

Федеральное государственное бюджетное учреждение
«Петербургский институт ядерной физики им.Б.П.Константинова»
Национального исследовательского центра «Курчатовский институт»

На правах рукописи

КОНОВАЛОВА Елена Александровна

РАСЧЁТЫ СПЕКТРАЛЬНЫХ СВОЙСТВ АТОМОВ
С НЕСКОЛЬКИМИ ВАЛЕНТНЫМИ ЭЛЕКТРОНАМИ

Специальность: 1.3.3. Теоретическая физика

ДИССЕРТАЦИЯ

на соискание ученой степени кандидата

физико-математических наук

Научный руководитель:

доктор физ.-мат. наук,

Козлов М.Г.

Гатчина

2022 г.

Оглавление

Введение	4
1 Обзор методов расчёта атомных спектров	15
1.1 Приближение Хартри-Фока-Дирака	17
1.2 Учёт корреляционных эффектов	19
1.2.1 Метод наложения конфигураций	19
1.2.2 Построение эффективного гамильтониана	20
1.2.3 Учёт остовных и остовно-валентных корреляций	21
1.2.4 Линеаризованный метод связанных кластеров	25
2 Расчёт спектров изоэлектронной серии Mg	27
2.1 Поправки квантовой электродинамики	28
2.2 Результаты и их обсуждение	30
3. Расчёт коэффициентов чувствительности спектральных линий Ni⁺ к вариации α	38
3.1 Мотивация и предварительные замечания	38
3.2 Метод моделирования	42
3.3 Результаты и обсуждение	45
4 Расчёт сверхтонкой магнитной аномалии	53

4.1	Поправки на конечный размер ядра к константам сверхтонкой структуры	53
4.1.1	Расчёт сверхтонкой магнитной аномалии	56
4.1.2	Дифференциальная магнитная аномалия	57
4.2	Метод моделирования	59
4.2.1	Одноэлектронное приближение	59
4.2.2	Обобщение на случай многоэлектронных систем	61
4.3	Ядерный множитель	62
4.4	Результаты и их обсуждение	64
4.4.1	Водородоподобные ионы	65
4.4.2	Тяжелые нейтральные атомы	68
4.5	Франций	70
4.5.1	Обработка экспериментальных данных	72
4.6	Изоэлектронная серия золота	75
4.6.1	Оценка погрешности атомных расчётов	78
4.6.2	Вычисление ядерных множителей	81
	Заключение	84
	Список литературы	89

Введение

Актуальность темы исследования

Атомная спектроскопия на порядки превышает точность достижимую в других экспериментах. Это позволяет использовать атомы как исключительно прецизионные инструменты для изучения фундаментальной физики. В настоящей работе рассмотрены две проблемы, которые могут быть сведены к изучению свойств электронной структуры атомов и ионов. Первая – поиск вариации постоянной тонкой структуры во времени. Вторая – исследование сверхтонкой структуры тяжелых атомов с учётом распределения ядерной намагниченности.

Поиск вариаций фундаментальных физических констант основан на сравнении спектров атомов, ионов или молекул, полученных от космических объектов ранней Вселенной из астрономических наблюдений с зарегистрированными в лабораторных условиях в наши дни. Обычно изучаются вариации во времени безразмерных фундаментальных постоянных, таких как: постоянная тонкой структуры $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c}$ (e – заряд электрона, \hbar – приведённая постоянная Планка, c – скорость света) или отношение масс покоя электрона и протона $\frac{m_e}{m_p}$ [1]. Одна из глав данной работы посвящена определению коэффициентов чувствительности спектральных линий к возможным изменениям α из релятивистских

расчётов электронной структуры атомных систем.

В последние годы достигнута высокая точность экспериментов по измерению магнитных дипольных констант сверхтонкой структуры (СТС) методами лазерной спектроскопии [2]. Константы сверхтонкой структуры содержат информацию о ядерных g -факторах изотопов $g_I = \mu/I$, где μ и I – магнитный момент и спин ядра. Отношение констант СТС A для различных изотопов равно отношению их ядерных g -факторов только в приближении точечного ядра. Зарядовая [3] и магнитная [4] поправки к константам СТС точечного ядра возникают, если принять во внимание распределения заряда и намагниченности по атомному ядру конечных размеров. Вместе эти поправки нарушают пропорциональность между константами A и ядерными g -факторами, что известно как сверхтонкая магнитная аномалия (СМА):

$${}^1\Delta^2 \equiv \frac{A^{(1)}g_I^{(2)}}{A^{(2)}g_I^{(1)}} - 1, \quad (1)$$

где $A^{(1)}$, $A^{(2)}$ – константы СТС двух изотопов, $g_I^{(1)}$ и $g_I^{(2)}$ – соответствующие g -факторы. Из-за малого времени жизни ядерные магнитные моменты короткоживущих изотопов не могут быть измерены независимо от констант СТС. Поэтому в ряде случаев поправка на СМА ограничивает точность определения ядерных магнитных моментов.

В некоторых изотопических рядах отношения постоянных СТС для низколежащих $s_{1/2}$ и $p_{1/2}$ атомных состояний $\rho = A(s_{1/2})/A(p_{1/2})$ измерены с достаточной точностью, чтобы надёжно извлечь дифференциальную

сверхтонкую магнитную аномалию (ДСМА):

$${}_{s_{1/2}}^{1}\Delta_{p_{1/2}}^2 = \frac{\rho^{(1)}}{\rho^{(2)}} - 1 \approx {}^1\Delta^2(s_{1/2}) - {}^1\Delta^2(p_{1/2}). \quad (2)$$

Дифференциальные аномалии могут быть измерены экспериментально. Из этих данных, используя теоретически рассчитанное отношение $\eta = \frac{{}^1\Delta^2(s_{1/2})}{{}^1\Delta^2(p_{1/2})}$, можно определить поправки на СМА как для $s_{1/2}$, так и для $p_{1/2}$ состояний. После этого можно уточнить g -фактор короткоживущего изотопа по g -фактору стабильного с помощью уравнения (1).

Цели и задачи исследования

Цель настоящей работы заключается в расчёте коэффициентов чувствительности спектральных линий к возможным изменениям постоянной тонкой структуры и констант СТС к распределению заряда и намагниченности внутри атомного ядра.

В соответствии с целью работы были поставлены следующие задачи:

1. выбрать теоретические модели электронного строения атомных систем для расчёта энергетических спектров и атомных свойств;
2. оценить точность рассмотренных методов на примере расчёта спектров изоэлектронной серии атома магния;
3. выполнить расчёт коэффициентов чувствительности к вариации постоянной тонкой структуры для E1 переходов Ni^+ ; ион Ni имеет большую чувствительность к α -вариации, поскольку это один из самых тяжелых элементов, спектр которого наблюдается на больших красных смещениях;

4. разработать метод расчёта констант сверхтонкой структуры, позволяющий оценивать сверхтонкие магнитные аномалии, исследовать его точность как на примере водородоподобных ионов, так и многоэлектронных систем.

Научная новизна

В настоящее время существует большая потребность в универсальных и точных методах расчёта свойств атомов. Объединение методов наложения конфигураций и лианеризованных связанных кластеров (configuration interaction + linearized coupled clusters, CI+LCC) позволяет вычислять спектры атомов с несколькими валентными электронами с погрешностью менее 1% и дает возможность проводить расчёты широкого набора атомных свойств. В рамках данного метода были вычислены частоты переходов из основного состояния в пять низколежащих мультиплетов атома магния и ионов его изоэлектронной серии, при этом достигнута точность в 0.1% или выше.

Метод CI+LCC использовался для расчёта констант СТС низколежащих состояний атома золота. Из недавно измеренных ДСМА [5] в результате расчётов были восстановлены СМА. Выяснилось, что СМА между изомерами 11/2 золота и стабильным изотопом ^{197}Au составляет $11.2\% \pm 1\%$ для состояния $6s_{1/2}$, что на порядок превышает погрешности измеренных констант СТС. Для того, чтобы найти g -факторы короткоживущих изотопов золота без потери экспериментальной точности необходимо учитывать поправку на СМА. Поэтому разработка новых методов атомных вычислений констант СТС, позволяющих оценить СМА, актуальна и своевременна.

На примере иона никеля продемонстрирован расчёт атомных свойств

систем с большим числом валентных электронов. Оптические переходы Ni^+ наблюдаются на больших красных смещениях и могут быть использованы для поиска вариации постоянной тонкой структуры во времени. Для всех рассмотренных оптических переходов Ni^+ уточнены значения коэффициентов чувствительности к α -вариации, впервые получены несколько коэффициентов, среди которых найден переход с рекордной для Ni^+ чувствительностью к α -вариации. Для оптических переходов Ni^+ были также вычислены силы осцилляторов, позволяющие определить относительные яркости линий, и сделано сравнение с астрофизическими данными.

Теоретическая и практическая значимость работы

Прецизионный расчёт частот переходов Al^+ представляет большой интерес в связи использованием перехода $^1S_0 \rightarrow ^3P_0$ в $^{27}\text{Al}^+$ в оптических атомных часах. Полная систематическая погрешность таких часов значительно меньше погрешности первичных цезиевых стандартов.

Сравнение частот переходов, зарегистрированных в лабораторных условиях и полученных из астрофизических наблюдений, позволяет наложить ограничение на изменение постоянной тонкой структуры во времени. Объектами для поиска вариации α являются атомы и ионы, спектр которых наблюдается на больших красных смещениях. Наиболее тяжелым из таких ионов является Ni^+ , изученный в диссертационной работе. Для поиска спектральных линий, наиболее интересных для наблюдения, необходимо выполнить расчёт электронной структуры и свойств выбранной атомной системы, потому что коэффициенты чувствительности частот переходов к изменению α сильно различаются.

Ядерные магнитные моменты короткоживущих изотопов определяются из анализа констант СТС, при этом поправкой на СМА часто пренебрегают. В большинстве случаев этот подход приемлем ввиду наличия экспериментальных погрешностей, потому что поправка на СМА обычно мала (менее 1% [6]). Однако, известно о больших СМА между долгоживущими изотопами золота [7, 8], они на порядок превосходят погрешность измерений. Для определения ядерных g -факторов из анализа констант СТС без потери экспериментальной точности требуется теоретическая оценка величины СМА.

Методы исследования

В качестве начального приближения для расчёта энергетического спектра и свойств рассмотренных атомных систем использовался метод Хартри–Фока–Дирака. Электронные корреляции учитывались с помощью комбинированных методов расчёта. В рамках этих методов полное многоэлектронное пространство конфигураций разделено на два подпространства: валентное и остовное. Остовные и остовно-валентные корреляции учитываются пертурбативно, используя многочастичную теорию возмущений (many-body perturbation theory, MBPT) или линеаризованный метод связанных кластеров, а валентные корреляции обрабатываются в рамках метода наложения конфигураций. Для магниеподобных ионов, где корреляционные эффекты могут быть учтены с высокой точностью, также были приняты в рассмотрение поправки квантовой электродинамики к энергии системы. Комбинированные методы позволяют рассчитать валентные энергии и частоты переходов для низколежащих состояний атомной системы. Эти вычисления необходимо

повторить при разных значениях α , чтобы численно найти коэффициенты чувствительности частот переходов к возможной α -вариации.

В работе предложена параметризация для констант СТС, где введены три атомных параметра (константа СТС в приближении точечного ядра \mathcal{A}_0 , параметры b_N и b_M , которые характеризуют зарядовую и магнитную поправки к \mathcal{A}_0) и три параметра, которые описывают ядро – g -фактор, радиус ядра и множитель $d_{\text{мис}}$, последний зависит от распределения намагниченности внутри ядра. После того, как вычислены атомные параметры, из экспериментальных данных по сверхтонкой структуре можно получить информацию о свойствах ядра.

Положения, выносимые на защиту

1. На примере расчёта спектров изоэлектронной серии атома магния оценена точность методов: CI, CI+MBPT и CI+LCC. Результаты метода CI+MBPT для энергий переходов рассмотренных систем на порядок лучше, чем для метода CI, а метод CI+LCC увеличивает точность расчёта ещё примерно в 2 раза. На уровне точности CI+LCC даже для относительно лёгких элементов, таких как магниеподобный ион Cl, поправки квантовой электродинамики становятся заметными и их необходимо учитывать. Расчёт CI+LCC проведён для большого числа уровней с погрешностью не превышающей 0.1% в рассмотренных атомных системах.
2. Выполнен расчёт коэффициентов чувствительности низколежащих спектральных линий однозарядного иона никеля на возможные изменения постоянной тонкой структуры во времени. В диапазоне частот, которые наблюдаются в астрофизике на больших красных

смещениях, исследованы несколько спектральных линий, расчёты для которых ранее не проводились. Среди них найден переход с рекордно большим для Ni^+ коэффициентом чувствительности к α -вариации, $q = -2210(150)$.

3. Проведены аналитические и численные расчёты отношения аномалий $\eta = \frac{{}^1\Delta^2(s_{1/2})}{{}^1\Delta^2(p_{1/2})}$, что позволяет получить сверхтонкие магнитные аномалии из экспериментальных данных и, благодаря этому, уточнить значения ядерных g -факторов короткоживущих изотопов.
4. Выполнен расчёт постоянных сверхтонкой структуры нейтральных атомов Fr, Au, а также золотоподобных ионов Hg и Tl. На основании экспериментальных данных исследованы изменения в распределении ядерной намагниченности в изотопических рядах Fr и Au, сделано сравнение с предсказаниями одночастичной ядерной модели.

Степень достоверности полученных результатов.

Достоверность представленных результатов обеспечена использованием проверенных теоретических методов. Рассчитанные энергии переходов в спектрах магния и ионов его изоэлектронной серии согласуются с экспериментальными значениями с погрешностью 0.1%. Коэффициенты чувствительности к α -вариации некоторых спектральных линий Ni^+ находятся в хорошем согласии с ранее опубликованными данными, другие получены впервые. Разработанный метод расчёта констант СТС, учитывающий СМА, проверялся в случае водородоподобных ионов, когда могут быть выполнены аналитические вычисления.

Апробация результатов

Результаты исследований, представленные в диссертации, докладывались и обсуждались на семинарах НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ и следующих международных и российских конференциях: Workshop on Electronic atomic factors and hyperfine anomalies (Brussels, Belgium, 2019); 13th European Conference on Atoms, Molecules and Photons (Florence, Italy, 2019); Fifth international conference on radiation and applications in various fields of research “RAD2017” (Budva, Montenegro, 2017); EGAS-47th conference of the European Group of Atomic Systems (Riga, Latvia, 2015); Workshop on precision physics and fundamental physical constants (г. Санкт-Петербург, Россия, 2013; Дубна, Россия, 2014); 11th European Conference on Atoms, Molecules and Photons (Aarhus, Denmark, 2013); Международный молодежный научный форум “OpenScience” (г. Гатчина, Россия, 2014 – 2021); Российская молодежная конференция по физике и астрономии (г. Санкт-Петербург, Россия, 2012 – 2017).

Публикации

По материалам диссертации опубликовано 12 печатных работ в том числе 6 статей, 5 из которых в рецензируемых научных изданиях, рекомендованных ВАК; 1 свидетельство о регистрации программы для ЭВМ и 5 тезисов докладов.

Статьи, индексируемые в базах Web of Science и Scopus

1. Konovalova E. A., Kozlov M. G., Imanbaeva R. T. Coefficients of sensitivity to α variation for astrophysically relevant transitions in Ni II // Physical Review A. — 2014. — V. 90. — P. 042512.
2. Konovalova E. A., Kozlov M. G. Correlation, Breit, and QED effects in

- spectra of Mg-like ions. // *Physical Review A*. — 2015. — V. 92. — P. 042508.
3. Konovalova E. A., Kozlov M. G., Demidov Yu. A., Barzakh A. E. Calculation of Francium Hyperfine Anomaly. // *Atoms*. — 2018. — V.6. — P. 39.
 4. Коновалова Е. А., Демидов Ю. А., Козлов М. Г. Расчёт сверхтонкой магнитной аномалии в многоэлектронных атомах. // *Оптика и спектроскопия*. — 2020. — Т. 128. — С. 1420–1426.
 5. Demidov Yu. A., Konovalova E. A., Imanbaeva R. T., Kozlov M. G., Barzakh A. E. Atomic calculations of the hyperfine-structure anomaly in gold // *Physical Review A*. — 2021. — V. 103. — P. 032824.

Зарегистрированные программы для ЭВМ

6. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2018661590. Российская Федерация. Программный модуль к СИ-МВРТ для расчёта сверхтонкой магнитной аномалии в атомных спектрах. / Коновалова Е. А., правообладатель: НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ; опубли. 10.09.2018.

Другие публикации

7. Konovalova E. A., Kozlov M. G., Demidov Yu. A., Barzakh A. E. Calculation of Thallium Hyperfine Anomaly. // *Radiation&Applications*. — 2017. — V. 2. — P. 181–185.
8. Konovalova E. A., Kozlov M. G., Safronova M. S. Atomic calculations of the low-lying states of ions with two valence electrons within the configuration-interaction plus all-order method. // *Online Abstracts — ECAMP-11th European Conference on Atoms, Molecules and Photons*. — Aarhus. — 2013.

9. Konovalova E. A. Search for fine-structure constant variation in Ni II. // Abstract book of Workshop on precision physics and fundamental physical constants. — Dubna. — 2014. — P. 22.
10. Konovalova E. A., Kozlov M. G. Precision Calculation of the Spectra of Mg-like Ions. // Book of Abstracts — EGAS-47th conference of the European Group of Atomic Systems. — 2015. — Riga. — P. 102.
11. Konovalova E. A., Demidov Yu. A., Kozlov M. G. Calculation of Thallium Hyperfine Anomaly. // Abstracts of fifth international conference on radiation and applications in various fields of research “RAD2017”. — Budva. — 2017. — P. 264.
12. Konovalova E. A., Kozlov M. G., Demidov Yu. A. Calculation of Hyperfine Anomaly in Heavy Atoms. // Abstracts. — ECAMP-13th European Conference on Atoms, Molecules and Photons. — Florence. — 2019. — P. 225.

Личный вклад автора

Автором или при совместной работе с другими исследователями были проведены все расчёты атомных спектров и свойств, представленные в диссертации; разработан и опробован метод расчёта констант сверхтонкой структуры, учитывающий СМА, и выполнен анализ полученных результатов.

Объем и структура диссертации

Диссертация состоит из введения, четырёх глав, заключения и списка литературы. Работа изложена на 108 страницах, содержит 5 рисунков и 14 таблиц. Список литературы включает 144 наименования.

Глава 1

Обзор методов расчёта АТОМНЫХ СПЕКТРОВ

В настоящее время существует большое количество методов расчёта спектров и свойств многоэлектронных атомов и ионов. В качестве начального приближения обычно используется метод Хартри–Фока–Дирака. Электронные корреляции в случае небольшого числа валентных электронов могут быть эффективно учтены в рамках многочастичной теории возмущений [9, 10]. Тем не менее, последовательное суммирование порядков теории возмущений характеризуется медленной сходимостью и становится не практичным при учёте более третьего или четвертого порядка. Поэтому используются различные варианты частичного суммирования ряда теории возмущений во всех порядках, из них наиболее широко известен метод связанных кластеров (coupled clusters, CC) [11–19]. Методы, использующие МВРТ, включая метод CC, наиболее эффективны для учёта остовных и остовно-валентных корреляций.

Электроны остова сильно экранируют заряд ядра, вследствие чего взаимодействие валентных электронов с ядром сопоставимо с межэлектронным взаимодействием. В таком случае нет четко определенного параметра малости, поэтому пертурбативные методы расчёта менее пригодны для учёта валентных корреляций, а более эффективны непертурбативные методы, такие как метод конфигурационного взаимодействия [20] или многоконфигурационные методы Хартри-Фока и Хартри-Фока-Дирака [21, 22]. Эти методы позволяют точно учесть корреляции между несколькими валентными электронами. Когда количество коррелируемых электронов превышает четыре или пять непертурбативные методы перестают быть эффективными.

Расчёты, выполненные в данной работе, используют комбинированные подходы, в рамках которых остовные и остовно-валентные корреляции учитываются пертурбативно, а валентные корреляции обрабатываются в рамках метода CI. Простейший метод этого типа – CI и MBPT второго порядка [23–25]. Более сложный вариант – CI и линейризованный метод связанных кластеров [26, 27]. В обоих случаях для формирования эффективного гамильтониана валентных электронов используются методы MBPT или LCC, затем в валентном подпространстве используется метод CI для расчёта валентных энергий и многоэлектронных волновых функций.

Во всех вычислениях, если не оговорено особо, используется атомная система единиц: $\hbar = m_e = e = 1$. Ниже в этой главе указанные методы рассмотрены более подробно.

1.1 Приближение Хартри-Фока-Дирака

Гамильтониан Дирака-Кулона-Брейта [28] является наиболее точной моделью описания многоэлектронных систем в поле атомного ядра:

$$\hat{H}_{DCB} = \sum_i \hat{h}_D(i) + \sum_{i<j} \left(\frac{1}{r_{ij}} + \hat{B}_{ij} \right) \quad (1.1)$$

Суммирование идёт по индексам всех электронов и пар электронов. Гамильтониан Дирака $\hat{h}_D(i)$ для i -го электрона в электростатическом поле ядра $\hat{V}_{\text{нuc}}$ имеет вид:

$$\hat{h}_D = c \boldsymbol{\alpha} \cdot \hat{\mathbf{p}} + c^2(1 - \beta) + \hat{V}_{\text{нuc}}, \quad (1.2)$$

где $\boldsymbol{\alpha}$ и β – матрицы Дирака, $\hat{\mathbf{p}}$ – оператор импульса электрона.

Энергия в уравнении (1.2) отсчитывается от энергии покоя невзаимодействующих электронов и ядра. Спектр \hat{h}_D содержит состояния как с положительной, так и с отрицательной энергией, разделенные интервалом порядка $2mc^2$. Поэтому при учёте межэлектронного взаимодействия в \hat{H}_{DCB} появляется потенциальная возможность рождения электронно-позитронных пар [29]. Для того, чтобы избежать вариационного коллапса, гамильтониан Дирака-Кулона-Брейта (1.1) проектируется на пространство состояний с положительной энергией [28].

Каждое из двухэлектронных слагаемых в (1.1) представляет собой сумму энергии кулоновского отталкивания электронов и оператора брейтовского

взаимодействия \widehat{B}_{ij} в пределе нулевой частоты:

$$\widehat{B}_{ij} = -\frac{\boldsymbol{\alpha}_i \cdot \boldsymbol{\alpha}_j}{r_{ij}} + \frac{1}{2} \left[\frac{\boldsymbol{\alpha}_i \cdot \boldsymbol{\alpha}_j}{r_{ij}} - \frac{(\boldsymbol{\alpha}_i \cdot \mathbf{r}_{ij})(\boldsymbol{\alpha}_j \cdot \mathbf{r}_{ij})}{r_{ij}^3} \right]. \quad (1.3)$$

Первое слагаемое в уравнении (1.3) соответствует оператору магнитных (гаунтовских) взаимодействий.

В случае многоэлектронных систем уравнение: $\widehat{H}_{DCB}\Phi_n = E_n\Phi_n$ не может быть решено в аналитическом виде. Рассмотрим приближённые методы решения этого уравнения. В качестве начального приближения обычно используется метод самосогласованного поля. В рамках этого приближения предполагается, что каждый электрон атома движется в самосогласованном поле, создаваемом ядром и всеми остальными электронами. Тогда, многоэлектронная волновая функция Φ_n может быть представлена в виде детерминанта Слейтера – антисимметризованного произведения одноэлектронных волновых функций: $\Phi_n = \frac{1}{\sqrt{N!}} \det\{\phi_{n_1} \dots \phi_{n_N}\}$. Функции ϕ_k удовлетворяют уравнениям Хартри–Фока–Дирака:

$$(\widehat{h}_D + \widehat{V})\phi_k = \epsilon_k\phi_k, \quad (1.4)$$

где \widehat{V} – оператор межэлектронного взаимодействия (самосогласованного поля). Уравнение (1.4) решается итерационным методом.

Рассмотрим четырехкомпонентную одноэлектронную волновую функцию (биспинор) подробнее. В сферически симметричном атомном

потенциале она имеет вид [30]:

$$\phi_{n,\kappa,m}(\mathbf{r}) = \frac{1}{r} \begin{pmatrix} P_{n,\kappa}(r)\Omega_{\kappa,m}(\omega) \\ -i Q_{n,\kappa}(r)\Omega_{-\kappa,m}(\omega) \end{pmatrix}. \quad (1.5)$$

Здесь n – главное квантовое число, $\kappa = (l - j)(2j + 1)$ – релятивистское квантовое число, m – магнитное квантовое число; $\Omega(\omega)$ – сферический спинор, $P_{n,\kappa}$ и $Q_{n,\kappa}$ – большая и малая компоненты биспинора.

