

УДК 52—47

Об энергетической структуре спектра Tc I

А. С. Бахтияров, П. О. Богданович, Г. Л. Жукаускас,
А. А. Никитин, З. Б. Рудзикас

Обсуждено состояние анализа линий технеция в спектрах звезд и Солнца. Изучена пригодность и эффективность различных вариантов метода самосогласованного поля Хартри — Фока для теоретического исследования спектров нейтрального технеция, расчетов длин волн и других характеристик электронных переходов между его уровнями. Рассмотрены конфигурации $4d^5s^2$, $4d^5s$, $4d^5p$ и $4d^5s5p$. Результаты показывают, что энергетические спектры этих конфигураций сильно перекрываются, поэтому необходимо учесть корреляционные эффекты. С этой целью энергетический спектр конфигурации $4d^5s^2$ рассчитан в трехконфигурационном приближении, а также во втором порядке несколько видоизмененной теории возмущений. Анализ полученного энергетического спектра и структуры весов собственных функций свидетельствует о малой пригодности одноконфигурационного приближения.

ON THE STRUCTURE OF THE ENERGY SPECTRA OF Tc I, by Bakhtiyarov A. S., Bogdanovich P. O., Zukauskas G. L., Nikitin A. A., Rudzikas Z. B.—The status of the analysis of technetium lines in the spectra of stars and the Sun is considered. The suitability and efficiency of various approaches of the self-consistent Hartree-Fock field for theoretical investigations of the energy spectra of neutral technetium, as well as for the wavelengths and the other characteristics of electronic transitions between its levels are discussed. The $4d^5s^2$, $4d^5s$, $4d^5p$ and $4d^5s5p$ configurations are studied. The results show that the energy spectra of these configurations are strongly overlapped, therefore the correlation effects ought to be taken into account. For this purpose the energy spectrum of the configuration $4d^5s^2$ is calculated in the three-configuration approximation as well as in the second order of a slightly modified perturbation theory. Analysis of the energy spectrum obtained as well as the structure of the weight of the eigenfunctions testifies to the unfitnes of the single-configuration approximation.

Введение. При идентификации энергетических спектров, как астрофизических, так и полученных в лабораторных условиях, чрезвычайно важно сочетание результатов измерений или наблюдений с теоретическими расчетами, с математическим моделированием соответствующих систем. Это особенно важно, когда изучаются спектры сложных многоэлектронных атомов и ионов, включая высокоионизованные атомы, для которых многие обычные понятия и характеристики (тип связи, вид конфигурации, строение спектров и др.) обладают рядом особенностей и специфических свойств. Именно к такому типу атомов относится технеций, и поэтому при изучении структуры его энергетического спектра необходимо привлечение мощных современных теоретических методов.

Целью данной работы является анализ линий технеция в спектрах звезд и Солнца, а также изучение пригодности и эффективности различных вариантов метода самосогласованного поля Хартри — Фока (ХФ) для расчетов энергетических спектров технеция, длин волн и характеристик электронных переходов между его уровнями.

Резонансные линии Tc I $\lambda\lambda$ 423.819; 426.230 и 429.706 нм перехода $4d^5s^2$ $^6S_{5/2} - 4d^5s5p$ $^6P_{7/2-3/2}^0$ впервые отождествлены Меррилом [14] в звездах поздних спектральных классов. Дальнейшие исследования [12, 13, 17, 18], которые в основном опирались на отождествление резонансных линий Tc I, позволили выделить среди звезд спектральных классов M, S и C группу (~ 45) объектов, в спектрах которых наблюдаются линии Tc I (Tc-звезды). Помимо резонансных линий Tc I в спектрах некоторых Tc-звезд наблюдались и субординатные линии перехода $4d^5s^2D - 4d^5p^6D^0$ [13].

В работе [19] для пяти звезд спектральная деталь λ 592.4 нм отождествляется с интеркомбинационной линией Tc I перехода $4d^5s^2$ $^6S_{5/2} - 4d^5s5p$ $^8P_{7/2}^0$. Эквивалентные ширины W наблюдаемых линий Tc I для некоторых Tc-звезд представлены в табл. 1.

