несвязанных моментов, где оператор J представлен как сумма орбитальных и спиновых операторов отдельных электронов, к которым применена теорема Экарта–Вигнера, с дальнейшим переводом в $LSJM$ -представление с помощью матрицы коэффициентов Клебша–Гордана.

Итоговая матрица оператора энергии взаимодействия атома с магнитным полем для всех значений квантового числа M в $LSJM$ -представлении конфигурации $1sng$ имеет вид

	$M = \pm 5$	$M = \pm 4$	$M = \pm 3$
${}^3G_5 {}^3G_5$	$\pm(4g_l + g_s)$	$\pm\frac{4}{5}(4g_l + g_s)$	$\pm\frac{3}{5}(4g_l + g_s)$
${}^3G_4 {}^3G_4$		$\pm\frac{1}{5}(19g_l + g_s)$	$\pm\frac{3}{20}(19g_l + g_s)$
${}^3G_3 {}^3G_3$			$\pm\frac{3}{4}(5g_l - g_s)$
${}^1G_4 {}^1G_4$		$\pm 4g_l$	$\pm 3g_l$
${}^3G_5 {}^3G_4$		$\frac{2}{5}(g_l - g_s)$	$\frac{8}{15}(g_l - g_s)$
${}^3G_4 {}^3G_3$			$\frac{\sqrt{35}}{12}(g_l - g_s)$
	$M = \pm 2$	$M = \pm 1$	$M = 0$
${}^3G_5 {}^3G_5$	$\pm\frac{2}{5}(4g_l + g_s)$	$\pm\frac{1}{5}(4g_l + g_s)$	0
${}^3G_4 {}^3G_4$	$\pm\frac{1}{10}(19g_l + g_s)$	$\pm\frac{1}{20}(19g_l + g_s)$	0
${}^3G_3 {}^3G_3$	$\pm\frac{1}{2}(5g_l - g_s)$	$\pm\frac{1}{4}(5g_l - g_s)$	0
${}^1G_4 {}^1G_4$	$\pm 2g_l$	$\pm g_l$	0
${}^3G_5 {}^3G_4$	$\frac{2\sqrt{21}}{15}(g_l - g_s)$	$\frac{4\sqrt{6}}{15}(g_l - g_s)$	$\frac{2}{3}(g_l - g_s)$
${}^3G_4 {}^3G_3$	$\frac{\sqrt{15}}{6}(g_l - g_s)$	$\frac{5\sqrt{3}}{12}(g_l - g_s)$	$\frac{\sqrt{5}}{3}(g_l - g_s)$.

Каждый элемент матрицы (8) необходимо умножить на $\mu_0 H$, где магнетон Бора $\mu_0 = 4.6686437 \cdot 10^{-5}$ [10], $g_l = 1$, $g_s = 2.00232$ с учетом аномального эффекта Зеемана.

При исследовании зеемановской структуры необходимо элементы матрицы (8) добавить к матрице (1) и

Таблица 4. Коэффициенты преобразования волновых функций $LSJM$ -представления через волновые функции представления несвязанных моментов

	1	2	3	4
	0 1 - -	0 0 - +	0 -1 + +	0 0 + -
3G_5	$\frac{\sqrt{2}}{3}$	$\frac{\sqrt{5}}{3\sqrt{2}}$	$\frac{\sqrt{2}}{3}$	$\frac{\sqrt{5}}{3\sqrt{2}}$
3G_4	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	0	$-\frac{1}{\sqrt{2}}$	0
3G_3	$\frac{\sqrt{5}}{3\sqrt{2}}$	$-\frac{\sqrt{2}}{3}$	$\frac{\sqrt{5}}{3\sqrt{2}}$	$-\frac{\sqrt{2}}{3}$
1G_4	0	$-\frac{1}{\sqrt{2}}$	0	$\frac{1}{\sqrt{2}}$

затем провести численную диагонализацию суммарной матрицы с параметрами тонкой структуры из табл. 1.

Докажем справедливость выражений (8), в том числе множителя $(g_l - g_s)$, в недиагональных матричных элементах на примере расчета матрицы с $M = 0$ в представлении несвязанных моментов. Для этого сначала приведем переводную матрицу коэффициентов Клебша–Гордана из представления несвязанных моментов в $LSJM$ -представление. Она имеет вид, представленный в табл. 4. Здесь в первой строке таблицы записаны волновые функции представления несвязанных моментов в такой последовательности: m_{l1}, m_{l2} , спиновые проекции обозначены знаками.