1.2 Учёт корреляционных эффектов

1.2.1 Метод наложения конфигураций

Детерминанты Слейтера Φ_n образуют полный набор в многоэлектронном гильбертовом пространстве, при условии бесконечного базиса одноэлектронных орбиталей:

$$\sum_n |\Phi_n\rangle\langle\Phi_n| = 1. \quad (1.6)$$

В методе наложения конфигураций волновую функцию многоэлектронной системы Ψ можно представить в виде разложения по функциям Φ_n :

$$\Psi = \sum_n |\Phi_n\rangle\langle\Phi_n|\Psi\rangle = \sum_n c_n |\Phi_n\rangle. \quad (1.7)$$

Коэффициенты c_n (проекции Ψ на базисные векторы пространства) подбираются из условия минимума полной энергии системы:

$$E = \frac{\langle \Psi | H | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle}. \quad (1.8)$$

Описанный метод может быть применён к любому атому, но эффективность метода CI быстро убывает с увеличением числа коррелируемых электронов.

1.2.2 Построение эффективного гамильтониана

Использование комбинированных методов расчёта, в рамках которых остовные и остовно-валентные корреляции учитываются пертурбативно, а валентные корреляции обрабатываются в рамках метода CI, требует разделения полного многоэлектронного гильбертова пространства на два подпространства: валентное и остовное, определённые через операторы проектирования \hat{P} и \hat{Q} , ($\hat{P} + \hat{Q} = \hat{I}$). Тогда волновая функция и полный гамильтониан системы могут быть записаны в виде:

$$\Psi = \hat{P}\Psi + \hat{Q}\Psi = \Phi + \chi \quad (1.9)$$

$$\left(\hat{P}\hat{H}\hat{P} + \hat{\Sigma}(E) \right) \Phi = E\Phi, \quad (1.10)$$

где $\hat{\Sigma}(E) = (\hat{P}\hat{H}\hat{Q})\hat{R}_Q(E)(\hat{Q}\hat{H}\hat{P})$. Здесь $\hat{R}_Q(E)$ – оператор резольвенты:

$$\hat{R}_Q(E) = \frac{1}{E - \hat{Q}\hat{H}\hat{Q}}. \quad (1.11)$$

Эффективный гамильтониан в подпространстве P имеет вид:

$$\hat{H}_{\text{eff}}(E) \equiv \hat{P}\hat{H}\hat{P} + \hat{\Sigma}(E) \quad (1.12)$$

Для практических целей, выбор подпространства P очень важен. Для атомов с несколькими валентными электронами оператор \hat{P} определён как проектор на такие состояния, для которых в остове нет ни одной дырки. Другими словами, подпространство P соответствует приближению замороженного остова. Оператор \hat{Q} – проектор на ортогональное дополнение к подпространству P , то есть на состояния атома, где есть хотя бы одна дырка в остове. Это означает, что остовно-остовные и остовно-валентные корреляции учитываются на этапе построения эффективного гамильтониана \hat{H}_{eff} , тогда как валентные корреляции учитываются явно при решении уравнения (1.10). Для низколежащих атомных уровней, энергии связи которых лежат ниже энергии возбуждения остова, проекции волновых функций на подпространство Q будут малы. Тогда подпространство Q можно учитывать пертурбативно.

Точная форма оператора $\hat{R}_Q(E)$ [Уравнение (1.11)] для многоэлектронных атомов неизвестна, могут быть сделаны лишь некоторые приближения. P, Q -разложение формально аналогично исключению малой компоненты из уравнений Хартри–Фока–Дирака (1.4).

1.2.3 Учёт остовных и остовно-валентных корреляций

Для атомов с одним валентным электроном гамильтониан Хартри–Фока–Дирака (1.4) может быть выбран в качестве невозмущённого гамильтониана

системы \hat{H}_0 . Для атомов с большим числом валентных электронов в гамильтониан \hat{H}_0 желательно включить, по крайней мере частично, поле валентных электронов, что даёт лучшее начальное приближение. Это соответствует приближению Хартри–Фока–Дирака для поля усредненного по конфигурации [30]. Для построения начального приближения во всех представленных в работе расчётах использовалась программа hfd [30]. Эта программа позволяет строить самосогласованное поле, усреднённое по релятивистской или нерелятивистской конфигурации. Использование самосогласованного поля, усреднённого по конфигурации, уменьшает размер валентного пространства и упрощает его выбор, что в свою очередь, во многом определяет точность метода CI.

Метод MBPT [31] позволяет последовательно разложить оператор резольвенты $\hat{R}_Q(E)$ по степеням остаточного двухэлектронного взаимодействия $\hat{V}' = \hat{V} - \hat{V}^{\text{DF}}$. В низшем (втором) порядке $\hat{R}_Q(E) = (E - \hat{Q}\hat{H}_0\hat{Q})^{-1}$. Третий порядок в разложении резольвенты всё ещё не известен и, возможно, слишком сложен для практического применения.

Оператор гамильтониана \hat{H}_{eff} определён только в валентном пространстве. Метод CI+MBPT позволяет включать основные возбуждения в метод CI на этапе построения эффективного гамильтониана H_{eff} , который теперь содержит дополнительные слагаемые теории возмущений. Метод CI затем применяется к изменённому \hat{H}_{eff} и не содержит возбуждений остова [27].

Решение уравнения (1.10) даёт спектр низколежащих уровней атома. Но для вычисления других атомных свойств (вероятностей переходов, констант

сверхтонкой структуры и пр.) нужно знать полную волновую функцию Ψ . Она восстанавливается из решения уравнения (1.10) следующим образом:

$$\Psi = \Phi + \chi = (1 + \hat{R}_Q(E)(\hat{Q}\hat{H}\hat{P}))\Phi \quad (1.13)$$

Здесь снова используется МВРТ разложение для оператора $\hat{R}_Q(E)$. Данный метод позволяет вычислять поправки второго порядка к энергиям и поправки первого порядка к волновым функциям.

Если известна только валентная волновая функция Φ , то вместо восстановления функции Ψ можно построить эффективные операторы для атомных свойств, оставаясь в валентном подпространстве. Валентно-остовные поправки к эффективным операторам могут быть получены в рамках приближения случайной фазы (random phase approximation, RPA). Это упрощение формулы 1.13 с заменой резольвенты на более простое выражение. В дополнение к RPA можно учесть поправки к операторам на структурное излучение и собственную энергию [32].

Рассмотренный метод CI+МВРТ сформулирован в рамках варианта теории возмущений в приближении Бриллюэна–Вигнера. Савуков и Джонсон [24] предложили альтернативный подход основанный на теории возмущений Рэля–Шредингера. В этом случае эффективный гамильтониан несимметричен, но не зависит от энергии. Однако в этом варианте теории возмущений возникает проблема не физических состояний.

Метод CI+МВРТ имеет несколько важных ограничений:

1. Число валентных электронов не должно превышать 3 или 4. Поскольку сложность метода полного наложения конфигураций быстро растет с

увеличением модельного пространства, а частичный учёт возбуждений плохо сказывается на точности метода.

2. Только нижняя часть валентного спектра может быть рассчитана с хорошей точностью. Для энергий выше энергии возбуждения остова, эффективный гамильтониан имеет полюса, и результаты могут оказаться существенно менее точными.
3. Поскольку в эффективном гамильтониане не учтены остовно-валентные корреляции более высоких порядков, погрешность расчёта частот переходов составляет около 1%.

Первые два ограничения относятся к методу CI. Третье ограничение относится к методу MBPT и может быть снято. Очевидным способом сделать это, является учёт следующих порядков теории возмущений. Однако, известно, что для атомов с одним валентным электроном, вычисления третьего порядка теории возмущений хуже соответствуют экспериментальным данным, чем результат второго порядка. Учёт третьего порядка MBPT для атомов с большим числом валентных электронов уже слишком сложен для практического применения. Поэтому от последовательного суммирования ряда теории возмущений необходимо перейти к частичному учёту высших порядков MBPT, оставляя задачу решаемой. Для этого в последние годы чаще всего используется метод связанных кластеров.

1.2.4 Линеаризованный метод связанных кластеров

Электронная волновая функция системы в рамках метода связанных кластеров имеет вид:

$$\Psi = e^{\hat{T}} \Phi_0, \quad (1.14)$$

где кластерный оператор \hat{T} представляет собой сумму n -кратных возбуждений:

$$\hat{T} = \hat{T}_1 + \hat{T}_2 + \dots + \hat{T}_n. \quad (1.15)$$

Оператор $e^{\hat{T}}$ действует на референсную многоэлектронную волновую функцию Φ_0 , которая может быть записана как детерминант Слейтера для основного состояния системы. Раскладывая оператор $e^{\hat{T}}$ в ряд Тейлора, получим выражение для волновой функции Ψ :

$$\Psi = (1 + \hat{T} + \frac{1}{2} \hat{T}^2 + \dots) \Phi_0. \quad (1.16)$$

Если ограничить это разложение только первыми слагаемыми: $\hat{T} = \hat{T}_1 + \hat{T}_2$ и пренебречь нелинейными членами в уравнении (1.16), то эта версия известна как линеаризованный метод связанных кластеров или парные уравнения [33].

На первом этапе вычислений решаются линеаризованные уравнения связанных кластеров для основных и основно-валентных кластерных амплитуд в приближении одно- и двукратных возбуждений, затем формируются одноэлектронные и двухэлектронные кластерные

амплитуды для валентного подпространства, на третьем шаге эти амплитуды используются для формирования эффективного валентного гамильтониана [27]. Затем, используется метод наложения конфигураций для учёта валентно-валентных корреляций так же, как это делается в методе CI+MBPT.

Метод CI + LCC даёт более точные волновые функции для последующего вычисления атомных свойств. Описанный метод не ограничен специфическим видом системы. Можно сказать, что сильной стороной метода CI является широкая применимость, в то время как метод LCC позволяет аккуратно учесть взаимодействие валентных электронов с атомным остовом [27].

Представленные в работе расчёты методами CI и CI + MBPT выполнялись с помощью пакета программ, описанного в работе [34]. Расчёты в рамках метода CI + LCC выполнялись с расширенным вариантом того же пакета программ.

Глава 2

Расчёт спектров

изоэлектронной серии Mg

Атом магния и ионы его изоэлектронной серии удобны для проверки методов расчёта атомных спектров, поскольку для этих систем доступно большое количество теоретических данных [21–24, 26, 27, 35–39] и имеются надёжные экспериментальные значения частот переходов. Эти системы содержат 10 остовных и 2 валентных электрона, что допускает достаточно точный учёт остовных, остовно-валентных и валентных корреляций. Точный учёт электронных корреляций даёт возможность оценить вклад брейтовского взаимодействия и поправки квантовой электродинамики (КЭД) в энергии спектральных уровней. В этой главе обсуждаются результаты, полученные нами в работах [40, 41]. В расчётах использованы гамильтонианы Дирака–Кулона и Дирака–Кулона–Брейта в приближении, запрещающим рождение электрон-позитронных пар. Одноэлектронные поправки КЭД (лэмбовский сдвиг спектральных линий) могут быть включены в гамильтониан системы,

используя эффективные или модельные потенциалы [42–47].

В этой главе исследован относительный вклад различных поправок в энергии переходов атома Mg и Mg-подобных ионов до Cl VI включительно. Для каждого иона построен конечный базисный набор, который включает в себя орбитали Дирака–Фока для основных и валентных состояний и штурмовские орбитали для виртуальных состояний [48]. После добавления штурмовских орбиталей выполнена диагонализация оператора Дирака–Фока остова на всем базисном наборе. Таким образом построен базисный набор $30spdfgh$ из 300 орбиталей, который включает парциальные волны с $l = 0, \dots, 5$. Весь базисный набор использован для расчётов методами MBPT и LCC. Пространство конфигурации для Cl включает однократные и двукратные возбуждения всех орбиталей до $21spdfg$, что соответствует полному наложению конфигураций для двух электронов на базисном наборе $21spdfg$.

В приближении валентного CI не учитываются остовно-валентные и остовно-остовные корреляции. В методах CI+MBPT и CI+LCC эти корреляции включены в эффективный гамильтониан валентных электронов.

2.1 Поправки квантовой электродинамики

Для рассмотренных систем учет поправок КЭД был выполнен полуэмпирически и включает только лэмбовские сдвиги валентных s -состояний. Известно, что лэмбовский сдвиг для состояний с $L \neq 0$ как минимум на порядок меньше.

Как показано в работе [47], лэмбовский сдвиг для s -состояний

водородоподобных ионов можно параметризовать следующим образом:

$$\Delta\varepsilon_{\text{QED}} = \frac{\alpha^3 Z^4}{\pi n^3} F_n(\alpha Z), \quad (2.1)$$

где n – главное квантовое число, α – постоянная тонкой структуры, Z – заряд ядра. Это выражение может быть обобщено на случай недиагональных матричных элементов:

$$\sigma_{n,n'} = \frac{\alpha^3 Z^4}{\pi (nn')^{3/2}} F_{n,n'}(\alpha Z). \quad (2.2)$$

Функция $F_{n,n'}(\alpha Z)$ табулирована в работе [47], она слабо зависит от αZ и от индексов n, n' . Учитывая, что $\frac{Z^3}{\pi (nn')^{3/2}} = |\Psi_n(0)\Psi_{n'}(0)|$ получим:

$$\sigma_{n,n'} = \frac{\alpha^3 Z}{\pi} |\Psi_n(0)\Psi_{n'}(0)| F_{n,n'}(\alpha Z). \quad (2.3)$$

Это выражение применимо не только в случае водородоподобных ионов, но и для валентных электронов многоэлектронных атомов. Согласно работе [49], плотность электронов на ядре может быть выражена через энергию связи ε_ν :

$$\varepsilon_\nu = \frac{(Z_i+1)^2}{2\nu^2}; \quad |\Psi_\nu(0)\Psi_{\nu'}(0)| = \frac{(Z_i+1)^2 Z}{\pi (\nu\nu')^{3/2}} = \frac{(4\varepsilon_\nu \varepsilon_{\nu'})^{3/4} Z}{\pi (Z_i+1)}. \quad (2.4)$$

Здесь Z_i – заряд иона (для нейтрального атома $Z_i = 0$), ν – эффективное главное квантовое число. Тогда недиагональный матричный элемент может

быть записан как:

$$\sigma_{\nu,\nu'} = \frac{(4\varepsilon_\nu\varepsilon_{\nu'})^{3/4}}{\pi(Z_i + 1)}\alpha^3 Z^2 F(\alpha Z). \quad (2.5)$$

Энергия связи ε_ν для валентных электронов в многоэлектронных атомах и ионах соответствует большим квантовым числам n водородоподобных ионов с таким же зарядом Z . Следовательно, функция $F(\alpha Z)$ в (2.5) соответствует пределу $n, n' \rightarrow \infty$ для функции $F_{n,n'}(\alpha Z)$. Согласно [47] эта функция медленно уменьшается с Z , но для диапазона $12 \leq Z \leq 17$ можно использовать $F(\alpha Z) \approx 4$, тогда:

$$\sigma_{\nu,\nu'} \approx 8\sqrt{2} \frac{(\varepsilon_\nu\varepsilon_{\nu'})^{3/4}}{\pi(Z_i + 1)}\alpha^3 Z^2. \quad (2.6)$$

В расчётах методом CI+LCC поправки КЭД в виде 2.6 добавлены к одноэлектронным радиальным интегралам валентных электронов.

2.2 Результаты и их обсуждение

В таблицах (2.1 – 2.3) выполнено сравнение результатов расчётов спектров атома Mg и ионов его изоэлектронной серии до Cl VI методами CI, CI+MBPT, CI+LCC и CI+LCC с учётом вкладов взаимодействия Брейта и поправок квантовой электродинамики с экспериментальными данными. Для основных состояний приведены двухэлектронные энергии связи, равные сумме первых двух потенциалов ионизации. Для всех других состояний приведены энергии переходов из основных состояний. Все энергии даны в см^{-1} . В таблицах также приведены относительные погрешности результатов

расчётов, для того чтобы оценить точность каждого из использованных теоретических методов.

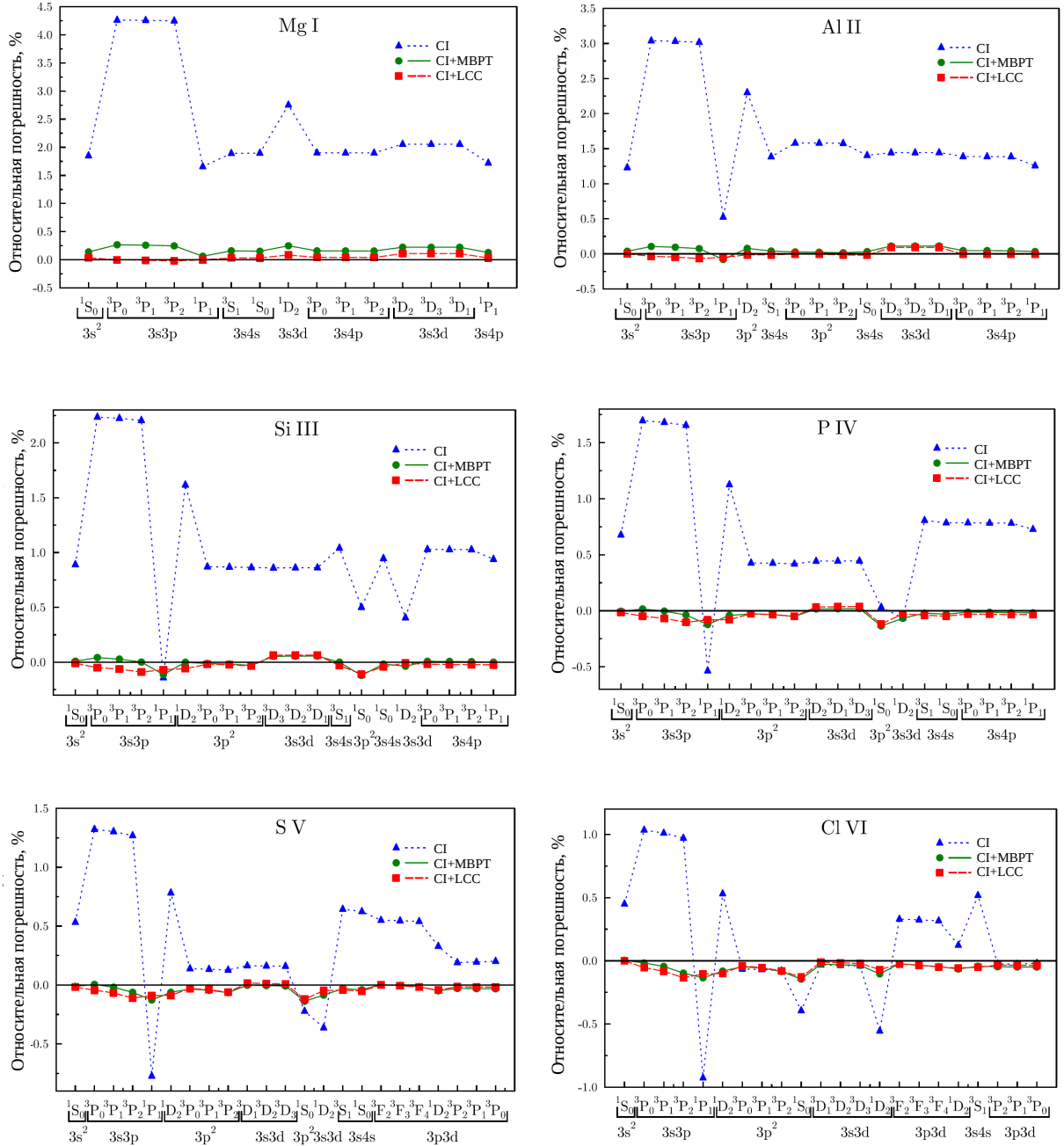


Рисунок 2.1. Сравнение относительных погрешностей спектров ионов изоэлектронной серии атома Mg, рассчитанных методами CI, CI+MBPT и CI+LCC для гамильтониана Дирака–Кулона. Для основных состояний приведены погрешности энергий связи двух валентных электронов, для других состояний – погрешности частот переходов из основных состояний.

На рисунках (2.1, 2.2) представлены относительные теоретические погрешности для энергий переходов из основных состояний рассмотренных ионов в возбуждённые. Сравнение относительных погрешностей методов CI, CI+MBPT и CI+LCC для гамильтониана Дирака–Кулона показано на рисунке (2.1). Отметим, что точность каждого метода улучшается вдоль изоэлектронной последовательности. Например, средняя погрешность метода CI для Mg I составляет около 2% и уменьшается примерно до 0.4% для Cl VI. Аналогично, средняя погрешность метода CI+MBPT уменьшается от 0.2% для Mg I до 0.1% для Cl VI. С увеличением заряда иона Z также уменьшается различие между результатами, полученными методами CI+MBPT и CI+LCC; оно почти исчезает для Cl VI. Это указывает на уменьшение роли остовно-валентных корреляций высших порядков для многозарядных ионов.

Для триплетных состояний валентное пространство насыщено уже на базисе $15spdfg$. Аналогичная точность расчёта синглетных состояний достигается на увеличенном до $21spdfg$ конфигурационном пространстве. Результаты для синглетных состояний конфигураций $3s3p$, $3s3d$ или $3p^2$ обычно менее точны, чем для других состояний. Эти состояния более чувствительны к качеству базисного набора и размеру активного пространства, но после многочисленных тестов можно сделать вывод о том, что базис $21spdfg$ насыщен для всех рассматриваемых состояний для полного двухэлектронного CI.

На рисунке (2.2) показано, как поправки на брейтовское взаимодействие и КЭД влияют на точность расчёта CI+LCC. Эти поправки абсолютно пренебрежимы для расчётов в рамках метода CI и лишь немного

заметны для метода CI+MBPT. На достигнутом уровне учёта электронных корреляций поправки на брейтовское взаимодействие и КЭД для Mg I и Al II пренебрежимо малы. Однако для самого тяжелого из рассмотренных ионов (Cl VI) они становятся существенными и несколько улучшают итоговую точность: средняя ошибка при их учёте уменьшается с 0.06% до 0.04%. Следует отметить, что для рассмотренных здесь ионов поправки на брейтовское взаимодействие и КЭД сопоставимы. Учёт взаимодействия Брейта обычно улучшает воспроизведение тонкой структуры, в то время как поправки КЭД уменьшают общий разброс ошибок.

В работе [51] показано, что наряду с поправками высших порядков необходимо также учитывать энергетическую зависимость эффективного гамильтониана. Для Mg-подобных ионов поправки на энергетическую зависимость эффективного гамильтониана были изучены в рамках метода CI+LCC. Средний размер этих поправок к валентным энергиям монотонно уменьшается от 0.06% для Mg I до 0.02% для Cl VI. В целом, они довольно малы и не улучшили согласие с экспериментальными данными. Таким образом поправками на энергетическую зависимость эффективного гамильтониана для рассматриваемых систем можно пренебречь.

Подводя итог, в этой главе изучена точность методов CI, CI+MBPT [23] и CI+LCC [26, 27] на примере изоэлектронной последовательности Mg. Показано, что метод CI+LCC обеспечивает более высокую точность, чем более простой метод CI+MBPT. В то время как относительная погрешность метода CI+MBPT была на уровне 0.1 – 0.2%, погрешность метода CI+LCC была примерно в два раза меньше, 0.05 – 0.1%. Метод валентного CI без учёта остовных корреляций на порядок менее точен.

Таблица 2.1. Сравнение рассчитанных спектров Mg I и Al II [40] с экспериментальными данными [50]. Теоретические результаты получены методом конфигурационного взаимодействия в валентном подпространстве (столбец CI) и комбинированными методами CI+МВРТ (столбец МВРТ) и CI+LCC (столбец LCC). В итоговых результатах (столбец FINAL) к значениям CI+LCC добавлены вклады взаимодействия Брейта и поправок квантовой электродинамики. Для основного состояния приведена энергия связи двух валентных электронов, для остальных состояний даны энергии возбуждения из основного состояния. В последних четырёх столбцах указаны относительные погрешности использованных методов.

