

Beräkningar av övergångar i atomära system

Karl Fogelmark

26 juni 2009

Sammanfattning

När vi har atomer med fler elektroner än en saknas en analytisk lösning. Dagens datorer är mycket väl lämpade för att använda Hartree-Focks metod för att effektivt lösa Schrödingerekvationen för flerelektronsystem. Datorprogrammen kan även korrigera för relativistiska effekter och konfigurationsväxelverkan. Ur datorsimuleringarna får vi elektronernas vågfunktioner, vilka vi har använt för att få en mängd olika data, så som: radien av elektronens bana, energinivå, skärmning från atomkärnan och hur de olika energinivåerna växelverkar med varandra.

Vi kan även simulera spridningsexperiment med ett annat program som använder R-matrismetoden, vilket är en metod för att förenkla problemet med växelverkan mellan den inkommande projektil-elektronen och den bundna. Vi får ur programmet information om tvärsnittet för reaktionen och färförskjutning av vågfunktionerna.

Som avslutande projekt har vi beräknat de olika elektromagnetiska övergångarna i helium och livstiden för de olika tillstånden.

1 Teori

1.1 Flerelektronsystem

Energinivåerna i väteatomen kan beräknas exakt i det icke-relativistiska fallet, eftersom det endast är ett tvåkropparsproblem. När man ökar antalet elektroner till två eller fler får vi följande Hamiltonoperator

$$H = \sum_{i=1}^N \left(-\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_i^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_i} \right) + \sum_{i<j=1}^N \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}}. \quad (1)$$

Till denna finns ingen exakt lösning, men man kan göra en rad approximationer. Eftersom elektronerna i fulla subskal har en sfärisk laddningsfördelning är det en god approximation att se huvuddelen av repulsionen mellan elektronerna som en centralpotential. Interaktionen mellan subskal och valenselektroner kan då approximeras med ett centralt potentialfält. De innanliggande elektronerna skärmar av den attraktiva potentialen från kärnan gentemot de yttre valenselektronerna, varför man kan beskriva potentialen för de yttersta elektronerna som kärnans laddning Z minus en avskärmningskonstant från de innanförliggande elektronerna.

1.2 Hartree-Fock

Hartree utvecklade 1928 en metod för att lösa flerelektronsystem. Den använder sig av centralfältsapproximationen, där man finner potentialen för i :te elektronen genom att beräkna laddningsfördelningen från de övriga elektronerna, vilket kan skrivas som

$$V_i(r_i) = \sum_{j \neq i} \int \frac{|u_j(r_j)|^2}{r_{ij}} dr_j \quad (2)$$

där $u_i(r_i)$ är ry addedelen av i :te elektronens vågfunktion [Hibbert]. Genom att skriva den totala vågfunktionen som en produkt av en-elektronfunktioner

$$\Psi = \phi_1 \phi_2 \dots \phi_N.$$

kan nu ekvation 1, bestående av N kopplade differentialekvationer, separeras till ett system av N stycken en-elektronekvationer, förutsatt att vi känner $V_i(r_i)$,

$$H = \sum_{i=1}^N \left(-\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_i^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_i} \right) + V_i(r_i). \quad (3)$$

Men vår produkt av en-elektronfunktioner är inte antisymmetrisk vid utbyte av en elektron mot en annan, vilket den måste vara för att uppfylla Paulis uteslutningsprincip, som säger att elektroner (och alla övriga fermioner) måste ha en unik uppsättning kvanttal. Detta innebär att de inte kan uppta samma punkt i rummet, vilket är ekvivalent med att vågfunktionen måste vara antisymmetrisk, så att $\Psi(r_1, m_1; r_2, m_2) = -\Psi(r_2, m_2; r_1, m_1)$, dvs. då $r_1 = r_2$ för två identiska partiklar och $m_1 = m_2$ (samma spinn) måste $\Psi = 0$ [Bengtsson 2005]. För att göra den ursprungliga symmetriska funktionen antisymmetrisk modifierade Fock denna till det man, sedan 30-talet, enklast beskriver med en Slaterdeterminant enligt [Foot 2005]:

$$\Psi(LS) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \phi_1(r_1) & \phi_1(r_2) & \phi_1(r_3) & \dots & \phi_1(r_N) \\ \phi_2(r_1) & \phi_2(r_2) & \phi_2(r_3) & \dots & \phi_2(r_N) \\ \phi_3(r_1) & \phi_3(r_2) & \phi_3(r_3) & \dots & \phi_3(r_N) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_N(r_1) & \phi_N(r_2) & \phi_N(r_3) & \dots & \phi_N(r_N) \end{vmatrix}.$$

Vi ser nu att vågfunktionen Ψ är antisymmetrisk vid utbyte av elektroner, eftersom determinanten byter tecken vid utbyte av kolonner eller rader med varandra. Även Pauliprincipen uppfylls eftersom determinanten blir lika med noll om två rader eller kolonner är lika [Cowan 1981].

Men för att lösa den separerade Schrödingerekvationen (3) måste vi först lösa ekvation 2 vilket kräver att vi måste bestämma var alla $N - 1$ elektroner befinner sig, det vill säga, vi måste känna deras vågfunktioner, och för att göra det måste vi känna potentialen; det är ett cirkelargument. En lösning är att använda detta cirkelresonemang genom att inledningsvis gissa en vågfunktion, till exempel kan man utgå från de analytiskt kända för väte, och sedan diagonalisera Hamiltonmatrisen för att lösa egenvärdesproblemet, och få ut nya vågfunktioner som vi kan använda för att få en ny bättre potential, och med denna göra om beräkningarna. Detta är grunden i Hartree-Fock metoden och det som våra program använder sig av. När resultaten konvergerar, dvs. man får ut samma vågfunktioner som man använde för att få potentialen (i ekv 2), vet man att lösningen är relativt korrekt [Thorne 2007].

1.3 Konfigurationsväxelverkan

Sedan tidigare har vi sett att varje elektron i en orbital definieras av kvanttalen n och ℓ , och kan kopplas ihop med de övriga elektronerna i atomen genom LS-koppling, förutsatt att spinban-växelverkan är mindre än växelverkan mellan elektronerna. Vi kan beskriva atomens egenskaper med en vågfunktion som är en linjärkombination av spin-orbitaler ($P_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \phi)$), som är separerad i en radialdel och en vinkeldel, där den sistnämnda är de kända klotytefunktionerna medan den radiella delen återstår för oss att bestämma, till exempel genom att använda Hartree-Fock metoden.

Men denna beskrivning av atomens elektronkonfiguration är inte helt korrekt. Vi kommer att se att då vi i våra simuleringar av atomerna använder vågfunktioner som är en blandning av olika elektronkonfigurationer kommer vi få ett resultat som bättre stämmer överens med verkligheten, för t.ex. energinivåerna. Detta innebär att vi, på grund av korrelationen mellan elektronerna, har en blandning av vågfunktioner för de olika konfigurationerna, speciellt för de exciterade, vars energinivåer överlappar. Denna konfigurationsväxelverkan borde leda till att man inte kan tillskriva varje egenfunktion Ψ_i , eller dess tillhörande energinivå E_i , till en specifik konfiguration given av en uppsättning nl och bestämda värden på L och S , men eftersom varje egenfunktion för en atom, fri från yttre påverkan, måste kunna beskrivas av ett specifikt J och en viss paritet, kommer konfigurationsblandningen endast att kunna ske mellan tillstånd av lika paritet och samma J , varför vi oftast kan använda konfigurationsnotationen till egenfunktionerna [Cowan 1981].

För att förstå detta kan vi vända oss till ett exempel från Hibberts skrift (se Referenser sid. 20), där vi tittar på grundtillståndet i He I som man oftast skriver som $1s^2 \ ^1S$ men vi kan koppla elektroner från andra orbitaler och få samma term, så länge $L = 0$. Detta är uppfyllt för alla $l_1 = l_2$, som till exempel $1s2s$, $2p3p$, osv. Därför kan man skriva vågfunktionen för $1s^2 \ ^1S$ som

$$\Psi(^1S) = c_1\phi_1(1s^2 \ ^1S) + c_2\phi_2(1s2s \ ^1S) + c_3\phi_3(2s^2 \ ^1S) + c_4\phi_4(2p^2 \ ^1S) + \dots \quad (4)$$

Där c_i är mixningskoefficienterna och ϕ_i är vågfunktionen för gällande konfiguration. Den resulterande atomära vågfunktionen Ψ kan skrivas mer generellt som

$$\Psi(LS) = \sum_{i=1}^M c_i\phi_i(\alpha_i LS) \quad (5)$$

där α_i är alla särskiljande egenskaper hos ϕ_i som inte inkluderas av LS , så att vi får ekvation 4.

