

Министерство вношего и ореднего специального образования Латвийской ССР

Латвийский ордена Трудового Красного Знамени государотвенный университет имени Петра Стучки Проблемная лаборатория спектроскопии

## ПРОЦЕССЫ ПЕРЕНОСА ЭНЕРТИИ В ПАРАХ МЕТАЛИОВ

СБОРНИК НАУЧНЫХ ТРУДОВ

4

Латвийский государственный уняверситет им. П.Стучки Рига 1985 639.186 + 539.196 + 621.383

YIK

ПРОЦЕССЫ НЕРЕНОСА ЭНЕРГИИ В ПАРАХ МЕТАЛЛОВ Процессы переноса энергии в парах металлов : Сборник научных трудов. - Рига:ЛГУ им.П.Стучки, 1985. - 128 с.

В сборнике отражены результаты изучения квантовых биени. В. ОСНОВНОМ ЭЛЕКТРОННОМ СОСТОЛНИИ ДВУХАТОМНЫХ МОЛЕКУЛ . ионизации при столкновениях оптически возбужденных атомов в пучке, нелинейных интерференционных сигналов с уровня 2pA неона, исследований паров серы, селена и теллура методом импульсного фотолиза. Теоретически рассчитаны межатомное взаимодействие атомов с несколькими открытыми оболочками , неадиабатические переходы при столкновениях возбужденных атомов второй группы с атомами инертных газов, эффект резонанса в передаче энергии возбуждения при столкновении щелочной молекулы с атомом. Описан метод аппроксимации для анализа контуров спектральных линий со сложной структурой и методы расчета параметров высокочастотных безэлектродных ламп. Сообщается о спектральных параметрах гелия в высокочастотном разреде, счетчике фотонов FS -4 и др. Работы выполнены в Латвийском и Ленинградском университетах, ИНХ и ФЭИ АН ЛатвССР.

Сборник рассчитан на научных работников, специализирующихся в области оптики и спектроскопии, физики низкотемпературной плазмы, квантовой электроники, квантовой химии, а также на студентов и аспирантов этих специальностей.

Табл. 6, ил. 39, библиогр. 144 назв.

Статьи, вошедшие в сборник, закончены и переданы в научную часть ЛГУ им. П. Стучки в сентябре 1984 года.

РЕДАНЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ: д-р физ.-мат.наук, проф. Э.К.Краулиня (отв.ред.), канд.физ.-мат.наук Э.М.Андерсон, канд.физ.-мат. наук, доц. М.Л.Янсон.

> Печатается по решению Издательского совета ЛГУ им. П.Стучки

n 20403-011y 85.9.1704060000 M812(11)-85 С Латвийский государственный университет им. П.Стучкя, 1985



М.П.Аузиныш, Р.С.Фербер ЛГУ им.П.Стучки (Рига)

# КВАНТОВЫЕ БИЕНИЯ В ОСНОВНОМ ЭЛЕКТРОННОМ СОСТОЯНИИ ДВУХАТОМНЫХ МОЛЕНУЛ

Спектроскопия квантовых биений в излучении /1/, позволяющая определить величину расщепления интерферирующих состояний и константы релаксации когерентности, применялась для исследования основного электронного состояния двухатомных молекул в нелинейном варианте резонанса биений между магнитными подуровнями при гармонически модулированной по амплитуде лазерной оптической накачке /2-4/. Метод позволил определить фактор Ланде для отдельных ЭКВ-подуровней в <sup>100</sup>  $R_2$ /2/ и  $K_2/4/$ . Однако наряду с таким преимуществом метода резонанса биений, как простота реализации гармонической модуляции лазерного луча, имеется и недостаток, заключающийся в том, что сам эффект проявляется в присутствии нелинейного возбуждающего светового поля, что затрудняет извлечение информации из сигнала, например, ввиду сдвига положения резонанса /3/.