	Эксп. (см ⁻¹)	CI	Теория (см ⁻¹)			Погрешность(%)				
			МВРТ	LCC	FINAL	CI	МВРТ	LCC	FINAL	
Mg I										
3s ² 1S ₀	182939	179554	182685	182875	182828	1.9	0.14	0.035	0.060	
3s3p 3P ₀	21850	20919	21792	21851	21841	4.3	0.27	-0.002	0.042	
3s3p 3P ₁	21871	20939	21814	21872	21862	4.3	0.26	-0.009	0.040	
3s3p 3P ₂	21911	20980	21857	21915	21903	4.2	0.25	-0.021	0.037	
3s3p 1P ₁	35051	34471	35030	35052	35037	1.7	0.06	-0.002	0.040	
3s4s 3S ₁	41197	40419	41132	41184	41170	1.9	0.16	0.032	0.066	
3s4s 1S ₀	43503	42678	43438	43490	43475	1.9	0.15	0.031	0.064	
3s3d 1D ₂	46403	45126	46288	46364	46344	2.8	0.25	0.085	0.127	
3s4p 3P ₀	47841	46932	47766	47822	47806	1.9	0.16	0.041	0.073	
3s4p 3P ₁	47844	46935	47769	47825	47809	1.9	0.16	0.040	0.073	
3s4p 3P ₂	47851	46942	47776	47832	47816	1.9	0.16	0.039	0.073	
3s3d 3D ₂	47957	46972	47851	47904	47886	2.1	0.22	0.110	0.147	
3s3d 3D ₃	47957	46972	47851	47904	47886	2.1	0.22	0.110	0.147	
3s3d 3D ₁	47957	46972	47851	47904	47886	2.1	0.22	0.110	0.147	
3s4p 1P ₁	49347	48497	49284	49332	49316	1.7	0.13	0.030	0.063	
Al II										
3s ² 1S ₀	381308	376617	381166	381313	381210	1.2	0.04	-0.001	0.026	
3s3p 3P ₀	37393	36257	37354	37406	37392	3.0	0.10	-0.035	0.003	
3s3p 3P ₁	37454	36319	37419	37471	37454	3.0	0.09	-0.046	0.000	
3s3p 3P ₂	37578	36444	37550	37603	37579	3.0	0.07	-0.066	-0.003	
3s3p 1P ₁	59852	59538	59900	59882	59855	0.5	-0.08	-0.050	-0.005	
3p ² 1D ₂	85481	83516	85415	85494	85450	2.3	0.08	-0.015	0.037	
3s4s 3S ₁	91275	90010	91238	91288	91256	1.4	0.04	-0.015	0.020	
3p ² 3P ₀	94085	92598	94060	94087	94049	1.6	0.03	-0.003	0.038	
3p ² 3P ₁	94147	92661	94126	94153	94112	1.6	0.02	-0.006	0.038	
3p ² 3P ₂	94269	92783	94255	94283	94234	1.6	0.01	-0.015	0.036	
3s4s 1S ₀	95351	94012	95320	95369	95336	1.4	0.03	-0.020	0.015	
3s3d 3D ₃	95549	94171	95443	95463	95418	1.4	0.11	0.091	0.138	
3s3d 3D ₂	95551	94172	95444	95464	95419	1.4	0.11	0.091	0.138	
3s3d 3D ₁	95551	94172	95444	95464	95420	1.4	0.11	0.091	0.138	
3s4p 3P ₀	105428	103965	105379	105431	105396	1.4	0.05	-0.004	0.030	
3s4p 3P ₁	105442	103979	105393	105446	105410	1.4	0.05	-0.004	0.030	
3s4p 3P ₂	105471	104009	105424	105477	105440	1.4	0.04	-0.006	0.030	
3s4p 1P ₁	106921	105578	106885	106929	106892	1.3	0.03	-0.008	0.027	

Таблица 2.2. Сравнение рассчитанных спектров Si III и P IV [40] с экспериментальными данными [50]. Данные представлены также, как в таблице (2.1).

	Эксп. (cm^{-1})	Теория (cm^{-1})				Погрешность(%)				
		CI	MBPT	LCC	FINAL	CI	MBPT	LCC	FINAL	
Si III										
$3s^2 \ ^1S_0$	634232	628587	634174	634298	634117	0.9	0.01	-0.010	0.018	
$3s3p \ ^3P_0$	52725	51546	52702	52750	52733	2.2	0.04	-0.049	-0.015	
$3s3p \ ^3P_1$	52853	51678	52838	52887	52863	2.2	0.03	-0.063	-0.018	
$3s3p \ ^3P_2$	53115	51944	53114	53163	53126	2.2	0.00	-0.090	-0.021	
$3s3p \ ^1P_1$	82884	83001	82978	82942	82903	-0.1	-0.11	-0.069	-0.023	
$3p^2 \ ^1D_2$	122215	120238	122216	122286	122217	1.6	0.00	-0.059	-0.002	
$3p^2 \ ^3P_0$	129708	128580	129724	129731	129679	0.9	-0.01	-0.018	0.022	
$3p^2 \ ^3P_1$	129842	128715	129864	129872	129813	0.9	-0.02	-0.023	0.022	
$3p^2 \ ^3P_2$	130101	128977	130138	130146	130075	0.9	-0.03	-0.035	0.020	
$3s3d \ ^3D_3$	142944	141714	142867	142854	142773	0.9	0.05	0.063	0.119	
$3s3d \ ^3D_2$	142946	141715	142867	142854	142775	0.9	0.05	0.064	0.119	
$3s3d \ ^3D_1$	142948	141716	142868	142855	142777	0.9	0.06	0.065	0.120	
$3s4s \ ^3S_1$	153377	151780	153378	153425	153368	1.0	0.00	-0.031	0.006	
$3p^2 \ ^1S_0$	153444	152676	153628	153610	153540	0.5	-0.12	-0.108	-0.062	
$3s4s \ ^1S_0$	159070	157563	159096	159136	159076	0.9	-0.02	-0.042	-0.004	
$3s3d \ ^1D_2$	165765	165093	165825	165778	165703	0.4	-0.04	-0.008	0.037	
$3s4p \ ^3P_0$	175230	173427	175215	175264	175203	1.0	0.01	-0.019	0.016	
$3s4p \ ^3P_1$	175263	173461	175250	175299	175236	1.0	0.01	-0.021	0.015	
$3s4p \ ^3P_2$	175336	173536	175327	175376	175310	1.0	0.01	-0.023	0.015	
$3s4p \ ^1P_1$	176487	174829	176487	176530	176465	0.9	0.00	-0.024	0.013	
P IV										
$3s^2 \ ^1S_0$	939386	933026	939426	939530	939247	0.7	0.00	-0.015	0.015	
$3s3p \ ^3P_0$	67918	66765	67907	67951	67931	1.7	0.02	-0.048	-0.019	
$3s3p \ ^3P_1$	68146	67001	68149	68192	68162	1.7	0.00	-0.068	-0.023	
$3s3p \ ^3P_2$	68615	67479	68641	68686	68634	1.7	-0.04	-0.103	-0.027	
$3s3p \ ^1P_1$	105190	105754	105320	105277	105225	-0.5	-0.12	-0.082	-0.033	
$3p^2 \ ^1D_2$	158142	156361	158207	158266	158170	1.1	-0.04	-0.079	-0.018	
$3p^2 \ ^3P_0$	164941	164237	164987	164984	164918	0.4	-0.03	-0.026	0.014	
$3p^2 \ ^3P_1$	165185	164484	165243	165240	165163	0.4	-0.04	-0.033	0.014	
$3p^2 \ ^3P_2$	165654	164962	165739	165736	165636	0.4	-0.05	-0.049	0.011	
$3s3d \ ^3D_2$	189398	188560	189368	189335	189210	0.4	0.02	0.033	0.099	
$3s3d \ ^3D_1$	189398	188557	189363	189330	189209	0.4	0.02	0.036	0.100	
$3s3d \ ^3D_3$	189398	188555	189360	189327	189209	0.4	0.02	0.037	0.100	
$3p^2 \ ^1S_0$	194592	194530	194857	194821	194725	0.0	-0.14	-0.118	-0.068	
$3s3d \ ^1D_2$	219154	219299	219300	219215	219099	-0.1	-0.07	-0.028	0.025	
$3s4s \ ^3S_1$	226898	225066	226947	226990	226901	0.8	-0.02	-0.040	-0.001	
$3s4s \ ^1S_0$	233998	232162	234071	234110	234018	0.8	-0.03	-0.048	-0.009	
$3s4p \ ^3P_0$	256553	254539	256585	256629	256535	0.8	-0.01	-0.029	0.007	
$3s4p \ ^3P_1$	256612	254602	256647	256691	256594	0.8	-0.01	-0.031	0.007	
$3s4p \ ^3P_2$	256760	254753	256803	256847	256743	0.8	-0.02	-0.034	0.007	
$3s4p \ ^1P_1$	257523	255651	257570	257610	257508	0.7	-0.02	-0.034	0.006	

Таблица 2.3. Сравнение рассчитанных спектров S V и Cl IV [40] с экспериментальными данными [50]. Данные представлены также, как в таблице (2.1).

	Эксп. (см^{-1})	CI	Теория (см^{-1})			Погрешность(%)				
			MBPT	LCC	FINAL	CI	MBPT	LCC	FINAL	
S V										
$3s^2 \ ^1S_0$	1295709	1288803	1295858	1295948	1295532	0.5	-0.01	-0.018	0.014	
$3s3p \ ^3P_0$	83024	81926	83020	83060	83039	1.3	0.00	-0.044	-0.018	
$3s3p \ ^3P_1$	83394	82307	83409	83449	83412	1.3	-0.02	-0.067	-0.022	
$3s3p \ ^3P_2$	84155	83087	84208	84248	84178	1.3	-0.06	-0.111	-0.027	
$3s3p \ ^1P_1$	127151	128134	127312	127265	127198	-0.8	-0.13	-0.090	-0.037	
$3p^2 \ ^1D_2$	193739	192223	193859	193910	193784	0.8	-0.06	-0.088	-0.023	
$3p^2 \ ^3P_0$	199967	199690	200036	200027	199947	0.1	-0.03	-0.030	0.010	
$3p^2 \ ^3P_1$	200371	200101	200460	200451	200352	0.1	-0.04	-0.040	0.009	
$3p^2 \ ^3P_2$	201146	200891	201277	201268	201135	0.1	-0.07	-0.061	0.006	
$3s3d \ ^3D_1$	234942	234556	234947	234905	234739	0.2	0.00	0.016	0.086	
$3s3d \ ^3D_2$	234947	234566	234959	234917	234746	0.2	-0.01	0.013	0.086	
$3s3d \ ^3D_3$	234956	234580	234977	234936	234756	0.2	-0.01	0.009	0.085	
$3p^2 \ ^1S_0$	235350	235873	235675	235633	235507	-0.2	-0.14	-0.120	-0.067	
$3s3d \ ^1D_2$	270700	271683	270933	270829	270664	-0.4	-0.09	-0.048	0.013	
$3s4s \ ^3S_1$	311595	309588	311692	311730	311601	0.6	-0.03	-0.043	-0.002	
$3s4s \ ^1S_0$	320108	318110	320238	320274	320140	0.6	-0.04	-0.052	-0.010	
$3p3d \ ^3F_2$	323133	321355	323119	323130	322931	0.6	0.00	0.001	0.062	
$3p3d \ ^3F_3$	323547	321780	323559	323571	323348	0.5	0.00	-0.007	0.062	
$3p3d \ ^3F_4$	324080	322331	324126	324139	323885	0.5	-0.01	-0.018	0.060	
$3p3d \ ^1D_2$	328454	327374	328614	328591	328357	0.3	-0.05	-0.042	0.030	
$3p3d \ ^3P_2$	345338	344679	345437	345389	345165	0.2	-0.03	-0.015	0.050	
$3p3d \ ^3P_1$	345713	345038	345818	345771	345539	0.2	-0.03	-0.017	0.050	
$3p3d \ ^3P_0$	345953	345255	346062	346016	345775	0.2	-0.03	-0.018	0.051	
Cl IV										
$3s^2 \ ^1S_0$	1702996	1695325	1702922	1703001	1702421	0.5	0.00	0.000	0.034	
$3s3p \ ^3P_0$	98062	97047	98079	98115	98093	1.0	-0.02	-0.054	-0.032	
$3s3p \ ^3P_1$	98621	97623	98664	98701	98657	1.0	-0.04	-0.082	-0.036	
$3s3p \ ^3P_2$	99782	98813	99879	99916	99824	1.0	-0.10	-0.134	-0.042	
$3s3p \ ^1P_1$	148947	150326	149149	149102	149018	-0.9	-0.14	-0.104	-0.047	
$3p^2 \ ^1D_2$	229219	228003	229404	229448	229288	0.5	-0.08	-0.100	-0.030	
$3p^2 \ ^3P_0$	234886	235038	234996	234983	234888	-0.1	-0.05	-0.041	-0.001	
$3p^2 \ ^3P_1$	235518	235681	235655	235643	235520	-0.1	-0.06	-0.053	-0.001	
$3p^2 \ ^3P_2$	236721	236907	236922	236911	236735	-0.1	-0.08	-0.080	-0.006	
$3p^2 \ ^1S_0$	275988	277074	276389	276345	276184	-0.4	-0.15	-0.129	-0.071	
$3s3d \ ^3D_1$	279758	279851	279830	279787	279566	0.0	-0.03	-0.010	0.069	
$3s3d \ ^3D_2$	279773	279877	279860	279817	279587	0.0	-0.03	-0.016	0.067	
$3s3d \ ^3D_3$	279804	279916	279906	279863	279618	0.0	-0.04	-0.021	0.066	
$3s3d \ ^1D_2$	320925	322706	321257	321147	320925	-0.6	-0.10	-0.069	0.000	
$3p3d \ ^3F_2$	383627	382362	383715	383722	383464	0.3	-0.02	-0.025	0.042	
$3p3d \ ^3F_3$	384280	383037	384412	384420	384124	0.3	-0.03	-0.036	0.041	
$3p3d \ ^3F_4$	385115	383896	385294	385302	384960	0.3	-0.05	-0.049	0.040	
$3p3d \ ^1D_2$	389464	388983	389717	389687	389376	0.1	-0.06	-0.057	0.023	
$3s4s \ ^3S_1$	407323	405211	407496	407531	407351	0.5	-0.04	-0.051	-0.007	
$3p3d \ ^3P_2$	409004	409106	409196	409142	408845	0.0	-0.05	-0.034	0.039	
$3p3d \ ^3P_1$	409551	409657	409750	409696	409392	0.0	-0.05	-0.035	0.039	
$3p3d \ ^3P_0$	409949	410028	410153	410101	409783	0.0	-0.05	-0.037	0.041	

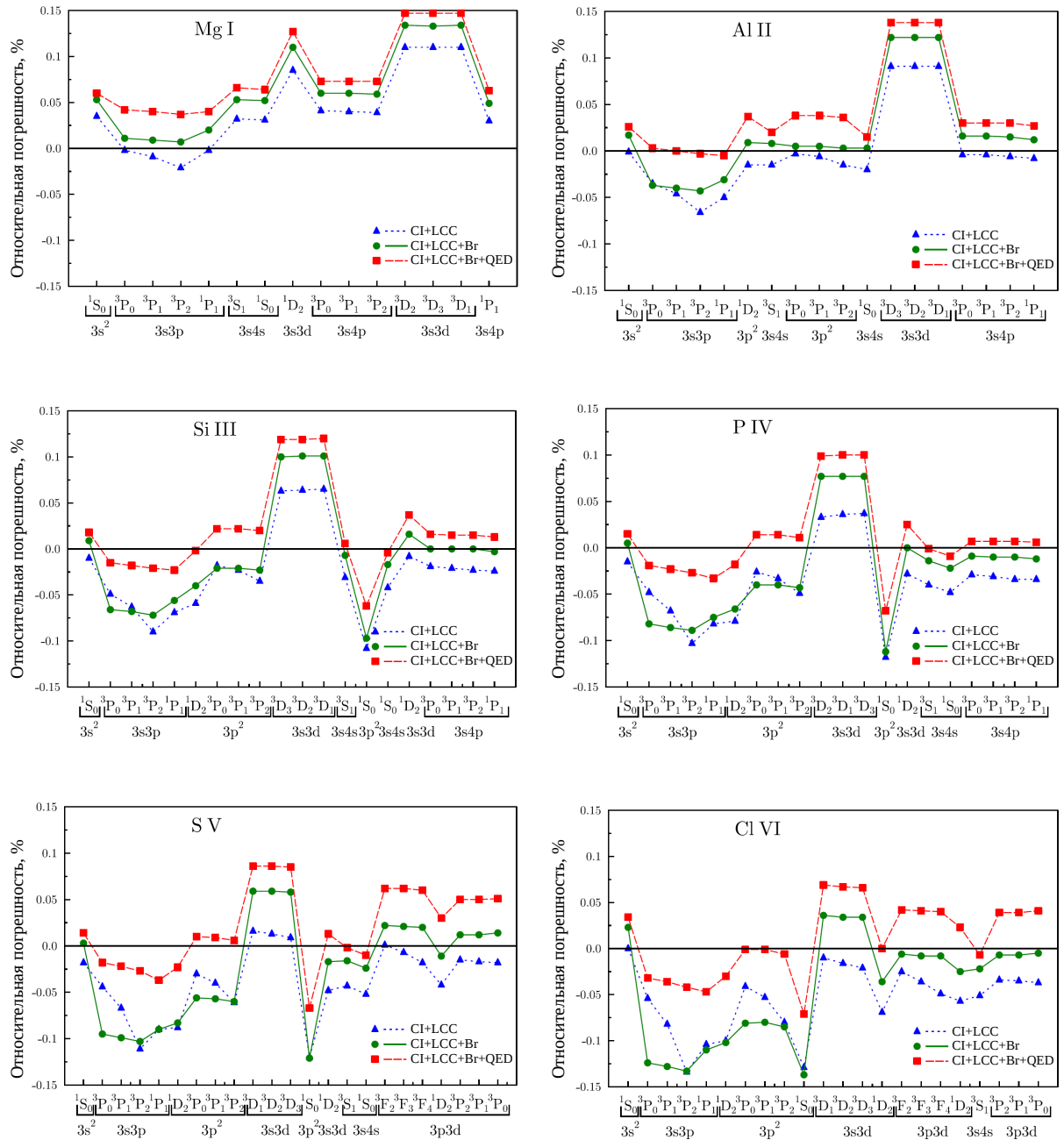


Рисунок 2.2. Относительные теоретические погрешности метода CI+LCC с использованием гамильтониана Дирака–Кулона (треугольники), или гамильтониана Дирака–Кулона–Брейта (круги), или гамильтониана Дирака–Кулона–Брейта с учётом КЭД поправок согласно уравнению(2.6) (квадраты). Для основных состояний снова приведены погрешности для энергий связи двух валентных электронов, для других состояний – погрешности для частот переходов из основных состояний.

Глава 3

Расчёт коэффициентов

чувствительности

спектральных линий Ni^+ к

вариации α

3.1 Мотивация и предварительные замечания

В 1937 году Поль Дирак предположил, что фундаментальные физические константы могут изменяться с течением времени [52]. Возможные вариации фундаментальных постоянных могут быть обнаружены во множестве физических явлений. Наиболее реалистичным инструментом для проверки данной гипотезы является атомная и молекулярная спектроскопия, вследствие рекордной точности определения частот переходов и длин волн спектральных линий [53, 54].

В спектрах квазаров наблюдаются линии поглощения от облаков межзвездного газа расположенных на линии наблюдения между квазаром и Землёй. Эти спектры соответствуют переходу валентного электрона в атоме или ионе из основного состояния в возбужденное. Зависимость частот переходов от α – релятивистский эффект, поэтому в расчётах необходимо учитывать релятивистские поправки ($H^{rel} \sim \alpha^2 Z^2$) к кулоновской энергии связи электронов с ядром и энергии межэлектронного взаимодействия [55]. Релятивистские поправки квадратично зависят от зарядового числа атома Z , поэтому для поиска вариации α подходят тяжелые атомы, спектры которых наблюдаются на больших красных смещениях. Вклад релятивистских поправок в энергию перехода для таких атомных систем ($Z < 30$) обычно не превышает нескольких процентов.

Сравнивая частоты переходов в линейчатых спектрах поглощения, полученных из астрофизических наблюдений на больших красных смещениях ω_i и в лабораторных условиях $\omega_{i,lab}$, можно получить ограничения на изменения фундаментальных постоянных на космологическом масштабе времени. Связь между частотами переходов выражается формулой [56, 57]:

$$\begin{aligned} \omega_i &= \omega_i^{(0)} + \omega_i^{(2)} \alpha^2 + \dots = \omega_{i,lab} + q_i x + \dots, \\ \omega_{i,lab} &= \omega_i^{(0)} + \omega_i^{(2)} \alpha_0^2, \quad x = (\alpha/\alpha_0)^2 - 1, \quad q_i = \left. \partial \omega_i / \partial x \right|_{x=0} \end{aligned} \quad (3.1)$$

где $\omega_i^{(0)}$ – частота перехода в нерелятивистском приближении, $\omega_i^{(2)}$ – релятивистская поправка к частоте перехода, α_0 – значение постоянной тонкой структуры в лабораторных условиях, q_i – коэффициент

чувствительности частоты перехода к изменению постоянной тонкой структуры (q -фактор). Отметим, что q -фактор перехода является разницей между q -факторами верхнего и нижнего спектральных уровней.

В атомных спектрах отношение масс покоя электрона и протона $\frac{m_e}{m_p}$ влияет только на изотопические сдвиги, вклады которых в энергии переходов незначительны (10^{-3} и менее). В молекулярных спектрах зависимость от $\frac{m_e}{m_p}$ значительно более заметна, чем в атомах, из-за наличия колебательных и вращательных степеней свободы. Поэтому космологический поиск вариаций α и $\frac{m_e}{m_p}$ обычно осуществляется отдельно с использованием атомных [1, 56–62] и молекулярных [63–68] спектров. Стоит отметить, что более высокую, чем в оптическом диапазоне, чувствительность к изменению обеих фундаментальных констант можно найти в инфракрасном и СВЧ диапазонах [69, 70]. На данный момент в лабораторных экспериментах получены следующие ограничения: $\dot{\alpha}/\alpha = (1.6 \pm 2.3) \times 10^{-17}/\text{год}$ [71] и $\left(\frac{\dot{m}_e}{m_p}\right)/\frac{m_e}{m_p} = (1.6 \pm 1.7) \times 10^{-15}/\text{год}$ [72].

Точность измерений лабораторных частот переходов и центров линий в астрономических наблюдениях является главным ограничением при поиске возможных вариаций физических констант во времени. Кроме того, разнообразие изотопов химических элементов во Вселенной может приводить к систематическим сдвигам частоты, сравнимым с ожидаемым сигналом от α -вариации [73]. Поэтому при поиске возможной α -вариации важно использовать атомы наиболее тяжелых элементов, спектры которых наблюдаются на больших красных смещениях, таких как Fe и Ni. Релятивистские эффекты в этом случае относительно большие, а изотопические сдвиги малы вследствие больших масс ядер.

Линии поглощения щелочных дублетов обусловленные тонкой структурой спектральных линий Mg II, Al III и Si IV часто встречаются в спектрах поглощения квазаров. Саведов (Savdoff) [74] первым проанализировал такие линии, наблюдаемые в эмиссионных спектрах сейфертовской галактики, чтобы получить ограничения на α -вариацию. Линии поглощения Mg II были исследованы в спектре блазара АО 0235+164 в радиодиапазоне [75]. В настоящее время большинство исследований возможной α -вариации на больших красных смещениях $z \gtrsim 1$ основано на анализе спектров поглощения квазаров с использованием многомультиплетного метода [56, 58, 59]. Этот метод использует линии разных ионов от одного и того же источника. Все линии анализируются одновременно, чтобы найти красное смещение и величину α для исследуемого квазара. Линии с малыми коэффициентами чувствительности к α -вариации служат в качестве маркеров, которые позволяют измерить красное смещение, а по линиям с большими q -факторами определяют величину α . Линии легких ионов, таких как Mg II и Al II, относятся к первой категории; большая часть линий Fe II, Ni II и Zn II, ко второй.

Чувствительность спектральных линий ионов железа к α -вариации детально изучалась в работах [76–78]. Спектральные линии Fe II имеют коэффициенты чувствительности к α -вариации разных знаков, что позволяет эффективно контролировать возможные систематические погрешности [76]. Спектр Ni II изучался менее детально [57, 79], и коэффициенты чувствительности были вычислены не для всех астрофизически значимых уровней. Недостающие теоретические данные были получены нами в работах [80, 81] и обсуждаются в этой главе далее.

Списки наблюдаемых на больших красных смещениях линий Ni II приведены в обзорах [82, 83], они включают 11 линий. Остальные частоты переходов Ni II приведены в таблицах NIST [50]. Обзор Мортонна [84] содержит как частоты переходов, так и силы осцилляторов для астрофизически значимых линий. В работе [85] приведены результаты высокоточных измерений некоторых переходов Ni II в лабораторных условиях. Для четырех астрофизически значимых линий были вычислены коэффициенты чувствительности к α -вариации [57, 79]. Некоторые линии Ni II имеют относительно небольшую чувствительность к α -вариации и могут быть отнесены к маркерам, что может быть полезно при оценке систематических погрешностей.

