

УДК: 524.316.01/02—355—16

ТЕОРЕТИЧЕСКИЙ РАСЧЕТ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО СПЕКТРА И СИЛ ОСЦИЛЛЯТОРОВ Тс II

А. С. БАХТИЯРОВ

Поступила 30 июня 1987

Принята к печати 15 января 1988

Энергетический спектр Тс II рассчитан в предположении одноконфигурационного приближения Хартри—Фока и обобщенной LS-связи. Рассмотрены конфигурации $4d^5 5s$, $4d^6$, $4d^5 5p$, $4d^4 5s^2$ и $4d^4 5s 5p$. Силы осцилляторов получены с использованием нерелятивистских операторов дипольного перехода как в форме «длины», так и в форме «скорости». Теоретический спектр и силы осцилляторов рассматриваются в сравнении с уровнями и интенсивностями линий классифицированного лабораторного спектра Тс II.

1. *Введение.* Линии Тс I впервые были отождествлены [1] в спектрах гигантов и сверхгигантов поздних спектральных классов. Обнаружение нестабильного элемента Тс (время жизни $\sim 2 \cdot 10^5$ лет) в атмосферах звезд явилось значительным аргументом, подтверждающим, что синтез тяжелых элементов происходит в звездах. И если этот синтез происходит в недрах звезд, должен существовать эффективный механизм перемещения вещества недр с атмосферой за время 10^5 лет.

К настоящему времени выделена группа звезд (~ 45) [2—4], названных Тс-звездами, в спектрах которых обнаружены резонансные и субординатные линии Тс I.

В работе [5] была выдвинута гипотеза о возможности отождествления линий Тс II со спектральными особенностями солнечного спектра. Попытка такого отождествления в [6, 7] не увенчалась успехом.

Как было показано в работах [8, 9], для обнаружения Тс в атмосфере Солнца наиболее предпочтительными являются линии переходов между высоковозбужденными уровнями Тс I. Четыре линии Тс I из списка [8, 9] были отождествлены и сделана оценка содержания Тс в атмосфере Солнца ($\lg N_{\text{Тс}} = 1.4 \text{ dex}$ в шкале $\lg N_{\text{H}} = 12 \text{ dex}$) [10]. В работе [11] определено, что содержание Тс в атмосфере Солнца не превышает — 0.6 dex.

Повышенное содержание тяжелых элементов и принадлежность к классам гигантов и сверхгигантов является характерной особенностью звезд с линиями Тс I в спектрах. Эти характеристики могут служить критерием отбора объектов для поиска Тс в атмосферах звезд более ранних спектральных классов. Линии Тс II и их радиационные параметры будут необходимым инструментом такого поиска.

Спектр линий Тс II впервые был получен Метгерсом и Скрибнером [12]. Исследование этих авторов позволило произвести классификацию 10 линий, берущих начало с термов 7S и 5S конфигураций $4d^5 5s$. В работе [13] был идентифицирован первый возбужденный терм 5D конфигурации $4d^6$. При исследовании спектра искрового разряда в области длин волн от 2054 А до 6673 А [14] спектру Тс II приписано 1200 линий.

Наиболее полный список отождествленных термов представлен в [15]. Абсолютные значения энергии термов a^5G , z^5G^o , z^5H^o и z^5F^o содержат неопределенную аддитивную поправку „ x “. Величина поправки определяется точностью выбранного значения энергии уровня в [15] $E({}^6G_0) = 24000.00 \text{ см}^{-1}$, а в [16] $E({}^6G_0) = 21050 \text{ см}^{-1}$. К настоящему времени из 1200 линий Тс II классифицированы 50.

2. Теоретический расчет спектра Тс II. Энергетический спектр Тс II был рассчитан в предположении одноконфигурационного приближения (ОКП) и обобщенной LS -связи для пяти конфигураций $4d^5 5s$, $4d^6$, $4d^4 5p$, $4d^4 5s^2$ и $4d^4 5s 5p$.