Представляется полезным реализовать другой вариант квантовых биений - в переходном процессе после импульсной оптической накачки, когда биения возникают при поглощении либо флуоресценции, которые вызваны слабым пробным лучом, т. е. в области линейного отклика ансамбля, например в области t > to (рис. Ia). Наиболее корректным является использование короткого импульса шириной Т << у - где у - скорость релаксации когерентности ЭКВ-уровня \*, J\*, опустошенного в процессе поглощения с него лазерных квантов. Если использовать геометрию возбуждения, соответствующую показанной на рис. 16, то (в классическом представлении) мгновенно оптически выстроенные магнитные моменты основного состояния (рис. 2а) после действия импульса прецессируют вокруг внешнего магнитного поля H #OZ с ларморовой частотой W . В связи с этим коэффициент поглощения пробного луча, вызывающего переход с того же уровня 3". Л' и имеющего ту же поляризацию, будет испытывать гармоническую модуляцию с той же частотой и затухающей с постоянной /- амплитудой. Такие же колебания будут наблюдаться в интенсивности лазерно-возбужденной флуоресценции (ЛИФ).

Однако реализация в эксперименте такой ситуации сталкивается с некоторыми техническими сложностями. Так, необходимо сочетать малую длительность лазерного импульса (десятки наносекунд при /~ 10<sup>6</sup>с) и его достаточно большую пля создания заметного опустошения мощность с очень узким частотным интервалом (нередко менее гигагерца) для селективного возбуждения ЭКВ-перехода ( \* , J') - (v', J). При этом желательно обеспечить достаточную частоту повторения импульсов (5-10 кГц), требующуюся для регистрации кинетики малых интенсивностей ЛИФ при небольших давлениях методом задержанных совпадений. Это побудило нас рассмотреть возможность регистрации квантовых биений в переходном процессэ после обрыва широкого лазерного импульса прямоугольной формы длительностью T >> y<sup>-1</sup> (см. рис. Ia). Кинетика такого переходного процесса исследована нами ранее /5,6/ с целью прямого измерения скорости релаксации / опустошенного ( 4", J") - уровня



<u>Рис. I.</u> Временная зависимость интенсивности ЛИФ  $f_i$  в переходном процессе после ослабления возбуждения при  $t = t_o$  (a) и геометрия эксперимента (6). к равновесному состоянию. Однако, как будет показано в дальнейшем изложении, возможность наблюдения биений в таком процессе зависит от соотношения между / и . Если . Сли . то картина распределения угловых моментов Ј при установившейся оптической накачке ( $t < t_o$ , см. рис. Ia) будет п. ектически такая же, как и в отсутствие магнитного поля (H= ω-= 0 . CM. DMC. 2a), B переходном процессе ( $t > t_c$ ) после ослабления возбуждения распределение "заплывет" до изо тропного, не успев повернуться вокруг НИОГ , т.е.биения наблюдаться не будут. Если, наоборот,  $\omega >> f$ , то распределение J при t < to уже изотропно (см. рис. 2в), и биения после ослабления луча, естественно, также не будут наблюдаться. При  $\omega \sim f$  стационарное распределение J имеет вид, подобный изображенному на рис. 26, т.е. по сравнению с рис. 2а имеется частичное "заплывание" опусточенных направлений Ј и одновременно поворот оси распределения на некоторый угол У. Следсвательно, в этом случае после ослабления луча, т. е. в области t > to, можно надеяться зарегистрировать бления, хэтя их амплитуда булет уменьшена , и на фоне "заплывания" из-за релаксации успеет заметно проявиться примерно ОЛИН период колебаний.



<u>Рис.2.</u> Распределение угловых моментов основного состояния Jпри стационерном оптическом выстраивании (Q - поглощение лилейно поляризованного луча с E109·):a- $\omega << f$ ;  $6-\omega - f$ ; в -  $\omega >> f$ . Приведем расчет ожидаемых сигналов для ситуации ,изображенной на рис. I, используя приближенное решение ,системы уравнений движения поляризационных моментов (ПМ),записанной для оптической накачки "опустошением" определенного ЭКВ – уровня  $v^{t,*}$ ,  $J^*$  основного электронного состояния с большим угловым моментом  $J^{>>}$  I. Так как система уравнений, упродающие предположения и техника решения методом разложения в ряд подробно описаны ранее /2,6,7/, здесь изложим их вкратце.