В представлении несвязанных моментов отличны от нуля только два матричных элемента: $\lambda_1 \lambda_1 = \frac{2}{9}(g_l - g_s) \mu_0 H$; $\lambda_3 \lambda_3 = \frac{2}{9}(g_s - g_l) \mu_0 H$. Результаты перевода в $LSJM$ представление по формуле $\sum_{i,j=1}^4 \alpha_{ik} \alpha_{ki} \lambda_{ik}$ с помощью табл. 4 следующие:

$${}^3G_5 {}^3G_5 = \left[\frac{2}{9}(g_l - g_s) + \frac{2}{9}(g_s - g_l) \right] \mu_0 H = 0,$$

$${}^3G_4 {}^3G_4 = \left[\frac{1}{2}(g_l - g_s) + \frac{1}{2}(g_s - g_l) \right] \mu_0 H = 0,$$

$${}^3G_3 {}^3G_3 = \left[\frac{5}{18}(g_l - g_s) + \frac{5}{18}(g_s - g_l) \right] \mu_0 H = 0. \quad (9)$$

Матричный элемент ${}^1G_4 {}^1G_0$ с очевидностью равен нулю.

$$\begin{aligned} {}^3G_5 {}^3G_4 &= \left[\frac{1}{3}(g_l - g_s) - \frac{1}{3}(g_s - g_l) \right] \mu_0 H \\ &= \frac{2}{3}(g_l - g_s) \mu_0 H, \end{aligned}$$

$${}^3G_4 {}^3G_4 = \left[\frac{\sqrt{5}}{6}(g_l - g_s) - \frac{\sqrt{5}}{6}(g_s - g_l) \right] \mu_0 H$$

$$= \frac{\sqrt{5}}{3}(g_l - g_s) \mu_0 H. \quad (10)$$

Таблица 5. Минимальные энергетические интервалы и соответствующие им значения магнитных полей в шейке антипересечений

Антипересекающиеся подуровни	H, Oe	$\Delta H, \text{Oe}$	$\Delta E, \text{cm}^{-1}$
1s5g			
$+3(^3G_3) - +3(^3G_5)$	39.27	0.01	0.000169346
$+2(^3G_3) - +2(^3G_5)$	56.77	0.03	0.000434529
$-3(^1G_4) - -3(^3G_3)$	32.84	0.04	0.000885725
$-2(^1G_4) - -2(^3G_3)$	28.37	0.06	0.001282701
$+4(^1G_4) - +4(^3G_5)$	85.30	0.06	0.001971988
1s6g			
$+3(^3G_3) - +3(^3G_5)$	22.72	0.01	0.000097831
$+2(^3G_3) - +2(^3G_5)$	32.86	0.03	0.000251040
$-3(^1G_4) - -3(^3G_3)$	19.02	0.03	0.000513873
$-2(^1G_4) - -2(^3G_3)$	16.41	0.03	0.000743958
$+4(^1G_4) - +4(^3G_5)$	49.38	0.04	0.001143119
1s7g			
$+3(^3G_3) - +3(^3G_5)$	14.310	0.007	0.000061500
$+2(^3G_3) - +2(^3G_5)$	20.69	0.02	0.000157822
$-3(^1G_4) - -3(^3G_3)$	11.99	0.02	0.000324258
$-2(^1G_4) - -2(^3G_3)$	10.34	0.03	0.000469318
$+4(^1G_4) - +4(^3G_5)$	31.10	0.03	0.000720880
1s8g			
$+3(^3G_3) - +3(^3G_5)$	9.586	0.007	0.000041132
$+2(^3G_3) - +2(^3G_5)$	13.87	0.01	0.000105557
$-3(^1G_4) - -3(^3G_3)$	8.035	0.02	0.000217571
$-2(^1G_4) - -2(^3G_3)$	6.92	0.02	0.000314831
$+4(^1G_4) - +4(^3G_5)$	20.84	0.03	0.000483495
1s9g			
$+3(^3G_3) - +3(^3G_5)$	6.733	0.006	0.000028837
$+2(^3G_3) - +2(^3G_5)$	9.74	0.01	0.000074007
$-3(^1G_4) - -3(^3G_3)$	5.64	0.01	0.000153006
$-2(^1G_4) - -2(^3G_3)$	4.86	0.02	0.000221356
$+4(^1G_4) - +4(^3G_5)$	14.63	0.03	0.000339920
$+3(^1G_4) - +3(^3G_5)$	6.575	0.01	0.000570803
1s10g			
$+3(^3G_3) - +3(^3G_5)$	4.908	0.005	0.000020999
$+2(^3G_3) - +2(^3G_5)$	7.10	0.01	0.000053893
$-3(^1G_4) - -3(^3G_3)$	4.12	0.01	0.000111644
$-2(^1G_4) - -2(^3G_3)$	3.53	0.01	0.000161495
$+4(^1G_4) - +4(^3G_5)$	10.67	0.03	0.000247976
$+3(^1G_4) - +3(^3G_5)$	4.79	0.01	0.000416248