Попытка обнаружить линии Tc II $\lambda\lambda$ 254.3, 261.0, 264.7, 313.5, 319.5, 321.2 и 323.7 нм в фраунгоферовом спектре Солнца предпринята в работе [15]. Спектральная деталь λ

Таблица 1. Длины волн и эквивалентные ширины наблюдаемых линий Тс

Звезда	Спектральный класс	λ , нм	W, пм	Литературный источник
OP Her	M5IIb—IIIa (S)	426.230	4.0	[18]
R Hyа	M6e—M8e (S)	426.230	52.4	[13]
		429.706	54.1	
RS Спс	M6eIb—II (S)	426.230	22.0	[18]
T Cet	M5—6eII (S)	426.230	20.0	[18]
T Cep	M5e—M9e	423.819	5.0	[13]
		426.230	8.0	
χ Cyg	S 7,1e—10,1e	426.230	52.4	[13]
		429.706	54.1	
		408.870	15.2	
		414.508	18.5	
R And	S 6,6e	426.230	40.0	[18]
UX Dra	C 7,3	426.230	19.0	[18]
U Hyа	C 7,3	426.230	13.0	[18]
R CMi	SC 4/10	592.447	13.3	[19]
S UMa	S 2/6	592.447	12.7	[19]
CY Cyg	SC 2/7,5	592.447	28.4	[19]

319.5 нм солнечного спектра в [9] была сопоставлена с линией Тс II. Полученная оценка содержания технеция 1.3 dex (в шкале $\lg N_{\text{H}}=12.0$) совпадает по порядку величины с содержаниями соседних элементов. Но, как показано в [11], учет поправочных множителей, неучтенных в [9], увеличивает содержание технеция в атмосфере Солнца в 50 раз, при этом сила резонансных линий Тс I должна быть сравнима или превышать силу линий, примыкающих к этим линиям в солнечном спектре.

Исследования, проведенные в [6, 7], показали, что более предпочтительными для отождествления Тс I в солнечном спектре являются линии $\lambda\lambda$ 363.607, 423.824, 485.355, 558.901 и 562.045 нм, так как эти линии менее всего отягощены блендами в солнечном спектре.

С целью выделения из бленд и отождествления спектральных деталей солнечного спектра с субординатными и интеркомбинационными линиями Тс I $\lambda\lambda$ 482.074, 485.359, 490.851, 490.957, 509.628, 516.181 и 558.902 нм в работе [1] сняты и промерены 8 участков солнечного спектра. Спектральные особенности представлялись как линейная суперпозиция нескольких линий, содержащая свободные параметры. Далее составлялась избыточная система уравнений для параметров, решаемая методом наименьших квадратов. Такая схема дала возможность выделить 4 линии Тс I $\lambda\lambda$ 482.074, 485.359, 509.628 и 613.081 нм. Эквивалентные ширины этих линий оказались равными соответственно 0.14, 0.16, 0.11 и 0.16 пм.

Отсутствие экспериментальных данных и обширных теоретических расчетов энергетического спектра и вероятностей переходов для Тс II, Тс III,... ограничивает поиск возможных линий технеция в спектрах других, более горячих нестационарных объектов, чем звезды поздних спектральных классов (к примеру, новые звезды).

Теоретический расчет энергетической структуры спектра и сил осцилляторов Тс I. Основному состоянию атома Тс I соответствует терм $^6S_{5/2}$ конфигурации $4d^55s^2$. Возбужденные состояния описываются уровнями термов конфигураций: $4d^65s$, $4d^65p$, $4d^55s5p$, $4d^55s6s$, $4d^66s$, $4d^55s5d$ и т. д. Низколежащие уровни лабораторного спектра Тс I [16] классифицируются в схеме LS-связи (выполняется правило интервалов внутри термов и между термами, собственные функции получаются довольно «чистыми», а экспериментальные g -факторы Ланде в пределах ошибок совпадают с теоретическими).

В качестве модели атома в данном разделе использовано одноконfigurационное приближение ХФ при LS-связи. Выбор данной модели обусловлен необходимостью вычисления большого массива однородных атомных данных для всех элементов этой группы и разумной затратой времени. Пакет программ, реализующий это приближение, описан в [2, 8]. В этом приближении проведены расчеты низколежащих конфигураций: $4d^55s^2$, $4d^65s$, $4d^65p$ и $4d^55s5p$.

Для получения радиальных орбиталей проводилось численное решение интегродифференциальных уравнений ХФ независимо для каждой из рассматриваемых конфигураций. С помощью полученных радиальных волновых функций строились многотермные волновые функции с определенным полным моментом J , как линейная суперпозиция волновых функций с различными орбитальными и спиновыми моментами L и S , дающими в сумме J . Энергетическая структура спектра определялась с учетом электростатического и спин-орбитального взаимодействия электронов.