Систему уравнений для ПМ основного состояния 93 возбужденного состояния for запишем в виде

$$f_{Q}^{\kappa} = \frac{\Gamma_{p}}{\Gamma_{\kappa}} \sum_{X \neq e}^{\kappa} \mathcal{F}^{X \neq e} \left\{ \phi^{(X)} \otimes \phi^{(\neq e)} \right\}_{Q}^{\kappa}; \qquad (Ia)$$

$$\frac{d\varphi^{\mathcal{X}}}{dt} = -\int_{P} \sum_{X,x'} \mathcal{A}^{X,x'} \left\{ \begin{array}{l} \varphi^{(X)} \otimes \varphi^{(x')} \right\}_{q}^{\mathcal{X}} + \int_{0}^{t} \varphi^{(0)}_{0} - \\ - \int_{\mathcal{X}}^{t} \varphi^{\mathcal{X}}_{q} + i \varphi \otimes \varphi^{\mathcal{X}}_{q} \end{array} \right.$$
(16)

Здесь  $\int p$  - скорость поглощения;  $\int_{K} \int_{\mathcal{H}} p$  - скорости релаксации ПМ соответствующего ранга;  $\omega = \int_{k_0} gH/\hbar$  - час - тота магнитного расщепления нижнего уровня;  $\int_{k_0} - Mагнетон Бо-$ ра; g - фактор Ланде. Принято, что  $\int p << \int_{K} , \int_{\mathcal{H}} << \int_{K} , \int_{K} , \int_{K} , \int_{K} << \int_{K} , \int_{K} ,$ 

$$A^{Xx'} = (-1)^{\Delta} \sqrt{\frac{(2X+1)(2x'+1)}{2x+1}} C^{XO}_{1\Delta} + C^{XO}_{2O} x_{O}, \quad (2)$$

где  $\Delta - J' - J''$ . Таблица значений A'' приведена в работе /3/. Член *јо уде* в уравнении (16) описывает восстановление заселенности при соударениях с соседними равновесно-заселенными уровнями.

Схема решения уравнений (Ia) и (Iб) такова. Вначале из (Iб) определяют развитие во времени  $\varphi_{0}^{3c}(t-t_{0})$  при  $t > t_{0}$ (см.рис.Ia). Затем, подставляя их в уравнение (Ia), определяют  $f_{0}^{K}$ , что позволяет рассчитать наблюдаемую в эксперименте величину – интенсивность ЛИФ с определенной поляризацией  $\vec{e}_{i}$  согласно

$$I(\vec{e_i}) \sim (-1)^{\Delta} \sum_{K} \sqrt{2K+1} C_{I-\Delta}^{KO} + \Delta \sum_{Q} (-1)^{Q} f_{Q}^{K} \Phi_{Q}^{K}(\vec{e_i}). \quad (3)$$

Стационарное уравнение (16) при  $\frac{d \psi_{g}}{dt} = 0$  (во время действия опустошающего импульса, т.е. при  $t < t_{0}$  - см. рис. Ia) решаем разложением в ряд по степеням параметра  $f_{20}$ , считая, что в нулевом приближении  $\psi_{g}^{\mathcal{H}} = \delta_{\mathcal{H}0} \delta_{g0}$ . Подставляя  $\psi_{0}^{0} =$ = I в тензорное произведение из уравнения (16), получаем первое приближение:

Далее решаем дифференциальное уравнение (16) при  $t > t_o$ с начальными условиями для  $q_q^{z}$  при  $t < t_o$ , что приводит к виражениям

Соответствующие выражения для  $f_Q^{\kappa}$  в этом приближении можно получить, подставляя выражение (5) в уравнение (1а). Чтобы далее перейти к расчету сигналов ЛИФ по формуле (4), обратимся к конкретным вариантам геометрии наблюдения (см. рис. 16). Вначале рассмотрим случай, когда регистрируется сигнал  $I_i$ . Здесь и далее примем, что все скорости релаксации не зависят от ранга ПМ, т.е.  $\Gamma_{\kappa} = \Gamma$ ,  $f_{\infty} = \mathcal{F}$ . С учетом конкретного вида  $\phi_{\chi}^{\kappa}(\tilde{e}_i)$  получим (с точностью до постоянного множителя и нормировкой на единицу при  $t - t_0 = \infty$ )

$$I_{1} = 1 - \frac{3}{7} \frac{f_{p}}{f} e^{-\delta(t-t_{0})}$$
(6)