3.2 Метод моделирования

Первые оценки q -факторов были получены в рамках полуэмпирической модели водородоподобного атома [58]. Более точные значения q -факторов были получены уже в рамках корреляционных расчётов [57, 80]. Для того, чтобы численно найти значения q -факторов нужно рассчитать частоты переходов для разных значений α или, что тоже самое, для разных значений параметра x из уравнения (3.1). Тогда q -фактор может быть найден по формуле:

$$q \approx \frac{\omega(x_+) - \omega(x_-)}{x_+ - x_-}. \quad (3.2)$$

Удобным является выбор: $x_{\pm} = \pm \frac{1}{8}$. Для проверки точности такого выбора значений x мы также оценивали $\frac{\partial q}{\partial x}$:

$$\left. \frac{\partial q}{\partial x} \right|_{x=0} = \left. \frac{\partial^2 \omega}{\partial x^2} \right|_{x=0} \approx 4 \frac{\omega(x_+) - 2\omega(x_0) + \omega(x_-)}{(x_+ - x_-)^2}, \text{ где } x_0 = \frac{x_+ + x_-}{2} = 0. \quad (3.3)$$

Когда производная $\frac{\partial q}{\partial x}$ мала, результат вычисления q -фактора по уравнению (3.2) достаточно надёжен. Большие значения производной $\frac{\partial q}{\partial x}$ возникают при сильном взаимодействии между близлежащими уровнями. В таких случаях может потребоваться более аккуратный расчёт q -факторов взаимодействующих уровней. Полезно проследить за такими уровнями до меньших значений x , поэтому были сделаны вычисления для дополнительного значения параметра: $x = -\frac{3}{8}$. Если рассчитанное расщепление между взаимодействующими уровнями при $x = 0$ близко к экспериментальному значению, можно ожидать хорошей точности расчёта q -факторов даже в случае сильно взаимодействующих уровней. Если же теоретическое расщепление отличается от экспериментального при $x = 0$, q -факторы также могут быть рассчитаны неверно. Точность вычисления q -факторов можно пытаться улучшить, для этого следует двигаться вдоль оси x до точки, в которой теоретическое расщепление совпадает с экспериментом [57]. В качестве дополнительного критерия надёжности расчёта q -факторов, сделано сравнение вычисленных электронных g -факторов [80] с доступными экспериментальными значениями [50].

Астрофизики наблюдаемым линиям поглощения Ni II соответствуют переходы из основного состояния, которое принадлежит конфигурации [Ar]3d⁹ с полным угловым моментом $J = 5/2$ и положительной чётностью.

Спектр Ni II плотный и сложный [50] из-за девяти электронов на открытых оболочках. Вследствие близости уровней с одинаковыми полным угловым моментом J и чётностью P они сильно взаимодействуют друг с другом, особенно при высоких частотах, которые наиболее интересны в астрофизике. Правилам отбора для электрических дипольных (E1) переходов из основного состояния соответствуют уровни с отрицательной чётностью и $J = 3/2, 5/2, 7/2$. Запрещенные переходы могут идти в более высоких мультипольностях. Однако интенсивность таких переходов, как правило, на несколько порядков меньше.

В диапазоне частот, наблюдаемом на больших красных смещениях (т.е. примерно между 52000 и 70000 см^{-1} [85, 86]), содержится пять низших нечётных уровней с $J = 3/2$, восемь уровней с $J = 5/2$ и семь уровней с $J = 7/2$. Все эти уровни принадлежат конфигурациям $3d^8 4p$, $3d^7 4s 4p$ и $3d^7 4p 4d$. В расчётах использовался метод валентного CI, с помощью которого получены частоты переходов на все эти уровни из основного состояния при четырёх значениях параметра x . Между этими точками строилась кубическая интерполяция в интервале $0.625 \leq (x + 1) \leq 1.275$.

В расчётах использован гамильтониан Дирака–Кулона, спроектированный на пространство состояний с положительной энергией. Поправки к q -факторам от брейтовского взаимодействия изучались ранее и были незначительными [78]. Все вычисления выполнены с помощью пакета программ И. И. Тупицына [20, 30].

Для решения уравнений Хартри–Фока–Дирака была выполнена процедура самосогласования для основного состояния принадлежащего конфигурации $[\text{Ar}]3d^9$. Затем все эти оболочки замораживались и из

конфигурации $3d^84s$ строилась валентная орбиталь $4s$, из нерелятивистской конфигурации $3d^84p$ строились две орбитали $4p_j$. На следующем этапе строились виртуальные орбитали, для этого использовался метод описанный в работах [87, 88]. В рамках этого метода большая компонента виртуальных орбиталей получена из предыдущей орбитали той же симметрии умножением на гладкую функцию радиальной переменной r , заданную на сферической сетке радиусом 50 а.е. Так был построен базисный набор, который включает в себя парциальные волны с $l = 0, \dots, 3$ ($8spd6f$) и состоит из 33 орбиталей [80].

Валентное конфигурационное пространство строилось путём одно- и двукратных (SD) возбуждений из небольшого списка ссылочных конфигураций. Для чётных состояний это $3d^9$ и $3d^84s$; для нечётных состояний – конфигурации $3d^84p$, $3d^74s4p$ и $3d^74p4d$. Так были получены 3292 чётная и 2991 нечётная релятивистские конфигурации. Размер построенного конфигурационного пространства значительно больше, чем в предыдущем исследовании [57].

3.3 Результаты и обсуждение

В таблице (3.1) представлены результаты вычислений частот E1 переходов в Ni II, электронных g -факторов, q -факторов и производных $\partial q/\partial x$. Уровни были идентифицированы из сравнения электронных g -факторов с экспериментальными значениями и с g -факторами, полученными в приближении LS -связи [см. таблицу (3.1)]. Порядок вычисленных уровней совпадает с экспериментом в рассматриваемом диапазоне энергий.

Таблица 3.1. Результаты расчётов спектральных характеристик Ni II методом CI в валентном подпространстве [80]. Частоты переходов ω , q -факторы и $\partial q/\partial x$ даны в см^{-1} . В столбце q_{recom} приведены рекомендованные значения q -факторов с погрешностями в скобках. Электронные g -факторы вычислены как в схеме JJ , так и LS связи. Экспериментальные значения для частот переходов и электронных g -факторов взяты из таблиц NIST [50], также выполнено сравнение q -факторов с полученными ранее результатами [57]. Буквами А – Н отмечены пары взаимодействующих уровней (см. обсуждение в тексте). Звездочками отмечены линии, наблюдаемые в спектре квазара J0108-0037 при $z = 1.371$ [86].

	Эксперимент		Теория						
	ω	g	ω	$g(JJ)$	$g(LS)$	q	$\partial q/\partial x$	q_{recom}	q [57]
$^4D_{7/2}$	51558	1.420	49002	1.423	1.429	-2487	-159	-2490(150)	-2415
$^4D_{5/2}$	52739	1.365	50239	1.359	1.371	-1290	-240	-1290(150)	-1231
$^4D_{3/2}$	53635	1.186	51183	1.187	1.200	-313	-179	-310(150)	
$^4G_{7/2}$	54263	1.025	51693	1.010	0.984	-1393	-394	-1390(150)	-1361
$^4G_{5/2}$	55019	0.616	52482	0.609	0.571	-473	-359	-470(150)	-394
$^4F_{7/2}$	55418	1.184	53008	1.194	1.238	-1181	-211	-1180(150)	-1114
$^4F_{5/2}$	56075	0.985	53728	0.996	1.029	-409	-44	-410(150)	-333
$^2G_{7/2}$	A 56371*	0.940	53972	0.923	0.889	-134	-873	-250(300)	-124
$^4F_{3/2}$	56425	0.412	54140	0.420	0.400	-137	-370	-140(150)	
$^2F_{7/2}$	B 57081*	1.154	54817	1.134	1.143	-969	1358	-790(300)	-700(250)
$^2D_{5/2}$	C 57420*	1.116	55315	1.100	1.200	-1495	-200	-1500(150)	-1400(250)
$^2F_{5/2}$	D 58493*	0.946	56376	0.966	0.857	-98	271	-100(150)	-20(250)
$^2D_{3/2}$	58706*	0.795	56770	0.799	0.800	-367	-51	-370(150)	
$^4P_{5/2}$	66571*	1.480	66169	1.506	1.600	-2205	-346	-2210(150)	
$^4P_{3/2}$	E 66580	1.550	66173	1.592	1.733	-2286	-370	-2290(250)	
$^2F_{5/2}$	67695	0.960	67512	0.943	1.029	-1904	-161	-1900(150)	
$^2F_{7/2}$	G 68131*	1.200	67921	1.186	1.143	-1664	-376	-1600(200)	
$^2D_{3/2}$	F 68154*	1.020	68080	1.033	0.800	-1091	120	-1090(250)	
$^2D_{5/2}$	68736*	1.264	68753	1.242	1.200	-410	-332	-410(150)	
$^4D_{7/2}$	H 70778	1.385	70704	1.383	1.429	-662	530	-750(200)	

Как видно на рисунке (3.1), экспериментальные расщепления между ближайшими уровнями воспроизводятся в расчёте, но в тоже время энергии низколежащих уровней отрицательной чётности недооценены.

Вычисления частот E1 переходов были проведены для четырёх значений параметра: $x = -\frac{3}{8}, -\frac{1}{8}, 0, +\frac{1}{8}$. По этим данным для каждого перехода была построена кубическая интерполяция в интервале $-\frac{3}{8} \leq x \leq +\frac{1}{8}$; q -факторы вычислялись как по уравнению (3.2), так и путём дифференциация интерполяционного полинома в точке $x = 0$. Полученные этими способами q -факторы очень близки друг к другу.

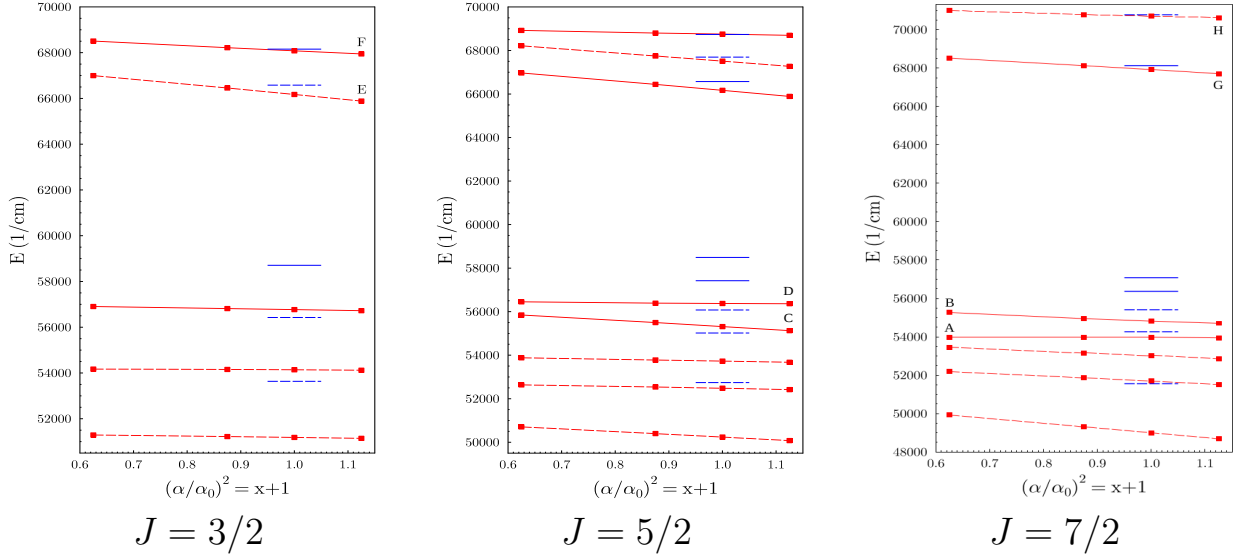


Рисунок 3.1. Зависимость частот перехода из основного состояния от параметра $(\alpha/\alpha_0)^2 = x + 1$. Сплошные линии на графиках относятся к переходам, отмечены линии, наблюдаемые в спектре квазара J0108-0037 при $z = 1.371$ [86]; пунктирные линии — для других переходов. Теоретические кривые получены путём кубической интерполяции между отмеченными точками, q -факторы соответствуют наклону кривых при $\alpha = \alpha_0$. Экспериментальные данные из [50] обозначены короткими горизонтальными линиями.

Для большинства уровней производная $\partial q/\partial x$ мала и отрицательна, что означает достаточно слабое взаимодействие между ближайшими уровнями с одинаковыми квантовыми числами J^P . Однако, в таблице (3.1) представлены четыре уровня с положительной производной $\partial q/\partial x$. Для каждого из этих четырёх уровней имеются близкие уровни с большой отрицательной производной $\partial q/\partial x$. Соответственно, возможны псевдопересечения взаимодействующих уровней и сильное отталкивание между ними. Такие пары уровней на рисунке (3.1) и в таблице (3.1) отмечены буквами. Ниже проанализированы каждая из этих пар.

Уровни А(${}^2G_{7/2}$) и В(${}^2F_{7/2}$). Это наиболее сильно взаимодействующая пара уровней с производными $\frac{\partial q_A}{\partial x} = -873 \text{ см}^{-1}$ и $\frac{\partial q_B}{\partial x} = 1358 \text{ см}^{-1}$. Рассчитанная

энергия расщепления уровней 845 см^{-1} , что больше экспериментального значения 709 см^{-1} . На рисунке (3.1) видно, что псевдопересечение этих уровней имеет место при положительных значениях x . Вычисленные электронные g -факторы отличаются от экспериментальных примерно на 2%. Двигаясь вдоль оси x к точке псевдопересечения при $x = x^* \approx 0.28$, расщепление между уровнями уменьшается, что обеспечивает лучшее согласие с экспериментом. В точке $x = \frac{1}{8}$, расщепление между уровнями равно 758 см^{-1} , при этом теоретическая погрешность уменьшается почти в три раза. Ошибка расчёта электронных g -факторов также уменьшается приблизительно до 1%. Для того, чтобы точно воспроизвести экспериментальное расщепление необходимо двигаться ещё ближе к x^* . Полностью пренебрегать взаимодействием уровней А и В с другими уровнями нельзя, значит необходимо воспроизводить также и другие энергетические расщепления. Это не может быть сделано с помощью единственного параметра x . Поэтому в качестве рекомендуемых значений выбраны q -факторы при $x = \frac{1}{8}$: $q_A = -255 \text{ см}^{-1}$ и $q_B = -792 \text{ см}^{-1}$.

В окрестности псевдопересечения $x = x^*$ взаимодействующие уровни параллельны друг другу, при этом $q_A^* = q_B^*$. Сдвиг к x^* сильно влияет на вычисленные q -факторы каждого уровня, оставляя их сумму почти неизменной. Погрешность расчёта q -факторов для этой пары уровней довольно велика и мы оцениваем её в 300 см^{-1} , так чтобы учесть их изменения на всём интервале между $x = 0$ и $x = x^*$.

Уровни $C(^2D_{5/2})$ и $D(^2F_{5/2})$ взаимодействуют намного слабее, чем первая пара (производные $\frac{\partial q_C}{\partial x} = -200 \text{ см}^{-1}$ и $\frac{\partial q_D}{\partial x} = 271 \text{ см}^{-1}$),

поэтому зависимостью g -факторов от x в этом случае можно пренебречь. Рассчитанная энергия расщепления уровней С и D: 1061 см^{-1} близка к экспериментальному значению 1073 см^{-1} . Один из двух электронных g -факторов на 2% больше экспериментальной величины, в то время как погрешность расчёта другого g -фактора значительно меньше.

Уровни E($^4P_{3/2}$) и F($^2D_{3/2}$). Производные $\frac{\partial g}{\partial x}$ этих уровней также имеют противоположные знаки, но по абсолютной величине они различаются в 3 раза. Это означает, что двухуровневая модель здесь не применима. Рассчитанная энергия расщепления переоценена на 332 см^{-1} (примерно на 20%) и электронный g -фактор уровня E на 3% больше экспериментального значения. Из-за сильного взаимодействия этой пары с другими уровнями нельзя сделать поправку к g -факторам, при $x = 0$ коэффициенты чувствительности равны: $q_E = -2286 \text{ см}^{-1}$ и $q_F = -1091 \text{ см}^{-1}$. Сдвиг по x используется только для оценки погрешности расчёта g -факторов, которая составляет 250 см^{-1} для обоих уровней. Отметим, что экспериментальное расщепление между уровнями E и F воспроизводится при $x = -0.3$, тогда g -факторы равны: $q_E = -2140 \text{ см}^{-1}$ и $q_F = -1180 \text{ см}^{-1}$.

Уровни G($^2F_{7/2}$) и H($^4D_{7/2}$). Взаимодействие этих уровней немного сильнее, чем в паре (C, D); рассчитанное энергетическое расщепление (2647 см^{-1}) на 135 см^{-1} меньше экспериментального значения. Вычисленные электронные g -факторы согласуются с экспериментальными значениями. Оптимальное теоретическое расщепление этих уровней достигается при значении параметра $x = -0.14$, тогда $q_G = -1600 \text{ см}^{-1}$ и $q_H = -750 \text{ см}^{-1}$. Погрешность расчёта g -факторов в этом случае составляет около 200 см^{-1} .

Остальные рассмотренные уровни слабо взаимодействуют с близлежащими линиями, их наклон на рисунке (3.1) относительно постоянный, поэтому вычисленные q -факторы менее чувствительные к деталям расчёта. Была выполнена проверка, что сдвиги вдоль оси x для улучшения энергетических расщеплений между ближайшими уровнями не изменяют q -факторы более чем на 100 см^{-1} . Теоретическая погрешность для этих q -факторов оценена в 150 см^{-1} . Окончательные значения q -факторов с погрешностями представлены в таблице (3.1). Приблизительно половина уровней из этой таблицы были изучены ранее в работе [57]. Коэффициенты чувствительности к изменению α всех рассмотренных в работе [57] уровней хорошо согласуются с представленными результатами. И, в тоже время, они плохо согласуются с результатами более ранних вычислений [79].

Силы осцилляторов.

Силы осцилляторов f_{osc} характеризуют вероятность перехода в единицу времени для E1 переходов. Поэтому от соответствующих f_{osc} зависит возможность наблюдения рассмотренных в этой главе переходов. Не все они известны экспериментально. Рассчитанные в работе [80] силы осцилляторов в калибровках длины (L) и скорости (V) для всех переходов из таблицы (3.1) представлены в таблице (3.2).

Для переходов с $f_{\text{osc}} > 10^{-3}$ оба метода вычисления согласуются друг с другом в пределах 10%. Даже для наиболее слабых переходов $10^{-3} > f_{\text{osc}} > 10^{-4}$ согласие довольно хорошее. Лишь в одном случае разница между силами осцилляторов, рассчитанными в разных калибровках, близка к 30%.

Для волновых функций, полученных в рамках СИ, различие между f_{osc} в L- и V- калибровках может быть использовано для оценки погрешности расчёта. Погрешность расчёта сил осцилляторов для переходов с $f_{\text{osc}} > 10^{-4}$ составляет 20–30%. В пределах этой ошибки вычисленные f_{osc} согласуются с экспериментальными и наблюдаемыми результатами из работы [84]. С одним лишь исключением – это линия 58706 см^{-1} , где сила осциллятора на 50% больше, чем у Мортонна [84].

Также имеется довольно хорошее согласие с наблюдаемыми результатами [89]. Для линии 68736 см^{-1} полученные значения f_{osc} лежат между значениями представленными в [84] и [89]. Однако, для линий 55418 см^{-1} и 56371 см^{-1} теоретические f_{osc} значительно меньше наблюдаемых. В частности, для потенциально интересной в астрофизике линии 56371 см^{-1} вычисленная сила осциллятора в три раза меньше, чем в работе [89]. Это затрудняет идентификацию этой линии при наблюдении источников на большом красном смещении.

Подводя итог, в этой главе представлен расчёт q -факторов для Ni II в рамках метода СИ для гамильтониана Дирака-Кулона, в приближении запрещающим рождение электрон-позитронных пар. Вычислены q -факторы для нескольких спектральных линий, которые ранее не изучались теоретически, но наблюдались в спектрах квазаров на большом красном смещении. Все рассчитанные значения коэффициентов чувствительности к α -вариации для Ni II отрицательны. Две линии имеют относительно небольшие q -факторы, около -400 см^{-1} , а одна – самый большой в наблюдаемом диапазоне частот q -фактор, $q = -2210 \text{ см}^{-1}$. Большая разница в коэффициентах чувствительности отдельных линий увеличивает

Таблица 3.2. Силы осцилляторов f_{osc} для рассмотренных переходов Ni II [80]. Вычисления сделаны в калибровках длины (L) и скорости (V). Выполнено сравнение с доступными экспериментальными и наблюдаемыми данными [84, 89].

	ω см ⁻¹	f_{osc}			
		L-калибровка	V-калибровка	[89]	[84]
⁴ D _{7/2}	51558	2.99E-08	9.83E-11		
⁴ D _{5/2}	52739	5.86E-04	5.72E-04		
⁴ D _{3/2}	53635	1.35E-05	1.50E-05		
⁴ G _{7/2}	54263	3.63E-04	3.30E-04		
⁴ G _{5/2}	55019	6.99E-05	7.33E-05		
⁴ F _{7/2}	55418	3.55E-03	3.14E-03	7.16E-03	
⁴ F _{5/2}	56075	5.39E-04	5.33E-04		
² G _{7/2}	56371*	2.22E-03	1.95E-03	6.22E-03	
⁴ F _{3/2}	56425	6.13E-05	6.92E-05		
² F _{7/2}	57081*	2.75E-02	2.53E-02	2.77E-02	2.77E-02
² D _{5/2}	57420*	5.05E-02	5.03E-02	4.27E-02	4.27E-02
² F _{5/2}	58493*	4.50E-02	4.36E-02	3.24E-02	3.24E-02
² D _{3/2}	58706*	1.04E-02	1.06E-02	6.00E-03	6.00E-03
⁴ P _{5/2}	66571*	5.24E-03	4.76E-03	6.00E-03	
⁴ P _{3/2}	66580	4.40E-04	3.12E-04		
² F _{5/2}	67695	6.94E-04	8.64E-04		9.72E-04
² F _{7/2}	68131*	1.02E-02	1.20E-02	9.90E-03	9.90E-03
² D _{3/2}	68154*	8.87E-03	8.03E-03	6.30E-03	6.30E-03
² D _{5/2}	68736*	3.03E-02	2.87E-02	2.76E-02	3.23E-02
⁴ D _{7/2}	70778	3.15E-03	3.59E-03		

общую чувствительность наблюдений к α -вариации и позволяет эффективно контролировать систематическую погрешность наблюдений.

По сравнению с предыдущими расчетами значительно увеличен размер активного пространства CI. Это не сильно изменило результаты, достигнуто хорошее согласие с расчетом [57]. Не следует ожидать, что точность расчёта в рамках метода CI может быть заметно улучшена: Ni II имеет 9 электронов на открытых оболочках, таким образом активное пространство CI практически невозможно насытить. С другой стороны, достигнутой точности достаточно для анализа астрофизических данных и поиска возможной α -вариации.

Глава 4

Расчёт сверхтонкой магнитной аномалии

4.1 Поправки на конечный размер ядра к константам сверхтонкой структуры

Наблюдаемые магнитные константы СТС A можно записать в виде [90]:

$$A = g_I \mathcal{A}_0 (1 - \delta)(1 - \varepsilon). \quad (4.1)$$

Здесь g_I – g -фактор ядра рассматриваемого изотопа, $g_I \mathcal{A}_0$ – константа СТС в приближении точечного ядра, δ и ε – поправки на распределение заряда (Брейта–Розенталь [3], BR) и намагниченности (Бора–Вайскопфа [4], BW) по атомному ядру.

В случае водородоподобных ионов выражение для \mathcal{A}_0 известно в

аналитическом виде [91, 92]:

$$\mathcal{A}_0 = \frac{\alpha(\alpha Z)^3}{j(j+1)} \frac{m}{m_p} \frac{\varkappa(2\varkappa(n_r + \gamma) - N)}{N^4 \gamma(4\gamma^2 - 1)} m c^2. \quad (4.2)$$

Здесь α – постоянная тонкой структуры, Z – заряд ядра, j – полный момент электрона, m и m_p массы электрона и протона, $\varkappa = (l - j)(2j + 1)$ – релятивистское квантовое число, $N = \sqrt{(n_r + \gamma)^2 + (\alpha Z)^2}$ – эффективное главное квантовое число, $n_r = n - |\varkappa|$ – радиальное квантовое число, n – нерелятивистское главное квантовое число, $\gamma = \sqrt{\varkappa^2 - (\alpha Z)^2}$. Для состояний с $j = \frac{1}{2}$ константа СТС \mathcal{A}_0 обращается в бесконечность при $\gamma = \frac{1}{2}$ или при $Z \approx 118$.

При одинаковых n отношения $\mathcal{A}_{0,s}/\mathcal{A}_{0,p_{1/2}}$ и $\mathcal{A}_{0,p_{1/2}}/\mathcal{A}_{0,p_{3/2}}$ равны [93]:

$$\frac{\mathcal{A}_{0,s}}{\mathcal{A}_{0,p_{1/2}}} = 3 + 2 \left(\frac{\alpha Z}{n - 1 + \gamma_{1/2}} \right)^2, \quad (4.3)$$

$$\frac{\mathcal{A}_{0,p_{1/2}}}{\mathcal{A}_{0,p_{3/2}}} = \frac{\gamma_{3/2}(4\gamma_{3/2}^2 - 1)}{2\gamma_{1/2}(4\gamma_{1/2}^2 - 1)} \left(1 + 3(\alpha Z)^2 \frac{5n - 4}{20n^2} \right) \quad (4.4)$$

В уравнениях (4.3, 4.4) было учтено, что γ для состояний $s_{1/2}$ и $p_{1/2}$ совпадают, а для состояний $p_{1/2}$ и $p_{3/2}$ отличаются друг от друга. Уравнения (4.3, 4.4) согласуются с результатами, полученными ранее для многоэлектронных систем в рамках квазиклассического приближения [94].

