

АКАДЕМИЯ НАУК АРМЯНСКОЙ ССР

АСТРОФИЗИКА

ТОМ 16

ФЕВРАЛЬ, 1980

ВЫПУСК 1

УДК 523.035.33

МЕЖКОНФИГУРАЦИОННЫЕ ПЕРЕХОДЫ C III, N IV, OV В СПЕКТРАХ ЗВЕЗД ВОЛЬФА—РАЙЕ

А. Ф. ХОЛТЫГИН

Поступила 5 февраля 1979

Вероятности ряда межконфигурационных переходов, имеющих важное значение для интерпретации спектров звезд Вольфа—Райе, вычислены в многоконфигурационном приближении для ионов C III, N IV, OV. Для независимой оценки вероятностей использовались лабораторные интенсивности линий. Результаты, полученных для переходов, разрешенных в одноконфигурационном приближении, находятся в хорошем согласии с теоретическими и экспериментальными данными других авторов.

1. Развитый эмиссионный спектр C III, N IV и отчасти OV является характерной особенностью звезд Вольфа—Райе (WR) [1—5]. Ряд линий этих ионов наблюдается также в спектрах планетарных туманностей, звезд Of, квазаров и других объектов. Детальный анализ эмиссионных звездных спектров в первую очередь требует знания энергетической схемы и вероятностей переходов для изучаемых ионов. В рамках одноконфигурационного приближения (ОКП) эта задача была рассмотрена в работах [6—8]. Структура возбужденных состояний C III, N IV, OV связана с электронными конфигурациями $2snl$ и $2pnl$. Полное описание этих состояний возможно только при учете межконфигурационных (МК) эффектов. Такой учет необходим, поскольку в спектрах звезд WR наблюдаются достаточно интенсивные МК линии иона C III: $\lambda 4159 (2p3p^3D - 2s5f^3F^o)$, $\lambda 7037 (2p3s^1P^o - 2s4d^1D)$, $\lambda 8352 (2s4d^3D - 2p3d^3F^o)$, $\lambda 10545 (2s4p^3P^o - 2p3p^3S)$ и др. [1—5], аналогичные переходы есть и у N IV и OV. Существенно также и то, что от МК эффектов заметно зависят вероятности, а следовательно, и интенсивности многих линий, разрешенных в схеме ОКП, таких, как, например, $\lambda 5696 (2s3p^1P^o - 2s3d^1D)$ иона C III и др. МК линии сравнимы по интенсивности с линиями, разрешенными в ОКП, даже для наиболее интенсивных одноконфи-

гурационных (ОК) линий. Аналогичная ситуация имеет место для ионов N IV и O V, но их звездный спектр в видимой и инфракрасной областях спектра менее богат линиями, в основном вследствие того, что наиболее интенсивные линии этих ионов лежат в недостаточно изученной ультрафиолетовой области спектра.

В спектрах звезд WR наблюдаются также МК и разрешенные в ОКП переходы, связанные с уровнями возбужденных конфигураций $2pn/$. Представляет большой интерес механизм заселения таких уровней. Прямая радиативная рекомбинация из состояния $2s^2S$ ионов C IV, N V, O VI, являющаяся основным механизмом заселения для конфигураций $2sn/$, запрещена в ОКП правилами отбора, а рекомбинация из состояния $2p^2P^o$ ионов C IV, N V, O VI, видимо, мало эффективна, поскольку населенность возбужденного состояния $2p^2P^1$ существенно меньше, чем основного состояния $2s^2S$. Наличие МК эффектов приводит к возможности заселения уровней конфигураций $2pn/$ через МК переходы: $2pn/^{1,3}L_j \rightarrow 2sn/^{1,3}L_j$. Кроме того, становится возможной фоторекомбинация из основного состояния $2s^2S$ ионов C IV, N V, O VI. Возможно, что некоторое значение при заселении этих уровней имеют также диэлектронная рекомбинация через автоионизационные термы $2pn/^{1,3}L$ и ступенчатое возбуждение из основного состояния $2s^2S$ изучаемых ионов.