Некоторые результаты расчета энергетического спектра TсI представлены в табл. 2. Анализ табл. 2 показывает, что: а) среднее отклонение $E_{теор}$ от $E_{эксп}$ для конфигураций $4d^65s$, $4d^55s5p$ и $4d^65p$ составляет ~ 5000 см $^{-1}$; б) относительное отклонение $|\Delta E|/E_{эксп}$ убывает для конфигураций $4d^55s5p$ и $4d^65p$ с ростом $E_{эксп}$; в) рассчитанная последовательность термов совпадает с экспериментальной, причем термы $z^8P^0(4d^55s5p)$ и $y^6P^0(4d^65p)$, как наблюдаемые, так и вычисленные — обращенные.

В последнем столбце приведены (умноженные на 100) квадраты наибольших коэффициентов разложения собственной волновой функции уровней, соответствующих

Таблица 2. Теоретические и экспериментальные значения энергии уровней Tс I

Конфигурация	Терм	J	$E_{эксп}$, см $^{-1}$	$E_{теор}$, см $^{-1}$	$\Delta E = E_{эксп} - E_{теор}$	Чистота терма
$4d^55s^2$	a^6S	2.5	0.0	0.0	0.0	99
$4d^6(a^5D)5s$	a^6D	4.5	2572.89	557	2016	99
		3.5	3250.91	1280	1971	99
		2.5	3700.55	1787	1914	99
		1.5	4002.58	2131	1872	99
		0.5	4178.72	2331	1848	99
$4d^6(a^5D)5s$	a^4D	3.5	10516.54	10689	-178	99
		2.5	11063.08	11518	-455	99
		1.5	11578.59	12040	-461	99
		0.5	11890.96	12338	-447	99
$4d^55s(a^7S)5p$	z^8P^0	2.5	16428.71	5042	11387	99
		3.5	16874.51	5281	11594	99
		4.5	17522.95	5606	11917	99
$4d^55s(a^7S)5p$	z^6P^0	3.5	23265.33	15346	7919	64
		2.5	23455.21	15283	8172	64
		1.5	23588.40	15263	8325	62
$4d^6(a^5D)5p$	z^6D^0	4.5	27369.78	20879	6491	97
		3.5	27660.09	21327	6333	94
		2.5	27940.72	21779	6162	96
		1.5	28151.28	22115	6036	98
		0.5	28296.69	22322	5975	99
$4d^6(a^5D)5p$	z^6F^0	5.5	30067.29	23186	6881	99
		4.5	30133.25	23678	6460	94
		3.5	30382.06	24051	6331	94
		2.5	30528.85	24330	6199	96
		1.5	30630.63	24516	6115	97
		0.5	30689.12	24623	6066	98
$4d^6(a^5D)5p$	z^4F^0	4.5	31114.09	25662	5452	95
		3.5	31604.99	26565	5040	82
		2.5	32014.79	27049	4966	86
		1.5	32253.65	27377	4877	90
$4d^6(a^5D)5p$	y^6P^0	3.5	31414.07	24551	6863	95
		2.5	31406.76	25443	5964	97
		1.5	31503.96	26007	5497	98
$4d^6(a^5D)5p$	z^4P^0	2.5	31927.01	27817	4110	91
		1.5	32258.07	28654	3604	96
		0.5	32403.07	29099	3304	99
$4d^55s(a^5S)5p$	x^6P^0	3.5	38240.77	32402	5839	58
		2.5	38216.75	32470	5747	59
		1.5	38319.60	32449	5871	63