Из уравнения (6) видно, что, по крайней мере в данном приближении, в сигнале ЛИФ  $I_i$  не присутствует гармонически модулированная составляющая. Зависимость  $I_i$  от времени t $t_o$ , рассчитанная при  $f = f_\rho = 10^6 \text{ c}^{-1}$ , приведена на рис. 3, кривая I. Следует отметить, что при таком значении "ма – лого" гареметра  $f_\rho/f = f$  рассматриваемое приближение нвляется весьма грубым и может дать лишь приблизительную картину. Этот зопрос подробнее рассмотрен в /2,3/.



<u>Fue.3.</u> Изменение интенсивности ЛИФ  $I_{I}$  (1) и линейной комбинации  $I_{LK}$  (2,3) в задисимости ст времени  $t - t_{c}$  после ослабления возбуждения. Выражения для сигналов I2 и I3 (см.рис.16) имеют вид

$$I_{2} = I - \frac{2}{7} \frac{f_{p}}{f} e^{-f(t-t_{o})} - \frac{1}{7} \frac{f_{p}}{f_{p}^{2} + 4\omega^{2}} \cos\left[2\omega(t-t_{o}) + \psi\right] e^{-f(t-t_{o})}; (7)$$

$$I_{3} = 3 - \frac{g}{7} \frac{r_{p}}{t} e^{-t(t-t_{o})} - \frac{6}{7} \frac{-r_{p}}{\sqrt{f^{2} + 4\omega^{2}}} \cos\left[2\omega(t-t_{o}) + \psi\right] e^{-t(t-t_{o})}(8)$$

В интенсивностях ЛИФ  $I_2$  и  $I_3$  присутствует осциллирующий член, содержащий частоту биений  $2\omega$  и фазу тригонометрической функции  $\Psi$  (см.также рис.26), определяемую как

$$\psi = \operatorname{arc} tg \frac{2\omega}{T}$$
 (9)

Вклад k гармонически модулированной составляющей (третье слагаемое) по отношению к экспоненциальной (второе слагаемое) максимален при  $\omega/j^{\circ} \rightarrow 0$  и составляет 0,5 для  $I_2$  и 2/3 для  $I_5$ . С ростом  $\omega/j^{\circ}$  величина k убывает (см. рис. 4), что находится в согласии с приведенными выше качествен - ным.1 рассуждениями в связк с рис.2. Необходимость обрабатывать сигналы в ситуации, когда  $\omega \sim j^{\circ}$ , делает весьма келательным устранить или по крайней мере заметно ослабить экс-



<u>Рис.4</u>. Относительная амплитуда гармонической модуляции для сигнала  $I_2$  в зависимости от  $\omega/\gamma^2$ .

- 9 -

поненциальную подложку. Для этого можно, например, регистрировать, в эксперименте оба сигнала  $I_2$  и  $I_1$ , что достигается просто поворотом на 90° анализатора, и затем перейти к линейной комбинации вида  $I_{LK} = 1,5 I_2 - I_1 - 0,5$ . В  $I_{LK}$  в использованном при выводе выражений (6)-(8) приближении отсутствует экспоненциальная подложка и наблюдаются осцилляции с экспоненциально убывающей амплитудой вокруг среднего значения  $I_{LK} = 0$ , см. рис. 3, где кривые 2 и 3 рассчитаны при  $\omega = 1,5$ ° и  $\omega = 0,5$ ° соответственно. Видно, что кривая 2 предпочтительнее для регистрации биений, а при дальнейшем росте  $\omega/3^2$  амплитуда колебаний довольно быстро убывает, см. рис. 4.