Ett sätt att mäta konfigurationsblandningen är genom korrelationsenergin, vilket är skillnaden i energi när vi inkluderar fler konfigurationer i vår Hartree-Fock kod mot den faktiska energin, som vi kan få genom störningsräkning. Då man ökar antalet orbitaler (M i ekv. 5) ser man att korrelationsenergin E^{korr} minskar eftersom resultatet för HF-energin blir bättre; $E^{korr} = E^{exakt} - E^{HF}$.

Det kan nu vara intressant att få ett explicit uttryck för korrelationsenergin, vilket vi kan få genom att lösa egenvärdesekvationen för Hamiltonmatrisen

$$\begin{vmatrix} H_{11} - \Delta E & H_{12} \\ H_{21} & H_{22} - \Delta E \end{vmatrix} = 0 \rightarrow \Delta E \approx \frac{H_{12}^2}{H_{22} - H_{11}} \quad (6)$$

eftersom $H_{12} = H_{21}$.

1.4 Z -beroendet av atomernas energi

För att undersöka och förstå hur energin varierar med kärnans laddning (Z) börjar vi med att notera att vi kan bryta ut ett Z^2 ur Hamiltonoperatoren för ett tvåelektronsystem genom att göra variabelsubstitutionen $r_i = s_i/Z$, dvs.

$$H = \left(-\frac{\nabla_1^2}{2} - \frac{Z}{r_1} \right) + \left(-\frac{\nabla_2^2}{2} - \frac{Z}{r_2} \right) + \frac{1}{r_{12}} \Rightarrow$$

$$H = Z^2 \left[\left(-\frac{\nabla_1^2}{2} - \frac{1}{s_1} \right) + \left(-\frac{\nabla_2^2}{2} - \frac{1}{s_2} \right) + \frac{1}{Zs_{12}} \right]$$

skriver vi detta för ett allmänt system av N elektroner får vi

$$H = Z^2 \left[\sum_{i=1}^N \left(-\frac{\nabla_i^2}{2} - \frac{1}{s_i} \right) + \frac{1}{Z} \sum_{i<j} \frac{1}{s_{ij}} \right],$$

där vi kan identifiera $1/Z$ som en störningsparameter. Vi kan därför, inom störningsteoriens ramar, uttrycka energin enligt

$$E = Z^2 (E_0 + \lambda E_1 + \lambda^2 E_2 + \dots) = Z^2 \left(E_0 + \frac{1}{Z} E_1 + \frac{1}{Z^2} E_2 + \dots \right) \quad (7)$$

där $\lambda = 1/Z$, och E_0 är summan av energierna för vätes huvudkonfiguration. Från ekvation 7 kan vi göra följande slutsatser om energiskillnaden mellan olika nivåers Z -beroende:

- Vid övergångar mellan olika orbitaler (olika n , tex $1s^2 - 1s2p$) kommer E_0 för de olika nivåerna vara olika vilket leder till att $\Delta E \propto Z^2$.
- Vid övergångar mellan nivåer som har samma vätelika energinivåer (samma n , t.ex. $1s^2 2s^2 - 1s^2 2s 2p$) kommer E_0 ta ut varandra varför andra termen i ekvation 7 blir den dominerande, vilket leder till $\Delta E \propto Z$.

1.5 Övergångar mellan energinivåerna

Den viktigaste informationskällan vi har för att förstå atomernas inre struktur och den kvantmekanik som där råder, får vi genom att studera de fotoner som atomen sänder ut eller absorberar. Det är därför intressant att förstå mekaniken bakom dessa övergångar.

Vi kan skriva ett atomärt tillstånd som en linjärkombination av alla tillstånd den kan vara i:

$$\Psi = \sum_k c_k \psi_k.$$

Vi kan nu få sannolikheten för att den skall befinna sig i tillstånd ψ_f som $|c_f(t)|^2$. Löser man Schrödingers tidsberoende ekvation genom att använda tidsberoende störningsräkning på operatoren som kopplar ihop de två tillstånden, samt använder gränsvillkoret att $c_f(0) = 0$, får vi följande

$$|c_f|^2 = K(E_f - E_i) \langle \Psi_f | e^{i\vec{k}\vec{r}} \vec{p} \cdot \hat{e} | \Psi_i \rangle^2 t$$

där $K(E_f - E_i)$ beror på energiskillnaden mellan de två nivåerna. För att lösa denna ekvation kan vi Taylorutveckla exponenten och tillämpa dipolapproximationen, vi får

$$e^{i\vec{k}\vec{r}} = 1 + i\vec{k} \cdot \vec{r} + \frac{1}{2}(i\vec{k} \cdot \vec{r})^2 + \dots \quad (8)$$

Eftersom \vec{r} är avståndet mellan elektronen och atomen, samt att $\vec{k} = 2\pi/\lambda$, där $10 \text{ nm} < \lambda < 10000 \text{ nm}$, leder detta till att endast första termen blir kvar i utvecklingen. Från detta kan man, efter ett par steg till, få regler som måste vara uppfyllda för att en elektrisk dipolövergång skall vara möjlig. Eftersom operatören inte verkar på spinnet måste detta förbli oförändrat mellan $\Psi_i \rightarrow \Psi_f$, så att $\Delta S = 0$, dvs. inga övergångar mellan trippletter och singuletter är tillåtna. Vidare måste pariteten ändras, och det visar sig att denna inte får ändras med mer än 1, alltså $\Delta \ell = \pm 1$. Vi får också att

$$\begin{aligned} \Delta J &= 0, \pm 1 & \Delta L &= 0, \pm 1 \\ J = 0 &\nrightarrow 0 & L = 0 &\nrightarrow 0. \end{aligned}$$

Då spin-ban-växelverkan blir jämförbar i storlek med den elektrostatiska växelverkan mellan elektronerna kommer reglerna för S och L att tappa betydelse.

Det finns andra processer för atomen att byta tillstånd, utöver dipolövergångar (E1). När vi i ekvation 8 även tar med den andra termen kommer vi få två nya övergångsprocesser, nämligen magnetisk dipol (M1) och elektrisk kvadropol (E2). För dessa övergångar behöver inte pariteten ändras när atomen byter tillstånd, vilket möjliggör övergångar inom samma konfiguration [Thorne 2007]. Dock är dessa övergångar mycket svaga jämfört med dipolövergångarna. Detta kan vi tolka som en följd av hur det elektriska fältet förhåller sig till det magnetiska; $|E|/|B| = c$.

2 Datorsimulering

För att simulera atomerna använder vi MCHF-paketet, som använder sig av Hartree-Fock-metoden (Multi Configuration Hartree-Fock) för att generera vågfunktioner till orbitalerna. Programmet kan även korrigera för korrelations-effekter, relativistiska och nukleära effekter.

2.1 Korrelationsenergi för He I-lik joner

Genom att se den elektrostatiska växelverkan mellan elektronerna i ett två-elektronssystem som en störning kan vi använda de analytiska funktionerna för väteorbitalerna för att beskriva systemet och sedan genom störningsräkning få de olika energierna, $E_0, E_1, E_2 \dots$, osv. För He I-lik joner får vi med denna metod den totala (exakta) energin från ekvation 7:

$$E = Z^2 \left(-1 + 0,625Z^{-1} - 0,157666Z^{-2} + 0,008699Z^{-3} + \dots \right).$$

Vid tillämpning av perturbationsteori på Hartree-Fock-ekvationerna får man på ett liknande sätt följande resultat

$$E^{HF} = Z^2 \left(-1 + 0,625Z^{-1} - 0,00111003Z^{-2} + 0,001055Z^{-3} \dots \right).$$

Från detta definierar man korrelationsenergin som skillnaden mellan den exakta energin och Hartree-Fockenergin vilket leder till att de två första termerna tar ut varandra, och vi får nästan bara en konstant kvar,

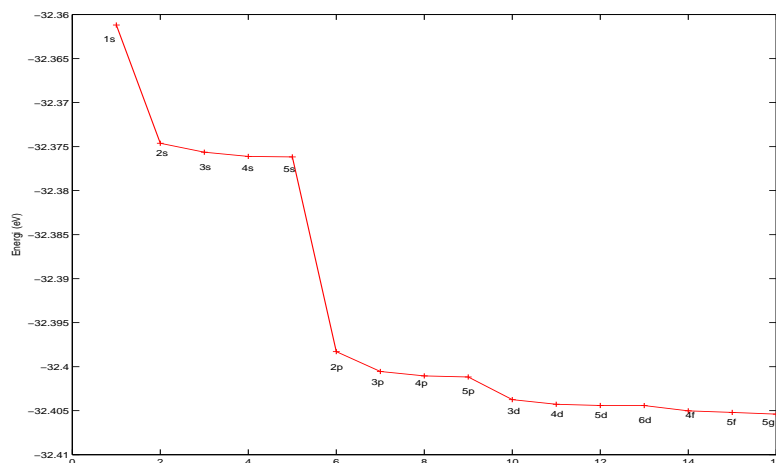
$$E^{korr} = E^{exakt} - E^{HF} = -0,046663 + 0,009754Z^{-1} + \dots$$

När vi går upp i Z kommer korrelationsenergin gå mot ett konstant värde [Handout2]. Detta kan vi se i resultatet från vår datorsimulering. Vi använde ett program som kan ses som en föregångare till MCHF, som heter CIV3. Med detta kunde vi förbättra energin genom att addera fler orbitaler. När vi sedan tog skillnaden mellan energin från CIV3 och E^{HF} fick vi värdena i tabell 1. Vi ser att dessa ligger mycket nära det väntade resultatet från korrelationsenergiekvationen ovan.