Основой анализа звездных спектров является лабораторный спектр. Обращает на себя внимание большое сходство лабораторного и звездного спектров ионов C III, N IV, O V, что свидетельствует о возможной близости механизмов их образования. Как и в звездном, так и в лабораторном спектрах наблюдается много интенсивных МК линий [9—11]. Вероятности МК переходов в значительной степени определяются энергетической структурой, сильно различающейся у рассматриваемых ионов. Поэтому, как правило, МК линии, интенсивные в спектре одного иона, будут слабыми в спектре другого или вовсе не будут наблюдаться. Таким образом, общая задача интерпретации эмиссионного спектра звезд WR должна рассматриваться с учетом МК эффектов, имеющих наибольшее значение именно для ионов C III, N IV, O V.

В настоящей работе рассмотрены МК эффекты для ионов C III, N IV, O V и получены вероятности разрешенных в ОКП и МК переходов. Определению вероятностей для этих ионов посвящено достаточно много работ, однако они ограничиваются в основном лишь разрешенными в ОКП переходами. Укажем только работу [12], в которой получены вероятности большого числа переходов, разрешенных в ОКП, в приближении, близком к использованному в настоящей работе.

2. Наиболее естественно межконфигурационные эффекты можно учесть в рамках многоконфигурационного приближения (МКП). Много-

конфигурационные (МНК) волновые функции разлагаются по одноконфигурационным. Коэффициенты разложения определяются диагонализацией матрицы энергии. Для изучаемых ионов C III, N IV, O V термы хорошо описываются LS связью, а релятивистские эффекты малы по сравнению с межконфигурационными, поэтому использовался нерелятивистский гамильтониан. В атомных единицах

$$H = \sum_{i=1}^n \left(-\frac{1}{2} \nabla_i^2 - Z/r_i \right) + \sum_{i < j}^n \frac{1}{r_{ij}}, \quad (1)$$

где n — число электронов; остальные обозначения обычные. Матричные элементы гамильтониана вычислялись в LS связи по ОК волновым функциям, полученным в [6, 7]. Матричные элементы $\langle \gamma \pi L S | H | \gamma' \pi' L' S' \rangle = 0$, если полный орбитальный момент $L \neq L'$, полный спин $S \neq S'$ и четности $\pi \neq \pi'$, поэтому матрица энергии распадается на блоки, соответствующие одинаковым π , L , S . Таким образом, в МНК разложении волновой функции терма LS конфигурации K будут присутствовать только волновые функции конфигураций, имеющих одинаковую четность с четностью конфигурации K, и терм LS. Тогда МНК волновая функция терма LS конфигурации K представляется в виде

$$\tilde{\psi}(KLS) = \sum_i \alpha_i (K_i LS) \psi(K_i LS), \quad (2)$$

где $\psi(K_i LS)$ — ОК волновая функция терма LS конфигурации K. Коэффициенты разложения α_i удовлетворяют условию $\sum_i \alpha_i^2 = 1$. Практически суммирование в (2) производится по ограниченному набору конфигураций. Априори не ясно, какие конфигурации следует включать в разложение (2). Из-за некоммутативности гамильтониана (1) и операторов переходов, увеличение числа поправочных конфигураций в разложении (2) уточняет энергии термов, но не обязательно улучшает вероятности переходов. Результаты наших расчетов показывают, что основной вклад в разложение (2) дают 2—3 конфигурации типа $2snl$, $2pnl$ с перекрывающимися или близкими термами. Поэтому мы включили в базис разложения (2) конфигурации $2snl$, при $n \leq 6$ и $2pnl$, при $n \leq 4$. Приведем для примера МНК разложение волновой функции терма $2p3s \ ^1P^0$ иона C III:

$$\begin{aligned} \tilde{\psi}(2p3s \ ^1P^0) = & 0.026 \psi(2s2p \ ^1P^0) + 0.178 \psi(2s3p \ ^1P^0) + \\ & + 0.686 \psi(2p3s \ ^1P^0) - 0.699 \psi(2s4p \ ^1P^0) - 0.067 \psi(2s5p \ ^1P^0) - \\ & - 0.052 \psi(2p3d \ ^1P^0) - 0.031 \psi(2s6p \ ^1P^0) - 0.032 \psi(2p4s \ ^1P^0). \end{aligned}$$

Аналогичные разложения получены для всех термов указанных конфигураций ионов C III, N IV, O V. Энергии термов, соответствующие МНК

волновым функциям, определялись как собственные значения матрицы энергии. Учет межконфигурационных эффектов в рассматриваемом базисе уменьшает разность экспериментальных и теоретических энергий до $500\text{--}3000\text{ см}^{-1}$ по сравнению с $10\,000\text{--}20\,000\text{ см}^{-1}$ в ОКП. В табл. 1 даны энергии термов конфигураций $2s3l$, $2p3l$ в ОКП, МКП и экспериментальные данные [9—11].