Используя экспериментальные значения для среднеквадратичных радиусов ядер $r_{\text{rms}} = \langle r^2 \rangle^{1/2}$, будем рассматривать ядро как равномерно заряженный шар радиуса $R = \left(\frac{5}{3} \langle r^2 \rangle \right)^{1/2}$. Магнитный радиус ядра обычно немного больше зарядового. Будем считать, что намагниченность распределена по шару радиуса R_M . Распределение намагниченности по ядру

обусловлено орбитальным движением протонов и спиновой поляризацией нуклонов. Плотность заряда внутри ядра относительно стабильна для различных изотопов [95], тогда как распределение намагниченности сильно зависит от спина ядра и валентной конфигурации нуклонов каждого изотопа. Для учёта этих эффектов согласно работам [96–98] используется ядерный множитель $d_{\text{нuc}}$. Для выбранного электронного состояния элемента с зарядом ядра Z поправки δ и ε могут быть записаны как [99, 100]:

$$\delta(R) = b_N \left(\frac{R}{\lambda_C} \right)^{2\gamma-1}, \quad \varepsilon(d_{\text{нuc}}, R_M, R) = b_M d_{\text{нuc}} \left(\frac{R_M}{R} \right)^2 \left(\frac{R}{\lambda_C} \right)^{2\gamma-1}. \quad (4.5)$$

Здесь λ_C – приведённая комптоновская длина волны электрона ($\lambda_C = \frac{\hbar}{m_e c}$); безразмерные параметры b_N и b_M не зависят от радиуса и структуры ядра. Ядерный множитель определен так, что $d_{\text{нuc}} = 0$ соответствует точечному магнитному диполю в центре ядра, $d_{\text{нuc}} = 1$ – равномерно намагниченному шару радиуса R . Для оценки величины ядерного множителя используется достаточно грубая одночастичная модель, поэтому Небольшим отличием между R_M и R можно пренебречь. В дальнейшем $R_M \equiv R$.

Параметризация констант сверхтонкой структуры уравнениями (4.1, 4.5) включает три атомные (\mathcal{A}_0, b_N, b_M) и три ядерные ($g_I, d_{\text{нuc}}, R$) характеристики. Атомные параметры одинаковы для различных изотопов. Если атомные параметры рассчитаны, то информацию о ядре можно извлечь из экспериментально измеренных констант СТС. Отметим, что радиус ядра R обычно плавно меняется в пределах нескольких процентов, таким образом поправка δ практически одинакова для всех изотопов выбранного атома.

Ядерные параметры необходимо задать перед расчётом констант СТС.

Будем рассматривать константу СТС как функцию от ядерных параметров:

$$A(g_I, d_{\text{нuc}}, R) = g_I \mathcal{A}_0 (1 - b_N(R/\lambda_C)^{2\gamma-1}) (1 - d_{\text{нuc}} b_M(R/\lambda_C)^{2\gamma-1}). \quad (4.6)$$

Для того, чтобы найти атомные параметры \mathcal{A}_0 , b_N и b_M из уравнения (4.6), необходимо варьировать значения $d_{\text{нuc}}$ и R . Изменяя ядерный множитель при фиксированном радиусе ядра, можно найти параметр b_M :

$$b_M = (R/\lambda_C)^{1-2\gamma} \left(1 - \frac{A(g_I, 1, R)}{A(g_I, 0, R)} \right). \quad (4.7)$$

Для того, чтобы найти параметр b_N нужно выполнить вычисления для различных радиусов ядра R , полагая $d_{\text{нuc}} = 0$:

$$b_N = \frac{(A(g_I, 0, R_2) - A(g_I, 0, R_1)) \lambda_C^{2\gamma-1}}{A(g_I, 0, R_2) R_1^{2\gamma-1} - A(g_I, 0, R_1) R_2^{2\gamma-1}}. \quad (4.8)$$

Используя b_N , может быть найден третий параметр:

$$\mathcal{A}_0 = \frac{A(g_I, 0, R)}{g_I (1 - b_N(R/\lambda_C)^{2\gamma-1})}. \quad (4.9)$$

4.1.1 Расчёт сверхтонкой магнитной аномалии

Если константы СТС изотопов и их ядерные g -факторы ($g_I^{(1)}$ и $g_I^{(2)}$) измерены независимо, то сверхтонкую магнитную аномалию ${}^1\Delta^2$ можно найти по уравнению (1). В СМА можно выделить вклады, связанные с изменением распределения заряда ${}^1\Delta_{\text{BR}}^2$ и намагниченности ${}^1\Delta_{\text{BW}}^2$ в ядре: ${}^1\Delta^2 = {}^1\Delta_{\text{BR}}^2 + {}^1\Delta_{\text{BW}}^2$.

Полагая радиусы ядер изотопов $R^{(1,2)} = R \pm \mathbf{r}$ и ядерные факторы $d_{\text{нuc}}^{(1)} =$

$d_{\text{нuc}}^{(2)} = 0$, получим:

$$\frac{A(g_I^{(1)}, 0, R + \mathbf{r})}{A(g_I^{(2)}, 0, R - \mathbf{r})} \approx \frac{g_I^{(1)}}{g_I^{(2)}} + 2\mathbf{r} \frac{\partial A(g_I^{(1)}, 0, R)/\partial R}{A(g_I^{(2)}, 0, R)}. \quad (4.10)$$

Тогда, часть СМА, связанная с перераспределением заряда ядер ${}^1\Delta_{\text{BR}}^2(R)$ равна:

$${}^1\Delta_{\text{BR}}^2(R, \mathbf{r}) \equiv \frac{g_I^{(2)} A(g_I^{(1)}, 0, R + \mathbf{r})}{g_I^{(1)} A(g_I^{(2)}, 0, R - \mathbf{r})} - 1 \approx -2(2\gamma - 1)b_N \frac{R^{2\gamma-2}\mathbf{r}}{\lambda_C^{2\gamma-1}}. \quad (4.11)$$

Если изотопы (1) и (2) характеризуются одинаковыми конфигурациями валентных нуклонов: $d_{\text{нuc}}^{(1)} = d_{\text{нuc}}^{(2)} = d_{\text{нuc}}$, то для ${}^1\Delta^2$ может быть получено аналогичное выражение.

$${}^1\Delta^2 \equiv \frac{A(1, d_{\text{нuc}}, R + \mathbf{r})}{A(1, d_{\text{нuc}}, R - \mathbf{r})} - 1 \approx -2(2\gamma - 1)(b_N + d_{\text{нuc}}b_M) \frac{R^{2\gamma-2}\mathbf{r}}{\lambda_C^{2\gamma-1}}. \quad (4.12)$$

Величины СМА между такими изотопами обычно малы ($\sim 10^{-3}$ для стабильных изотопов таллия [6]), они значительно меньше, чем СМА между парами изотопов с различными конфигурациями валентных нуклонов [6]. В случае $d_{\text{нuc}}^{(1)} \neq d_{\text{нuc}}^{(2)}$ различием между радиусами ядер изотопов можно пренебречь, тогда СМА определяется формулой:

$${}^1\Delta^2 \approx \epsilon_2 - \epsilon_1 = (d_{\text{нuc}}^{(2)} - d_{\text{нuc}}^{(1)})b_M \left(\frac{R}{\lambda_C}\right)^{2\gamma-1}. \quad (4.13)$$

4.1.2 Дифференциальная магнитная аномалия

Значение СМА можно найти из уравнения (1), если ядерные g -факторы были определены экспериментальными методами, не основанными на

измерениях констант СТС. Измеренные значения СМА между стабильными и долгоживущими изотопами, как правило, находятся в диапазоне 10^{-2} – 10^{-4} [6]. Однако, известно о больших СМА между долгоживущими изотопами золота: $^{197}\Delta^{198} = 8.53(8)\%$ и $^{197}\Delta^{180} = 21(14)\%$ [7, 8]. Они на порядки превышают погрешности измеренных констант СТС, поэтому для определения g -факторов короткоживущих изотопов золота без потери экспериментальной точности требуют оценки СМА. Метод определения СМА, основанный на анализе дифференциальных сверхтонких магнитных аномалий [Уравнение (2)], был предложен в работах [101, 102] и применялся для ряда изотопов таллия [103] и висмута [104].

Дифференциальные сверхтонкие магнитные аномалии между изотопами с одинаковыми ядерными спинами I обычно очень малы ($\sim 10^{-4}$ для нейтрального атома Fr [6]). Пренебрегая этими небольшими изменениями ДСМА, будем следить за перераспределением ядерной намагниченности между изотопами с различными ядерными спинами, тогда СМА описывается уравнением (4.13). Отношение сверхтонких магнитных аномалий для атомных состояний $s_{1/2}$ и $p_{1/2}$ определяется только атомными параметрами:

$$\eta = \frac{{}^1\Delta^2(s_{1/2})}{{}^1\Delta^2(p_{1/2})} \approx \frac{b_M(s_{1/2})}{b_M(p_{1/2})}. \quad (4.14)$$

Используя теоретическое значение η и эталонный ядерный g фактор $g_I^{(1)}$, можно восстановить сверхтонкие магнитные аномалии для состояний $s_{1/2}$ и

$p_{1/2}$ и учесть поправку на СМА к g -фактору короткоживущего изотопа:

$${}^1\Delta_{s_{1/2}}^2 = \frac{{}^1\Delta_{p_{1/2}}^2}{1 - 1/\eta}, \quad g_I^{(2)} = g_I^{(1)} \frac{A^{(2)}}{A^{(1)}} \left(1 - {}^1\Delta_{s_{1/2}}^2\right). \quad (4.15)$$

Если известен $d_{\text{nuc}}^{(1)}$ и измерена дифференциальная магнитная аномалия, то может быть найден $d_{\text{nuc}}^{(2)}$:

$$d_{\text{nuc}}^{(2)} = d_{\text{nuc}}^{(1)} + \frac{{}^1\Delta_{p_{1/2}}^2}{(1 - 1/\eta)b_{M, s_{1/2}}(R/\lambda_C)^{2\gamma-1}}. \quad (4.16)$$

4.2 Метод моделирования

4.2.1 Одноэлектронное приближение

Взаимодействие электрона с ядром в приближении точечного магнитного диполя описывается оператором:

$$H_{\text{hfs}}^{\text{PD}} = \frac{\mu}{I} \frac{\boldsymbol{\alpha} \cdot (\boldsymbol{\alpha} \times \mathbf{r})}{r^3}, \quad (4.17)$$

где $\boldsymbol{\alpha} = \gamma_0 \boldsymbol{\gamma}$, γ_i – матрицы Дирака. Диагональный матричный элемент оператора (4.17) задаёт сверхтонкое расщепление электронного состояния:

$$\Delta E = A \frac{F(F+1) - I(I+1)j(j+1)}{2}. \quad (4.18)$$

Здесь F – полный момент атома, j – полный момент электрона.

Радиальный интеграл для константы сверхтонкой структуры в

приближении точечного магнитного диполя имеет вид:

$$I_{n,\varkappa} = 2 \int_0^\infty P_{n,\varkappa} Q_{n,\varkappa} \frac{dr}{r^2}. \quad (4.19)$$

Здесь $P_{n,\varkappa}$ и $Q_{n,\varkappa}$ – большая и малая компоненты биспинора [Уравнение (1.5)]. При равномерном распределении ядерной намагниченности по шару радиальный интеграл (4.19) внутри ядра радиуса R имеет вид [4, 98]:

$$I_{n,\varkappa}^{\text{нuc}} = 2 \int_0^R P_{n,\varkappa} Q_{n,\varkappa} \frac{r dr}{R^3}. \quad (4.20)$$

Вне ядра радиальный интеграл (4.19) остается неизменным.

Внутри ядра используется разложение радиальных функций P и Q в ряд Тейлора. Для радиальной функции P это разложение имеет вид:

$$P_{n,\varkappa}(r)|_{r \leq R} = r^{|\varkappa|} \sum_{k=0}^M P_{n,\varkappa,k} x^k, \quad x = \frac{r}{R}. \quad (4.21)$$

Для функции Q используется аналогичное разложение. Используя эти разложения, может быть вычислен радиальный интеграл (4.20) и ядерный вклад в интеграл (4.19):

$$I_{n,\varkappa}^{\text{нuc}} = 2R^{2|\varkappa|-1} \sum_{m=0}^M \sum_{k=0}^m \frac{P_{n,\varkappa,k} Q_{n,\varkappa,m-k}}{2|\varkappa| + m + 2}, \quad (4.22)$$

$$I_{n,\varkappa}^{\text{нuc},0} = 2R^{2|\varkappa|-1} \sum_{m=0}^M \sum_{k=0}^m \frac{P_{n,\varkappa,k} Q_{n,\varkappa,m-k}}{2|\varkappa| + m - 1}. \quad (4.23)$$

4.2.2 Обобщение на случай многоэлектронных систем

После того, как одноэлектронные радиальные интегралы определены, можно вычислять атомные константы сверхтонкой структуры с использованием многоэлектронных волновых функций, учитывая электронные корреляции, как описано в работе [32].

На первом этапе расчёты могут быть выполнены методом конфигурационного взаимодействия с замороженным атомным остовом и несколькими валентными электронами. Затем могут быть учтены остовно-валентные электронные корреляции в рамках многочастичной теории возмущений или методом связанных кластеров. На этом этапе валентные радиальные интегралы заменяются эффективными, которые учитывают спиновую поляризацию атомного остова. Последние получены решением уравнений приближения случайной фазы (RPA).

Зависимости начальных и эффективных радиальных интегралов от радиуса ядра могут значительно отличаться друг от друга. Это наиболее заметно для орбиталей с большим угловым моментом, поскольку центробежный барьер не позволяет этим орбиталям проникать внутрь ядра, и соответствующие начальные радиальные интегралы не зависят от радиуса ядра. Учет спиновой поляризации атомного остова всегда включает в себя поляризацию остовных s и $p_{1/2}$ оболочек, из-за чего все эффективные радиальные интегралы чувствительны к изменению ядерного радиуса.

Все корреляционные поправки можно разделить на два класса: первые смешивают орбитали в пределах одной парциальной волны, вторые смешивают разные парциальные волны. Например, поправка на собственную энергию электрона относится к первому классу. Поправки этого

класса смешивают остовные и валентные орбитали одинаковой симметрии, что может существенно изменить электронную плотность на ядре и таким образом размер элементов матрицы сверхтонкой структуры. С другой стороны, все орбитали одной и той же симметрии имеют практически одинаковую чувствительность к изменению ядерного радиуса [105], значит корреляционные поправки этого класса не сильно влияют на параметры b_N и b_M . Поправки на спиновую поляризацию атомного остова относятся ко второму классу, они могут значительно влиять на параметры b_N и b_M .

4.3 Ядерный множитель

В рамках одночастичной модели ядра предполагается, что намагниченность сферически симметричного ядра возникает за счет спиновой поляризации нуклонов и орбитального движения валентного протона. Ядерный g -фактор определяется знаменитой формулой Ланде:

$$g_I = \left[\frac{1}{2} - \frac{L(L+1) - 3/4}{2I(I+1)} \right] g_S + \left[\frac{1}{2} + \frac{L(L+1) - 3/4}{2I(I+1)} \right] g_L. \quad (4.24)$$

где L – орбитальный момент валентного нуклона. В случае валентного протона $g_L = 1$, тогда как для нейтрона $g_L = 0$; g_S выбирается так, чтобы воспроизвести экспериментальное значение ядерного g -фактора согласно уравнению 4.24 [106].

Введя обозначение σ для усредненной компоненты спина валентного

нуклона на направление \mathbf{I} , g -фактор ядра можно представить в виде:

$$g_I = \frac{\sigma}{I}g_S + \frac{(I - \sigma)}{I}g_L. \quad (4.25)$$

Сравнивая уравнения (4.24) и (4.25), получим:

$$\sigma = \begin{cases} \frac{1}{2}, & \text{если } I = L + \frac{1}{2} \\ -\frac{I}{2(I+1)}, & \text{если } I = L - \frac{1}{2}. \end{cases} \quad (4.26)$$

Поправка Бора–Вайскопфа ε может быть представлена как линейная комбинация спинового и орбитального вкладов, ε_S и ε_L с теми же весами, которые определены уравнением (4.25):

$$\varepsilon = \frac{\sigma g_S}{I g_I} \varepsilon_S + \left(\frac{I - \sigma}{I} \right) \frac{g_L}{g_I} \varepsilon_L. \quad (4.27)$$

Случай равномерно намагниченного ядра ($d_{\text{нuc}} = 1$) реализуется, когда валентный нуклон находится в состоянии $L = 0$. Если валентный нуклон находится в состоянии $L \neq 0$, то остов ядра асимметричен, что приводит к появлению дополнительного вклада в спиновую часть поправки ε . Выражения для ζ были предложены в работе [107]:

$$\zeta = \begin{cases} \frac{2I-1}{4(I+1)}, & \text{если } I = L + \frac{1}{2} \\ \frac{2I+3}{4I}, & \text{если } I = L - \frac{1}{2}. \end{cases} \quad (4.28)$$

Поправки ε_S и ε_L могут быть записаны как:

$$\varepsilon_S = (1 - k\zeta)\varepsilon(d_{\text{нuc}} = 1), \quad \varepsilon_L = (1 + k)\varepsilon(d_{\text{нuc}} = 1), \quad (4.29)$$

здесь, $k \approx -0.38$ [4]. Таким образом, для ядерного множителя $d_{\text{нuc}}$ получено следующее выражение:

$$d_{\text{нuc}} = 1 + k \left[1 - (1 + \zeta) \frac{\sigma g_S}{I g_I} \right]. \quad (4.30)$$

Следует подчеркнуть, что ядерный множитель $d_{\text{нuc}}$ имеет сингулярность при $g_I \rightarrow 0$.

4.4 Результаты и их обсуждение

Для расчёта констант СТС применялся пакет программ [34]. Этот пакет программ широко используется для расчёта различных атомных свойств, включая расчёт констант сверхтонкой структуры Tl [108, 109], Yb [110], Mg [111] и Pb [112]. Начальным было приближение замороженного остова. Для решения уравнений Дирака–Хартри–Фока использовалась программа HFD [30]. Остовно-остовные и валентно-остовные корреляции учитывались либо в рамках метода MBPT, либо LCC.

Общие свойства СМА, а именно зависимость поправок Брейта–Розенталь и Бора–Вайскопфа от радиуса ядра и зависимость отношения поправок Бора–Вайскопфа для $s_{1/2}$ и $p_{1/2}$ состояний от заряда ядра, были изучены на примере водородоподобных ионов. Проведены расчёты СМА для нейтральных атомов Fr и Au, золотоподобных ионов Hg и Tl.

4.4.1 Водородоподобные ионы

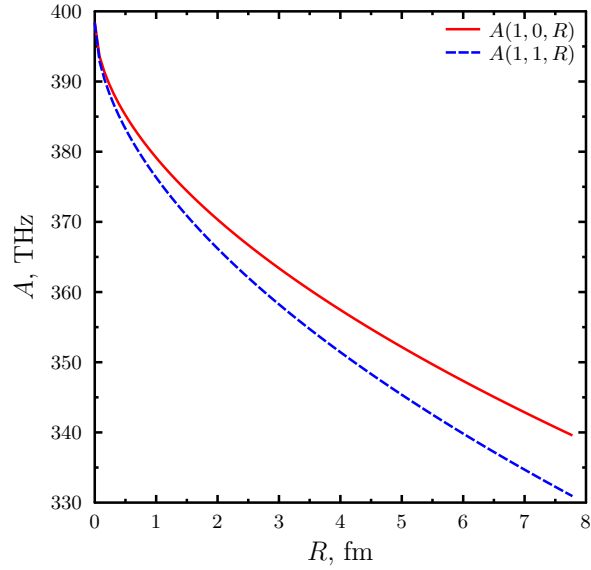


Рисунок 4.1. Зависимость константы $A(g_I, d_{\text{нuc}}, R)$ основного состояния водородоподобного иона Fr от радиуса ядра R и $g_I = 1$ [93]. Сплошная и пунктирная линии описываются уравнением (4.6), когда $d_{\text{нuc}} = 0$ и 1, соответственно.

Зависимость константы A основного состояния Fr^{86+} от радиуса ядра R представлена на рисунке (4.1). Параметры $b_N(1s_{1/2}) = 1.241(20)$ и $b_M(1s_{1/2}) = 0.208(3)$ найдены численно по уравнениям (4.8) и (4.7). Константа $\mathcal{A}_0(1s_{1/2})$, полученная численно по уравнению (4.9), находится в согласии с аналитическим значением [92]: 398.4(6) ТГц и 397.7 ТГц, соответственно. На рисунке (4.1) показаны аппроксимации констант СТС для двух распределений ядерной намагниченности $d_{\text{нuc}} = 0$ и $d_{\text{нuc}} = 1$, выполненные с использованием найденных выше атомных параметров.

В таблицах (4.1, 4.2) приведены результаты расчётов поправок Бора–Вайскопфа (полагая $d_{\text{нuc}} = 1$) и Брейта–Розенталь для $2s_{1/2}$ и $2p_{1/2}$ состояний водородоподобных ионов в зависимости от заряда ядра $Z \in [10, 90]$. Вычисленные значения поправок ε и δ и их отношения $\eta =$

Таблица 4.1. Зависимость поправок Бора–Вайскопфа $\varepsilon(d_{\text{нuc}}, R)$ [см. Уравнения (4.5, 4.7)] для $2s_{1/2}$ и $2p_{1/2}$ состояний водородоподобных ионов и их отношения $\eta = \frac{\varepsilon(s_{1/2})}{\varepsilon(p_{1/2})}$ от заряда ядра Z , полагая $d_{\text{нuc}} = 1$. Радиусы ядер R взяты из работы [113].

Z	$\varepsilon(1, R)(2s_{1/2})$ (%)			$\varepsilon(1, R)(2p_{1/2})$ (%)			η	
	[92]	[4]		[92]	[4]		[92]	
10	0.042	0.043	0.05	–	0.0002	–	–	277.3
20	0.106	0.106	0.12	–	0.0015	–	–	73.9
30	0.203	0.205	0.23	0.006	0.006	0.01	33.1	33.2
40	0.341	0.344	0.41	0.019	0.019	0.03	18.4	18.5
50	0.553	0.561	0.67	0.048	0.048	0.08	11.5	11.6
60	0.856	0.873	1.03	0.111	0.112	0.17	7.74	7.79
70	1.335	1.353	1.51	0.245	0.245	0.36	5.45	5.52
80	1.976	2.048	2.15	0.495	0.505	0.70	3.99	4.05
90	2.969	3.077	2.88	0.987	1.004	1.27	3.01	3.07

Таблица 4.2. Зависимость от заряда ядра Z поправок Брейта–Розенталь $\delta(R)$ для $2s_{1/2}$ и $2p_{1/2}$ состояний водородоподобных ионов, их отношения $\eta_{BR} = \frac{\delta(s_{1/2})}{\delta(p_{1/2})}$ и коэффициента $k = 1 - \delta(R)(2s_{1/2}) + \delta(R)(2p_{1/2})$. Радиусы ядер R взяты из работы [113].

Z	$\delta(R)(2s_{1/2})$ (%)		$\delta(R)(2p_{1/2})$ (%)		η_{BR}	k
	[92]		[92]			
10	0.115	0.115	–	0.0003	–	383.3
20	0.299	0.295	0.0036	0.0036	82.6	81.9
30	0.601	0.593	0.0167	0.0165	36.0	35.9
40	1.08	1.06	0.0545	0.0539	19.8	19.7
50	1.90	1.86	0.156	0.154	12.2	12.1
60	3.28	3.20	0.406	0.400	8.1	8.0
70	5.83	5.60	1.05	1.01	5.6	5.5
80	10.1	9.87	2.56	2.52	3.9	3.9
90	18.3	17.7	6.50	6.30	2.8	2.8

Таблица 4.3. Зависимость параметров \mathcal{A}_0 для $2s_{1/2}$, $2p_{1/2}$ $2p_{3/2}$ состояний водородоподобных ионов, найденных численно по уравнению (4.9), в сравнении с аналитическими значениями, полученными по уравнению (4.2). В последних столбцах приведены численные значения отношения $\frac{\mathcal{A}_{0,s}}{\mathcal{A}_{0,p_{1/2}}}$ в сравнении с аналитическими результатами, полученными по уравнению (4.3).