Jon	E^{korr}	Jon	E^{korr}
He I	-0,04156	N VI	-0,04441
Li II	-0,04282	O VII	-0,04444
Be III	-0,04350	F VIII	-0,04459
B IV	-0,04399	Ne IX	-0,04469
C V	-0,04421		

Tabell 1: Skillnaden i Hartree-Fockenergin och beräknad energi för He I-likajoner, efter att programmet hade inkluderat alla orbitaler ut till $5g$.

Vid körningen av programmet adderade vi en orbital i taget, upp till $n = 5$ för alla subskal till g -orbitalen. I figur 1 ser vi hur korrelationsenergin minskar för varje ny orbital i kol-jonen C V. Vi ser även hur energin minskar drastiskt varje gång vi inkluderar en ny partialvåg (ℓ -kvanttal), vilket innebär att vi har förbättrat vår modell avsevärt.

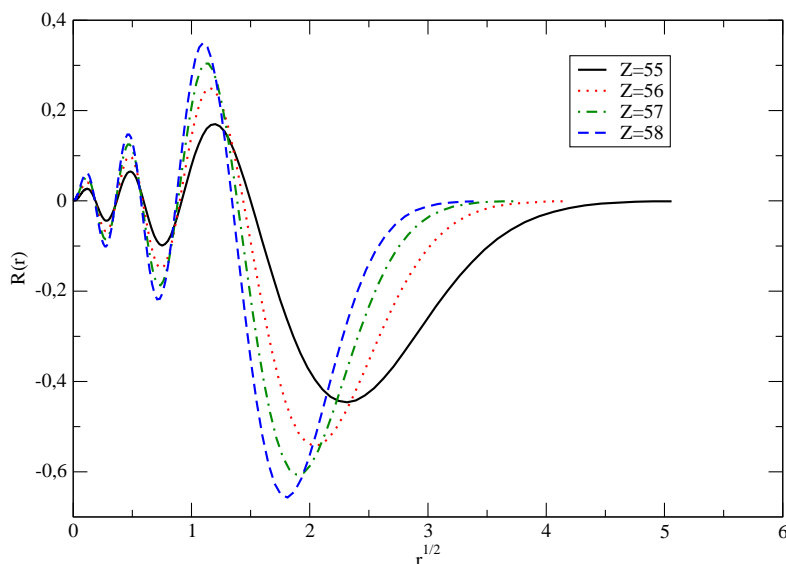


Figur 1: Korrelationsenergin då vi lägger till fler orbitaler för C V. Vi lägger till upp till $n = 5$, alltså först 1s,2s,3s,4s,5s, sedan 2p,3p,4p,5p, 3d,4d, osv.

2.2 Vågfunktionens kollaps

I figur 2 ser vi radialdelen av $6s$ -vågfunktionen för Cs I-liknande joner, med konfigurationen $5p^66s$, för olika Z , och som väntat har vi 6 noder, enligt regeln $n - \ell$. På grund av den attraktiva potentialen från atomen kommer $R(r)$ tryckas ihop mer mot denna, allt eftersom vi ökar Z .

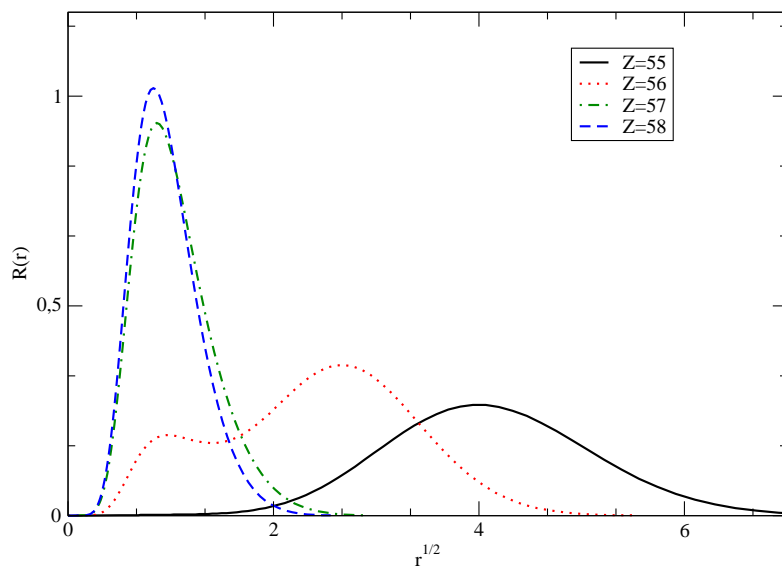
Radialdelen för $4f$ -elektronen i figur 3 har inte alls samma enhetliga utseende när vi ökar Z , med bibehållen elektronkonfiguration. Något som verkar förändras när vi går från $Z = 56$ (Ba II) till $Z = 57$ (La III). För att förstå detta undersöker vi hur radierna för $5p$ och $4f$ orbitalerna förändras med Z , vilket åskådliggörs i figur 4(a). Vi ser att då $Z = 57$ ligger $4f$ -orbitalen innanför $5p$ -elektronen. På grund av detta får vi även en nedgång i avskärmningen av atomkärnans potential, se figur 4(b).



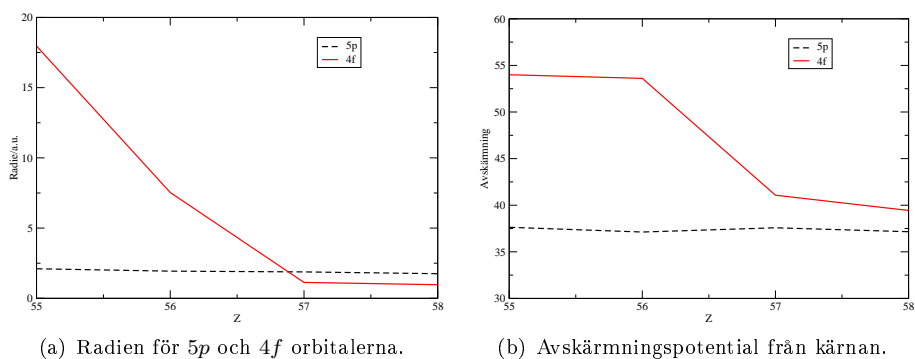
Figur 2: Radialdelen av vågfunktionen för $6s$ -elektronen i Cs I-liknande joner, i kvadratroten ur Bohrradien a_0 . På grund av den attraktiva potentialen kommer högre Z innebära att $R(r)$ trycks ihop mer mot kärnan.

2.3 Korrelationsenergin Z -beroende

Vi kan undersöka korrelationen mellan $2s^22p^2P$ och $2p^3^2P$ i B I-liknande joner genom att göra simuleringar av dessa med MCHF-sviten. När vi tar skillnaden i energinivåerna mellan första beräkningen, då vi endast inkluderade första konfigurationen, och andra körningen av programmet, då vi inkluderade båda konfigurationerna, se ekv. 9, får vi korrelationsenergin, ΔE , i figur 5(a). Från figuren ser vi att sambandet mellan ΔE och kärnladdningen Z är linjärt. Detta beror på att täljaren i ekvation 6 är proportionell mot Z^2 och eftersom E_0 i ekvation 7 för de två vätelika orbitalerna är de samma kommer energiskillnaden i nämnaren (i 6) att vara proportionell mot Z , som vi tidigare noterat på sidan 4.



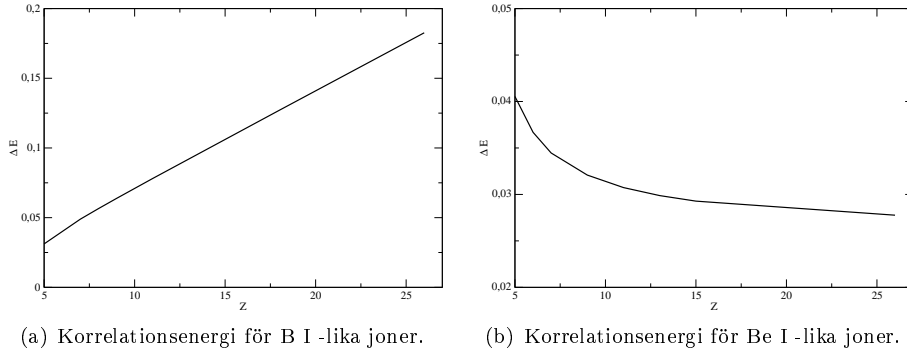
Figur 3: Radialdelen för $4f$ -elektronens vågfunktion i Cs I-likna joner. Vi ser att när vi går från $Z = 56$ till $Z = 57$ kollapsar funktionen in mot atomkärnan.