Таблица 1

ЭНЕРГИИ ТЕРМОВ В см^{-1} , ВЫЧИСЛЕННЫЕ В ОКП— E_1 ,
МКП— E_2 , И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ — E_3

Терм	Ион	E_1	E_2	E_3	$E_2 - E_3$
$2s3p\ ^1P^o$	C III	249148*	261395	258931	+ 2646
	N IV	394704	408025	404522	+ 3503
	O V	569077	584133	580825	+ 3308
$2s3p\ ^3P^o$	C III	244824	259155	259720	— 565
	N IV	391434	403966	406005	— 2039
	O V	562646	579352	582879	— 3487
$2p3s\ ^1P^o$	C III	297806	311126	310006	+ 1120
	N IV	458747	472178	473029	— 851
	O V	640604	665470	664486	+ 984
$2p3s\ ^3P^o$	C III	292889	309239	308250	+ 989
	N IV	450033	466537	465454	+ 1083
	O V	632527	655177	653249	+ 1928
$2p3d\ ^1P^o$	C III	329805	348261	345713	+ 1548
	N IV	506438	520197	518610	+ 1587
	O V	697930	720997	719275	+ 1722
$2p3d\ ^3P^o$	C III	323594	339631	340127	— 496
	N IV	495070	513505	511535	+ 1970
	O V	684916	707302	708051	— 749

* Используется обычное спектроскопическое обозначение термов: $n/^{1,3}L$ для $2sn/^{1,3}L$ и $n/^{1,3}L$ для $2pn/^{1,3}L$.

Вероятности дипольных переходов получены по обычным формулам:

$$gW(\gamma SL \rightarrow \gamma' SL') = 2.13 \cdot 10^{10} \Delta E \cdot S(\gamma SL \rightarrow \gamma' SL') \text{ с}^{-1}, \quad (3)$$

здесь ΔE — разность энергий термов в атомных единицах; g — статистический вес термина $\gamma' SL'$, если рассматриваются вероятности перехода для излучения; S — сила линии в МКП, определяемая через ОК приведенные матричные элементы операторов переходов

$$\bar{S}(\gamma SL \rightarrow \gamma' SL') = \left\{ \sum_{i,j} x_i x_j (\gamma_i LS \| Q_i \| \gamma_j L'S) \right\}^2, \quad (4)$$

где Q_i — оператор дипольных переходов.

Суммирование в (4) производится по всем конфигурациям, входящим в МНК разложение волновых функций термов γSL и $\gamma'S'L'$. В табл. 2 для иллюстрации точности используемого приближения представлены вероятности нескольких разрешенных в ОКП переходов и одного интеркомбинационного перехода, которые сравниваются с расчетами в МКП [12—14]. Сравнение вычисленных вероятностей с экспериментальными данными [15] показывает, что рассмотренный вариант МКП существенно уточняет вероятности переходов по сравнению с полученными нами ранее в ОКП [6, 8].

Таблица 2

ВЕРОЯТНОСТИ НЕКОТОРЫХ ПЕРЕХОДОВ, РАЗРЕШЕННЫХ В ОКП, ВЫЧИСЛЕННЫЕ В ОКП — A_1 , В МКП — A_2 , И ПОЛУЧЕННЫЕ В РАБОТАХ [N] — A_3

Переход	Ион	λ (Å)	A_1	A_2	A_3	N
$2s^2\ ^1S - 2s2p\ ^1P^o$	C III	977	$2.54+9^*$	$1.67+9$	$1.79+9$	[12]
	N IV	765	$3.41+9$	$2.34+9$	$2.32+9$	[12]
	O V	630	$4.12+9$	$2.77+9$	$2.87+9$	[12]
$2s^2\ ^1S - 2s2p\ ^3P^o$	C III	1909	$1.90+2$	$7.70+1$	$9.60+1$	[14]
	N IV	1486	$1.06+3$	$4.28+2$	—	—
	O V	1218	$4.04+3$	$2.72+3$	$1.88+3$	[13]
$2s2p\ ^1P^o - 2p^2\ ^1S$	C III	1247	$1.24+9$	$2.28+9$	$2.11+9$	[14]
	N IV	955	$1.75+9$	$3.11+9$	$3.11+9$	[12]
	O V	774	$2.26+9$	$4.13+9$	$4.02+9$	[12]
$2s2p\ ^1P^o - 2p^2\ ^1D$	C III	2304	$1.98+8$	$1.49+8$	$1.41+8$	[14]
	N IV	1719	$3.08+8$	$2.54+8$	$2.38+8$	[12]
	O V	1371	$4.08+8$	$3.48+8$	$3.48+8$	[12]
$2s2p\ ^3P^o - 2p^2\ ^3P$	C III	1176	$1.47+9$	$1.39+9$	$1.35+9$	[14]
	N IV	913	$1.94+9$	$1.95+9$	$1.80+9$	[12]
	O V	760	$2.39+9$	$2.46+9$	$2.26+9$	[13]