Таблица 3. Теоретические силы осцилляторов и длины волн Тс I

Мультиплет	$J-J'$	$\lambda_{\text{лаб}}, \text{нм}$	gf_L	gf_V	gf_G	
переход: $4d^55s^2-4d^55s5p$						
$a^6S-z^6P^0$	2.5—1.5	423.819	0.12	0.08	0.38	
	2.5—2.5	426.227	0.14	0.14	0.59	
	2.5—3.5	429.707	0.16	0.21	0.81	
$a^6S-x^6P^0$	2.5—1.5	260.885	5.2	3.5	1.6	
	2.5—2.5	261.587	5.0	5.0	2.5	
	2.5—3.5	261.423	4.6	6.0	3.6	
переход: $4d^65s-4d^65p$						
$a^6D-z^6F^0$	4.5—5.5	363.607	4.9	3.5	3.5	
	4.5—4.5	362.736	0.35	0.24	0.17	
	3.5—4.5	371.886	3.6	2.6	2.5	
	3.5—3.5	368.474	0.94	0.70	0.50	
	3.5—2.5	366.492	0.05	0.03	0.005	
	2.5—3.5	374.685	1.6	1.6	1.5	
	2.5—2.5	372.635	0.99	0.75	0.68	
	2.5—1.5	371.226	0.17	0.08	0.07	
	1.5—2.5	376.877	0.84	0.97	0.89	
	1.5—1.5	375.437	0.87	0.66	0.66	
	1.5—0.5	374.615	0.28	0.11	0.10	
	0.5—1.5	377.937	0.28	0.43	0.39	
	0.5—0.5	377.103	0.63	0.48	0.47	
$a^6D-z^4F^0$	4.5—4.5	350.270	0.031	0.018	—	
	3.5—4.5	358.794	0.10	0.062	0.18	
	3.5—3.5	352.583	0.026	0.015	—	
	2.5—3.5	358.263	0.047	0.028	0.19	
	2.5—2.5	353.081	0.018	0.011	—	
1.5—2.5	356.885	0.016	0.01	—		
$a^6D-y^6P^0$	4.5—3.5	346.628	2.1	1.3	0.73	
	3.5—3.5	354.973	0.75	0.58	0.35	
	3.5—2.5	355.065	1.1	0.66	0.28	
	2.5—3.5	360.732	0.46	0.32	0.26	
	2.5—2.5	360.827	1.0	0.66	0.31	
	2.5—1.5	359.566	0.39	0.24	0.10	
	1.5—2.5	364.804	0.51	0.35	0.28	
	1.5—1.5	363.515	0.71	0.46	0.19	
	0.5—1.5	365.859	0.62	0.40	0.26	
$a^6D-z^6D^0$	4.5—4.5	403.163	3.3	3.0	2.5	
	4.5—3.5	398.497	1.2	1.0	0.69	
	3.5—4.5	414.495	0.32	0.30	0.18	
	3.5—3.5	409.567	1.3	1.2	1.1	
	3.5—2.5	404.911	1.3	1.1	0.87	
	2.5—3.5	417.253	0.48	0.46	0.28	
	2.5—2.5	412.422	0.38	0.35	0.34	
	2.5—1.5	408.871	1.0	0.92	0.72	
	1.5—2.5	417.628	0.52	0.49	0.33	
	1.5—1.5	413.985	0.023	0.021	0.023	
	1.5—0.5	411.508	0.53	0.53	0.43	
	0.5—1.5	417.027	0.39	0.37	0.27	
	0.5—0.5	414.508	0.13	0.12	0.09	
	$a^4D-z^4D^0$	3.5—3.5	452.284	2.1	3.4	
		3.5—2.5	442.959	0.64	0.96	
2.5—2.5		453.953	0.92	1.5		
2.5—1.5		448.706	0.55	0.85		
1.5—2.5		464.833	0.025	0.045		
1.5—1.5		459.335	0.46	0.78		
1.5—0.5		456.454	0.30	0.49		
0.5—1.5		466.021	0.048	0.084		
0.5—0.5		463.057	0.22	0.37		