(a) Radien för $5p$ och $4f$ orbitalerna.

(b) Avskärmningspotential från kärnan.

Figur 4: Jämförelse mellan $5p$ och $4f$ orbitalerna. När vi går till $Z = 57$ kommer $4f$ orbitalen innanför $5p$, vilket leder till att avskärmningspotentialen för $4f$ sjunker kraftigt.



Figur 5: Korrelationsenergi för B I- och Be I-lika joner. Vi ser att för B I-lika har vi ett linjärt samband, medan vi för Be I får ett konstant värde för höga Z , men vid låga Z har vi för komplicerad elektronväxelverkan för vår modell, varför beteendet här avviker från det väntade.

På samma sätt kan vi nu undersöka korrelationsenergins Z -beroende i Be I-lika joner mellan $2p^2$ och $2s3d^1D$, se ekv. 10. Eftersom vi nu har två konfigurationer med olika väteenergier (E_0), kommer nämnaren i ekv. 6 att vara proportionell mot Z^2 , och hela uttrycket för korrelationsenergin kommer därför bli konstant. I figur 5(b) ser vi att resultatet från simuleringen inte följer det väntade sambandet för låga Z , eftersom dessa atomer inte är tillräckligt vätelika. När vi däremot ökar Z , men bibehåller samma elektronkonfiguration (Be I), kommer vi få ett allt mer planetsystemsliknande beteende, och som vi ser går korrelationsenergin mot en konstant för högre Z .

2.4 Korrelationskoefficienter

Från våra simuleringar av B I och Be I -lika joner får vi ut mixningskoefficienterna c_i i ekvation 5. I vårt fall har vi endast tagit med en extra orbital för de båda jonerna, får vi för B I:

$$\Psi_{BI} = c_1\phi(2s^22p^2P) + c_2\phi(2p^3^2P) \quad (9)$$

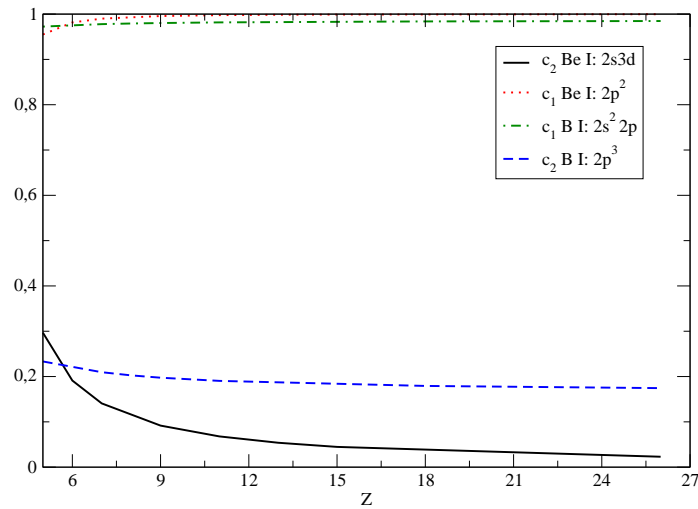
och för Be I får vi:

$$\Psi_{BeI} = c_1\phi(2p^2^1D) + c_2\phi(2s3d^1D). \quad (10)$$

Från andra ordningens utveckling av determinanten i ekvation 6 får vi sambandet mellan korrelationskoefficienterna och energin:

$$\frac{c_2}{c_1} \approx c_2 \approx \frac{H_{12}}{H_{22} - H_{11}} \quad (11)$$

eftersom $c_1 \approx 1$. Enligt samma resonemang som för korrelationsenergin väntar vi oss nu att c_2 minskar som $\frac{1}{Z}$ för Be I-lika joner, medan den går mot en konstant för de B I-lika jonerna, eftersom täljaren i ekvationen nu inte är i kvadrat. Från figur 6 ser vi att detta stämmer väl.



Figur 6: Korrelationskoefficienterna för Be I och B I-likajoner. Vi ser att bidraget från c_1 är mycket nära ett för båda jon-sekvenserna. I enlighet med teorin ser vi att korrelationseffekten för de Be I-likajonerna minskar för ökande Z enligt $c_2 \propto \frac{1}{Z}$, medan de för B I-likajonerna går mot ett konstant värde för höga Z .

3 R-matismetoden

En av de viktigaste metoder vi har för att experimentellt undersöka atomernas struktur och växelverkan är kollisionsprocesser. För att tolka resultatet från spridningsexperiment måste man ha en teoretisk modell mot vilken man kan jämföra resultaten. Vi begränsar oss framöver till att undersöka system där den inkommande projektil-elektronen träffar väteatomer, eller vätelika atomer. Det är dock enkelt att vidarutveckla fallet med en-elektronatomer till att omfatta flerelektronssystem.

Vid den teoretiska modellering av spridningsexperiment uppstår två beräkningskomplicerade moment då avståndet mellan den fria, inkommande elektronen, och den bundna minskar: dels kommer vågfunktionen för den bundna elektronen att förändras på grund av repulsionen mellan de två elektronerna, dels kommer elektronerna att bli o-urskiljbara. I R-matismetoden löser man dessa två problem genom att dela upp atomen i två regioner med en sfär med radien $r = a$, så att vågfunktionen för den bundna väte-elektronen försvinner då $r \geq a$. Innanför sfären har vi bundna, ortogonala, tillstånd som svarar mot 1s, 2s, 2p... i väte, vilka växelverkar kraftigt med den fria elektronen. I denna region använder vi ekvation 5 för att beskriva den bundna elektronen, eftersom vi har konfigurationsmixning. R-matismetoden beror kraftigt på valet av dessa bundna tillstånd.

I regionen utanför sfären beskrivs den fria elektronens radiella rörelse av kontinuumorbitaler som väljs så att de uppfyller en ekvation snarlik Besslekvationen (mer om detta i del 3.3). Man kan här bortse från utbytes effekter av de två elektronerna eftersom vågfunktionen för den bundna elektronen är helt innesluten av sfären.

R-matismetoden löser kopplade differentialekvationer i den yttre regionen

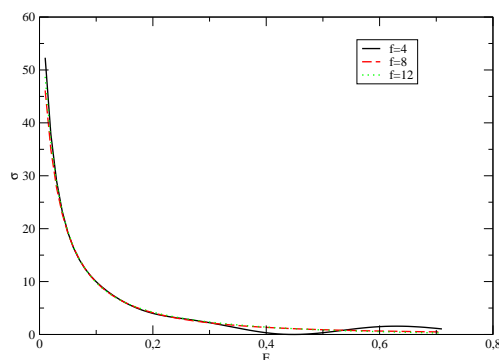
för varje kollisionsenergi. I den inre regionen reduceras problemet till att diagonalisera en $N+1$ Hamiltonmatris, oberoende av energin.

Vi har två program i R-matrisviten. Det första, **rmat**, räknar ut sfärens ytamplituder för R-matrisen från de utgångsvärdena man har i spridningssystemet. De värden man får ut från **rmat** används som in-värden för programmet **asym** som löser spridningsproblemet för den energin man vill studera utanför sfären och anpassar R-matrisen vid ytan vilket ger en reell så kallad K-matris, som vi kan använda för att beräkna en spridningsmatris S. Dessa två program använder vi för att få värden för fasförskjutning δ och tvärsnitt σ_{ij} , som kan ses som sannolikheten att en viss reaktion äger rum [Handout1].

3.1 Kollisionsprocesser och konvergens

När vi studerar kollisionsreaktioner talar vi om öppna och stängda kanaler. Då den inkommande elektronen har en energi högre än excitationenergin för ett visst tillstånd svarar detta mot en öppen kanal. Det innebär att kollisionsprocessen kan resultera i att väteelektronen exciteras hit. Ju högre energi den inkommande elektronen har desto fler öppna kanaler har vi. Även då energin för den inkommande elektronen är under det lägsta tröskelvärdet (för väte $E_i < 10,2$ eV), som svarar mot en excitation till $2s$, har vi en öppen kanal som svarar mot elastisk spridning [Dunseath 2009].

När kollisionsenergin är låg har vi störst tvärsnitt, eftersom elektronen då har tillräckligt lång tid på sig för att växelverka med atomen. Från figur 7 ser vi hur ökande kollisionsenergier ger lägre tvärsnitt. Vi ser även att tvärsnittet konvergerar ju fler kontinuumorbitaler vi inkluderar i beräkningarna. Då vi använder oss av fyra kontinuumorbitaler i yttre regionen ($r > a$) skiljer sig resultatet något från när vi har det dubbla. Att däremot öka antalet till tolv ger ingen förändring, det vill säga, resultatet har konvergerat, och vi kan nöja oss med att använda fler än fyra, men inte fler än åtta. För att få god konvergens är det viktigt att potentialen $V(r)$ som vi använder oss av är korrekt, samt att vi har valt våra bundna tillstånd på ett riktigt sätt.