Z	$\mathcal{A}_{0,s}$ (ТГц)		$\mathcal{A}_{0,p_{1/2}}$ (ТГц)		$\mathcal{A}_{0,p_{3/2}}$ (ТГц)		$\frac{\mathcal{A}_{0,s}}{\mathcal{A}_{0,p_{1/2}}}$	
	Ур. (4.2) [92]		Ур. (4.2) [92]		Ур. (4.2)		Ур. (4.3)	
10	0.032	0.032	0.0107	0.0107	0.002	0.002	3.00	3.00
20	0.266	0.266	0.088	0.088	0.017	0.017	3.01	3.01
30	0.954	0.954	0.315	0.315	0.058	0.058	3.02	3.02
40	2.464	2.463	0.809	0.809	0.139	0.139	3.05	3.04
50	5.409	5.408	1.761	1.760	0.275	0.276	3.07	3.07
60	10.909	10.905	3.509	3.509	0.484	0.485	3.11	3.11
70	21.200	21.185	6.718	6.717	0.785	0.787	3.16	3.15
80	41.313	41.261	12.844	12.841	1.202	1.205	3.22	3.21
90	84.547	84.369	25.660	25.637	1.761	1.767	3.29	3.28

$\frac{\varepsilon(s_{1/2})}{\varepsilon(p_{1/2})}$ и $\eta_{\text{BR}} = \frac{\delta(s_{1/2})}{\delta(p_{1/2})}$ находятся в согласии с результатами, полученными аналитически в работе [92]. Отношения η и η_{BR} быстро уменьшаются с ростом Z .

Зависимость параметров \mathcal{A}_0 для $2s_{1/2}$, $2p_{1/2}$ и $2p_{3/2}$ состояний водородоподобных ионов от заряда ядра представлена в таблице (4.3). Волновые функции $p_{3/2}$ состояний обращаются в 0 при $r = 0$, таким образом поправки Бора–Вайскопфа и Брейта–Розенталь для этих состояний равны 0. В этом случае полученные из расчётов константы СТС для $g_I = 1$ непосредственно равны \mathcal{A}_0 . Для состояний $2s_{1/2}$ и $2p_{1/2}$ параметры \mathcal{A}_0 получены по уравнению (4.9). При этом параметры \mathcal{A}_0 даже в случае больших Z отличаются от значений, полученных аналитически [Уравнение (4.2)], не более чем на 0.2%. Отношение $\frac{\mathcal{A}_{0,s_{1/2}}}{\mathcal{A}_{0,p_{1/2}}}$ с высокой

точностью описывается уравнением (4.3), тогда как погрешность для отношения $\frac{\mathcal{A}_{0,p_{1/2}}}{\mathcal{A}_{0,p_{3/2}}}$ [Уравнение (4.4)] не превышает 1% для $Z < 30$, а для $Z = 90$ составляет уже 12%.

4.4.2 Тяжелые нейтральные атомы

Сверхтонкое расщепление спектральных линий зависит от асимптотики волновой функции [Уравнение (1.5)] валентного электрона на малых расстояниях, поскольку оно обусловлено взаимодействием электрона с ядром. На таких расстояниях кулоновское поле ядра можно считать неэкранированным, а радиальные волновые функции состояний $s_{1/2}$ и $p_{1/2}$ пропорциональными друг другу с коэффициентом $\frac{Z\alpha}{2}(1 + \frac{Z^2\alpha^2}{4})$ [114]. Используя квазиклассическую оценку для $\frac{\mathcal{A}_{0,s}}{\mathcal{A}_{0,p_{1/2}}} = 3$ [94] и пропорциональность радиальных волновых функций, получим выражения для η и η_{BR} . Согласно уравнению (4.6) параметр η может быть найден как:

$$\frac{1}{\eta} = \frac{A_{s_{1/2}}(1, 0, R)}{A_{p_{1/2}}(1, 0, R)} \cdot \frac{A_{p_{1/2}}(1, 0, R) - A_{p_{1/2}}(1, 1, R)}{A_{s_{1/2}}(1, 0, R) - A_{s_{1/2}}(1, 1, R)}. \quad (4.31)$$

Первая дробь в выражении (4.31) может быть заменена на $\frac{\mathcal{A}_{0,s_{1/2}}}{\mathcal{A}_{0,p_{1/2}}}$, если пренебречь поправками Брейта–Розенталя; вторая дробь зависит от радиальных интегралов внутри ядра, где радиальные волновые функции состояний $s_{1/2}$ и $p_{1/2}$ пропорциональны друг другу, коэффициент пропорциональности для радиальных интегралов равен $\frac{\alpha^2 Z^2}{4} \left(1 + \frac{\alpha^2 Z^2}{4}\right)^2$. Тогда выражение для η имеет вид [93]:

$$\frac{1}{\eta} = \frac{3}{4} \alpha^2 Z^2. \quad (4.32)$$

Учитывая следующие слагаемые по αZ , получим:

$$\frac{1}{\eta} = \frac{\alpha^2 Z^2}{4} 3k \left(1 + \frac{\alpha^2 Z^2}{4} \right)^2. \quad (4.33)$$

Параметр k возникает в уравнении (4.33) вследствие учёта вклада поправок Брейта–Розенталь $k = 1 - \delta(s_{1/2}) + \delta(p_{1/2})$. Зависимость параметра k от Z для водородоподобных ионов представлена в таблице (4.2). Аналогичное

Таблица 4.4. Атомные множители η для атомов Au, Tl, Fr, полученные по Уравнение (4.32) и Уравнение (4.33) в сравнении с результатами расчётов водородоподобных ионов и нейтральных атомов. В случае водородоподобных ионов $\eta = \frac{\varepsilon(2s_{1/2})}{\varepsilon(2p_{1/2})}$, для нейтральных атомов зависимостью η от главного квантового числа можно пренебречь.

η	Au	Tl	Fr
Уравнение (4.32)	4.01	3.82	3.31
Уравнение (4.33)	3.69	3.51	3.07
Водородоподобный ион	4.10	3.86	3.26
Нейтральный атом	3.3 ^a 4.0(3) ^d	3.4(2) ^b 3.1 ^e	3.1(1) ^c
Эксперимент	–	2.84(78) ^f	–

Примечание. ^a [115]; ^b [116]; ^c [98]; ^d [5]; ^e [96]; ^f [117].

выражение может быть получено для отношения поправок Брейта–Розенталь:

$$\frac{1}{\eta_{BR}} = \frac{\mathcal{A}_{0, s_{1/2}}}{\mathcal{A}_{0, p_{1/2}}} \cdot \frac{\mathcal{A}_{0, p_{1/2}} - A_{p_{1/2}}(1, 0, R)}{\mathcal{A}_{0, s_{1/2}} - A_{s_{1/2}}(1, 0, R)}. \quad (4.34)$$

В силу пропорциональности волновых функций для состояний $s_{1/2}$ и $p_{1/2}$ внутри ядра вторые дроби в уравнениях (4.31) и (4.34) равны, тогда: $\frac{\eta_{BR}}{\eta} = k$.

Атомные множители η , полученные для нейтральных атомов Au, Tl и Fr аналитически по уравнениям (4.32, 4.33) и численно, находятся в согласии

друг с другом [см. таблицу 4.4].

4.5 Франций

Отсутствие у франция стабильных изотопов не позволяет определять их ядерные g -факторы неоптическими методами. Точность этих оценок ограничена необходимостью учета поправки на СМА. Наиболее точно известен g -фактор для изотопа ^{210}Fr из сравнения измеренной и рассчитанной константы СТС для состояния $9s$ [118]. В этом разделе выполнен расчёт энергий связи и констант СТС для низколежащих состояний атома франция.

Таблица 4.5. Энергии связи низколежащих состояний атома Fr (au). Строки DHF, DHF + MBPT и DHF + LCC соответствуют методам Хартри–Фока–Дирака и Хартри–Фока–Дирака с учётом корреляционных поправок методами многочастичной теории возмущений или связанных кластеров. Учтены энергетическая зависимость эффективных гамильтонианов и вклад брейтовского взаимодействия. Экспериментальные данные и теоретическая ошибка (в %) приведены в последних двух строках.

Метод	$7s_{1/2}$	$7p_{1/2}$	$7p_{3/2}$
DHF	0.13124	0.08597	0.08046
DHF + MBPT	0.15342	0.09454	0.08666
DHF + LCC	0.14984	0.09367	0.08604
Эксперимент [50]	0.14967	0.09391	0.08623
Погрешность расчёта	0.11%	-0.26%	-0.22%

Основное состояние нейтрального атома франция $[\text{Rn}]7s$. В приближении Хартри–Фока–Дирака (DHF) атом франция можно рассматривать как одноэлектронную систему в поле замороженного остова. На следующих этапах учитываются валентно-остовные электронные корреляции в рамках методов MBPT или LCC. В Таблица (4.5) приведены энергии связи

низших возбуждённых состояний $7s_{1/2}$, $7p_{1/2}$ и $7p_{3/2}$. Представленные результаты расчётов учитывают энергетическую зависимость эффективных гамильтонианов и вклад брейтовского взаимодействия. Теоретическая погрешность энергий связи для рассмотренных состояний не превышает 0.25%.

Таблица 4.6. Параметры аппроксимации постоянных СТС для $7s_{1/2}$, $7p_{1/2}$ и $7p_{3/2}$ состояний атома Fr. Для расчёта констант СТС ^{210}Fr использовались $R = 7.1766$ fm, $g_I = 0.733$ и $d_{\text{нuc}} = 0.51$. Также представлены другие теоретические результаты, полученные в рамках метода связанных кластеров, и экспериментальные данные.

	$7s_{1/2}$	$7p_{1/2}$	$7p_{3/2}$	$7s_{1/2}$	$7p_{1/2}$	$7p_{3/2}$
	DHF			DHF+RPA		
\mathcal{A}_0 (МГц)	8139	780	56.2	9508	957	100.3
b_N	1.380	0.413	0.000	1.389	0.399	0.305
b_M	0.231	0.075	0.000	0.231	0.067	0.058
$A/g_I(^{210}\text{Fr})$ (МГц)	6764	740	56.2	7892	910	96.5
	DHF+MBPT+RPA			DHF+LCC+RPA		
\mathcal{A}_0 (МГц)	12988	1527	110.0	11749	1416	101.7
b_N	1.327	0.413	0.046	1.336	0.419	0.034
b_M	0.228	0.072	-0.004	0.228	0.073	-0.006
$A/g_I(^{210}\text{Fr})$ (МГц)	10874	1449	109.5	9825	1342	98.0
$A/g_I(^{210}\text{Fr})$ (МГц)		Теория* [118]		9927	–	–
		Теория [119]		9885.24	1279.56	104.28
		Эксперимент [120–122]		9856(113)	1296(15)	106.8(13)

* В работе [118] использовалось одно и тоже Ферми распределение заряда и ядерной намагниченности, что соответствует $d_{\text{нuc}} = 1$.

Зависимость констант сверхтонкой структуры Fr от радиуса ядра представлена в таблице (4.6). В рамках приближения DHF с учётом брейтовского взаимодействия константа СТС $A(7p_{3/2})/g_I = 56.2$ МГц мала и нечувствительна к изменению радиуса ядра [Таблица (4.6)]; зависимость констант СТС $A(7s)$ и $A(7p_{1/2})$ от радиуса ядра описывается уравнением (4.6); атомный множитель $\eta(Fr) = 3.09$ согласуется с аналитическим

значением -3.07 , полученным по уравнению (4.33).

Учет спиновой поляризации остова в рамках приближения случайной фазы (RPA) приводит к тому, что в константе СТС $A(7p_{3/2})$ появляются вклады от $s_{1/2}$ и $p_{1/2}$ парциальных волн. Вследствие этого $A(7p_{3/2})$ становится чувствительной к СМА. Зависимость $A(7p_{3/2})$ от радиуса ядра такая же, как у $A(7s_{1/2})$ и $A(7p_{1/2})$. Параметры b_N и b_M для состояния $7p_{1/2}$ меняются слабее, потому что константа СТС $A(7p_{1/2})$ почти в 10 раз больше, чем $A(7p_{3/2})$. В свою очередь примесь $p_{1/2}$ парциальной волны незначительно меняет $A(7s_{1/2})$. В результатах, полученных методами DHF+MBPT+RPA и DHF+LCC+RPA, учтена также поправка на структурное излучение, которая смешивает различные парциальные волны. Эта поправка частично компенсирует вклад RPA. Итоговые значения параметров b_N и b_M для состояния $7p_{3/2}$ близки к нулю; атомный множитель $\eta(\text{Fr}) = 3.1(1)$.

4.5.1 Обработка экспериментальных данных

Информация о параметрах b_N и b_M может быть извлечена из экспериментально измеренных отношений констант сверхтонкой структуры $\rho = A(7s_{1/2})/A(7p_{1/2})$. Это отношение может быть записано как функция от радиуса ядра R и ядерного фактора $d_{\text{нuc}}$:

$$\rho(R, d_{\text{нuc}}) = \rho_0 \frac{(1 - b_{N p_{1/2}}(R/\lambda_C)^{\varkappa})(1 - d_{\text{нuc}} b_{M p_{1/2}}(R/\lambda_C)^{\varkappa})}{(1 - b_{N s_{1/2}}(R/\lambda_C)^{\varkappa})(1 - d_{\text{нuc}} b_{M s_{1/2}}(R/\lambda_C)^{\varkappa})}, \quad (4.35)$$

где $\rho_0 = \frac{A_{0, p_{1/2}}}{A_{0, s_{1/2}}}$.

Нечетно-четные изотопы Fr с числом нейтронов $N \leq 126$ ($A \leq 213$) имеют спин $I = 9/2$. Магнитные моменты $\mu(A, 9/2)$ для изотопов от

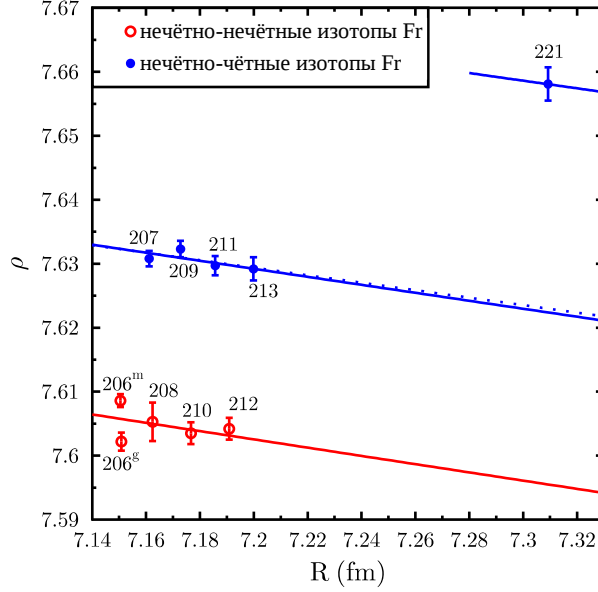


Рисунок 4.2. Экспериментальные значения отношений $\rho = A(7s)/A(7p_{1/2})$ для нечетно-четных и нечетно-нечетных изотопов франция [123] в зависимости от ядерных радиусов изотопов R [122]. Сплошные линии соответствуют однопараметрической аппроксимации по уравнению (4.35) с ρ_0 в качестве свободного параметра. Для нечетно-четных изотопов использован $d_{\text{нuc}} = 0.32$. Величина ρ_0 , полученная из однопараметрической аппроксимации, фиксируется и подбирается ядерный множитель, который для нечетно-нечетных изотопов $A = 206 - 212$ равен $d_{\text{нuc}} = 0.51$ и $d_{\text{нuc}} = 0.05$ для ^{221}Fr .

$A = 213$ до $A = 207$ изменяются лишь в пределах 3% [120]. В основном состоянии ядра этих изотопов имеют один валентный протон на подоболочке $h_{9/2}$. Множитель $d_{\text{нuc}}$ для таких состояний ядер является постоянным, изменяясь в пределах тех же 3% [124]. Для изотопов ^{211}Fr и ^{209}Fr величина ядерного множителя была оценена ранее $d_{\text{нuc}} = 0.3$ [125]. Вычисленный по уравнению (4.30) ядерный множитель для нечетно-четных изотопов равен $0.32(4)$, если $g_L = 1.16$ [121].

Одночастичная ядерная модель может быть обобщена на случай нечетно-нечетных изотопов (один валентный протон и один нейтрон) [97]. Ядерные спины и валентные конфигурации ядер изотопов с $A = 206 - 212$ различны (I

= 5, 6, 7, 3). Соответственно, ядерные множители $d_{\text{нuc}}$ могут быть разными. Однако, во всех этих случаях оболочечная модель дает $d_{\text{нuc}} = 0.5(1)$.

Экспериментальные значения ρ для нечетно-нечетных и нечетно-четных изотопов [123] и аппроксимации, соответствующие уравнению (4.35), представлены на рисунке (4.2). Чтобы проверить общую применимость разработанного подхода, предположим, что ядерные факторы всех рассмотренных нечетно-четных изотопов Fr одинаковы и равны $d_{\text{нuc}}^{I=9/2} = 0.3$, тогда однопараметрическая аппроксимация согласно уравнению (4.35) с ρ_0 в качестве свободного параметра дает: $\rho_0 = 8.619$. Зафиксировав теперь величину ρ_0 , можно подобрать $d_{\text{нuc}} = 0.51$ для нечетно-нечетных изотопов $A = 206 - 212$. Это согласуется с оценкой, полученной в рамках оболочечной модели. Отклонение экспериментальных значений ρ для ^{206}Fr от линии аппроксимации (см. Рисунок (4.2)) связано с изменениями структуры этого ядра, приводящими к изменению $d_{\text{нuc}}$. Для ^{221}Fr аппроксимация дает $d_{\text{нuc}} = 0.05$. Этот результат может представлять особый интерес для ядерной физики вследствие малой поправки Бора-Вайскопфа.

Следует заметить, что теоретическое значение ρ_0 , полученное в рамках метода DHF+LCC+RPA равно 8.30 и 8.50 для DHF+MBPT+RPA что на 4% и 1.5% меньше значения, полученного из аппроксимации. В таблице (4.6) приведены экспериментальные значения A/g_I для рассмотренных состояний Fr, неопределенность в величине поправки Бора-Вайскопфа включена в экспериментальную погрешность. Погрешность расчёта \mathcal{A}_0 сильно зависит от уровня учёта электронных корреляций и в рамках метода DHF+LCC+RPA не превышает 3.5% для состояний $7s_{1/2}$ и $7p_{1/2}$. Напротив, параметры b_N и b_M полученные методами DHF+MBPT+RPA и

DHF+LCC+RPA практически совпадают.

4.6 Изоэлектронная серия золота

В работе [126] изоэлектронная серия золота (Au I, Hg II и Tl III) рассматривается нами как системы с одним валентным электроном над заполненной оболочкой $5d^{10}$, включенной в атомный остов. Все вычисления выполнены с использованием гамильтониана Дирака–Кулона–Брейта. Поправки Брейта, включающие как магнитное так и запаздывающие (в пределе нулевой частоты) слагаемые, учитываются в согласно работам [127, 128]. Начальным приближением для описания электронной структуры этих систем является решение уравнений Хартри–Фока–Дирака для остовных и валентных орбиталей вплоть до $7p_{3/2}$. Объединим полученные орбитали с B-сплайнами 4-го порядка, как описано в работе [129], чтобы сформировать базисный набор для расчёта корреляционных поправок. Построенный базисный набор $22spdfghi$ включает 224 орбитали для парциальных волн с орбитальным угловым моментом l от 0 до 6.

Корреляционные поправки к СТС включают как поправки к многоэлектронным волновым функциям, так и к оператору СТС. Для учета корреляционных поправок к волновой функции используется либо теория возмущений многих тел второго порядка (МВРТ) [23, 34], либо линеаризованный метод связанных кластеров (LCC) [26, 27], учитывающий однократные и двукратные возбуждения. Поправки МВРТ и LCC включают вклад собственной энергии [108]. Энергетическая зависимость эффективного гамильтониана учитывается согласно работам [23, 27]. Корреляционные

поправки к оператору СТС включает в себя спиновую поляризацию атомного остова, учитываемую в рамках приближения случайной фазы (RPA), и поправку на структурное излучение [109].

В Таблица (4.7) представлены рассчитанные энергии связи низколежащих состояний Au I, Hg II и Tl III; выполнено сравнение с экспериментальными данными [50]. Как видно из Таблица (4.7), метод DHF + LCC во всех случаях дает результаты, более близкие к экспериментальным энергиям связи, чем метод DHF + MBPT. При таком подходе с достаточной точностью может быть воспроизведена только нижняя часть валентного спектра. Для энергий выше энергии возбуждения остова эффективный гамильтониан имеет полюса, и результаты расчётов могут быть ненадежными. В случае золота дублет $5d^{10}6p$ лежит на границе остовных возбуждений. Взаимодействие между этим дублетом и квинтетом $5d_{5/2}^9 6s_{1/2} 6p_{3/2} {}^4P^o$ достаточно сильное. Из-за противоположного порядка уровней в этих мультиплетах энергетическая щель между уровнями с $J = 3/2$ намного меньше, чем щель между уровнями с $J = 1/2$. Таким образом, погрешность описания состояния $5d^{10}6p_{3/2}$ в золоте ожидается заметно большей, чем для уровня $5d^{10}6p_{1/2}$. Соответственно, при расчёте констант СТС ограничимся рассмотрением состояний $6s_{1/2}$ и $6p_{1/2}$.

В Таблица (4.8) обобщены результаты расчётов констант СТС золота и Au-подобных ионов ртути и таллия. Множитель $\eta(\text{Au})$ равен 3.74 в приближении DHF. На следующем этапе мы учитываем эффективное смешивание различных парциальных волн, учитывая поправки RPA. Множитель $\eta(\text{Au})$ увеличивается за счет этих поправок до 4.23. Учёт валентно-остовных электронных корреляций в рамках методов MBPT или

Таблица 4.7. Энергии связи низколежащих состояний атома Au I, Hg II и Tl III (au). Строки DHF, DHF + MBPT и DHF + LCC соответствуют методам Хартри–Фока–Дирака и Хартри–Фока–Дирака с учётом корреляционных поправок методами многочастичной теории возмущений или связанных кластеров. Учтены энергетическая зависимость эффективных гамильтонианов и вклад брейтовского взаимодействия. Экспериментальные данные и теоретическая ошибка (в %) приведены в последних двух строках для каждой системы.

Метод	$6s_{1/2}$	$6p_{1/2}$	$6p_{3/2}$
Au I			
DHF	0.2742	0.1335	0.1215
DHF + MBPT	0.3507	0.1698	0.1491
DHF + LCC	0.3397	0.1689	0.1508
Эксперимент [50]	0.3390	0.1688	0.1514
Погрешность расчёта	−0.19%	−0.05%	0.44%
Hg II			
DHF	0.6212	0.0480	0.3734
DHF + MBPT	0.7033	0.4601	0.4159
DHF + LCC	0.6905	0.4553	0.4134
Эксперимент [50]	0.6893	0.4547	0.4132
Погрешность расчёта	−0.17%	−0.12%	−0.07%
Tl III			
DHF	1.0265	0.7515	0.6917
DHF + MBPT	1.1126	0.8129	0.7430
DHF + LCC	1.0987	0.8054	0.7377
Эксперимент [50]	1.0970	0.8047	0.7372
Погрешность расчёта	−0.15%	−0.09%	−0.07%

LCC, существенно изменяют значения \mathcal{A}_0 , но b_N и b_M остаются стабильными. Параметры b_N и b_M изменяются за счет учёта поправки на структурное излучение, так как она смешивает парциальные волны с разными l , как и RPA. Вклады RPA и структурного излучения в параметры b_N и b_M почти компенсируют друг друга. Оба эти вклада в параметры b_N и b_M оказываются достаточно большими, что мешает стабильности результатов. Значения этих параметров практически совпадают для приближений DHF + MBPT и DHF + LCC.

В качестве окончательного значения атомного множителя η для золота принимается среднее значение результатов, полученных в рамках различных приближениях [см. последний столбец в таблице (4.8)] с погрешностью, включающей дисперсию этих результатов: $\eta(\text{Au}) = 4.0(3)$. Это значение совпадает со значением, использованном в работе [5], но заметно отличается от соответствующих значений, полученных и используемых ранее: 3.2 [4], 3.5 [130], 4.5 [90], 3.3 [115].

В рамках данного подхода были рассчитаны атомные множители η для Hg II и Tl III. Вклады RPA и структурного излучения для этих ионов меньше. В то же время энергии возбуждения из электронной оболочки $5d$ больше. Соответственно, отличие результатов применяемых методов для значений η для Hg II и Tl III меньше, чем для Au I. Окончательные значения $\eta(\text{Hg II}) = 3.7(1)$ и $\eta(\text{Tl III}) = 3.8(3)$. Таллий имеет два стабильных изотопа ^{203}Tl и ^{205}Tl , константы СТС и ядерные g -факторы которых измерены с высокой точностью [117, 133–137]. Поэтому атомный множитель для таллия может быть получен непосредственно из экспериментальных данных: $\eta(\text{Tl}) = 2.84(78)$. Атомный множитель слабо зависит от заряда иона, поэтому отсетим, что вычисленный параметр $\eta(\text{Tl III})$ согласуется с этими экспериментальными данными и результатами расчётов, представленными в таблице (4.4).