В предположении ОКП волновая функция многоэлектронного иона для каждой конфигурации электронов представляется в виде антисимметризованной суперпозиции одноэлектронных волновых функций. Система дифференциальных уравнений Хартри—Фока, определяющих радиальные части одноэлектронных волновых функций, решалась численно, методом итераций.

На основе полученных радиальных волновых функций строились многотермные волновые функции с определенным полным моментом J , как линейные суперпозиции волновых функций со всеми возможными в данной конфигурации орбитальными и спиновыми моментами L и S . Энергетический спектр определялся в результате диагонализации матрицы энергии взаимодействия (электростатического и спин-орбитального) электронов. Алгоритмы метода расчета и описание программ представлены в [17, 18].

В табл. 1 приведено сравнение результатов расчета с измеренным энергетическим спектром Тс II. В целом ОКП правильно отражает поведение лабораторного спектра Тс II (последовательность термов и относительное расположение уровней термов). Средняя абсолютная погрешность $E_{\text{окп}}$, без учета величины аддитивной поправки « x » составляет 3000 см^{-1} .

Таблица 1

ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ СПЕКТР Тс II

Конфигур.	Терм	J	$E_{\text{экс}} (\text{см}^{-1})$	$E_{\text{онп}} (\text{см}^{-1})$	$\frac{\Delta E = E_{\text{экс}} - E_{\text{онп}} }{E_{\text{экс}}}$	$\frac{\partial E_{\text{экс}}}{\partial E_{\text{экс}}} \frac{\Delta E}{E_{\text{экс}}}$ (%)	Коэффициенты разложения многотерм. волнов. функции
1	2	3	4	5	6	7	8
$4d^5 (^6S) 5s$	a^1S	3	0.0	0.0	—	—	100 1S
$4d^6$	a^5D	4	3461.27	5621	2200	62	100 5D
		3	4217.17	6460	2200	53	100 5D
		2	4669.22	6998	2300	50	100 5D
		1	4961.14	7340	2400	48	100 5D
		0	5100.01	7506	2400	47	100 5D
$4d^5 (^6S) 5s$	a^5S	2	12617.20	14609	2000	16	100 5S
$4d^5 (^4G) 5s$	a^5G	2	$23838.39 + x$	26174	2300	10	99 5G
		3	$23917.17 + x$	26237	2300	10	100 5G
		4	$23978.75 + x$	26298	2300	10	100 5G
		5	$24024.80 + x$	26329	2300	10	99 5G
		6	$24000.00 + x$	23305	2300	10	100 5G
		$4d^5 (^6S) 5p$	x^1P^0	2	37767.21	32171	5600
3	38302.80	32527		5800	15	99 1P	
4	39308.38	33093		6200	16	100 1P	
$4d^5 (^6S) 5p$	x^5P^0	3	43500.97	39806	3400	9	98 5P
		2	43741.33	40050	3700	8	98 5P
		1	43905.00	40235	3700	8	98 5P

1	2	3	4	5	6
$4d^5 (^4G) 5p$	z^5G^0	2	$59034.69+x$	56133	2900
		3	$59227.75+x$	56223	3000
		4	$59412.20+x$	56324	3100
		5	$59581.18+x$	56428	3200
		6	$59757.65+x$	56536	3200
$4d^5 (^4G) 5p$	z^5H^0	3	$60535.64+x$	57230	3900
		4	$60594.78+x$	57518	3000
		5	$61243.52+x$	57800	3400
		6	$61716.05+x$	58035	3700
		7	$61940.66+x$	58172	3800
$4d^5 (^4G) 5p$	z^5F^0	1	$60707.68+x$	59032	1700
		2	$61029.24+x$	59355	1700
		3	$61347.68+x$	59739	1600
		4	$61419.15+x$	58861	2600
		5	$61803.08+x$	58831	3000