Таким образом, наличие множителя $(g_l - g_s)$ в недиагональных матричных элементах (8) доказано. По-видимому, авторы [9] положили $g_l = 1$; $g_s = 2$ и не указали знак квадратного корня недиагональных матричных элементов. Вообще говоря, орбитальное g_l и спиновое g_s гироманнитные отношения лучше разделить, так как эти величины постоянно уточняются и в зависимости от этого можно получить несколько разные результаты.

Таблица 6. Поля пересечений (H, Oe) конфигураций $1sng$ атома He

Пересекающиеся подуровни		Конфигурация					
верхний	нижний	1s5g	1s6g	1s7g	1s8g	1s9g	1s10g
1G_4	3G_3	H, Oe					
+1	+3	32.26	18.71	11.80	7.91	5.56	4.06
0	+2	26.24	15.22	9.60	6.44	4.53	3.30
-1	+1	22.03	12.77	8.06	5.40	3.80	2.77
-1	0	51.37	29.83	18.84	12.65	8.90	6.50
-2	0	18.86	10.93	6.89	4.62	3.25	2.37
-2	-1	35.70	20.72	13.07	8.77	6.17	4.50
-3	-1	16.36	9.48	5.98	4.01	2.82	2.06
-3	-2	26.41	15.31	9.66	6.48	4.55	3.32
-4	-2	14.35	8.32	5.24	3.52	2.47	1.80
-4	-3	20.60	11.94	7.53	5.05	3.55	2.59
1G_4	3G_5	H, Oe					
+3	+5	31.19	18.06	11.38	7.63	5.36	3.91
+2	+4	33.63	19.48	12.27	8.23	5.78	4.21
+1	+3	36.66	21.23	13.38	8.97	6.30	4.60
0	+2	39.82	23.06	14.53	9.74	6.84	4.99
3G_3	3G_5	H, Oe					
+3	+5	14.39	8.33	5.24	3.51	2.47	1.80
+3	+4	21.06	12.19	7.67	5.14	3.61	2.63
+2	+4	16.28	9.42	5.93	3.97	2.79	2.04
+2	+3	25.38	14.69	9.25	6.20	4.35	3.17
+1	+3	18.70	10.82	6.81	4.56	3.21	2.34
+1	+2	31.64	18.31	11.53	7.72	5.42	3.95
0	+2	21.86	12.65	7.97	5.34	3.75	2.73
0	+1	40.99	23.72	14.93	10.00	7.03	5.12
-1	+1	26.12	15.12	9.52	6.38	4.48	3.26
-2	0	31.97	18.50	11.65	7.80	5.48	4.00
-3	-1	39.89	23.09	14.54	9.74	6.84	4.99
3G_5	3G_4	H, Oe					
+2	+4	36.54	21.13	13.30	8.90	6.25	4.56
+1	+3	36.05	20.84	13.11	8.78	6.16	4.49
0	+2	34.35	19.85	12.49	8.36	5.87	4.28
-1	+1	31.92	18.45	11.61	7.77	5.46	3.98
-2	0	29.17	16.86	10.61	7.10	4.99	3.63
-3	-1	26.39	15.26	9.60	6.43	4.51	3.29
-4	-2	23.78	13.74	8.65	5.79	4.06	2.96
-4	-3	46.17	26.68	16.78	11.23	7.88	5.75
-5	-3	21.41	12.38	7.79	5.21	3.66	2.67
-5	-4	33.89	19.59	12.33	8.25	5.79	4.22