Экспериментальная установка в основном подобна использованной при регистрации кинетики переходного процесса в /5, 6/. Основное отличие установки, использованной в настоящем эксперименте, состоит в том, что ячейка, содержащая металлический натрий, помещалась между полюсами электромагнита, образующего поле величиной до 7000 Гс. Флуоресценция наблюдалась в геоматрии, соответствующей  $I_4$ ,  $I_6$  на рис. 16. Оптический переход в молекуле  $Na_2$  ( $\psi^a$ =3,  $J^a$ =43)  $\chi' \mathcal{E}_6^a$ -( $\psi'$ =6,

J'=43)  $B'\Pi_{a}$  возбуждался при поглощении квантов лазерного излучения с длиной волны 488,0 нм от аргонового лазера Spectra -Physics I7I, работавшего в одночастотном режиме генерации при выходной мощности около 400 мВт. Луч модулировался по амплитуде с помощью электрооптического модулятора МЛ-3 в виде прямоугольных импульсов длиной около 30 мкс, час тотой 9 кГц, с фронтом спада длительностью около 100 нс.Глубина модуляции составляла приблизительно 5:1. Кинетика ЛИФ на линии  $Q_{I3}$  регистрировалась методом задержанных совпадений в варианте однофотонного статистического анализа. Временное распределение одноэлектронных импульсов преобразовывалось в амплитудное и анализировалось с помощью анализатора импульсов АИ-256-6 с выходом на ЦПУ.

При измерениях попеременно регистрировалась кинетика возбуждающего лазерного импульса, сигналов *I*, и *I*<sub>2</sub> при включенном внешнем магнитном поле Н. Затем те же сигналы регистрировались при H=0.

При обработке, аналогичной выполнявшейся в /5,6/, уч --

валась коррекция на форму возбуждающего импульса и на невыполнение условий однофотонного статистического анализа. Полученные значения I, и I, нормировались на одинаковое суммарное количество импульсов во всех каналах. При этом их разность I,5 Io - I, должна содержать только гармонически молулированную составляющую (в используемом при расчетах приближении). Вид экспериментально полученной при Н=4180 Гс. температуре отростка с натрием 268°С зависимости, а также расчетные данные приведены на рис.5. Хотя сигнал сильно затумлен, представляется, что он демонстрирует наличие магнитных квантовых биений от уровня 2"=3. J =43 основного электронного состояния Na, в переходном процессе на фоне экспоненциальной подложки. Последнее может быть связано с неточностью используемого при получении формул (6)-(9) приближения, а также с погрешностями при нормировке, например, в связи с учетом немодулированного фона в ЛИФ. С учетом этого численно смоделирована линейная комбинация Г и вида



<u>Рис.5</u>.Линейная комбинация экспериментально зарегистрированных сигналов кинетики переходного процесса (I) и расчетная кривая (2).

In - A-Be-S(t-to)-Ce-S(t-to)cos[2w(t-to)+4]; (10)

где параметр  $f = 0,7 \cdot 10^{+6} c^{-1}$  определялся нри обработие чисто экспоненциального сигнала при H=0, частота  $\omega$  соответствовала значению фактора Ланде для  $X = состояния Ma_2$  из работы /9/, равному 2,09·10<sup>-5</sup>, и тогда фаза  $\psi$  определялась согласно (9). В связи с обсужденными выше причинами отношение коэффициентов B/C, характеризующее относительный вилад остаточного экспоненциального слагаемого к гармоническому члену, варьировалось. На рис.5 приведена зависимость (кривая 2), рассчитанная при B/C.= I.4. Видно, что кривые I и 2, рис.5, показывают качественное согласие, приемленое в рамках использованного при расчетах приближения.

Эксперимент носит предварительный демонстрационный характер. Если в дальнейшем удастся значительно улучшить отношение сигнала к шуму, то можно надеяться мопольсовать предлагаемую методику для одновременного определения скорости релаксации / и фактора Ланде уровня d', J' основного электронного состояния двухатомных молекул.