Таблица 1 (окончание)

7	8
5	$94 {}^5G - 17 {}^5G ({}^4F) + 15 {}^3F ({}^4G)$
5	$94 {}^5G - 17 {}^5G ({}^4F) - 26 {}^5H ({}^4G)$
5	$92 {}^5G - 16 {}^5G ({}^4F) - 33 {}^5H ({}^4G)$
5	$92 {}^5G - 16 {}^5G ({}^4F) - 34 {}^5H ({}^4G)$
5	$93 {}^5G - 14 {}^5G ({}^4F) - 30 {}^5H ({}^4G) - 12 {}^3H ({}^4G)$
5	$95 {}^5H + 26 {}^5G ({}^4G)$
5	$93 {}^5H + 33 {}^5G ({}^4G)$
6	$93 {}^5H + 35 {}^5G ({}^4G)$
6	$94 {}^5H + 32 {}^5G ({}^4G)$
6	$100 {}^5H$
3	$69 {}^5F + 56 {}^5D ({}^4P) - 36 {}^5D ({}^4D) + 15 {}^5F ({}^4F)$
3	$65 {}^5F + 53 {}^5D ({}^4P) - 35 {}^5D ({}^4D) - 12 {}^3F ({}^4G)$
3	$63 {}^5F + 59 {}^5D ({}^4P) - 14 {}^5P ({}^4D) - 27 {}^5P ({}^4P) - 36 {}^5D ({}^4D)$
4	$83 {}^5F - 25 {}^5D ({}^4P) + 18 {}^5D ({}^4D) - 36 {}^5F ({}^4D) - 23 {}^3F ({}^4F)$
5	$92 {}^5F - 26 {}^5F (D) + 23 {}^5F ({}^4F)$

Таблица 2

ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ СИЛЫ ОСЦИЛЛЯТОРОВ Tc II

Переходы; $4d^5 5s - 4d^6 5p$						
Мультиплет	$J_1 - J_2$	$J_{\text{эвб.}} (A)$	$I_{\text{эвб.}}$	gf_L	gf_V	
1	2	3	4	5	6	
$a^7S - z^7P^o$	3-2	2647.01	3000	1.94	1.68	
	3-3	2609.99	2000	2.74	2.32	
	3-4	2543.23	5000	3.61	2.95	
$a^7S - z^6P^o$	3-3	2298.08	30	0.030	0.017	
	3-2	2285.46	15	0.012	0.007	
$a^6S - z^7P^o$	2-3	3892.13	100	0.013	0.037	
	2-2	3975.02	30	0.005	0.015	
$a^6S - z^6P^o$	2-3	3237.02	3000	2.05	2.86	
	2-2	3212.02	2000	1.49	2.07	
	2-1	3195.20	1000	0.907	1.24	
$a^6G - z^6G^o$	6-6	2795.78	500	4.58	4.49	
	6-5	2809.65	150	0.427	0.422	
	5-6	2797.73	10	0.017	0.017	
	5-5	2811.61	1600	3.47	3.43	
	5-4	2825.04	80 _c	0.542	0.54	
	4-5	2807.92	15	0.002	0.002	
	4-4	2821.35	500	2.63	2.62	
	4-3	2836.12	150	0.499	0.499	
	3-4	2816.52	10	0.002	0.002	
	3-3	2831.18	600	1.94	1.93	
	3-2	2846.74	30	0.317	0.318	
	2-3	—	—	0.013	0.013	
	2-2	2840.38	400	1.41	1.41	
	$a^6G - z^6H^o$	6-7	2634.91	1000	5.79	5.11
		6-6	2650.60	20	0.020	0.018
6-5		2684.23	6	0.067	0.060	
5-6		2652.35	600	4.93	4.39	
5-5		2686.03	8	0.002	0.002	
5-4		2733.78	7	0.040	0.037	
4-5		2682.70	600	4.08	3.68	
4-4		2730.23	6	0.026	0.024	
4-3		—	—	0.012	0.011	
3-4		2725.65	400	3.30	3.02	
3-3		—	—	0.044	0.041	
2-3		2724.19	200	2.55	2.37	
$a^6G - z^6F^o$	6-5	2644.50	500	3.34	2.81	
	5-5	2646.24	100	0.394	0.332	
	5-4	2673.41	200	2.08	1.75	
	4-5	2643.01	200	0.068	0.057	
	4-4	2670.11	20	0.382	0.321	
	4-3	2675.22	200	0.848	0.663	
	3-4	—	—	0.052	0.044	
	3-3	2670.82	3	0.231	0.18	
	3-2	2693.74	40	0.695	0.549	
	2-3	—	—	0.015	0.012	
	2-2	2688.04	3	0.19	0.15	
2-1	2711.48	5	0.586	0.466		