Особенности зеемановской структуры (антипересечения и пересечения магнитных компонент)

Особенностями зеемановского расщепления являются антипересечения и пересечения магнитных подуровней. Для нахождения минимального энергетического расстояния между магнитными подуровнями с $M = 0$ в шейке антипересечения и соответствующего ей значения

Таблица 7. Доказательство линейности при трех значениях магнитного поля H

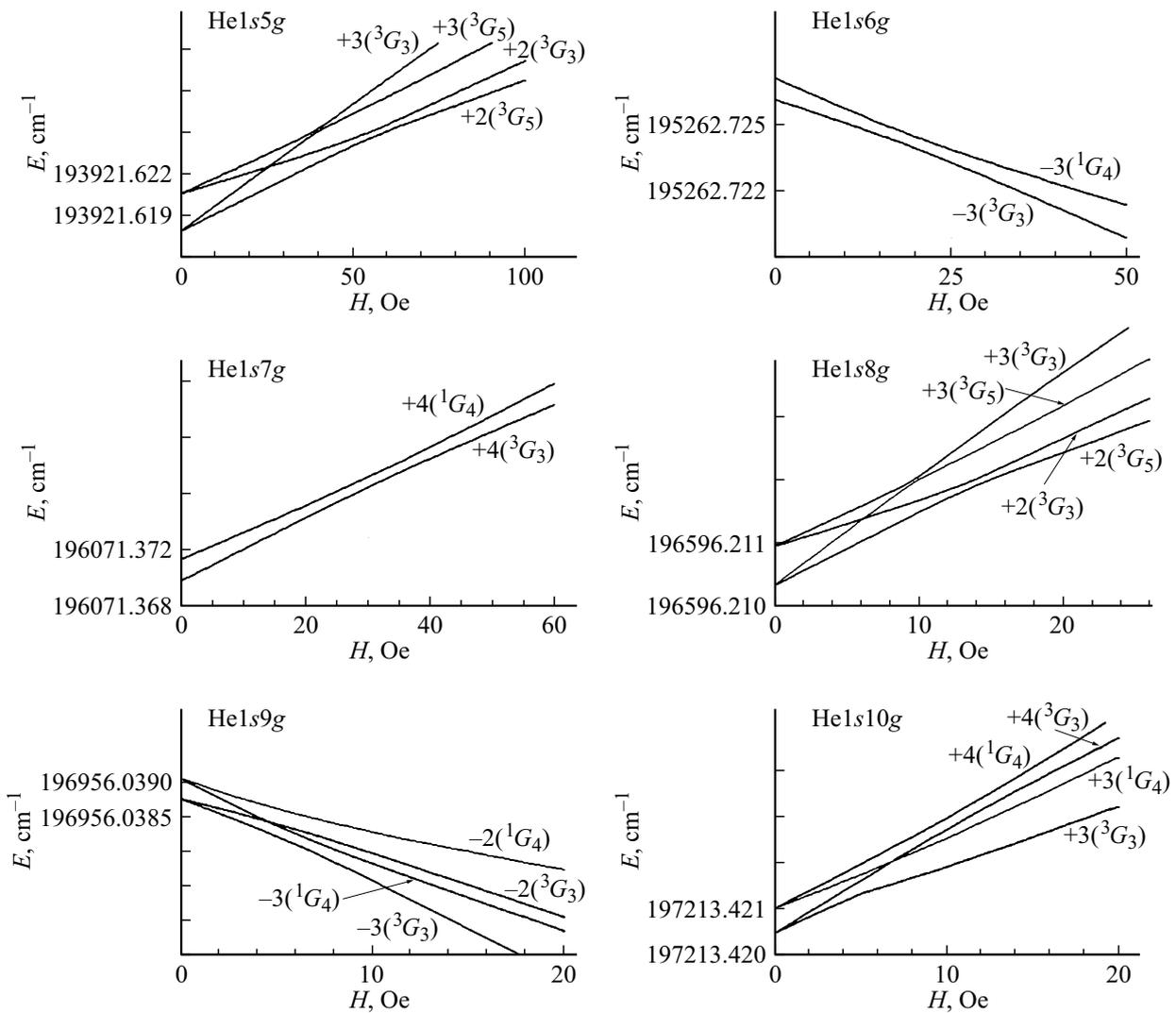
Уровни	Энергии	$\Delta E(H)^{+1 \rightarrow 0}$	$\Delta E(H)^{-1 \rightarrow 0}$	$\Delta E(H)^{+1 \rightarrow 0}$	$\Delta E(H)^{-1 \rightarrow 0}$	$\Delta E(H)^{+1 \rightarrow 0}$	$\Delta E(H)^{-1 \rightarrow 0}$
		1s5g					
		$H_1 = 0.1$ Oe		$H_2 = 0.4$ Oe		$H_3 = 1$ Oe	
3G_4	193921.614948739	0.000004842	0.000004841	0.000019369	0.000019 362	0.000048434	0.000048393
3G_5	193921.617719262	0.000005604	0.000005605	0.000022417	0.000022 419	0.000056036	0.000056053
3G_3	193921.620238142	0.000003499	0.000003499	0.000013995	0.000013 995	0.000034990	0.000034988
1G_4	193921.621933101	0.000004730	0.000004730	0.000018918	0.000018 922	0.000047284	0.000047312
		1s6g					
		$H_1 = 0.1$ Oe		$H_2 = 0.3$ Oe		$H_3 = 0.7$ Oe	
3G_4	195262.723082377	0.000004842	0.000004841	0.000014527	0.000014 520	0.000033906	0.000033871
3G_5	195262.724684231	0.000005604	0.000005605	0.000016812	0.000016 815	0.000039224	0.000039238
3G_3	195262.726141773	0.000003499	0.000003499	0.000010497	0.000010 496	0.000024494	0.000024492
1G_4	195262.727124343	0.000004730	0.000004730	0.000014188	0.000014 192	0.000033098	0.000033121
		1s7g					
		$H_1 = 0.1$ Oe		$H_2 = 0.15$ Oe		$H_3 = 0.35$ Oe	
3G_4	196071.368738129	0.000004842	0.000004840	0.000007263	0.000007 260	0.000016951	0.000016937