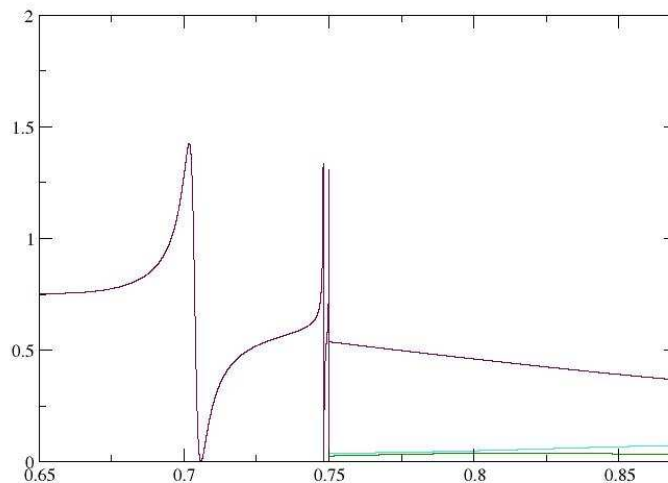
Figur 7: Tvärsnittet för olika energier, uträknat med tre olika antal kontinuumfunktioner ($f=4,8,12$). Vi ser att det inte är någon skillnad mellan $f=8$ och $f=12$ kontinuumfunktioner.

3.2 Tvärsnitt och resonans

När vi undersöker energi-intervallet $0,65 < E < 0,85$ får vi figur 8. Vi ser att tvärsnittet är konstant tills vi når den första resonansen vid $E = 0,7$ Ry (relativt grundtillståndet), då tvärsnittet ökar kraftigt, eftersom den inkommande elektronen nu fångas in i ett kvasi-bundet tillstånd av väteatomen som nu blir negativt joniserad (H^-). Vågfunktionen kan därför beskrivas som en linjärkombination av två tillstånd: den bundna $1s$ och den fria ks , samt fallet där den fria har blivit infångad av atomen,

$$\Psi = c_1|1sks\rangle + c_2|2s^2\rangle.$$

När vi ökar energin ytterligare, förbi $0,7$ Ry, kommer en av koefficienterna c_i att byta tecken och vi får destruktiv interferens, vilket leder till ett oscillerande beteende, som vi kan se ur figur 8. Processen upprepas då vi når den andra resonansen strax innan $0,75$ Ry. Här ligger tillstånden tätare, vilket leder till att resonanstopparna ligger närmre varandra. Efter $E = 0,75$ Ry har vi passerat $H^-(2s, 2p)$ varefter det inte finns några fler orbitaler, varför tvärsnittet fortsätter att avta med ökande kollisionensenergi. Men vid $E = 0,75$ Ry ser vi två nya kurvor, som uppstår eftersom vi har passerat excitationnivån för $H^-(2s, 2p)$, så att två tidigare stängda kanaler öppnas, nämligen excitation svarande mot $1s \rightarrow 2s$ samt $1s \rightarrow 2p$.



Figur 8: Tvärsnittets beroende av energin, i Ry relativt grundtillståndet. Vi ser de två resonanserna vid $0,7$ och $0,75$ Ry som kraftiga toppar, följda av dalar som uppstår på grund av interferens.

3.3 Färförskjutning

På stora avstånd från väteatomens potential kan vi beskriva projektil-elektronen som en linjärkombination av en plan våg (e^{ikr}), som svarar mot ingen interaktion, samt en sfärisk ($r^{-1}e^{ikr}$), som svarar mot en spridd partikel. Med dessa krav, då $r \rightarrow \infty$, kan, som visas i Dunseath, vågfunktionen av en spridd partikel skrivas

$$\phi(r) = \sum_{\ell m} c_{\ell m} R_{\ell}(r) Y_{\ell m}$$

där $Y_{\ell m}$ är de kända klotyttefunktionerna och det som återstår att lösa är radialdelen. Då vi inte har någon potential, dvs, partikeln är fri, blir Schrödinger-ekvationen för radialdelen

$$\left(\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{d}{d\rho} - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} + 1 \right) R_{\ell}(\rho) = 0$$

där $\rho = kr$. Till denna ekvation finns två lösningar; de sfäriska Besselfunktionerna ($j_{\ell}(\rho)$) för den reguljära, samt de sfäriska Neumanfunktionerna ($n_{\ell}(\rho)$) till de irreguljära lösningarna. Vid stora avstånd kan dessa två funktioner skrivas som

$$j_{\ell}(\rho) = \lim_{\rho \rightarrow \infty} \frac{1}{\rho} \sin(\rho - \ell\pi/2)$$

$$n_{\ell}(\rho) = \lim_{\rho \rightarrow \infty} -\frac{1}{\rho} \cos(\rho - \ell\pi/2).$$

Radialdelen av vågfunktionen för en partikel som växelverkar med potentialen $V(r)$ från en atom kan, för stora r , skrivas som en linjärkombination av de sfäriska Bessel och Neumanfunktionerna. Vi får i den yttre regionen

$$R_{\ell}(r) = \lim_{r \rightarrow \infty} A_{\ell} j_{\ell}(kr) + B_{\ell} n_{\ell}(kr) = \tag{12}$$

$$\frac{1}{kr} \left(A_{\ell} \sin(kr - \ell\pi/2) - B_{\ell} \cos(kr - \ell\pi/2) \right).$$

Genom att välja koefficienterna A_{ℓ} , B_{ℓ} så att

$$A_{\ell} = c_{\ell} \cos \delta_{\ell} \quad B_{\ell} = c_{\ell} \sin \delta_{\ell}$$

får vi

$$R_{\ell}(r) = \lim_{r \rightarrow \infty} \frac{c_{\ell}}{kr} \sin(kr - \ell\pi/2 + \delta_{\ell})$$

där färförskjutningen δ_{ℓ} ger ett mått på styrkan av växelverkanspotentialen. När $V(r) > 0$ kommer vågfunktionen, på grund av den repulsiva potentialen, att förskjutas bort från atomen. På motsvarande sätt kommer en attraktiv potential, $V(r) < 0$, att färförskjuta vågfunktionen in mot atomen.

På grund av vårt val av koefficienterna A_{ℓ} och B_{ℓ} kommer dessa att förhålla sig till varandra som $\tan \delta_{\ell} = -B_{\ell}/A_{\ell}$, alltså kan vi för stora r skriva ekvation 12 som

$$R_{\ell}(r) = A_{\ell} \left(j_{\ell}(kr) - \tan(\delta_{\ell}) n_{\ell}(kr) \right).$$

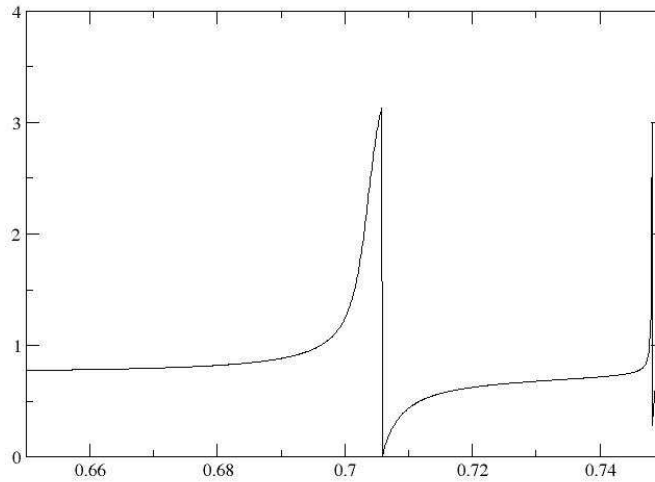
Genom att sedan approximera potentialen från atomen till en lådpotential ($V(r) = 0$ då $r > a$) och kräva kontinuitet vid gränsen $r = a$ får vi med hjälp av föregående ekvation

$$\gamma_{\ell} = \frac{R'(a)}{R(a)} \rightarrow \tan \delta_{\ell} = \frac{kj'_{\ell}(ka) - \gamma_{\ell} j_{\ell}(ka)}{kn'_{\ell}(ka) - \gamma_{\ell} n_{\ell}(ka)}$$

vilket efter en del räkningar ger oss den så kallade Breit-Wigner-ekvationen

$$\tan \delta = \frac{\Gamma(E)/2}{E_r - E} \quad (13)$$

där $\Gamma(E)$ är vidden av resonansen och E är energin för projektilen. När vi gradvis ökar kollisionsenergin E kommer tan-funktionen snabbt att gå mot oändligheten, vilket svarar mot en fas $\delta = \pi/2$. När sedan $E > E_r$ kommer fasan att vara nära $\delta = -\pi/2$. Vi kan alltså vänta oss en kraftig förskjutning av fasan med π vid resonansenergin E_r , se figur 9.