Список литературы

- I. Александров Е.Б. УФН, 1972, т. 107, вып. 4, с. 592-622.
- Ferber R.S., Okunevich A.I., Shmit O.A. et al. -Chem. Phys. Lett., 1982, vol. 90, p. 476-480.
- Аболтиныш А.Р., Фербер Р.С.-В кн.: Процессы переноса эмергии в парах металлов. Рига: ЛГУ им. П. Стучки, 1983, с. 28-39.
- Аузиныш М.П., фербер Р.С.-Письма в ЖЭТФ, 1984, т. 39, вып. 8. с. 376-378.
- Аузиныш М.П., Пирагс И.Я., фербер Р.С. и др.-Письма в ЖЭТФ, 1980, т.31, вып. 10, с. 589-592.
- Auzin'sh M.P., Ferber R.S., Pirags I.Ya.-J. Phys. B: At. Mol. Phys., 1983, vol. 16, p. 2759-2771.
- 7. Аузиныш М.П. Изв. АН ЛатвССР, сер. физ. и техн. наук. 1984. N. I.c. II-15.
- 6. Дьяконов М.И., ЖЭТФ, 1964, т. 47, вып. 6, с. 2213-2221.
- Brooks 2.A., Anderson C.N., Ramsay N.F.-Phys. Rev., 1964, vol. 1364, N 1, p.62-68.

# В.Б.Грушенский, М.Л.Янсон ЛГУ им.П.Стучки (Рига)

# ЭФФЕКТ РЕЗОНАНСА В ПЕРЕДАЧЕ ЭНЕРГИИ ВОЗБУЖДЕНИЯ ПРИ СТОЛКНОВЕНИИ ДВУХАТОМНОЙ ЩЕЛОЧНОЙ МОЛЕКУЛН С АТОМОМ

К настоящему времени накоплен общирный экспериментальный материал по измерению эффективных сечений процессов передачи энергии возбуждения (ПЭВ) при столкновении возбужденной молекулы целочного димера и атома. Больши ство экспериментов проводилось в условиях, когда было возможно определить только суммарные эффективные сечения ПЭВ, усредненные по распределению реагентов по начальным состояниям и скоростям и просуммированные по возможным конечным состоя ниям продуктов. Подробная интерпретация целого ряда подобных процессов была дана нами ранее /1-3/. Использование методов лазерной спектроскопии позволило в последнее время детализировать ряд процессов ПЭВ, в частности, удалось измерить сечения передачи энергии с отдельных колебательно-врацательных уровней возбужденной молекулы. Например, в проблемной лаборатории спектроскопии ЛГУ им. П.Стучки в смеси паров натрия и калия в результате облучения различными линиями гелий-неонового и криптонового лазера возбуждались отдельные уровни А'Г, - состояния молекулы Na. Передача энергии возбуждения обнаруживалась по высвечива. ию резонансных D - линий атомарного калия /42P1/2.3/2-42S1/2/. В условиях эксперимента единственно возможным каналом заселения 4<sup>2</sup>P; - уровней атома колия являлась столкновительная передята энергии от возбужденной молекулы Na2 (A'E') по схеме

 $Na_2(A'\Sigma_{\mu}, v'J') + K(4^2S_{1/2}) - Na_2(X'\Sigma_{g}, v'J') + K(4^2\beta).(I)$ Эксперимент позволил определить эффективное сечение ПЭВ с отдельного V'J' - уровня молекулы  $Na_2$ , а сканирование по различным колебательно-вращательным уровням состояния  $A'\Sigma_{\mu}^{*}$  дало возможность определить зависимость сечения от дефекта резонанса  $\Delta \mathcal{E}$ .

В связи с подобными эксперьментами представляет интерес выподнение расчета эффективного сечения ПЭВ от двухатомной молекулы к атому и выяснение его зависимости от основных параметров реагентов и условий протекания процесса. В сбщем случае процедура расчета сечения сводится к решению системы связанных дифференциальных уравнений для амплитуд вероятности нахождения возбуждения у молекулы или у атома. Для про сов с участием молекул число связанных уравнений оказывается настолько большим, что даже использование современных ЭВМ не даст возможности решичь задачу. В связи с этим несомненный интерес представляют модельные подходы, позволяющие путем отказа от излишней детализации сформулировать задачу тахим образом, что возможно либо аналитическое, либо сравнительно простое числечное решение. В задачах теории столкновений такое упроцение возможно, так как в эксперименте обычно не различаются состояния с различными значсниями квантового числа М проекции полного момента молекулы Э. Это позволяет, используя предложенный Рабицем метод эффективного потенциала /4/, получить аналитическое выражечие для эффективного сечения ПЭВ от двухатомной молекулы к атому.