3G_5	196071.369746173	0.000005604	0.000005605	0.000008406	0.000008 407	0.000019613	0.000019618
3G_3	196071.370663981	0.000003499	0.000003499	0.000005248	0.000005 248	0.000012247	0.000012246
1G_4	196071.371283543	0.000004730	0.000004731	0.000007094	0.000007 096	0.000016551	0.000016560
		1s8g					
		$H_1 = 0.09$ Oe		$H_2 = 0.1$ Oe		$H_3 = 0.32$ Oe	
3G_4	196596.209656481	0.000004357	0.000004356	0.000004842	0.000004 840	0.000015500	0.000015482
3G_5	196596.210331441	0.000005044	0.000005044	0.000005604	0.000005 605	0.000017931	0.000017937
3G_3	196596.210946275	0.000003149	0.000003149	0.000003499	0.000003 499	0.000011197	0.000011196
1G_4	196596.211361727	0.000004257	0.000004258	0.000004730	0.000004 731	0.000015131	0.000015142
		1s9g					
		$H_1 = 0.06$ Oe		$H_2 = 0.07$ Oe		$H_3 = 0.26$ Oe	
3G_4	196956.037863250	0.000002905	0.000002904	0.000003389	0.000003 388	0.000012595	0.000012578
3G_5	196956.038337114	0.000003363	0.000003363	0.000003923	0.000003 923	0.000014568	0.000014574
3G_3	196956.038768917	0.000002099	0.000002099	0.000002449	0.000002 449	0.000009098	0.000009097
1G_4	196956.039060906	0.000002838	0.000002839	0.000003311	0.000003 312	0.000012293	0.000012304
		1s10g					
		$H_1 = 0.04$ Oe		$H_2 = 0.05$ Oe		$H_3 = 0.14$ Oe	
3G_4	197213.420160634	0.000001937	0.000001936	0.000002421	0.000002 420	0.000006780	0.000006774
3G_5	197213.420505980	0.000002242	0.000002242	0.000002802	0.000002 802	0.000007845	0.000007847
3G_3	197213.420820757	0.000001400	0.000001400	0.000001749	0.000001 749	0.000004899	0.000004898
1G_4	197213.421033729	0.000001892	0.000001892	0.000002365	0.000002 366	0.000006620	0.000006625