Figur 9: Färförskjutningen framställd med R-matrismetoden. Vi ser den kraftiga färförskjutningen vid $E_r = 0,7$ Ry. På grund av programets begränsning börjar fasan felaktigt om från noll, eftersom det är en tan-funktion. Egentligen skall funktionen se ut som en trappa.

3.4 Tidsfördröjning

Vi har nu sett att vid vissa energier får vi resonanser. För att förstå varför vi tolkar dessa som bundna tillstånd, kan vi undersöka distributionen av rörelsemängden, k , för $R(r, t)$, då $r \rightarrow \infty$. I Dunseath visas att man kommer se punkter där genomsnittet av den oscillerande distributionen av rörelsemängden inte är identiskt lika med noll, utan på vissa ställen oscillerar långsammare. Vid dessa punkter uppstår det en tidsfördröjning, τ , för de inkommande och de utgående vågpaketet, som kan beskrivas av

$$\tau \propto \frac{d\delta_\ell}{dk}.$$

När fasan förändras snabbt, vilket ekvation 13 visar att den gör vid resonanser, kommer tidsfördröjningen mellan det inkommande och utgående vågpaketet att

öka, vilket ger ett kvasi-bundet tillstånd. Vi kan tolka detta som att då elektronens energi (E_r) är lägre än potentialbarriärens höjd, fångas denna in, men på grund av elektronens möjlighet att tunnla genom barriären får vi inget riktigt bundet tillstånd.

4 Övergångar i He I

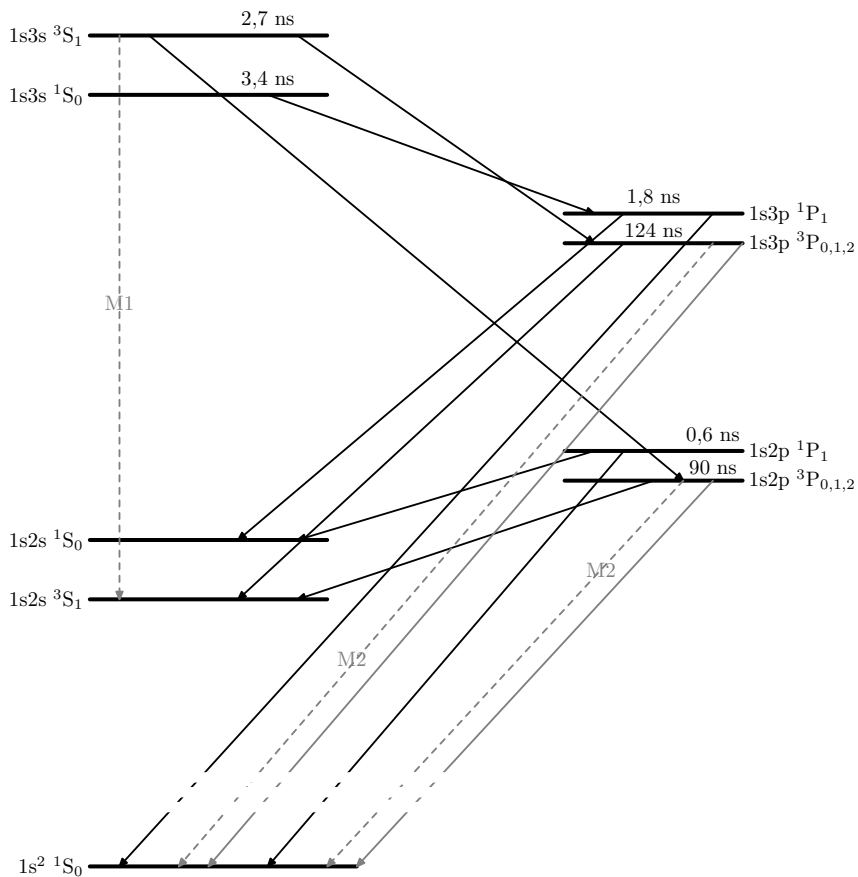
Som avslutande projekt har vi studerat på övergångarna i neutralt helium. För att göra detta använde vi MCHF-paketet, med vilken vi räknade ut de individuella energinivåerna, och när vi väl hade vågfunktionerna kunde vi få värden för övergångarna mellan de olika nivåerna. Vi får från programmet övergångssannolikheten för de möjliga övergångarna, se tabell 3 sid. 19.

Ur figur 4 (s. 16) ser vi energinivåerna i He I och de dominerande de-excitationsprocesserna, som alla är dipolövergångar. Vi börjar med att undersöka den översta nivån, $1s3s^3S$, som i huvudsak går till $1s2p^3P_{2,1}$ men även till $1s3p^3P_{2,1}$. Från denna term har vi den starkaste dipolmagnetiska övergången, som går till den underliggande trippletten. Genom att summera övergångssannolikheten för alla sätt nivån kan sönderfalla på och sedan invertera summa får vi livstiden för tillståndet, som i detta fall är 2,7 ns. Singulettermen i denna konfiguration har en liknande livstid och sönderfaller i princip uteslutande via de två 1P -termerna. Därifrån går den dominerande dipol-excitationsprocessen ner till grundtillståndet, men även till singulettermen ovanför denna, $1s2s^1S$. Livstiden för den översta 3P -termen är endast 1,8 ns, vilket dels beror på den starka kopplingen till grundtillståndet, men vi har även deexcitation via det elektriska kvadropolmomentet, mellan de båda P-singulettarna. I tabell 3 ser vi att E2 är 7 magnituder lägre än E1.

Båda våra 3P -termer sönderfaller huvudsakligen till den lägre liggande $1s2s^3S$, helt enligt reglerna för dipolövergångar. Hos dessa trippletter finner vi en magnetisk kvadropolövergång, ner till grundtillståndet, men denna är 8 magnituder svagare än den dominerande elektriska dipolövergången. Vi ser även att livstiden för trippletterna är avsevärt längre, 124 ns för den över och 90 ns för den nedre.

På grund av relativistiska effekter mixas 3P -termerna med deras respektive singuletter, vilket möjliggör spin-förbjudna dipolövergångar (E1), så som $1s2p^1P$ och $1s3p^1P$ till $1s2s^3S$. Dessa är 9 storleksordningar lägre än de tillåtna vilket tyder på att mixningen mellan termerna finns där, men är liten. Om vi tittar på det omvända, dvs. spinförbjudna dipolövergångar från 3P till 1S ser vi att $1s3p^3P$ till grundtillståndet endast är 5 magnituder svagare än den kraftigaste, tillåtna, till $1s2s^3S$. Ur tabell 3 ser vi samma sak för $1s2p^3P$ till grundtillståndet, även denna är 5 storleksordningar svagare än den dominerande. Övergångar som möjliggörs av mixningen av termer på detta sätt, där $\Delta S \neq 0$ kallas spinförbjudna, och linjerna de ger upphov till i spektrum kallas för interkombinationslinjer. Dessa linjer är tydligast i interstellära nebulosor där densiteten är för låg för att möjliggöra deexcitation från metastabila tillstånd via kollisioner, varför dessa mer osannolika processer blir dominerande.

När vi kommit till $1s2s$ konfigurationen finns inga elektromagnetiska övergångar ner till grundtillståndet, varken för trippletten eller singulettens, varför deexcitationer måste finna andra processer, så som tvåfotons-deexcitation, eller kollisionsprocesser. Alltså utgör $1s2s$ konfigurationen ett metastabilt tillstånd.



Figur 10: De starkaste övergångarna i He I. Notera att energiskala är bruten, varför grundtillståndet verkar ligga närmre de övriga än den egentligen gör. Övergångar med hög sannolikhet är markerade med svart pil, interkombinationslinjer med grå pil, och svaga magnetiska övergångar är markerade med streckad grå pil. De individuella energinivåerna för olika J i tripletterna är dragna som en linje, för detaljer hänvisas till text eller tabell 3. De flesta värden är de samma för de olika J -nivåerna i varje tripplet.

4.1 Beräknad livstid jämfört mot experimentella värden

För att se hur bra våra beräkningar är jämför vi våra värden för livstiden för de olika energinivåerna i helium mot experimentellt uppmätta värden. För översta $1,3P$ termerna är den uppmätta livstiden $1,65 \pm 0,11$ respektive $99,4 \pm 4,2$ ns [Wedding 1990], vilket stämmer någorlunda överens med våra beräknade värden på $1,8$ respektive 124 ns.

Skillnaden mellan uppmätt och beräknat värde för de underliggande $1s2p^{1,3}P$ termerna är ännu mindre, med experimentellt värde på $0,56 \pm 0,014$ [Zitnik 2003] respektive $99,0$ ns [Landman 1968], vilket ligger nära våra värden som var $0,58$ ns, respektive $91,7$ ns.