Сформулируем вкратце основные этапы расчета, следуя в основном методике, предлятенной в работе /4/.В квазиклассическом приближении сечение процесса ПЭВ определяется как

 $G_n = 2\pi \int P(b) b \, db$ , (2) где b - прицельный параметр; а P(b) - вероятность процесса. Вероятность перехода в первом порядке теории возмущений удобно представлять через амплитуду перехода

$$S(b) = -\frac{t}{\hbar} \int exp(-iH_ot/\hbar) V(t) exp(iH_ot/\hbar) dt.$$
(3)

Здесь V(t) - зависящий от времени потенциал межмолекулярного взаимодействия;  $\hat{H}_0$  - оператор невозбужденной системы атом + молекула. Интегрирование по времени охватывает весь процесс столкновения, причем минимум межмолекулярного расстояния  $\mathcal{R}(t)$  соответствует значению t = 0. В общем случае вероятность парехода при столкновении из состояния

 $\langle v' J' j' | в состояние \langle v' J' j' | выражается в виде ряда$ матричных элементов оператора <math>S(b) по всем возможным проекциям моментов J и j на выбранную ось квантования (здесь J - вращательный момент молекулы; j - момент атома; знак ' относится к начальному, знак ' - к конечному состоянию системы).Поскольку зависимость сечения ПЭВ от проекций моментов достаточно слабая, можно использовать приближение эфўективного потенциала  $V_{3\phi}(t)$  Рабица. В этом приближении чероятность перехода определяется просто как квадрат модуля матричного элемента амплитуды вероятности перехода между начальным и конечным состояниям системы:

Pop (v' 3'j'+v" 3"j") = / < v' 3'j' / S(b) / v" 3"j">/2= =  $\left[-i\hbar^{-1} \langle y' j' f' \right] dt \exp\left[-\frac{iH_0^{3\phi}t}{\hbar} V_{3\phi}(t) \exp\left(\frac{iH_0^{3}t}{\hbar}\right) \right] x$  (4) x/y' ] ') /2.

В приближении эффективного потенциала спектр оператора  $H_{o}^{3\phi}$  совпадает со спектром оператора  $H_{o}$ , т.е.  $\langle y' J' j' J H_{o}^{3\phi} / y' J' j'' > = \mathcal{E}_{y' J'} \mathcal{E}_{J' J'} \mathcal{E}_{j' J''} \mathcal{E}_{j' J'''} \mathcal{E}_{j' J'''}$  (5) С учетом уравнения (5) формулу (4) представим в виде

 $P_{3\phi}(v'J'j' - v'J'j') =$ 

= |-ih-1 f dt exp i AE t < v' 3'j' | Vap (t) | v" 3"j" > 12

где  $\Delta \mathcal{E} = \mathcal{E}_{y',j'} + \mathcal{E}_{j'} - \mathcal{E}_{y'',j''} - \mathcal{E}_{j''}$  есть дефект резонанса.

Оператор взаимодействия в рассматриваемом случае процесса (I) отвечает взаимодействию двух диполей и имеэт вид

$$V(R) = \frac{D_1 D_2 - 3(\overline{D_1 h})(\overline{D_2 h})}{R^3}, \qquad (7)$$

(6)

де  $D_1$  – операт р дипольного момента молекулы;  $D_2$  – операор дипольного момента атома;  $\tilde{h}$  – единичный вектор в направнении оси, соединяющей центр молекулы с ядром атома;  $\mathcal{R}$  – межмолекулярное расстояние. В этом случае матричные элементы эффективного гамильтониана принимают вид