Таблица 2 (окончание)

Переходы: $4d^6-4d^55P$					
1	2	3	4	5	6
$a^5D-z^6P^0$	4-3	2496.77	500	0.53	1.10
	3-3	2544.81	400	0.13	0.29
	3-2	2529.34	400	0.26	0.56
	2-3	2574.44	30	0.018	0.042
	2-2	2558.61	300	0.16	0.36
	2-1	2547.93	150	0.095	0.21
	1-2	2577.86	40	0.041	0.093
	1-1	2567.86	250	0.12	0.27
	0-1	2576.28	90	0.054	0.12
$a^5D-z^7P^0$	4-4	2788.80	7	0.0002	0.0006
	4-3	2869.30	30	0.0016	0.0055
	3-4	—	—	0.00003	0.0001
	3-3	—	—	0.0002	0.0007
	3-2	2979.78	7	0.0004	0.0015
	2-3	—	—	0.00001	0.00005
	2-2	3020.45	3	0.0002	0.0007
	1-2	3047.53	15	0.00004	0.0002
	$a^5D-z^5F^0$	4-5	1713	—	1.46
4-4		1725	—	0.26	0.22
4-3		1727	—	0.092	0.076
3-4		1748	—	0.68	0.61
3-3		1750	—	0.26	0.17
3-2		1760	—	0.0021	0.0018
2-3		1764	—	0.30	0.27
2-2		1774	—	0.15	0.13
2-1		1784	—	0.0006	0.0005
1-2		1783	—	0.20	0.17
1-1		1793	—	0.11	0.1
0-1		1799	—	0.11	0.095

* Данные волея линий данного мультиплета имеют приближенное значение из-за энергетической поправки уровней термина z^5F^0 .

Средняя относительная погрешность $E_{\text{ОКП}}$ равна 52% для конфигурации $4d^6$, 11% — $4d^55s$ и 7% — $4d^55p$. Большая относительная погрешность $E_{\text{ОКП}}$ конфигураций $4d^6$ и $4d^55s$ может быть объяснена существованием сильного взаимодействия этих конфигураций [19], которое не учитывается в ОКП.

В последнем столбце табл. 1 приведены коэффициенты разложения многотермной волновой функции, умноженные на 100. Для термов z^5G^0 , z^5H^0 и z^5F^0 это разложение показывает непригодность «чистой» LS-связи.

3. Силы осцилляторов $Tc II$. Расчет сил осцилляторов и вероятностей переходов $Tc II$ проводился в базе многотермных волновых функций с использованием нерелятивистских операторов излучения. Алгоритм метода и текст программы описаны в [20]. Были рассчитаны все возможные переходы между конфигурациями $4d^65s-4d^65p$ и $4d^6-4d^55p$. В табл. 2

представлены силы осцилляторов в форме „длины“ gf_L и „скорости“ gf_V и интенсивности классифицированных линий спектра TcII.