Värre är det för $1s3s^{1,3}S$ termerna, där singulettens har en livstid på $54,5 \pm 0,8$ ns [Khayrallah 1978], och tripplettens är $35,27 \pm 0,24$ ns [Schmoranzner 1990]. Våra värden för dessa nivåer var $3,42$ ns (1S) och $2,74$ ns (3S), se tabell 2.

Att genomföra beräkningarna som resulterade i våra värden var en komplicerad process vilket tog oss en vecka att genomföra. Det involverade körning av många olika program för att beräkna varje enskild energinivå, sedan skulle man flytta runt filerna som programmen skapade och byta namn på dessa och för att sedan låta nya program beräkna övergångstyrkan. Man var tvungen att lägga rätt filer i rätt mappar så att programmen vi använde hade rätt ingångsvärden. Eftersom det lätt kan uppstå fel i något av alla dessa led kan vi misstänka att felet i $3^{1,2}S$ härstammar härifrån. I tabell 2 ser vi att även energinivåerna för de två termerna skiljer sig kraftigt från experimentella mätningar [NIST]. Därför gör vi om beräkningarna för $1s3s$ igen och precis som tidigare inkluderar vi relativistiska effekter. Vi får nu nya energinivåer för båda $1,3S$ termerna, vilka är $-2,06867173$ hartree för 3S och $-2,061269731$ hartree, relativt joniseringsgränsen, för 1S vilket nu stämmer nära överens med de experimentellt bestämda nivåerna i tabell 2. På grund av tidsbrist och den väldigt invecklade körningen av programmen hinner vi tyvärr inte göra om övergångsberäkningarna med dessa nya energinivåer för att verkligen verifiera att vi får rätt hela vägen till slutet.¹

¹Felet i energin för $1s3s^3S$ uppstod förmodligen på grund av något fel i input data, eftersom det blev rätt när vi gjorde om beräkningarna. För att däremot få det nya värdet för $1s3s^1S$, måste man ändra vår vanliga lösningsgång, som byggde på att man använde vågfunktionerna från de tidigare beräkningarna för att få dem ortogonala mot varandra, så att man använder lösningen från $1s2s^1S$ för att få $1s3s^1S$. Eftersom $1s2s$ vågfunktionerna redan är optimerade använder man MCHF-paketet för att endast optimera de nya orbitalerna. Det var detta som gav oss det felaktiga värdet för 1S , däremot om man låter MCHF-paketet variera alla orbitalerna, även de man ortogonaliserar mot, får vi det nya värdet som bättre stämmer överens mot de experimentella värdena i NIST-databasen.

Nivå	Livstid (ns)		Energivåer (hartree)	
	Exp.	Beräknad	Exp.	Beräknad
$1s3p\ ^1P_1$	1,81	1,65	-2,053361832	-2,054781347
$1s3p\ ^3P_0$	124,38	99,4	-2,056298438	-2,054781347
$1s3p\ ^3P_1$	124,22	99,4	-2,056299672	-2,054781347
$1s3p\ ^3P_2$	124,22	99,4	-2,056299770	-2,054781347
$1s3s\ ^1S_0$	3,42	35,5	-2,059487985	-2,015696747
$1s3s\ ^3S_1$	2,74	54,5	-2,066905870	-1,990458949
$1s2p\ ^1P_1$	0,58	0,56	-2,122046163	-2,123285078
$1s2p\ ^3P_0$	91,7	99,0	-2,131373282	-2,132494897
$1s2p\ ^3P_1$	91,7	99,0	-2,131377782	-2,132494897
$1s2p\ ^3P_2$	91,7	99,0	-2,131378131	-2,132494897
$1s2s\ ^1S_0$		∞	-2,144178364	-2,144969136
$1s2s\ ^3S_1$		∞	-2,173436715	-2,175156235

Tabell 2: Jämförelse mellan våra beräknade livstider och energinivåer mot experimentellt uppmätta. Grundnivån har uteslutits eftersom vi har valt denna som utgångspunkt för att jämföra våra beräknade energinivåer (relativt joniseringsgränsen) med de experimentella energierna (relativt grundnivån).

Bilaga

Övergång från	Övergång till	EM-operator	E (cm^{-1})	Våglängd (Å)	Övergångar per sek	Livstid (ns)
$1s3s\ ^1S_0$	$1s3p\ ^1P_1$	E1	8588,3	11640,6	$1,82 \cdot 10^8$	3,42
$1s3s\ ^1S_0$	$1s2p\ ^1P_1$	E1	23621,2	4232,3	$1,10 \cdot 10^8$	3,42
$1s3s\ ^1S_0$	$1s3p\ ^3P_1$	E1	9212,6	10851,7	14,4	3,42
$1s3s\ ^1S_0$	$1s2p\ ^3P_1$	E1	25591,2	3906,5	6,71	3,42
$1s3s\ ^1S_0$	$1s2p\ ^3P_2$	M2	25591,3	3906,5	$3,45 \cdot 10^{-4}$	3,42
$1s3s\ ^1S_0$	$1s3p\ ^3P_2$	M2	9212,6	10851,7	$1,35 \cdot 10^{-4}$	3,42
$1s3s\ ^3S_1$	$1s2p\ ^3P_2$	E1	31110,8	3213,4	$1,35 \cdot 10^8$	2,74
$1s3s\ ^3S_1$	$1s2p\ ^3P_1$	E1	31110,7	3213,4	$8,09 \cdot 10^7$	2,74
$1s3s\ ^3S_1$	$1s3p\ ^3P_2$	E1	14732,1	6786	$6,82 \cdot 10^7$	2,74
$1s3s\ ^3S_1$	$1s3p\ ^3P_1$	E1	14732,1	6786	$4,09 \cdot 10^7$	2,74
$1s3s\ ^3S_1$	$1s2p\ ^3P_0$	E1	31109,7	3213,5	$2,70 \cdot 10^7$	2,74
$1s3s\ ^3S_1$	$1s3p\ ^3P_0$	E1	14731,8	6786,2	$1,36 \cdot 10^7$	2,74
$1s3s\ ^3S_1$	$1s2s\ ^3S_1$	M1	40525,2	2466,9	90,9	2,74
$1s3s\ ^3S_1$	$1s2p\ ^1P_1$	E1	29140,7	3430,6	7,71	2,74
$1s3s\ ^3S_1$	$1s3p\ ^1P_1$	E1	14107,8	7086,3	1,94	2,74
$1s3s\ ^3S_1$	$1s2p\ ^3P_2$	M2	31110,8	3213,4	$8,64 \cdot 10^{-4}$	2,74
$1s3s\ ^3S_1$	$1s2p\ ^1P_1$	M2	29140,7	3430,6	$6,5 \cdot 10^{-4}$	2,74
$1s3s\ ^3S_1$	$1s2p\ ^3P_1$	M2	31110,7	3213,4	$2,88 \cdot 10^{-4}$	2,74
$1s3s\ ^3S_1$	$1s3p\ ^3P_2$	M2	14732,1	6786	$9,8 \cdot 10^{-5}$	2,74
$1s3s\ ^3S_1$	$1s3p\ ^1P_1$	M2	14107,8	7086,3	$4,08 \cdot 10^{-5}$	2,74
$1s3s\ ^3S_1$	$1s3p\ ^3P_1$	M2	14732,1	6786	$3,26 \cdot 10^{-5}$	2,74
$1s3p\ ^1P_1$	$1s2\ ^1S_0$	E1	185868,8	538	$5,44 \cdot 10^8$	1,81
$1s3p\ ^1P_1$	$1s2s\ ^1S_0$	E1	19791,2	5051,4	$7,1 \cdot 10^6$	1,81
$1s3p\ ^1P_1$	$1s2p\ ^1P_1$	E2	15032,9	6650,3	22,7	1,81
$1s3p\ ^1P_1$	$1s2s\ ^3S_1$	E1	26417,4	3784,3	$1,87 \cdot 10^{-1}$	1,81
$1s3p\ ^1P_1$	$1s2p\ ^1P_1$	M1	15032,9	6650,3	$7,76 \cdot 10^{-3}$	1,81
$1s3p\ ^1P_1$	$1s2s\ ^3S_1$	M2	26417,4	3784,3	$9,56 \cdot 10^{-6}$	1,81
$1s3p\ ^1P_1$	$1s2p\ ^3P_1$	E2	17002,9	5879,7	$4,6 \cdot 10^{-6}$	1,81
$1s3p\ ^1P_1$	$1s2p\ ^3P_2$	E2	17003,1	5879,7	$1,31 \cdot 10^{-6}$	1,81
$1s3p\ ^1P_1$	$1s2p\ ^3P_2$	M1	17003,1	5879,7	$2,46 \cdot 10^{-8}$	1,81
$1s3p\ ^1P_1$	$1s2p\ ^3P_0$	M1	17001,9	5880,1	$1,97 \cdot 10^{-8}$	1,81
$1s3p\ ^1P_1$	$1s2p\ ^3P_1$	M1	17002,9	5879,7	$7,61 \cdot 10^{-9}$	1,81
$1s3p\ ^1P_1$	$1s2p\ ^3P_2$	M3	17003,1	5879,7	$5,64 \cdot 10^{-11}$	1,81
$1s3p\ ^3P_2$	$1s2s\ ^3S_1$	E1	25793,1	3875,9	$8,05 \cdot 10^6$	124
$1s3p\ ^3P_2$	$1s2p\ ^3P_1$	E2	16378,6	6103,9	12,4	124
$1s3p\ ^3P_2$	$1s2p\ ^3P_2$	E2	16378,7	6103,8	9,66	124