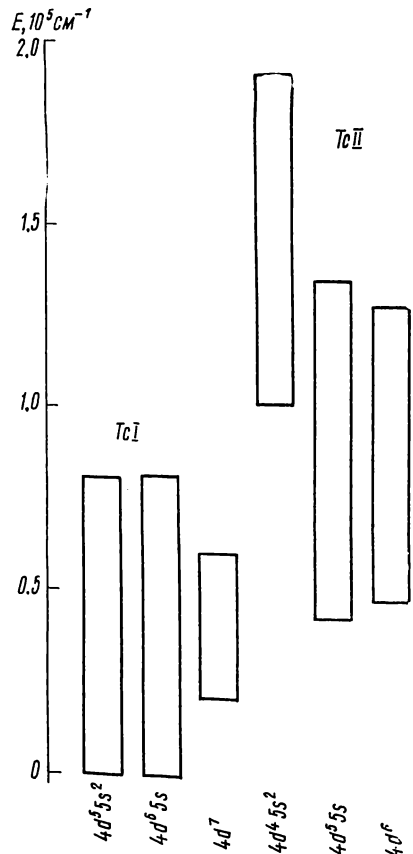
Мультиплет	$J-J'$	$\lambda_{\text{лаб}}, \text{нм}$	gf_L	gf_V	gf_G
$a^4D-z^4P^0$	3.5—2.5	466.931	1.1	1.3	
	2.5—2.5	479.162	0.55	0.75	
	2.5—1.5	471.679	0.60	0.75	
	1.5—2.5	491.302	0.17	0.25	
	1.5—1.5	483.437	0.49	0.64	
	1.5—0.5	480.070	0.26	0.33	
	0.5—1.5	490.851	0.11	0.15	
0.5—0.5	487.380	0.34	0.44		
$a^4D-z^4F^0$	3.5—4.5	485.359	2.6	4.2	
	2.5—3.5	486.673	2.1	3.4	
	2.5—2.5	477.557	0.16	0.24	
	1.5—2.5	489.192	1.4	2.3	
	1.5—1.5	483.539	0.16	0.25	
	0.5—1.5	490.957	0.91	1.5	
$a^4D-y^0P^0$	3.5—3.5	478.393	0.009	0.017	
$a^4D-z^6F^0$	3.5—4.5	509.488	0.067	0.14	
	2.5—3.5	517.481	0.036	0.084	
	1.5—2.5	527.551	0.018	0.044	

указанным термам. Близость этих величин к 100 указывает на чистоту LS -связи. Это обстоятельство следует учитывать при составлении уравнений стационарности для расчета теоретического спектра Tс I.

Силы осцилляторов и вероятности переходов Tс I вычислены с использованием нерелятивистских операторов излучения [5], в базе многотермных волновых функций для всех возможных переходов между конфигурациями $4d^5s^2-4d^5s5p$ и $4d^6s-4d^6p$. Рассчитанные силы осцилляторов в форме длины gf_L и скорости gf_V , превосходящие 0.01, представлены в табл. 3. В шестом столбце табл. 3 приведены силы осцилляторов gf_G из работы [10], в которой величина радиального интеграла перехода для Tс I принята равной значению этого интеграла для Mn I, интерполированному между кулоновским и XФ величинами радиального интеграла перехода. Наблюдается согласие между gf_L , gf_V и gf_G (~50 %) кроме переходов $^6S-z^6P^0$ и $^6S-x^6P^0$.

Большие погрешности в теоретических значениях энергий (табл. 2) и, в соответствии с этим, малая точность теоретических длин волн, а также большие различия в силах осцилляторов, полученных с использованием двух видов оператора перехода, свидетельствуют о том, что используемое приближение является недостаточно точным и необходимо уточнение получаемых теоретических результатов.

Возможности уточнения результатов теоретического расчета спектральных характеристик технеция. Технеций принадлежит к ряду переходных элементов с заполняющейся $4d$ -



Ширины энергетических спектров конфигураций Tс I и Tс II

оболочкой. Как известно, в спектрах этих атомов и их первых ионов исключительно большую роль играют корреляционные эффекты. Это во многом обусловлено тем, что одноэлектронные энергии nd - и $(n+1)s$ -электронов в этих атомах близки, и три конфигурации $nd^N(n+1)s^2$, $nd^{N+1}(n+1)s$ и nd^{N+2} , обладающие одинаковой четностью, сильно смешиваются между собой. На рисунке изображены области существования энергетических спектров конфигураций $4d^55s^2$, $4d^65s$, $4d^7\text{Tc I}$ и $4d^45s^2$, $4d^55s$, $4d^6\text{Tc II}$, полученные в одноконфигурационном приближении ХФ. Как видно из рисунка, все три конфигурации нейтрального технеция полностью перекрываются, что обуславливает сильное возмущающее взаимное влияние термов из различных конфигураций. Большое число уровней приводит к довольно высокой плотности отдельных частей энергетического спектра. Исходя из одноконфигурационных расчетов, нельзя даже гарантировать, что уровень ${}^6S_{5/2}$ конфигурации $4d^55s^2$ является самым низким, так как в этом приближении он только на 800 см^{-1} ниже, чем уровень $({}^5D)6D_{9/2}$ конфигурации $4d^65s$.