* $2.54+9 = 2.54 \cdot 10^9\ c^{-1}$.

3. Основная трудность, встречающаяся при изучении межконфигурационных переходов, — недостаток экспериментальных значений вероятностей. Частично эту трудность можно преодолеть, если использовать лабораторные интенсивности МК линий. Рассмотрим приближенный метод оценки вероятностей переходов, не требующий знания детальных условий в излучающей лабораторной плазме. При получении спектров в лабораторных условиях обычно можно пренебречь эффектами самопоглощения в линиях. Тогда интенсивность излучения в линии $i - j$

$$I_{ij} = N_j h \nu_{ij} A_{ij} V, \quad (5)$$

где N_i — населенность уровня j , $h \nu_{ij}$ — энергия перехода $i - j$, A_{ij} — соответствующая вероятность перехода, V — объем излучающего газа. Для переходов с общим верхним уровнем j легко получить соотношение

$$\frac{I_{ij}}{J_{kj}} = \frac{\lambda_{kj} A_{ji}}{\lambda_{ij} A_{ji}} \quad (6)$$

позволяющее по известной вероятности разрешенного в ОКП перехода и лабораторным интенсивностям линий получить вероятность МК перехода. Вероятности, определенные этим методом, имеют лишь оценочный характер, в основном из-за неточностей в определении интенсивностей. Однако они все же могут быть критерием правильности выбранной схемы МКП. Вероятности ряда МК переходов, как вычисленные в МКП, так и полученные по лабораторным интенсивностям для C III и N IV, приведены в табл. 3. В табл. 4 наши результаты, полученные для O V, сравниваются с данными работы [13]. Вероятности переходов получены для всех МК переходов между термами конфигураций $2snl$ при $n \leq 6$ и $2pnl$ при $n \leq 4$.

Таблица 3

ВЕРОЯТНОСТИ МК ПЕРЕХОДОВ ИОНОВ C III, N IV,
ПОЛУЧЕННЫЕ В МКП — A_1 И ПО ЛАБОРАТОРНЫМ
ИНТЕНСИВНОСТЯМ ЛИНИЙ — A_2

Ион	Переход*	λ (Å)**	A_1	A_2
C III	$2s^2 \ ^1S - 3s' \ ^1P^0$	322.6	$8.81+8$	$3.7+8$
	$2p^2 \ ^1S - 3p \ ^1P^0$	1308.7	$5.24+7$	$5.8+7$
	$2p^2 \ ^1D - 3p \ ^1P^0$	884.5	$5.17+8$	
	$2p^2 \ ^3P - 3p \ ^3P^0$	818.1	$3.66+7$	
	$2p^2 \ ^1S - 4p \ ^1P^0$	714.9	$4.00+8$	$3.8+8$
	$3s' \ ^1P^0 - 4d \ ^1D$	7037.2	$5.79+7$	
	$3s' \ ^3P^0 - 4d \ ^3D$	7606	$3.66+5$	
	$3p' \ ^1D - 5f \ ^1F^0$	6350.8	$1.13+7$	$1.2+7$
	$3d' \ ^1F^0 - 5g \ ^1G$	19200	$5.73+6$	
	$3d' \ ^3F^0 - 5g \ ^3G$	7597	$4.64+7$	$7.7+7$
	$4p \ ^3P^0 - 3p' \ ^3S$	10545	$4.44+6$	
N IV	$2p^2 \ ^1S - 3p \ ^1P^0$	591.2	$3.13+8$	
	$2p^2 \ ^1D - 3p \ ^1P^0$	463.7	$1.78+8$	
	$3s' \ ^1P^0 - 4d \ ^1D$	2402.8	$4.75+8$	
	$3p' \ ^1P - 4p \ ^1P^0$	3825.1	$3.09+7$	$4.3+7$
	$3p' \ ^3P - 4f \ ^3F^0$	3129	$4.61+7$	
	$3d \ ^3P^0 - 5d \ ^3D$	2225	$1.07+8$	$1.1+8$
	$3d' \ ^1F^0 - 5g \ ^1G$	2081.0	$8.10+8$	$4.6+8$
	$3d' \ ^3F^0 - 6g \ ^3G$	1245	$3.26+8$	$1.8+8$