магнитного поля в программе MathCad использовался ряд специальных функций, т.е. определялся минимум разности двух функций $E_i - E_k$, где i и k — антипересекающиеся компоненты. Дополнительно исследовалась окрестность вблизи поля антипересечения, т.е. тот интервал, в котором минимальный энергетический интервал ΔE одинаков со всеми приведенными в табл. 5 знаками. Эта величина составляет ошибку ΔH . Фрагменты некоторых антипересечений магнитных подуровней для

всех шести исследованных конфигураций представлены на рисунке и в табл. 5.

Пересечения зеемановских подуровней с $\Delta M = \pm 1, \pm 2$ определялись при условии $E_i(H) - E_k(H) = 0$ с точностью 10^{-9} см^{-1} , где i и k — пересекающиеся подуровни.

Поля пересечений зеемановских компонент с $\Delta M = \pm 1, \pm 2$ представлены в табл. 6 в области изменения магнитного поля $0 \sim 40$ Oe.



Фрагменты зависимостей энергий зеемановских подуровней с $\Delta M = 0$ в области антипересечений.

В табл. 5 и 6 значения магнитных полей расположены не по возрастанию, а для одинаковых во всех 6 конфигурациях пар пересекающихся или антипересекающихся зеемановских подуровней. Из табл. 6 видно, что пересечения начинаются при небольших значениях напряженности магнитного поля H у конфигурации $1s\ 10g$. По мере уменьшения главного квантового числа n g -электрона эти значения возрастают, но вполне доступны для экспериментального определения. Указанные выше нулевые невязки по энергиям позволяют надеяться, что данные табл. 5 и 6 верны.

Гиромагнитные отношения уровней, рассчитанные по зеемановскому расщеплению

Гиромагнитные отношения уровней при $H \neq 0$ можно определять только в линейной области. Условие линейности такое: расстояние между зеемановскими

компонентами с положительными и отрицательными значениями M по отношению к $M = 0$ должны быть одинаковы. Мы провели такое исследование для трех значений магнитного поля H . Результаты представлены в табл. 7, из которой видно, что области линейности для разных конфигураций разные. Лучше всего линейность наблюдается для минимального поля в каждой конфигурации. С усилением магнитного поля согласие ухудшается в последних знаках после запятой.

Гиромагнитные отношения рассчитывались по известной формуле:

$$g_i = \sum_{k=1}^4 \alpha_{ik}^2 g^k, \quad (11)$$

где i — номер строки, k — номер столбца, g^k — LS -связные гиромагнитные отношения, α_{ik} — коэффициенты промежуточной связи, полученные при численной диагонализации матрицы оператора энергии с учетом взаимодействия атома с магнитным полем. Она

Таблица 10. Коэффициенты промежуточной связи для конфигурации $1s5g$ в магнитном поле $H = 0$ Ое

Уровень	3G_4	3G_5	3G_3	1G_4
3G_4	-0.859053516250295	0	0	0.511885784348427
3G_5	0	1	0	0
3G_3	0	0	1	0
1G_4	-0.511885784348427	0	0	-0.859053516250295

и 1G_4 совпали с таковыми при диагонализации матрицы оператора энергии 2-го ранга в $LSJM$ представлении в отсутствие поля. Это понятно из анализа матрицы оператора энергии (12). В линейной области магнитные поля очень малы и умноженные на магнетон Бора эти элементы становятся практически нулями. В итоге мы получаем квазидиагональную матрицу типа (1). Сказанное подтверждается результатами численной диагонализации матрицы оператора энергии (12). В качестве иллюстрации приведем коэффициенты промежуточной связи для конфигурации $1s5g$ при гарантированном линейном магнитном поле $H = 0.1$ Ое. Соответствующие коэффициенты промежуточной связи приведены в табл. 9. Для сравнения приведем коэффициенты промежуточной связи при $H = 0$ (табл. 10).