Таблица 4. Энергии (100 см^{-1}), многоконфигурационные функции термов конфигураций $4d^55s^2$, $4d^65s$ и $4d^7\text{ Tc I}$

XФ	Трехконфигур. приближение	100ψ		
		$4d^55s^2$	$4d^65s$	$4d^7$
0	0	100^6S		
500	516	95^2S	$-23({}_0^1S)^2S+22({}_4^1S)^2S$	
273	270	75^4P	$-48({}_2^3P)^4P-31({}_4^3P)^4P$	$+34^4P$
743	759	97^2P	$+19({}_2^3P)^2P$	$+11^2P$
289	316	83^4D	$-15({}_4^5D)^4D-54({}_4^3D)^4D$	
804	821	$86_1^2D-45_5^2D$		-22_1^2D
554	549	91_3^2D	$-12({}_4^3D)^2D-33({}_2^1D)^2D$	-12_1^2D
381	406	$69_5^2D+45_1^2D$	$-51({}_4^3D)^2D+11({}_4^1D)^2D$	$+21_1^2D$
390	397	94^4F	$+27({}_2^3F)^4F$	-21^4F
389	402	$68_3^2F-24_5^2F$	$+20({}_2^3F)^2F+65({}_4^1F)^2F$	
453	441	68_5^2F	$+48({}_2^3F)^2F-17({}_4^3F)^2F$	-52^2F
234	253	81^4G	$+59({}_3^3G)^4G$	
609	618	98_3^2G	$-12({}_2^1G)^2G$	-13_3^2G
421	428	91_5^2G	$-22({}_4^3G)^2G-34({}_2^1G)^2G$	
413	431	91^2H		$+42^2H$
335	336	99^2I	$+13({}_1^1I)^2I$	
116	109	20^4D	$+98({}_5^5D)^4D$	
268	248	53^4D	$+84({}_3^3D)^4D$	
329	259	$16_3^2D+33_5^2D$	$+67({}_4^3D)^2D+33({}_4^1D)^2D$	$+48_3^2D$
644	666	36_3^2D	$+79({}_2^1D)^2D-41({}_4^1D)^2D$	$+25_3^2D$
339	317	$-16_1^2D-32_5^2D$	$+45({}_3^3D)^2D+67({}_4^1D)^2D$	$+31_3^2D$
421	424		$+85({}_2^3F)^4F+46({}_4^3F)^4F$	
201	229		$+37({}_2^3F)^4F+62({}_4^3F)^4F$	$+69^4F$
481	509	$-33_3^2F-45_5^2F$	$+69({}_2^3F)^2F-43({}_4^3F)^2F$	$+14^2F$
262	241	$-14_3^2F-22_5^2F$	$+39({}_2^3F)^2F+85({}_4^3F)^2F$	-22^2F
382	331	60_5^2F	$+26({}_2^3F)^2F-64({}_4^1F)^2F$	$+33^2F$
585	583		$+27({}_4^1D)^2D$	$+75_1^2D-49_3^2D$
358	393	-21_5^2D	$-31({}_2^1D)^2D-43({}_4^1D)^2D$	$+47_1^2D+63_3^2D$
207	170	19^4F	$-64({}_4^3F)^4F-27({}_2^3F)^4F$	$+70^4F$
447	489	$-22_3^2F+47_1^2F$	$+35({}_4^1F)^2F$	$+74^2F$

Из рисунка видно, что нижний уровень $(^6S)7S_3$ конфигурации $4d^55s$ Tc II лежит почти посередине энергетических спектров конфигураций нейтрального атома. В результате этого большое число уровней даже основной конфигурации Tc I лежит выше энергии ионизации.

Чтобы учесть взаимное влияние трех рассматриваемых конфигураций Tc I, был проведен расчет и диагонализация матрицы оператора энергии электростатического взаимодействия электронов в трехконфигурационном приближении $4d^55s^2$, $4d^65s$, $4d^7$ и получены энергетические поправки к энергии термов и многоконфигурационные волновые функции (без учета спин-орбитального взаимодействия). Эти результаты для конфигурации $4d^55s^2$ и некоторых наиболее смешивающихся термов конфигураций $4d^65s$ и $4d^7$ представлены в табл. 4. Следует отметить, что мультиплетное расщепление термов конфигурации $4d^55s^2$ невелико, что обусловлено полузаполненностью оболочки $4d^N$ ($N=2l+1$) и, как следствие, равенством нулю диагональных матричных элементов одноэлектронного оператора спин-орбитального взаимодействия. В таблице приведены как энергии термов в одноконфигурационном приближении, так и уточненные энергии. Все энергии отсчитаны от энергии терма 6S , полная энергия ($-9228443 \times 10^2 \text{ см}^{-1}$) в данном приближении остается неизменной.