Для сравнения полученных сил осцилляторов и относительных интенсивностей линий были вычислены коэффициенты корреляции между величинами $x = \lg(gf_L)$ и $y = \lg(g_U I_{\text{lab.}}^{\lambda^2})$, где g_U — статистический вес верхнего уровня, остальные обозначения общепринятые. Для линий внутри мультиплетов $a^1S - z^7P^o$, $a^3D - z^5P^o$, $a^3S - z^5P^o$, $a^5G - z^5G^o$, $a^5G - z^5H^o$ и $a^5G - z^5F^o$ ρ_{xy} равно соответственно 0.79, 0.82, 0.99, 0.89, 0.91 и 0.06. Величины ρ_{xy} , превосходящие 0.7, указывают на хорошее согласие теоретических сил осцилляторов с интенсивностями линий лабораторного спектра, внутри мультиплетов.

Ленинградский государственный
университет

THE THEORETICAL CALCULATION OF THE ENERGY SPECTRUM AND THE OSCILLATOR STRENGTHS OF Tc II

A. S. BAKHTIYAROV

The energy spectrum of TcII is calculated taking into account the Hartree-Fock single-configuration approximation and the general LS-coupling. The $4d^5s$, $4d^0$, $4d^35p$, $4d^45s^2$ and $4d^45s5p$ configurations have been studied. The oscillator strengths are obtained by using non-relativistic dipole transition operators in both length and velocity formalisms. The theoretical spectrum and the oscillator strengths are considered in comparison with the classified laboratory spectrum of TcII.

ЛИТЕРАТУРА

1. P. W. Merrill, *Astrophys. J.*, 116, 21, 1952.
2. B. F. Peery, *Astrophys. J.*, 163, L1, 1971.
3. F. Sanner, *Astrophys. J.*, 219, 538, 1978.
4. I. R. Little -- Marenin, S. J. Little, *Astron. J.*, 84, 1374, 1979.
5. C. E. Moore, *Science*, 114, 60, 1951.
6. Г. Юбенс, Ш. де Ягер, К. Цваан, Сб. докладов V международного коллоквиума по астрофизике в Льеже, 10—12 сентября 1953. Пер. под ред. А. Г. Масевич, ИЛ, М., 1957.
7. J. L. Greenstein, C. de Jager, *Bull. Acad. Nether*, 13, 13, 1956.
8. А. А. Никитин, *Астрон. ж.*, 35, 18, 1958.
9. А. А. Никитин, *Астрон. ж.*, 35, 366, 1958.
10. Д. Амандурдыс, Канд. диссертация, Л., 1983.
11. Р. И. Костык, А. В. Переход, *Кинемат. и физ. неб. тел.*, 2, № 4, 38, 1986.

12. *W. F. Meggers, B. F. Scribner, J. Res. NBS, 45, 476, 1950.*
13. *M. A. Catalan, F. R. Rico, Annu. Real. Soc. Esp. Fisica y Quimica(Madrid) A, 48, 334, 1952.*
14. *W. R. Vozman, C. H. Corliss, J. L. Tech, J. Res, NBS A. Phys. and Chem., 71A, 547, 1967*
15. *C. E. Moore, Atomic energy levels. v. III, NBS, Washington, 1958.*
16. *Y. Shadmi, Bull. Res. Counc. Israel, 9F, 141, 1961.*
17. *П. О. Богданович, Сб. программ по мат. обеспечению атомных расчетов, Вильнюс, вып. 2, 3, 1980.*
18. *С. Д. Шаджювене, П. О. Богданович, Сб. программ по мат. обеспечению атомных расчетов, Вильнюс, вып. 5, 31, 1981.*
19. *А. С. Бахтияров, П. О. Богданович, Г. Л. Жукаускас, А. А. Никитин, Э. Б. Рудакас, Кинемат. и физ. неб. тел, 2, № 2, 13, 1986.*
20. *Г. В. Меркелис, Сб. программ по мат. обеспечению атомных расчетов, Вильнюс, вып. 8, 3, 1981.*