4.6.1 Оценка погрешности атомных расчётов

Оценка достоверности значений ядерных множителей для изотопов золота, полученных по уравнению (4.30), требует определения точности расчёта атомных параметров. Для этого рассмотрим ионы ртути (Hg II) с похожей

Таблица 4.8. Атомные параметры \mathcal{A}_0 (МГц), b_N , b_M , η и константы СТС для низколежащих уровней $^{193}\text{Au}^m$, $^{199}\text{Hg}^+$ и $^{205}\text{Tl}^{++}$ в сравнении с экспериментальными данными [5, 131, 132].

Метод	\mathcal{A}_0 (МГц)	b_N	b_M	A (МГц)	η
Au I					
$6s_{1/2}$					
DHF	24362	1.259	0.244	24872	
DHF + RPA	26797	1.263	0.242	27351	
DHF + MBPT + RPA	34285	1.258	0.239	35014	
DHF + LCC + RPA	32411	1.257	0.239	33101	
Эксперимент ($^{193}\text{Au}^m$)				32391(30)	
$6p_{1/2}$					
DHF	2140	0.336	0.065	2385	3.74
DHF + RPA	1833	0.257	0.057	2057	4.23
DHF + MBPT + RPA	3395	0.291	0.060	3799	3.99
DHF + LCC + RPA	3180	0.296	0.060	3558	4.00
Эксперимент ($^{193}\text{Au}^m$)				3696(4)	
Hg II					
$6s_{1/2}$					
DHF	38197	1.297	0.253	33987	
DHF + DHF + RPA	41414	1.295	0.251	36864	
DHF + MBPT + RPA	46942	1.265	0.247	41907	
DHF + LCC + RPA	45342	1.268	0.248	40474	
Эксперимент (^{199}Hg)				40507.3479968416(4)	
$6p_{1/2}$					
DHF	5605	0.356	0.070	5481	3.63
DHF + RPA	5681	0.329	0.066	5569	3.80
DHF + MBPT + RPA	7347	0.339	0.067	7196	3.72
DHF + LCC + RPA	6998	0.340	0.067	6853	3.72
Эксперимент (^{199}Hg)				6970(90)	
Tl III					
$6s_{1/2}$					
DHF	53101	1.343	0.263	152272	
DHF + RPA	58099	1.326	0.262	166856	
DHF + MBPT + RPA	63524	1.312	0.260	182694	
DHF + LCC + RPA	61911	1.314	0.260	178021	
$6p_{1/2}$					
DHF	9441	0.381	0.075	29824	3.52
DHF + RPA	9892	0.361	0.070	31309	3.72
DHF + MBPT + RPA	11579	0.352	0.069	36679	3.78
DHF + LCC + RPA	11191	0.355	0.069	35441	3.76

на атом золота электронной структурой. Поправки Бора–Вайскопфа для ртути ранее подробно изучались. Экспериментальные значения констант СТС приведены в работах [131, 138]: $A(6s_{1/2}, {}^{199}\text{Hg II}) = 40507.348$ МГц и $A(6s_{1/2}, {}^{201}\text{Hg II}) = -14977.183$ МГц. Сравнивать с экспериментом можно только значения A , тогда как наша цель – оценить точность вычисления \mathcal{A}_0 . Погрешность расчёта констант СТС состоит из трех вкладов: погрешности \mathcal{A}_0 , δ и ε [см. Уравнение (4.1)]. Таким образом, следует независимо оценить точность определения δ и ε , чтобы из сравнения с экспериментом делать выводы о погрешности вычисления \mathcal{A}_0 .

Погрешность расчёта поправки Брейта–Розенталь (δ) можно оценить в 3% по разбросу результатов расчёта b_N в рамках различных приближений [Таблица (4.8)]. Это приводит к погрешности 0.3% в окончательных значениях $A(6s_{1/2})$. Для оценки погрешности определения поправки Бора–Вайскопфа (ε) использовался полуэмпирический подход. В работе [124] было показано, что поправки ε для ряда изотопов ртути, включая ${}^{201,199}\text{Hg}$, хорошо воспроизводятся следующим простым соотношением:

$$\varepsilon = \pm \frac{\alpha}{\mu}, \quad I = L \pm \frac{1}{2}, \quad \alpha = 1 \cdot 10^{-2}. \quad (4.36)$$

где μ – магнитный момент рассматриваемого изотопа. Используя известные значения μ [139], получаем: $\varepsilon({}^{199}\text{Hg}) = 2.0\%$, $\varepsilon({}^{201}\text{Hg}) = 1.8\%$. Соответственно, теоретические константы $A(6s_{1/2})$ для ${}^{201,199}\text{Hg}$, вычисленные методом LCC+RPA с этими поправками Бора–Вайскопфа и \mathcal{A}_0 , b_N из Таблица (4.8) составляют -14978 МГц и 40474 МГц, что соответствует относительной погрешности (по сравнению с

экспериментальными данными) в 0.06% и 0.08%. Однако, нельзя с уверенностью утверждать, что погрешность вычисления \mathcal{A}_0 того же порядка. Возможные варьирования поправок ε приводят к изменению значения \mathcal{A}_0 . Для оценки поправок Бора–Вайскопфа для изотопов ртути можно использовать модифицированное соотношение [140]:

$$\varepsilon = c_1 \pm \frac{\alpha}{\mu}, \quad (4.37)$$

где константа c_1 для изотопов ртути меньше 0.02 (см. также [7]). Предсказываемые значения СМА одинаковы при использовании обоих выражений для ε [Уравнение (4.36) или Уравнение (4.37)], но значения ε отличаются. Это отличие было включено в погрешность определения поправки Бора–Вайскопфа, что приводит к ошибке в 2% для окончательных значений $A(6s_{1/2})$. Принимая во внимание совпадение теоретических и экспериментальных значений $A(6s_{1/2})$ для $^{201,199}\text{Hg}^+$, можно оценить возможную погрешность расчёта $\mathcal{A}_0(6s_{1/2})$ для Hg II в 2.5%. Учитывая сходство электронной структуры Au I и Hg II, можно ожидать, что такая же оценка справедлива и для атома золота.

4.6.2 Вычисление ядерных множителей

Согласно уравнению (4.30) изомеру $^{193}\text{Au}^m$ соответствует ядерный множитель $d_{\text{нuc}} = 0.73$ и поправка Бора–Вайскопфа $\varepsilon = 1.4\%$ [см. Уравнение (4.5)]. Экспериментально измеренная константа $A(6s_{1/2}, ^{193}\text{Au}^m)$ согласуется с результатом LCC+RPA с погрешностью в 2.2%. В тоже время, константа $A(6s_{1/2}, ^{197}\text{Au}) = 3265$ МГц, вычисленная методом

LCC+RPA, используя ядерный множитель $d_{\text{nuc}} = -8.0$ согласно 4.30, отличается от экспериментального значения 3049.66 МГц [141] на 7.1%. Это различие нельзя полностью объяснить погрешностью атомных расчётов, так как ранее показано, что погрешность не превышает 2.5%. Это означает, что одночастичная модель ядра не работает для расчёта d_{nuc} в случае ^{197}Au . В то же время совпадение теоретических и экспериментальных значений для $A(6s_{1/2}, ^{193}\text{Au}^m)$ свидетельствует о том, что предсказание одночастичной ядерной модели d_{nuc} для $^{193}\text{Au}^m$ не противоречит имеющимся экспериментальным данным и оценкам погрешности атомных расчётов.

Таблица 4.9. Сравнение ядерных множителей d_{nuc} , полученных по уравнениям (4.30) или (4.16) с $^{193}\text{Au}^m$ в качестве эталонного изотопа. Также приведены спины ядер и магнитные моменты соответствующих изотопов или изомеров.

Изотоп	Ядерный спин	g-фактор		d_{nuc}	
				Уравнение (4.30)	Уравнение (4.16)
199	3/2	0.1799(5)	[142]	-3.7	-3.2(5)
197	3/2	0.097164(6)	[141]	-8.0	-5.1(5)
195	3/2	0.0991(4)	[143]	-7.8	-
193	3/2	0.0932(10)	[5]	-8.4	-5.4(8)
191	3/2	0.0908(12)	[5]	-8.6	-5.8(9)
$^{195^m}$	11/2	1.148(7)	[5]	0.73	
$^{193^m}$	11/2	1.149(7)	[5]	0.73	
$^{191^m}$	11/2	1.150(7)	[5]	0.73	
$^{189^m}$	11/2	1.157(7)	[5]	0.73	
$^{177^m}$	11/2	1.185(7)	[5]	0.74	

Получим информацию о ядерном множителе ^{197}Au с помощью уравнения (4.16), используя $d_{\text{nuc}}(^{193}\text{Au}^m)$ в качестве референсного значения. Тогда, экспериментально измеренная СМА: $^{197}\Delta^{193^m}(6s_{1/2}) = 11.2(11)\%$ [5] соответствует $d_{\text{nuc}}^{197} = -5.1(5)$. Погрешность d_{nuc} , рассчитанного по уравнению (4.16), определяется неопределенностью атомного множителя η

и экспериментальной погрешностью соответствующего значения СМА и не включает возможную ошибку в референсном значении $d_{\text{нuc}}(^{193}\text{Au}^m)$. Ядерный множитель, полученный из экспериментальных данных соответствует поправке $\varepsilon^{197} = -9.6(9)\%$ для состояния $6s_{1/2}$. Ядерные множители $d_{\text{нuc}}^{193} = -5.4(8)$ и $d_{\text{нuc}}^{191} = -5.8(9)$ получены из значений СМА $|^{197}\Delta^{193}(s_{1/2})| \leq 1.5\%$ и $|^{197}\Delta^{191}(s_{1/2})| \leq 1.4\%$, приведенных в работе [5]. Та же процедура, что и для ^{197}Au , дает $d_{\text{нuc}}^{199} = -3.2(5)$ для ^{199}Au . Поправка Бора–Вайскопфа для состояния $6s_{1/2}$ изотопа ^{199}Au составляет $\varepsilon^{199} = 6.0(9)\%$. Этот ядерный множитель, извлеченный из экспериментальных данных, находится в согласии с предсказанием одночастичной ядерной модели [Уравнение (4.30)]: $d_{\text{нuc}}^{199} = -3.7$. В то же время коэффициенты для других изотопов $3/2$ золота, полученные в рамках одночастичной ядерной модели, сильно завышены [см. Таблица (4.9)]. Используя $d_{\text{нuc}} = -5.1$, параметры \mathcal{A}_0 , b_N , b_M и $g_I = 0.097164(6) \mu_N$ [141], рассчитаны константы СТС для ^{197}Au . Теоретические результаты, полученные в рамках метода RPA+LCC, $A(6s_{1/2}, ^{197}\text{Au}) = 3110$ МГц и $A(6p_{1/2}, ^{197}\text{Au}) = 309$ МГц согласуются с экспериментальными значениями [141, 144] в пределах 2.0% и -3.9% , соответственно.

Подводя итоги главы, можно сделать вывод, что используемый пакет программ позволяет выполнить расчёт отношения сверхтонких магнитных аномалий η . С его помощью, используя экспериментальные дифференциальные аномалии, мы смогли найти абсолютные значения аномалий, зная которые можно уточнить значения g -факторов короткоживущих изотопов тяжёлых элементов и проверить модели ядра.

Заключение

В работе исследована точность метода наложения конфигураций и комбинированных методов расчёта CI+MBPT и CI+LCC. В рамках этих методов полное многоэлектронное гильбертово пространство конфигураций разделено на два подпространства: валентное и остовное. Остовные и остовно-валентные корреляции учитываются пертурбативно, а валентные корреляции обрабатываются в рамках метода наложения конфигураций. На примере изоэлектронной последовательности Mg изучена точность этих методов. Для Mg-подобных ионов, где корреляционные эффекты могут быть учтены с высокой точностью, также были приняты в рассмотрение поправки квантовой электродинамики к энергии системы. В работе показано, что для рассмотренных ионов поправки на брейтовское взаимодействие и КЭД сопоставимы. Учёт взаимодействия Брейта обычно улучшает воспроизведение тонкой структуры, в то время как поправки КЭД уменьшают общий разброс ошибок. Поправки КЭД учтены на уровне лэмбовских сдвигов s -состояний валентных электронов, для этого было получено полуэмпирическое выражение для лэмбовского сдвига s -состояний многоэлектронных систем.

На примере иона никеля продемонстрирован расчет атомных свойств систем с большим числом валентных электронов. Оптические переходы Ni^+

наблюдаются на больших красных смещениях и могут быть использованы для поиска вариации постоянной тонкой структуры во времени. Зависимость частот переходов от α возникает вследствие учета релятивистских поправок к кулоновской энергии связи электронов с ядром и энергии межэлектронного взаимодействия. Поправка пропорциональна зарядовому числу атома Z , поэтому при поиске возможной α -вариации важно использовать атомы наиболее тяжелых элементов, спектры которых наблюдаются на больших красных смещениях, таких как Fe и Ni. Спектр Ni II изучался менее детально, и коэффициенты чувствительности были вычислены не для всех астрофизически значимых оптических уровней.

Наблюдаемым в астрофизике линиям поглощения Ni II соответствуют переходы из основного состояния, которое характеризуется полным угловым моментом $J = 5/2$ и принадлежит к конфигурации $[\text{Ar}]3d^9$. Поскольку Ni II имеет девять электронов на открытых оболочках, его спектр плотный и сложный. Из-за близости уровней с одинаковыми полным угловым моментом J и чётностью P они сильно взаимодействуют друг с другом, особенно при высоких частотах, которые более интересны в астрофизике. Сильно взаимодействующие пары уровней наиболее интересны, поскольку они обладают большей чувствительностью к α -вариации.

По сравнению с предыдущими расчетами значительно увеличен размер активного пространства CI. Это не сильно изменило результаты, достигнуто хорошее согласие с расчетом [57]. Не следует ожидать, что точность расчёта в рамках метода CI может быть заметно улучшена: Ni II имеет 9 электронов на открытых оболочках, таким образом активное пространство CI практически невозможно насытить. С другой стороны, достигнутой

точности достаточно для анализа астрофизических данных и поиска возможной α -вариации.

В последней главе выполнены расчёты констант сверхтонкой структуры, учитывающие распределение заряда и намагниченности внутри атомного ядра. В работе использована атомно-ядерная параметризация констант сверхтонкой структуры и предложен метод расчёта атомных параметров. После того, как вычислены атомные параметры, из экспериментальных данных по сверхтонкой структуре можно получить информацию о ядерных параметрах. На достигнутом уровне расчёта констант сверхтонкой структуры наиболее эффективен метод восстановления сверхтонких магнитных аномалий из их разности (ДСМА). При этом необходимо использовать теоретически рассчитанное отношение СМА для уровней $s_{1/2}$ и $p_{1/2}$. Для отношения аномалий η в работе получено аналитическое выражение, которое согласуется с результатами численных расчётов и экспериментальными данными. Сверхтонкие магнитные аномалии, полученные из экспериментальных данных, позволяют исследовать изменения в распределении ядерной намагниченности в изотопических рядах тяжелых атомов и выполнить проверку одночастичной ядерной модели.

Основные результаты и выводы:

1. На примере изоэлектронной последовательности Mg изучена точность методов CI, CI+MBPT и CI+LCC. Показано, что метод CI+LCC обеспечивает более высокую точность, чем более простой метод CI+MBPT. В то время как относительная погрешность метода CI+MBPT была на уровне 0.1 – 0.2%, погрешность метода CI+LCC

- была примерно в два раза меньше, 0.05 – 0.1%. Метод валентного CI без учёта остовных корреляций на порядок менее точен.
2. В рамках метода наложения конфигураций вычислены коэффициенты чувствительности к α -вариации и силы осцилляторов для Ni II. В диапазоне частот, которые наблюдаются в астрофизике на больших красных смещениях, исследованы несколько спектральных линий, расчёты для которых ранее не проводились. Среди них две линии имеют относительно небольшие q -факторы, около -400 см^{-1} , а одна – самый большой в интересующем диапазоне частот q -фактор, $q = -2210 \text{ см}^{-1}$. Большие различия в коэффициентах чувствительности отдельных линий увеличивает общую чувствительность наблюдений к α -вариации и позволяет эффективно контролировать систематические погрешности.
 3. Показано, что аналитическое выражение для атомного множителя η (4.32), полученное в работе, воспроизводит результаты численных расчётов и экспериментальные данные. Используя теоретическое значение η , можно получить величину сверхтонкой магнитной аномалии из экспериментальных данных и, благодаря этому уточнить значения ядерных g -факторов короткоживущих изотопов.
 4. Выполнен расчёт постоянных сверхтонкой структуры нейтральных атомов Fr, Au, а также золотоподобных ионов Hg и Tl. На основании экспериментальных данных исследованы изменения в распределении ядерной намагниченности в изотопических рядах Fr и Au, сделано сравнение с предсказаниями одночастичной ядерной

модели. Выяснилось, что СМА между изомерами $11/2$ золота и стабильным изотопом ^{197}Au составляет $11.2\% \pm 1\%$ для состояния $6s_{1/2}$, что на порядок превышает погрешности измеренных констант СТС. Для определения g -факторов короткоживущих изотопов золота без потери экспериментальной точности поправку на СМА необходимо учитывать.

Список литературы

1. Webb J. K., King J. A., Murphy M. T. et al. Indications of a spatial variation of the fine structure constant // Phys. Rev. Lett. — 2011. — Vol. 107. — P. 191101.
2. Cocolios T. E., Al Suradi H., Billowes J. et al. The collinear resonance ionization spectroscopy (CRIS) experimental setup at CERN-ISOLDE // Nucl. Instr. Meth. B. — 2013. — Vol. 317. — P. 565–569.
3. Rosenthal J. E., Breit G. The isotope shift in hyperfine structure // Phys. Rev. — 1932. — Vol. 41. — P. 459–470.
4. Bohr A., Weisskopf V. F. The influence of nuclear structure on the hyperfine structure of heavy elements // Phys. Rev. — 1950. — Vol. 77. — P. 94–98.
5. Barzakh A. E., Atanasov D., Andreyev A. N. et al. Hyperfine anomaly in gold and magnetic moments of $I^\pi = 11/2^-$ gold isomers // Phys. Rev. C. — 2020. — Vol. 101. — P. 034308.
6. Persson J. R. Table of hyperfine anomaly in atomic systems // At. Data Nucl. Data Tables. — 2013. — Vol. 99. — P. 62 – 68.

7. Ekström C., Wannberg G., Ragnarsson I. et al. Nuclear ground-state spin of ^{185}Au and magnetic moments of $^{187,188}\text{Au}$: further evidence for coexisting nuclear shapes in this mass region // Nucl. Phys. A. — 1980. — Vol. 348. — P. 25–44.
8. Harding R., Andreyev A., Barzakh A. et al. Laser-assisted decay spectroscopy for the ground states of $^{180,182}\text{Au}$ // Phys. Rev. C. — 2020. — Vol. 102, N. 2. — P. 024312.
9. Blundell S. A., Johnson W. R., Sapirstein J. Improved many-body perturbation-theory calculations of the $n = 2$ states of lithiumlike uranium // Phys. Rev. A. — 1990. — Vol. 41. — P. 1698–1700.
10. Safronova U. I., Savukov I. M., Safronova M. S., Johnson W. R. Third-order relativistic many-body calculations of energies and lifetimes of levels along the silver isoelectronic sequence // Phys. Rev. A. — 2003. — Vol. 68. — P. 062505.
11. Blundell S. A., Johnson W. R., Sapirstein J. Relativistic all-order calculations of energies and matrix elements in cesium // Phys. Rev. A. — 1991. — Vol. 43. — P. 3407.
12. Eliav E., Kaldor U., Ishikawa Y. Relativistic coupled cluster method based on Dirac–Coulomb–Breit wavefunctions. Ground state energies of atoms with two to five electrons // Chem. Phys. Lett. — 1994. — Vol. 222. — P. 82–87.
13. Mosyagin N. S., Eliav E., Titov A. V., Kaldor U. Comparison of relativistic effective core potential and all-electron Dirac-Coulomb

- calculations of mercury transition energies by the relativistic coupled-cluster method // J. Phys. B. — 2000. — Vol. 33, N. 4. — P. 667–676.
14. Chaudhuri R. K., Sahoo B. K., Das B. et al. Relativistic coupled cluster calculations of the energies for rubidium and cesium atoms // J. Chem. Phys. — 2003. — Vol. 119. — P. 10633.
 15. Sahoo B. K., Chaudhuri R., Das B., Mukherjee D. Relativistic Coupled-Cluster Theory of Atomic Parity Nonconservation: Application to $^{137}\text{Ba}^+$ // Phys. Rev. Lett. — 2006. — Vol. 96. — P. 163003.
 16. Dzuba V. A., Johnson W. R. Coupled-cluster single-double calculations of the relativistic energy shifts in C IV, Na I, Mg II, Al III, Si IV, Ca II, and Zn II // Phys. Rev. A. — 2007. — Vol. 76. — P. 062510.
 17. Porsev S. G., Beloy K., Derevianko A. Precision determination of weak charge of Cs^{133} from atomic parity violation // Phys. Rev. D. — 2010. — Vol. 82. — P. 036008.
 18. Kállay M., Nataraj H. S., Sahoo B. K. et al. Relativistic general-order coupled-cluster method for high-precision calculations: Application to the Al^+ atomic clock // Phys. Rev. A. — 2011. — Vol. 83. — P. 030503(R).
 19. Pathak H., Sahoo B. K., Das B. P. et al. Relativistic equation-of-motion coupled-cluster method: Application to closed-shell atomic systems // Phys. Rev. A. — 2014. — Vol. 89. — P. 042510.
 20. Kotochigova S. A., Tupitsyn I. I. Theoretical investigation of rare-earth and barium spectra by the Hartree-Fock-Dirac method // J. Phys. B. — 1987. — Vol. 20. — P. 4759.

21. Jönsson P., Froese Fischer C. Accurate multiconfiguration Dirac-Fock calculations of transition probabilities in the Mg isoelectronic sequence // J. Chem. Phys. — 1997. — Vol. 30. — P. 5861–75.
22. Jönsson P., Froese Fischer C., Godefroid M. R. MCHF calculations of isotope shifts and oscillator strengths for transitions between low-lying states in Be-like systems and neutral magnesium // J. Phys. B. — 1999. — Vol. 32, N. 5. — P. 1233.
23. Dzuba V. A., Flambaum V. V., Kozlov M. G. Combination of the many body perturbation theory with configuration interaction method // Phys. Rev. A. — 1996. — Vol. 54. — P. 3948–59.
24. Savukov I. M., Johnson W. R. Combined CI+MBPT calculations of energy levels and transition amplitudes in Be, Mg, Ca, and Sr // Phys. Rev. A. — 2002. — Vol. 65. — P. 042503.
25. Dzuba V. A. V^{N-M} approximation for atomic calculations // Phys. Rev. A. — 2005. — Vol. 71. — P. 032512.
26. Kozlov M. G. Precision calculations of atoms with few valence electrons // Int. J. Quant. Chem. — 2004. — Vol. 100. — P. 336.
27. Safronova M. S., Kozlov M. G., Johnson W. R., Jiang D. Development of a configuration-interaction + all-order method for atomic calculations // Phys. Rev. A. — 2009. — Vol. 80. — P. 012516.
28. Sucher J. Foundations of the relativistic theory of many-electron atoms // Phys. Rev. A. — 1980. — Vol. 22. — P. 348–362.

29. Brown G. E., Ravenhall D. G. On the interaction of two electrons // Proc. R. Soc. A: Math. Phys. Eng. Sci. — 1951. — P. 552–559.
30. Братцев В. Ф., Дейнека Г. Б., Тупицин И. И. Применение метода Хартри-Фока к расчету релятивистских атомных волновых функций // Изв. Акад. Наук СССР, сер. физ. — 1977. — Т. 41. — С. 2655–64.
31. Козлов М. Г., Порсев С. Г. Использование объединенного метода наложения конфигураций и многочастичной теории возмущения для расчета атомов с двумя валентными электронами // ЖЭТФ. — 1997. — Т. 111. — С. 838–846.
32. Дзюба В. А., Козлов М. Г., Порсев С. Г., Фламбаум В. В. Применение эффективных операторов для расчета сверхтонкой структуры атомов // ЖЭТФ. — 1998. — Т. 114, N. 5. — С. 1636–1645.
33. Blundell S. A., Johnson W. R., Liu Z. W., Sapirstein J. Relativistic all-order calculations of energies and matrix elements for Li and Be^+ // Phys. Rev. A. — 1989. — Vol. 40, N. 5. — P. 2233.
34. Kozlov M. G., Porsev S. G., Safronova M. S., Tupitsyn I. I. CI-MBPT: A package of programs for relativistic atomic calculations based on a method combining configuration interaction and many-body perturbation theory // Comput. Phys. Commun. — 2015. — Vol. 195. — P. 199–213.
35. Johnson W. R., Safronova M. S., Safronova U. I. Relativistic many-body calculations of energies of Mg I, Al II, Al I, Hg I, Tl II, Tl I, Pb I, Bi II and Bi I // Phys. Scripta. — 1997. — Vol. 56. — P. 25263.