Из таблицы видно, что рассматриваемое приближение в большинстве случаев повышает энергии термов конфигурации $4d^55s^2$, а сами поправки достигают нескольких тысяч см^{-1} . Такие энергетические поправки не являются особенно большими по сравнению с общей шириной энергетического спектра конфигурации. Гораздо более важным в этом случае является смешивание конфигураций, проявляющееся в разложении собственных функций, приведенных в табл. 4. В разложении сначала представлены термы конфигурации $4d^55s^2$, затем — $4d^6(LS)5s$, а в конце — $4d^7$. Указаны только термы, обладающие большими весовыми коэффициентами. Из таблицы видно, что для некоторых термов смешивание очень велико, и приписывание их определенным конфигурациям становится весьма условным.

Значительное смешивание конфигураций, которое, естественно, в меньшей степени проявляется и для возбужденных конфигураций вида $4d^55snl$, $4d^6n'l'$, $4d^45s^2n''l''$ и других, оказывает существенное влияние не только на длины волн, но и на характеристики электронных переходов. В связи с этим могут существенно изменяться силы осцилляторов, приведенные в табл. 3.

Таблица 5. Энергии (100 см^{-1}) уровней конфигурации $4d^55s^2$ Tc I, отсчитанные от $-9228444 \cdot 10^2 \text{ см}^{-1}$ (XФ) и $-9228640 \cdot 10^2 \text{ см}^{-1}$ (корреляц.)

J	XФ	Корреляц.	100 Ψ	J	XВ	Корреляц.	100 Ψ
2.5	0	0	100^6S	1.5	398	361	$81^4F+49^2_5D+30^2_1H$
2.5	264	212	97^4P	6.5	336	363	100^2I
1.5	267	214	99^4P	2.5	411	372	$62^2_3F+56^2_5D+36^2_1D$
0.5	271	215	100^4P	4.5	409	400	$79^2H+60^2_5G$
2.5	232	254	$97^4G+21^2_3F$	2.5	455	408	95^2_3F
3.5	234	256	98^4G	3.5	456	409	$92^2_5F-35^2_5G$
5.5	234	257	100^4G	3.5	424	412	$93^2_5G+31^2_5F$
4.5	234	258	100^4G	3.5	424	412	$93^2_5G+31^2_5F$
3.5	288	290	97^4D	5.5	418	413	95^2H-29^2I
2.5	295	292	97^4D	4.5	432	421	$78^2_5G-61^2H$
1.5	295	293	98^4D	0.5	501	458	100^2S
0.5	292	293	100^4D	1.5	555	474	100^2_3D
2.5	368	329	$60^2_5D+41^2_1D-62^2_3F$	2.5	557	477	98^2_3D
1.5	377	338	$67^2_5D-57^4F+47^2_1D$	4.5	611	564	100^2_3G
3.5	387	347	$78^2_3F-58^4F$	3.5	612	565	100^2_3G
4.5	388	352	98^4F	1.5	743	661	98^2P
2.5	391	353	$92^4F-34^2_3F$	0.5	745	664	100^2P
3.5	393	358	$77^4F+58^2_3F-22^4D$	2.5	806	701	$83^2_1D-56^2_5D$
5.5	333	359	96^2I+29^2H	1.5	808	704	$81^2_1D+54^2_5D-22^2P$

Поправки к энергиям термов, полученным в трехконфигурационном приближении, использованы для расчета уточненного спектра конфигурации $4d^5 5s^2$. При этом, кроме указанных конфигураций, по методике работ [3, 4] во втором порядке теории возмущений учитывалось влияние еще 12 поправочных конфигураций вида $4d^3 5s^2 (nl)^2$ и $4d^5 (n'l')^2$. Полученные результаты приведены в табл. 5. В ней для сравнения указаны и энергии, найденные в одноконфигурационном приближении. Поскольку в данном случае влияние наиболее важных поправочных конфигураций $4d^6 5s$ и $4d^7$ определялось с помощью точной диагонализации матриц, приведенные энергии являются более точными, чем рассчитанные в [14], где учет этих конфигураций, как и остальных, выполнен во втором порядке теории возмущений, а не точной диагонализацией матриц, как в данной работе. Используемая методика не позволяет получать точных многоконфигурационных собственных волновых функций, а только собственные функции исследуемой конфигурации. Однако разложения, приведенные в табл. 5, в некоторых случаях существенно отличаются от получаемых без учета корреляционных поправок.

