

Radiacinių šuolių parametrai volframo jonuose su atviru 4d sluoksniu

Spectroscopic parameters of emission transitions in tungsten ions with open 4d shell

Rasa Karpuškienė, Romualdas Kisielius, Pavelas Bogdanovičius

Vilniaus universitetas, Teorinės fizikos ir astronomijos institutas, Saulėtekio al. 3, 10257 Vilnius

rasa.karpuskiene@tfai.vu.lt

Keletą pastarųjų metų išsamiai tiriame volframo jonus su atviru 4d sluoksniu pagrindinėje konfigūracijoje, taikydami kvazireliatyvistinį artinį (QR) reliatyvistiniams efektams išskaityti, o koreliacinius efektus išskaitome taikydami konfigūracijų sąveikos (CI) metodą transformuotųjų radialiųjų orbitalių bazėje.

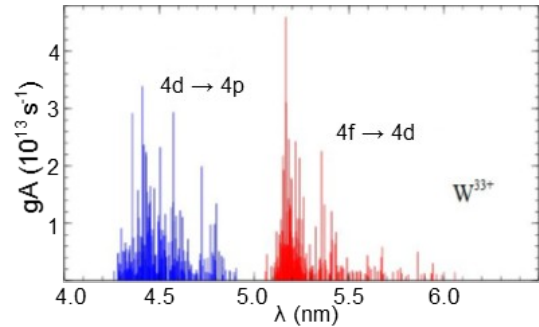
Naujausiame mūsų darbe išsamiai išnagrinėtos W^{34+} pagrindinės konfigūracijos $4p^6 4d^4$ ir sužadintų konfigūracijų komplekso $4p^5 4d^5 + 4p^6 4d^3 4f$ lygmenų energijos, pateikti įvairių tipų emisijos šuolių spektroskopiniai parametrai [1]. Be to, remiantis palyginimu su eksperimentiniais ir kitų autorių teoriniais duomenimis, buvo nuosekliai įvertinti kvazireliatyvistiniu artiniu gaunamų šuolių tikimybių ir bangų ilgių neapibrėžtumai. Šiuo metu atliekamas analogiškas tyrimas W^{33+} jono pagrindinei konfigūracijai $4p^6 4d^5$ ir sužadintoms konfigūracijoms $4p^5 4d^6 + 4p^6 4d^4 4f$.

Šiame darbe pateiksime jonų W^{34+} ir W^{33+} stipriausių elektrinių dipolinių šuolių (E1) tikimybių analizę ir palyginimą su eksperimentiniais [2] bei kitų autorių teoriniais duomenimis [3,4].

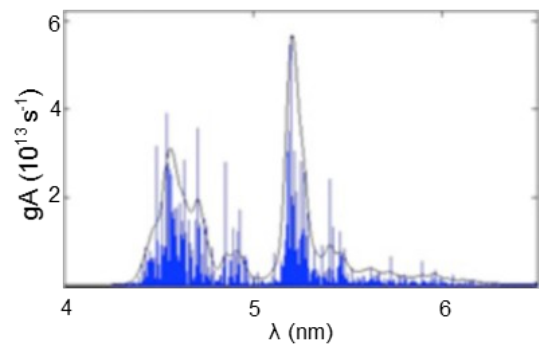
Jonai W^{34+} ir W^{33+} yra sudėtingos sistemos. Kiekvieno iš jų pagrindinėje konfigūracijoje yra virš 30 lygmenų, o sužadintose, turinčiose atvirus 4p, 4d ir 4f sluoksnius, lygmenų skaičius jonui W^{34+} yra 420 ir 525 jonui W^{33+} . Iš daugumos sužadintų lygmenų yra leistini E1 šuoliai. Kadangi šuolių yra labai daug, detaliam išanalizuoti kiekvieno šuolio charakteristikas yra praktiškai neįmanoma. Gautus teorinius skaičiavimų rezultatus optimaliausia yra vaizduoti grafiškai.

Palyginimui pateikiame savo gautus rezultatus (1 pav.) ir dalį duomenų iš [4] (2 pav.). Šiuose brėžiniuose kiekvienas E1 šuolis pavaizduotas vertikaliu brūkšniu ties savo bangos ilgiu λ , o brūkšnio aukštis gA atitinka šuolio tikimybę A , padaugintą iš pradinio lygmens statistinio svorio g .

Kvazireliatyvistiniu artiniu gautus spektroskopinius parametrus palyginome su darbe [3] pateiktais rezultatais, naudodami vidurkių skaičiavimo metodus, pateiktus tame pačiame darbe. Gauti vidutiniai dydžiai leidžia palyginti ne tik skirtingais būdais gautus teorinius rezultatus tarpusavyje, bet ir įvertinti jų neapibrėžtumus bei tikslumą. Vėliau šiuos įvertinimus naudojame konkrečių šuolių tikimybių ir bangos ilgių, gautų kvazireliatyvistiniu artiniu, neapibrėžtumams nustatyti.



1 pav. Teorinės emisijos šuolių charakteristikos gautos QR artiniu.



2 pav. Teorinės šuolių charakteristikos iš [4] su instrumentine Gauso tipo gaubiamąja.

Pilnus tiriamų jonų spektroskopinių parametru, įskaitant sužadavimo elektronus parametrus, rinkinius galima rasti Vilniaus universitete veikiančioje atviros prieigos sudėtingų atomų ir daugiakrūvių jonų duomenų bazėje ADAMANT (www.adamant.tfai.vu.lt/database)

Reikšminiai žodžiai: volframas, radiaciniai šuoliai, kvazireliatyvistinis artinis.

Literatūra

- [1] R. Karpuškienė, P. Bogdanovich and R. Kisielius, ADNDT **115-116** 385 (2017).
- [2] R. Radtke, C. Biedermann, G. Fussmann, J.L. Schwob, P. Mandelbaum and R. Doron, Atomic and Plasma-Material Interaction Data for Fusion, vol. 13 (International Atomic Energy Agency, Vienna, 2007)
- [3] R. Radtke, C. Biedermann, J.L. Schwob, P. Mandelbaum and R. Doron, Phys. Rev. A **64** 012720 (2001).
- [4] C. S. Harte, C. Suzuki, T. Kato, H. A. Sakaue, D. Kato, K. Sato, N. Tamura, S. Sudo, R. D'Arcy, E. Sokell, J. White, G. O'Sullivan, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **43** 205004 (2010).