* Используется обычное спектроскопическое обозначение термов: $nl^{1,3}L$ для $2snl^{1,3}L$ и $nl'^{1,3}L$ для $2pnl^{1,3}L$.

** Для триплетов приведена длина волны, усредненная по уровням термов.

Общий вывод, который может быть сделан на основании проведенных расчетов вероятностей и сравнения с лабораторным и звездным спектрами, состоит в том, что рассмотренное многоконфигурационное приближение для ионов C III, N IV, O V объясняет появление всех наблюдавшихся в лабораторном и звездном спектрах МК линий этих ионов и дает реальные вероятности переходов.

Таблица 4

ВЕРОЯТНОСТИ МК ПЕРЕХОДОВ ИОНА OV, В МКП—A₁
И ПОЛУЧЕННЫЕ В РАБОТЕ [13]—A₂

Ион	Переход *	λ (Å)	A ₁	A ₂
O V	2p ² ¹ S — 3p ¹ P ^o	341.4	1.01+8	1.46+8
	2p ² ¹ D — 3p ¹ P ^o	286.4	5.72+9	4.55+9
	2p ² ³ P — 3p ³ P ^o	270.8	1.83+8	1.95+8
	2p ² ¹ S — 4p ¹ P ^o	222.2	5.80+9	
	2p ² ³ P — 4p ³ P ^o	191.5	1.41+9	
	3d' ¹ F ^o — 5g ¹ G	1047.9	5.89+8	
	3d' ³ F ^o — 5g ³ G	865.6	2.10+8	

В заключение автор выражает благодарность А. А. Никитину и Т. Х. Феклистовой за полезное обсуждение работы.

Ленинградский государственный
университет

INTERCONFIGURATION TRANSITIONS OF CIII, NIV, OV IN SPECTRA OF WOLF-RAYET STARS

A. F. KHOLTYGIN

The transition probabilities for some interconfiguration transitions of CIII, NIV, OV, important for interpretation of WR stars spectra are obtained by the configuration interaction method. These probabilities are also estimated using laboratory intensities of lines. The obtained values for transitions allowed in approximations of one configuration are in good agreement with theoretical and experimental results of other authors.

ЛИТЕРАТУРА

1. *L. H. Aller, D. J. Faulkner, Ap. J., 140, 167, 1964.*
2. *B. Edlen, Vistas in Astronomy, 2, 1456, 1956.*
3. *L. V. Kuhl, Ap. J., 145, 715, 1966.*
4. *A. D. Code, R. C. Bless, Ap. J., 139, 787, 1964.*
5. *T. G. Barnes, D. L. Lambert, A. E. Potter, Ap. J., 187, 73, 1974.*
6. *А. Ф. Холтыгин, Вестн. ЛГУ, № 19, 127, 1977.*
7. *А. А. Никитин, А. Ф. Холтыгин, Т. Х. Феклистова, Публ. Тартуской обс., 45, 56, 1977.*
8. *А. А. Никитин, А. Ф. Холтыгин, Т. Х. Феклистова, Публ. Тартуской обс., 45, 63, 1977.*
9. *K. Bockasten, K. B. Johanson, Ark. Fysik, 38, 563, 1968.*
10. *C. E. Moore, NSRDS-NBS, 3, Section 3, 1971.*
11. *C. E. Moore, NSRDS-NBS, 3, Section 4, 1971.*
12. *D. G. Hummer, D. Norcross, M. N., 168, 263, 1974.*
13. *M. Malinowski, Astron. Astrophys., 43, 101, 1975.*
14. *H. P. Nussbaumer, P. J. Storey, Astron. Astrophys., 64, 139, 1978.*
15. *J. R. Buchet, M. C. Buchet-Poulizak, M. Druetta, J. Opt. Soc. Am., 66, 842, 1976.*