Проведенные расчеты показали, что даже в случае основной конфигурации Tc I роль корреляционных эффектов очень велика. Не менее важны они и в случае возбужденных конфигураций. Следовательно, только последовательное применение многоконфигурационного приближения может привести к теоретическим результатам, достаточно хорошо совпадающим с экспериментальными данными как по длинам волн, так и по вероятностям электронных переходов.

1. *Амандурдыев Д.* О технеции в атмосфере Солнца: Автореф. дис. ... канд. физ.-мат. наук.—Л., 1983.—14 с.
2. *Богданович П. О.* Программа численного решения уравнений Хартри—Фока // Сб. программ по мат. обеспечению атом. расчетов, Вильнюс.—1980.—Вып. 2.—С. 3—99.
3. *Богданович П. О., Жукаускас Г. Л.* Приближенный учет суперпозиции конфигураций в атомных спектрах // Литов. физ. сб.—1983.—23, № 3.—С. 18—33.
4. *Богданович П. О., Жукаускас Г. Л., Шаджювене С. Д.* Роль корреляционных поправок к энергии атома, определяемых конфигурациями вида $n_1 l_1^{N_1-1} n_2 l_2^{N_2} n_3 l_3$ и $n_3 l_3^{N_3+1} n_1 l_1^{N_1+1} n_2 l_2^{N_2}$ // Там же.—1984.—24, № 5.—С. 27—37.
5. *Меркеллис Г. В.* Программа расчета сил осцилляторов и вероятностей электрического и магнитного мультипольного излучения // Сб. программ. по мат. обеспечению атом. расчетов, Вильнюс.—1981.—Вып. 8.—С. 3—69.
6. *Никитин А. А.* О линиях технеция в спектре Солнца. I. // Астрон. журн.—1958.—35, № 1.—С. 18—25.
7. *Никитин А. А.* О линиях технеция в спектре Солнца. II // Там же.—№ 3.—С. 366—371.
8. *Шаджювене С. Д., Богданович П. О.* Программа расчета сложных энергетических спектров многоэлектронных атомов и ионов // Сб. программ по мат. обеспечению атом. расчетов, Вильнюс.—1981.—Вып. 5.—С. 31—81.
9. *Юбене Г., де Ягер Ш., Цваан К.* К вопросу о существовании технеция в солнечной атмосфере // Ядерные процессы в звездах: Сб. докл. V междунар. коллоквиума по астрофизике в Льеже, 10—12 сент. 1953 / Пер. под ред. А. Г. Масевич.—М.: Изд-во иностр. лит., 1957.—423 с.
10. *Garstang R. H.* Technetium oscillator strengths // Publ. Astron. Soc. Pacific.—1981.—93, N 555.—P. 611—616.
11. *Greenstein J. L., de Jager C.* The occurrence of technetium in the Sun // Bull. Acad. Netherlands — 1956.—13, N 467.—P. 13—16.
12. *Little-Marenin I. R., Little S. J.* Technetium in late-type stars. I. Observation // Astron. J.—1979.—84, N 9.—P. 1374—1383.
13. *Maehara H.* Spectral analysis of some Mira-type long-period variable stars // Publ. Astron. Soc. Jap.—1971.—23, N 3.—P. 313—333.
14. *Merrill P. W.* Spectroscopic observations of stars of class S // Astrophys. J.—1952.—116, N 1.—P. 21—26.
15. *Moore C. E.* Technetium in the Sun // Science.—1951.—114, N 2951.—P. 60—62.
16. *Moore C. E.* Atomic energy levels // NBS.—1958.—111.—P. 467.
17. *Peery B. F.* Technetium stars // Astrophys. J.—1971.—163, N 1.—P. L1—L4.
18. *Sanner F.* Observation of technetium stars // Ibid.—1978.—219, N 3.—P. 538—542.
19. *Smith V. V., Wallerstein G.* Quantitative technetium and niobium abundances in heavy-element stars // Ibid.—1983.—273, N 3.—P. 742—748.

Поступила в редакцию
10.06.85

Ин-т физики АН ЛитССР, Вильнюс
Астрон. обсерватория Ленингр. ун-та