36. Porsev S. G., Kozlov M. G., Rakhlina Y. G., Derevianko A. High-precision calculations of electric-dipole amplitudes for transitions between low-lying levels of Mg, Ca, and Sr // *Phys. Rev. A.* — 2001. — Vol. 64. — P. 012508.
37. Angstmann E. J., Dzuba V. A., Flambaum V. V. Relativistic effects in two valence-electron atoms and ions and the search for variation of the fine-structure constant // *Phys. Rev. A.* — 2004. — Vol. 70. — P. 014102.
38. Berengut J. C., Dzuba V. A., Flambaum V. V., Kozlov M. G. Configuration interaction calculation for the isotope shift in Mg I // *Phys. Rev. A.* — 2004. — Vol. 69. — P. 044102.
39. Berengut J. C., Flambaum V. V., Kozlov M. G. Calculation of relativistic and isotope shifts in Mg I // *Phys. Rev. A.* — 2005. — Vol. 72. — P. 044501.
40. Konovalova E., Kozlov M. Correlation, Breit, and QED effects in spectra of Mg-like ions // *Phys. Rev. A.* — 2015. — Vol. 92, N. 4. — P. 042508.
41. Konovalova E. A., Kozlov M. G. Precision Calculation of the Spectra of Mg-like Ions // Abstracts of 47th conference of the European Group of Atomic Systems. — Riga. — 2015. — P. 102.
42. Cheng K. T., Chen M. H., Sapirstein J. Quantum electrodynamic corrections in high-Z Li-like and Be-like ions // *Phys. Rev. A.* — 2000. — Vol. 62. — P. 054501.
43. Flambaum V. V., Ginges J. S. M. Radiative potential and calculations of QED radiative corrections to energy levels and electromagnetic

- amplitudes in many-electron atoms // *Phys. Rev. A.* — 2005. — Vol. 72, N. 5. — P. 052115.
44. Sapirstein J., Cheng K. T. S-matrix calculations of energy levels of the lithium isoelectronic sequence // *Phys. Rev. A.* — 2011. — Vol. 83. — P. 012504.
45. Roberts B. M., Dzuba V. A., Flambaum V. V. Double-core-polarization contribution to atomic parity-nonconservation and electric-dipole-moment calculations // *Phys. Rev. A.* — 2013. — Vol. 88. — P. 042507.
46. Тупицын И. И., Берсенева Е. В. Одночастичный нелокальный потенциал для учёта квантовоэлектродинамических поправок в расчётах электронной структуры атомов // *Оптика и спектроскопия.* — 2013. — Т. 114, N. 5. — С. 743–743.
47. Shabaev V. M., Tupitsyn I. I., Yerokhin V. A. Model operator approach to the Lamb shift calculations in relativistic many-electron atoms // *Phys. Rev. A.* — 2013. — Vol. 88. — P. 012513.
48. Тупицын И. И., Логинов А. В. Применение штурмовских разложений в расчетах сверхтонкой структуры атомных спектров // *Оптика и спектроскопия.* — 2003. — Т. 94, N. 3. — С. 357–365.
49. Собельман И. И. Введение в теорию атомных спектров. — Наука, 1977. — 320 С.
50. Kramida A., Ralchenko Y., Reader J., NIST ASD Team. — NIST Atomic Spectra Database (ver. 5.9), [Online]. Available:

<https://physics.nist.gov/asd> [2016, January 31]. National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD. — 2021.

51. Козлов М. Г. Высшие порядки по остаточному двухэлектронному взаимодействию // Оптика и Спектроскопия. — 2003. — Т. 95. — С. 11.
52. Dirac P. A. M. The cosmological constants // Nature. — 1937. — Vol. 139, no. 3512. — P. 323.
53. Karshenboim S. G., Peik E. Astrophysics, atomic clocks and fundamental constants // Eur. Phys. J.: Spec. Top. — 2008. — Vol. 163. — P. 1–7.
54. Andreev O. Y., Labzowsky L. N., Plunien G., Soff G. Testing the time dependence of fundamental constants in the spectra of multicharged ions // Phys. Rev. Lett. — 2005. — Vol. 94, N. 24. — P. 243002.
55. Коновалова Е. А., Демидов Ю. А., Столяров А. В. Влияние релятивистских взаимодействий на спектральные характеристики основного состояния монооксида углерода // Оптика и спектроскопия. — 2018. — Т. 125, N. 4. — С. 451–456.
56. Dzuba V. A., Flambaum V. V., Webb J. K. Space-time variation of physical constants and relativistic corrections in atoms // Phys. Rev. Lett. — 1999. — Vol. 82. — P. 888.
57. Dzuba V. A., Flambaum V. V., Kozlov M. G., Marchenko M. α dependence of transition frequencies for ions Si II, Cr II, Fe II, Ni II and Zn II // Phys. Rev. A. — 2002. — Vol. 66. — P. 022501.

58. Dzuba V. A., Flambaum V. V., Webb J. K. Calculations of the relativistic effects in many-electron atoms and space-time variation of fundamental constants // *Phys. Rev. A.* — 1999. — Vol. 59, N. 1. — P. 230.
59. Webb J. K., Flambaum V. V., Churchill C. W. et al. Search for time variation of the fine structure constant // *Phys. Rev. Lett.* — 1999. — Vol. 82. — P. 884–7.
60. Levshakov S. A., Molaro P., Lopez S. et al. A new measure of $\Delta\alpha/\alpha$ at redshift $z = 1.84$ from very high resolution spectra of Q 1101-264 // *Astron. & Astrophys.* — 2007. — Vol. 466. — P. 1077–1082.
61. Molaro P., Centurion M., Whitmore J. B. et al. The UVES Large Program for Testing Fundamental Physics: I Bounds on a change in alpha towards quasar HE 2217-2818 // *Astron. Astrophys.* — 2013. — Vol. 555. — P. 68.
62. Songaila A., Cowie L. L. Constraining the variation of the fine-structure constant with observations of narrow quasar absorption lines // *Astrophys. J.* — 2014. — Vol. 793, N. 2. — P. 103.
63. Thompson R. I. The determination of the electron to proton inertial mass ratio via molecular transitions // *Astrophys. Lett.* — 1975. — Vol. 16. — P. 3.
64. King J. A., Murphy M. T., Ubachs W., Webb J. K. New constraint on cosmological variation of the proton-to-electron mass ratio from Q0528-250 // *Mon. Not. R. Astron. Soc.* — 2011. — Vol. 417. — P. 3010–3024.

65. Wendt M., Molaro P. QSO 0347-383 and the invariance of m_p/m_e in the course of cosmic time // *Astron. & Astrophys.* — 2012. — Vol. 541. — P. A69.
66. Rahmani H., Wendt M., Srianand R. et al. The UVES large program for testing fundamental physics – II. Constraints on a change in μ towards quasar HE 0027-1836 // *Mon. Not. R. Astron. Soc.* — 2013. — Vol. 435. — P. 861.
67. Albornoz Vásquez D., Rahmani H., Noterdaeme P. et al. Molecular hydrogen in the $z_{abs} = 2.66$ damped Lyman- α absorber towards Q J 0643-5041. Physical conditions and limits on the cosmological variation of the proton-to-electron mass ratio // *Astron. & Astrophys.* — 2014. — Vol. 562. — P. A88.
68. Bagdonaite J., Ubachs W., Murphy M. T., Whitmore J. B. Analysis of Molecular Hydrogen Absorption toward QSO B0642-5038 for a Varying Proton-to-Electron Mass Ratio // *Astrophys. J.* — 2014. — Vol. 782. — P. 10.
69. Levshakov S. A., Combes F., Boone F. et al. An upper limit on variation of the fine-structure constant alpha at redshift $z = 5.2$ // *Astron. & Astrophys.* — 2012. — Vol. 540. — P. L9.
70. Kozlov M. G., Levshakov S. A. Microwave and submillimeter molecular transitions and their dependence on fundamental constants // *Ann. Phys.* — 2013. — Vol. 525. — P. 452–471.
71. Rosenband T., Hume D. B., Schmidt P. O. et al. Frequency ratio of Al^+

- and Hg⁺ single-ion optical clocks; metrology at the 17th decimal place // Science. — 2008. — Vol. 319, no. 5871. — P. 1808–1812.
72. Blatt S., Ludlow A. D., Campbell G. K. et al. New limits on coupling of fundamental constants to gravity using ⁸⁷Sr optical lattice clocks // Phys. Rev. Lett. — 2008. — Vol. 100, N. 14. — P. 140801.
73. Kozlov M. G., Korol V. A., Berengut J. C. et al. Space-time variation of the fine structure constant and evolution of isotope abundances // Phys. Rev. A. — 2004. — Vol. 70. — P. 062108.
74. Savedoff M. P. Physical constants in extra-galactic nebulae // Nature. — 1956. — Vol. 178, no. 4535. — P. 688–689.
75. Wolfe A. M., Brown R. L., Roberts M. S. Limits on the variation of fundamental atomic quantities over cosmic time scales // Phys. Rev. Lett. — 1976. — Vol. 37, N. 4. — P. 179.
76. Porsev S. G., Koshelev K. V., Tupitsyn I. I. et al. Transition frequency shifts with fine-structure-constant variation for Fe II: Breit and core-valence correlation corrections // Phys. Rev. A. — 2007. — Vol. 76, N. 5. — P. 052507.
77. Dzuba V. A., Flambaum V. V. Relativistic corrections to transition frequencies of Fe I and search for variation of the fine structure constant // Phys. Rev. A. — 2008. — Vol. 77. — P. 012514.
78. Porsev S. G., Kozlov M. G., Reimers D. Transition frequency shifts with fine-structure constant variation for Fe I and isotope-shift calculations in Fe I and Fe II // Phys. Rev. A. — 2009. — Vol. 79. — P. 032519.

79. Murphy M. T., Webb J. K., Flambaum V. V. et al. Possible evidence for a variable fine-structure constant from qso absorption lines: motivations, analysis and results // *Mon. Not. R. Astron. Soc.* — 2001. — Vol. 327. — P. 1208.
80. Konovalova E. A., Kozlov M. G., Imanbaeva R. T. Coefficients of sensitivity to α variation for astrophysically relevant transitions in Ni II // *Phys. Rev. A.* — 2014. — Vol. 90, N. 4. — P. 042512.
81. Konovalova E. A. Search for fine-structure constant variation in Ni II // Abstract book of Workshop on precision physics and fundamental physical constants. — Dubna. — 2014. — P. 22.
82. Berengut J. C., Dzuba V. A., Flambaum V. V. et al. Atomic transition frequencies, isotope shifts, and sensitivity to variation of the fine structure constant for studies of quasar absorption spectra // *From Varying Couplings to Fundamental Physics.* — Springer, 2011. — P. 9–16.
83. Murphy M. T., Berengut J. C. Laboratory atomic transition data for precise optical quasar absorption spectroscopy // *Mon. Not. R. Astron. Soc.* — 2013. — Vol. 438. — P. 388–411.
84. Morton D. C. Atomic Data for Resonance Absorption Lines. III. Wavelengths Longward of the Lyman Limit for the Elements Hydrogen to Gallium // *Astrophys. J. Suppl. Series.* — 2003. — Vol. 149. — P. 205–238.
85. Pickering J. C., Thorne A. P., Murray J. E. et al. Accurate laboratory wavelengths of some ultraviolet lines of Cr, Zn and Ni relevant to time

- variations of the fine structure constant // Mon. Not. R. Astron. Soc. — 2000. — Vol. 319. — P. 163–167.
86. Rahmani H., Srianand R., Gupta N. et al. Constraining the variation of fundamental constants at $z \sim 1.3$ using 21-cm absorbers // Mon. Not. R. Astron. Soc. — 2012. — Vol. 425. — P. 556–576.
87. Bogdanovich P. The simplified superposition of configurations in the atomic spectra // Lith. J. Phys. — 1991. — Vol. 31, N. 2. — P. 79–83.
88. Kozlov M. G., Porsev S. G., Flambaum V. V. Manifestation of the nuclear anapole moment in the M1 transitions in Bismuth // J. Phys. B. — 1996. — Vol. 29. — P. 689–97.
89. Rahmani H., Srianand R. Private communication. — 2013.
90. Stroke H., Blin-Stoyle R. J., Jaccarino V. Configuration mixing and the effects of distributed nuclear magnetization on hyperfine structure in odd- A nuclei // Phys. Rev. — 1961. — Vol. 123, N. 4. — P. 1326.
91. Pyykkö P., Pajanne E., Inokuti M. Hydrogen-like relativistic corrections for electric and magnetic hyperfine integrals // Int. J. Quantum Chem. — 1973. — Vol. 7, N. 4. — P. 785–806.
92. Shabaev V. M. Hyperfine structure of hydrogen-like ions // J. Phys. B. — 1994. — Vol. 27. — P. 5825–5832.
93. Коновалова Е. А., Демидов Ю. А., Козлов М. Г. Расчёт сверхтонкой магнитной аномалии в многоэлектронных атомах // Оптика и спектроскопия. — 2020. — Т. 128, N. 10. — С. 1420–1426.

94. Sushkov O. P., Flambaum V. V., Khriplovich I. B. Theory of hyperfine structure of heavy atoms // *Opt. Spectrosc.* — 1978. — Vol. 44. — P. 2–6.
95. Andrae D. Finite nuclear charge density distributions in electronic structure calculations for atoms and molecules // *Phys. Rep.* — 2000. — Vol. 336, N. 6. — P. 413 – 525.
96. Konovalova E. A., Demidov Y. A., Kozlov M. G., Barzakh A. E. Calculation of francium hyperfine anomaly // *Atoms.* — 2018. — Vol. 6, N. 3. — P. 39.
97. Büttgenbach S. Magnetic hyperfine anomalies // *Hyperfine Interact.* — 1984. — Vol. 20, N. 1. — P. 1–64.
98. Mårtensson-Pendrill A.-M. Magnetic moment distributions in Tl nuclei // *Phys. Rev. Lett.* — 1995. — Vol. 74. — P. 2184–7.
99. Konovalova E. A., Kozlov M. G., Demidov Y. A., Barzakh A. E. Calculation of thallium hyperfine anomaly // *Rad. Applic.* — 2017. — Vol. 2, N. 3. — P. 181–185.
100. Konovalova E. A., Kozlov M. G., Demidov Y. A. Calculation of Hyperfine Anomaly in Heavy Atoms // *Abstracts of 13th European Conference on Atoms, Molecules and Photons.* — Florence. — 2019. — P. 225.
101. Ehlers V. J., Kabasakal Y., Shugart H. A., Tezer O. Hyperfine structure of ^{67}Ga and ^{72}Ga // *Phys. Rev.* — 1968. — Vol. 176, N. 1. — P. 25.
102. Persson J. Extraction of hyperfine anomalies without precise values of the

- nuclear magnetic dipole moment // Eur. Phys. J. A. — 1998. — Vol. 2, N. 1. — P. 3–4.
103. Barzakh A. E., Batist L. K., Fedorov D. V. et al. Hyperfine structure anomaly and magnetic moments of neutron deficient Tl isomers with $I = 9/2$ // Phys. Rev. C. — 2012. — Vol. 86, N. 1. — P. 014311.
104. Schmidt S., Billowes J., Bissell M. L. et al. The nuclear magnetic moment of ^{208}Bi and its relevance for a test of bound-state strong-field QED // Phys. Lett. B. — 2018. — Vol. 779. — P. 324–330.
105. Galván A. P., Zhao Y., Orozco L. A. et al. Comparison of hyperfine anomalies in the $5s_{1/2}$ and $6s_{1/2}$ levels of ^{85}Rb and ^{87}Rb // Phys. Lett. B. — 2007. — Vol. 655, no. 3-4. — P. 114–118.
106. Volotka A. V., Glazov D. A., Tupitsyn I. I. et al. Ground-state hyperfine structure of H-, Li-, and B-like ions in the intermediate-Z region // Phys. Rev. A. — 2008. — Vol. 78, N. 6. — P. 062507.
107. Bohr A. Nuclear magnetic moments and atomic hyperfine structure // Phys. Rev. — 1951. — Vol. 81, N. 3. — P. 331.
108. Dzuba V. A., Flambaum V. V., Kozlov M. G., Porsev S. G. Using effective operators in calculating the hyperfine structure of atoms // Sov. Phys.–JETP. — 1998. — Vol. 87. — P. 885–90.
109. Kozlov M. G., Porsev S. G., Johnson W. Parity nonconservation in thallium // Phys. Rev. A. — 2001. — Vol. 64. — P. 052107–7.

110. Porsev S. G., Rakhlina Y. G., Kozlov M. G. Calculation of hyperfine structure constants for Ytterbium // J. Phys. B. — 1999. — Vol. 32. — P. 1113–20.
111. Kjøller N. K., Porsev S. G., Westergaard P. G. et al. Hyperfine structure of the $(3s3d)^3D_J$ manifold of $^{25}\text{Mg I}$ // Phys. Rev. A. — 2015. — Vol. 91. — P. 032515.
112. Porsev S. G., Kozlov M. G., Safronova M. S., Tupitsyn I. I. Development of the configuration-interaction + all-order method and application to the parity-nonconserving amplitude and other properties of Pb // Phys. Rev. A. — 2016. — Vol. 93. — P. 012501.
113. Angeli I., Marinova K. P. Table of experimental nuclear ground state charge radii: An update // At. Data Nucl. Data Tables. — 2013. — Vol. 99, N. 1. — P. 69–95.
114. Хриплович И. Б. Несохранение четности в атомных явлениях.—2-е изд. — М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит, 1988. — 287 С.
115. Song S., Wang G., Ye A., Jiang G. Multi-configuration Dirac–Fock calculations of the hyperfine structure constants A and B of neutral Cu, Ag and Au // J. Phys. B: Atom. Mol. Phys. — 2007. — Vol. 40, N. 3. — P. 475.
116. Prosnjak S. D., Maison D. E., Skripnikov L. V. Hyperfine structure in thallium atom: Study of nuclear magnetization distribution effects // J. Chem. Phys. — 2020. — Vol. 152, N. 4. — P. 044301.

117. Chen T.-L., Fan I., Chen H.-C. et al. Absolute frequency measurement of the $6p_{1/2} \rightarrow 7s_{1/2}$ transition in thallium // Phys. Rev. A. — 2012. — Vol. 86. — P. 052524.
118. Gomez E., Aubin S., Orozco L. A. et al. Nuclear magnetic moment of ^{210}Fr : A combined theoretical and experimental approach // Phys. Rev. Lett. — 2008. — Vol. 100. — P. 172502.
119. Sahoo B. K., Nandy D. K., Das B. P., Sakemi Y. Correlation trends in the hyperfine structures of $^{210,212}\text{Fr}$ // Phys. Rev. A. — 2015. — Vol. 91, N. 4. — P. 042507.
120. Coc A., Thibault C., Touchard F. et al. Hyperfine structures and isotope shifts of $^{207-213,220-228}\text{Fr}$; possible evidence of octupolar deformation // Phys. Lett. B. — 1985. — Vol. 163, no. 1-4. — P. 66–70.
121. Grossman J. S., Orozco L. A., Pearson M. R. et al. Hyperfine anomaly measurements in francium isotopes and the radial distribution of neutrons // Phys. Rev. Lett. — 1999. — Vol. 83, N. 5. — P. 935.
122. Voss A., Buchinger F., Cheal B. et al. Nuclear moments and charge radii of neutron-deficient francium isotopes and isomers // Phys. Rev. C. — 2015. — Vol. 91, N. 4. — P. 044307.
123. Zhang J., Tandecki M., Collister R. et al. Hyperfine anomalies in Fr: boundaries of the spherical single particle model // Phys. Rev. Lett. — 2015. — Vol. 115, N. 4. — P. 042501.
124. Moskowitz P. A., Lombardi M. Distribution of nuclear magnetization in

- mercury isotopes // Phys. Lett. B. — 1973. — Vol. 46, N. 3. — P. 334–336.
125. Mårtensson-Pendrill A. M. Isotopes through the looking glass // Hyperfine Interact. — 2000. — Vol. 127, no. 1-4. — P. 41–48.
126. Demidov Y. A., Konovalova E. A., Imanbaeva R. T. et al. Atomic calculations of the hyperfine-structure anomaly in gold // Phys. Rev. A. — 2021. — Vol. 103, N. 3. — P. 032824.
127. Cheung C., Safronova M. S., Porsev S. G. et al. Accurate prediction of clock transitions in a highly charged ion with complex electronic structure // Phys. Rev. Lett. — 2020. — Vol. 124, N. 16. — P. 163001.
128. Porsev S. G., Safronova U. I., Safronova M. S. et al. Optical clocks based on the Cf^{15+} and Cf^{17+} ions // Phys. Rev. A. — 2020. — Vol. 102, N. 1. — P. 012802.
129. Kozlov M. G., Tupitsyn I. I. Mixed Basis Sets for Atomic Calculations // Atoms. — 2019. — Vol. 7, N. 3. — P. 92.
130. Eisinger J., Jaccarino V. Effects of the Distribution of Nuclear Magnetization on Hyperfine Structure // Rev. Mod. Phys. — 1958. — Vol. 30. — P. 528.
131. Berkeland D., Miller J., Bergquist J. C. et al. Laser-cooled mercury ion frequency standard // Phys. Rev. Lett. — 1998. — Vol. 80, N. 10. — P. 2089.

132. Brage T., Proffitt C., Leckrone D. S. Theoretical Oscillator Strengths and Hyperfine Structure in Hg II // *Astrophys. J.* — 1999. — Vol. 513, N. 1. — P. 524.
133. Lurio A., Prodell A. G. HFS Separations and Hfs Anomalies in the $^2P_{1/2}$ State of Ga⁶⁹, Ga⁷¹, Tl²⁰³, and Tl²⁰⁵ // *Phys. Rev.* — 1956. — Vol. 101. — P. 79–83.
134. Gould G. HFS Separations and HFS Anomaly in the $6^2P_{3/2}$ Metastable Level of Tl²⁰³ and Tl²⁰⁵ // *Phys. Rev.* — 1956. — Mar. — Vol. 101. — P. 1828–1829.
135. Grexa M., Hermann G., Lasnitschka G., Fricke B. Hyperfine structure and isotopic shift of the $n \ ^2P_J$ levels ($n=7-10$) of $^{203,205}\text{Tl}$ measured by Doppler-free two-photon spectroscopy // *Phys. Rev. A.* — 1988. — Vol. 38, N. 3. — P. 1263.
136. Hermann G., Lasnitschka G., Spengler D. Hyperfine structures and level isotope shifts of the $n \ ^2S_{1/2}$ ($n = 7 - 12$)-and $n \ ^2D_{3/2,5/2}$ ($n= 6 - 10$)-levels of $^{203,205}\text{Tl}$ measured by atomic beam spectroscopy // *Z. Phys. D.* — 1993. — Vol. 28, N. 2. — P. 127–134.
137. Richardson D. S., Lyman R. N., Majumder P. K. Hyperfine splitting and isotope-shift measurements within the 378-nm $6P_{1/2}$ - $7S_{1/2}$ transition in ^{203}Tl and ^{205}Tl // *Phys. Rev. A.* — 2000. — Vol. 62. — P. 012510.
138. Burt E. A., Taghavi-Larigani S., Tjoelker R. L. High-resolution spectroscopy of $^{201}\text{Hg}^+$ hyperfine structure: A sensitive probe of nuclear

- structure and the hyperfine anomaly // *Phys. Rev. A.* — 2009. — Vol. 79, N. 6. — P. 062506.
139. Stone N. J. Table of nuclear magnetic dipole and electric quadrupole moments // *At. Data Nucl. Data Tables.* — 2005. — Vol. 90, N. 1. — P. 75–176.
140. Fujita T., Arima A. Magnetic hyperfine structure of muonic and electronic atoms // *Nucl. Phys. A.* — 1975. — Vol. 254, N. 2. — P. 513–541.
141. Dahmen H., Penselin S. Measurement of the nuclear magnetic dipole moment of ^{197}Au and hyperfine structure measurements in the ground states of ^{197}Au , ^{107}Ag , ^{109}Ag and ^{39}K // *Z. Phys.* — 1967. — Vol. 200, N. 4. — P. 456–466.
142. Bout P. A. V., Ehlers V. J., Nierenberg W. A., Shugart H. A. Hyperfine-Structure Separations, Nuclear Magnetic Moments, and Hyperfine-Structure Anomalies of Gold-198 and Gold-199 // *Phys. Rev.* — 1967. — Vol. 158. — P. 1078–1084.
143. Hinfurtner B., König C., Hagn E. et al. Measurements of spectroscopic quadrupole moments of neutron-deficient Au isotopes with quadrupole-interaction-resolved NMR-ON // *Nucl. Phys. A.* — 1993. — Vol. 562, N. 2. — P. 205 – 217.
144. Passler G., Rikovska J., Arnold E. et al. Quadrupole moments and nuclear shapes of neutron-deficient gold isotopes // *Nucl. Phys. A.* — 1994. — Vol. 580, N. 2. — P. 173–212.