Видно, что на главной диагонали коэффициентов промежуточной связи расположены большие числа, что говорит о том, что матрица оператора энергии (12) записана правильно. Самые большие коэффициенты, близкие к единице, относятся к уровням 3G_5 и 3G_3 с единственным значением квантового числа J в рассматриваемых конфигурациях. Поэтому и гиромагнитные отношения этих уровней оказались равными LS -связным аналогам. Коэффициенты уровней 3G_4 и 1G_4 значительно меньше единицы, поэтому соответствующие гиромагнитные отношения отличаются от LS -связных аналогов (табл. 8). Большинство величин в таблице 9 практически нули, что подтверждает проведенный выше анализ матрицы оператора (12). Также из сравнения табл. 9 и 10 видно, что магнитное поле в линейной области незначительно влияет на коэффициенты промежуточной связи и гиромагнитные отношения.

Характер связи в исследованных конфигурациях $1sng$ таков: гиромагнитное отношение уровня 3G_4 находится где-то посередине между LS - и LK -типами связи (табл. 8), гиромагнитное отношение уровня 1G_4 ближе к LS -связи. Гиромагнитные отношения уровней с единственным значением J оказались точно LS связными. Таким образом, рассматриваемые системы в целом ближе к LS -связи. Поэтому классификация всех конфигураций гелия в приближении LS -связи оправдана [4].

В заключение сформулируем основные результаты, полученные в настоящей работе. Исследована тонкая структура и зеемановское расщепление высоковозбужденных конфигураций $1sng$ ($n = 5 \div 10$). Определены параметры тонкой структуры в отсутствие поля с нулевыми невязками по энергиям. Исследовано зеемановское

расщепление и определены его особенности (пересечения и антипересечения магнитных подуровней). В линейной области определены гиромагнитные отношения по зеемановскому расщеплению. Показано, что по коэффициентам промежуточной связи в отсутствие поля наблюдаются значительные отступления от LS -связи, а сравнение гиромагнитных отношений, определенных по зеемановскому расщеплению, показало близость 3-х уровней к LS -связи, и только один уровень 3G_4 занимает промежуточное положение между LS - и LK -типами связей. Сделан вывод, что в линейной области магнитное поле незначительно влияет на коэффициенты промежуточной связи, и как следствие — на гиромагнитные отношения.

Список литературы

- [1] Анисимова Г.П., Горбенко А.П., Долматова О.А., Крылов И.Р., Машек И.Ч., Цыганкова Г.А. // Опт. и спектр. 2016. Т. 120. № 2. С. 192; Anisimova G.P., Gorbenko A.P., Dolmatova O.A., Krylov I.R., Mashek I.Ch., Tsygankova G.A. // Opt. Spectrosc. 2016. V. 120. N 2. P. 184.
- [2] Анисимова Г.П., Волкова Л.А., Жихарева Н.В., Капелькина Е.Л. // Опт. и спектр. 2001. Т. 90. № 6. С. 885; Anisimova G.P., Volkova L.A., Zhikhareva N.V., Kapel'kina E.L. // Opt. Spectrosc. 2001. V. 90. N 6. P. 795.
- [3] Анисимова Г.П., Волкова Л.А., Семенов Р.И. // Опт. и спектр. 2002. Т. 92. № 4. С. 543; Anisimova G.P., Volkova L.A., Semenov R.I. // Opt. Spectrosc. 2002. V. 92. N 4. P. 492.
- [4] NIST ASD Levels Output (2013).
- [5] Anisimova G.P., Mashek I.Ch., Dolmatova O.A., Gorbenko A.P., Semenov R.I., Tchoffo M.L., Tsygankova G.A. // Am. J. Mod. Phys. 2014. V. 3. N 4. P. 143.
- [6] Юцис А.П., Савукина А.Ю. Математические основы теории атома. Вильнюс. 1973. 479 с.
- [7] Анисимова Г.П., Семенов Р.И., Тучкин В.И., Чаблин Р.В. // Опт. и спектр. 1994. Т. 76. № 4. С. 551; Anisimova G.P., Semenov R.I., Tuchkin V.I., Chablin R.V. // Opt. Spectrosc. 1994. V. 76. N 4. P. 489.
- [8] Соболев И.И. Введение в теорию атомных спектров. М.: Изд. физ.-мат. лит., 1963. 640 с.
- [9] Green J.B., Eichelberger J.F. // Phys. Rev. 1939. V. 56. N 1. P. 51.
- [10] Kaufman V., Sugar J. // J. Phys. Chem. Ref. Data. 1988. V. 17. N 4. P. 1679.