Övergång från	Övergång till	EM- operator	E (cm ⁻¹)	Våglängd (Å)	Övergångar per sek	Livstid (ns)
1s3p ³ P ₂	1s2p ³ P ₀	E2	16377,5	6104,2	5,52	124
1s3p ³ P ₂	1s ² ¹ S ₀	M2	185244,5	539,8	1,09·10 ⁻¹	124
1s3p ³ P ₂	1s2p ³ P ₂	M1	16378,7	6103,8	2,73·10 ⁻²	124
1s3p ³ P ₂	1s2p ³ P ₁	M1	16378,6	6103,9	1,01·10 ⁻³	124
1s3p ³ P ₂	1s2s ³ S ₁	M2	25793,1	3875,9	3,55·10 ⁻⁵	124
1s3p ³ P ₂	1s2s ¹ S ₀	M2	19166,8	5215,9	2,22·10 ⁻⁵	124
1s3p ³ P ₂	1s2p ¹ P ₁	E2	14408,5	6938,4	7,73·10 ⁻⁷	124
1s3p ³ P ₂	1s2p ¹ P ₁	M1	14408,5	6938,4	8,92·10 ⁻⁹	124
1s3p ³ P ₂	1s2p ³ P ₂	M3	16378,7	6103,8	3,49·10 ⁻¹¹	124
1s3p ³ P ₂	1s2p ¹ P ₁	M3	14408,5	6938,4	2,3·10 ⁻¹¹	124
1s3p ³ P ₂	1s2p ³ P ₁	M3	16378,6	6103,9	1,74·10 ⁻¹¹	124
1s3p ³ P ₁	1s2s ³ S ₁	E1	25793,2	3875,9	8,05·10 ⁶	124
1s3p ³ P ₁	1s ² ¹ S ₀	E1	185244,5	539,8	44,2	124
1s3p ³ P ₁	1s2p ³ P ₂	E2	16378,8	6103,8	20,7	124
1s3p ³ P ₁	1s2p ³ P ₁	E2	16378,6	6103,8	6,9	124
1s3p ³ P ₁	1s2s ¹ S ₀	E1	19166,9	5215,9	8,73·10 ⁻¹	124
1s3p ³ P ₁	1s2p ³ P ₁	M1	16378,6	6103,8	9,11·10 ⁻³	124
1s3p ³ P ₁	1s2p ³ P ₂	M1	16378,8	6103,8	1,69·10 ⁻³	124
1s3p ³ P ₁	1s2p ³ P ₀	M1	16377,6	6104,2	1,33·10 ⁻³	124
1s3p ³ P ₁	1s2s ³ S ₁	M2	25793,2	3875,9	1,97·10 ⁻⁵	124
1s3p ³ P ₁	1s2p ¹ P ₁	E2	14408,6	6938,4	3,6·10 ⁻⁶	124
1s3p ³ P ₁	1s2p ¹ P ₁	M1	14408,6	6938,4	5,96·10 ⁻⁹	124
1s3p ³ P ₁	1s2p ³ P ₂	M3	16378,8	6103,8	2,9·10 ⁻¹¹	124
1s3p ³ P ₀	1s2s ³ S ₁	E1	25793,4	3875,9	8,04·10 ⁶	124
1s3p ³ P ₀	1s2p ³ P ₂	E2	16379,1	6103,7	27,6	124
1s3p ³ P ₀	1s2p ³ P ₁	M1	16378,9	6103,7	4,1·10 ⁻³	124
1s3p ³ P ₀	1s2p ¹ P ₁	M1	14408,9	6938,3	3,57·10 ⁻⁸	124
1s2p ¹ P ₁	1s ² ¹ S ₀	E1	170836	585,4	1,72·10 ⁹	0,58
1s2p ¹ P ₁	1s2s ¹ S ₀	E1	4758,3	21010,1	1,78·10 ⁶	0,58
1s2p ¹ P ₁	1s2s ³ S ₁	E1	11384,6	8781,4	1,64	0,58
1s2p ¹ P ₁	1s2s ³ S ₁	M2	11384,6	8781,4	2·10 ⁻⁵	0,58
1s2p ³ P ₂	1s2s ³ S ₁	E1	9414,4	10619,1	1,09·10 ⁷	91,7
1s2p ³ P ₂	1s ² ¹ S ₀	M2	168865,8	592,2	3,11·10 ⁻¹	91,7
1s2p ³ P ₂	1s2s ³ S ₁	M2	9414,4	10619,1	6,42·10 ⁻⁶	91,7
1s2p ³ P ₂	1s2s ¹ S ₀	M2	2788,1	35856,6	1,12·10 ⁻⁸	91,7
1s2p ³ P ₁	1s2s ³ S ₁	E1	9414,5	10619	1,09·10 ⁷	91,7
1s2p ³ P ₁	1s ² ¹ S ₀	E1	168865,9	592,2	1,77·10 ²	91,7
1s2p ³ P ₁	1s2s ¹ S ₀	E1	2788,3	35854,9	2,64·10 ⁻²	91,7
1s2p ³ P ₁	1s2s ³ S ₁	M2	9414,5	10619	3,56·10 ⁻⁶	91,7
1s2p ³ P ₀	1s2s ³ S ₁	E1	9415,6	10617,8	1,09·10 ⁷	91,7

Tabell 3: Resultatet av MCHF-paketets beräkningar för övergångar mellan de olika energinivåerna. Tittar vi närmare ser vi mixningen mellan ³P och ¹P.

Referenser

- [Thorne 2007] "Spectrophysics, Principles and Applications" Anne P. Thorne, Ulf Litzén, Sveneric Johansson, Media-Tryck Lund, (2007).
- [Foot 2005] "Atomic Physics" Christopher J. Foot, Oxford University Press (2005).
- [Bengtsson 2005] "Bengtsson om statistisk fysik" Hans-Uno Bengtsson, KFS AB Lund (2005).
- [Dunseath 2009] "Electron - Atom Scattering" Kevin Dunseath, Mariko Dunseath-Terao.
- [Hibbert] "Computational Atomic Physics, Electron and Positron Collisions with Atoms and Ions" Klaus Bartschat (Editor), Alan Hibbert, Springer (1996).
- [Cowan 1981] "The Theory of Atomic Structure and Atomic Spectra" R.D. Cowan, University of California Press, Berkeley (1981).
- [Handout 1] "EU Socrates Intensive Programme, Introduction to R-matrix theory in atomic physics".
- [Handout 2] "Perturbation Expansions in Z^{-1} " Alan Hibbert.
- [Zitnik 2003] "Lifetimes of n^1P states in helium" M Zitnik, A Stanic, K Bucar, J G Lambourne, F Penent, R I Hall och P Lablanquie J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 36 (2003) 4175-4189
- [Khayrallah 1978] "adiative lifetime measurement of the 3^1S , 3^1D , 4^1D , 4^1F , and 5^1F excited states of helium" George A. Khayrallah och S. J. Smith, Physical Review A, vol 18, nr. 2, aug. (1978).
- [Landman 1968] "Lifetimes and Alignment Depolarization Cross Sections of the $(3p^54p)^3D_3$ and 1D_2 Levels in Argon and the $(1s2p)^3P$ Term in Helium*" Donald A. Landman, The Physical Review nr 173.
- [Schmoranzer 1990] "Radiative lifetimes of He I 3^3S_1 and 3^3D_J by beam-gas dye-laser spectroscopy" H. Schmoranzer, H. Roth, U. Volz och D. Marger, J- Phys. B. at. Mol. Opt. Phys. 24 (1991) 595-604.
- [Wedding 1990] "Lifetimes of the $3^1,^3P$ and $3^1,^3D$ states of Helium" A.B. Wedding, A.G. Mikosza och J.F. Williams, Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena, 52 (1990) 689-696.
- [NIST] NIST Atomic Spectra Database (3.1.5), [Online]. Tillgänglig: <http://physics.nist.gov/asd3> [20090609]. National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD. Ralchenko, Yu., Kramida, A.E., Reader, J., och NIST ASD Team (2008).