< v' 3'j' 1 Vap (R) / v 3'j'> = Svive < 3'j' 1 Vap (R) / 3'j'> . =- Svive dida (2) 1/2 [(23'+1)(2j'+1)(2j'+1)(2j'+1)] 1/4 × (8)  $x \exp \left\{ \frac{iT}{2} [|\vec{3}'+j'-\vec{3}'-j']+\vec{3}'+j'+\vec{3}'+j'] \Big| \begin{pmatrix} \vec{3}'t \ \vec{3}' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j't \ \vec{3}' \end{pmatrix} \\ (\vec{0} \ \vec{0} \ \vec{0} \end{pmatrix} \right\},$ где 5, , - интеграл перекрывания между колебательными волновыми функциями молекулы, соответствующими начальному и конечному состояниям молекулы;  $\alpha'_1$  и  $\alpha'_2$  - матричные элементы дипольного момента молекулы и атома соответственно. Подставляя выражение (8) в формулу (6) и используя приближение прямолинейной траектории для сталкивающихся частиц, для которого  $\mathcal{R} = (b^2 + y^2 t^2)^{\frac{1}{2}}$ , где V - относительная скорость частиц, для эффективной вероятности получим выражение

 $P_{ap}(v' J'j' \to v' J'j') = \pi^{-2} (S_{v'} )^2 (d_1 d_2)^2 \frac{2}{3} \times$ \*[(23'+1)(2j'+1)(23"+1)(2j"+1)]<sup>1/2</sup> (000)<sup>2</sup> (000)<sup>\*</sup> (9)  $\times \left| \left( \frac{\exp\left(i\frac{\Delta \xi}{\hbar}t\right)dt}{(\hbar^2 + v^2 t^2)^{3/2}} \right|^2.$ 

Входящий в эту формулу интеграл, как показано в работе /5/, может быть выражен через модифицированную функцию Бесселя  $K_1(x)$ , где  $-x = \frac{A \leq b}{\pi Y}$ , а именно:

 $\int \frac{e_{IP}(i\frac{\Delta\xi}{K}t)dt}{(b^2+y^2t^2)^{3/2}} = 2 \frac{\Delta\xi b}{\pi y} K_I(\frac{\Delta\xi b}{\pi y})/yb^2.$ (10)

Подставляя выражение (IC) в формулу (9), получаем окончательное выражение для вероятности перехода:

 $P_{a\phi}(v'3'j'-v'3'j') = \frac{1}{3} \frac{d_1^2 d_2^2}{\hbar^2 v^2 \delta^4} (S_{v'v'})^2 {3' + 3' \choose 0 0 0}^2 \times$ × (1 1 0)2[(2]+1)(2]+1)(2]+1)(2]+1)(2]+1)]12 (AEL)2 (II) $K_{i}^{2}\left(\frac{\Delta \varepsilon b}{\delta V}\right) = \frac{A^{2}}{L^{4}} d^{2}K_{i}^{2}(d),$ 

где введено обозначение  $\mathcal{L} = \frac{\Delta \mathcal{E} \mathcal{B}}{\hbar v}$  и  $\mathcal{H}^2 = \frac{\mathcal{B}}{\mathcal{B}} \cdot \frac{d_i^2 d_2^2}{\hbar^2 v^2} (S_{v'v'})^2 x$  $\times \left( \frac{\mathcal{J}'}{\mathcal{D}} + \frac{\mathcal{J}'}{\mathcal{D}} \right)^2 \left( \frac{j'}{\mathcal{D}} + \frac{j'}{\mathcal{D}} \right)^2 \left[ (2\mathcal{J}' + 1)(2j' + 1)(2\mathcal{J}'' + 1)(2j'' + 1) \right]^{1/2}$ 

Следуя работе Накамуры /6/, заменим последнее выражение величиной

$$P_{3\phi}\left(v' J'j' \rightarrow v' J''j''\right) - \sin^2\left[\frac{\#}{b^2} \mathcal{L}_{i}(d_{i})\right]. \quad (12)$$

Тогда для аффективного сечения передачи возбуждении получим

$$G_n = 2T \int b \, db \, \sin^2 \left[ \frac{4}{b^2} \, d \, K_1(d) \right].$$
 (13)

Для оценки этого интеграла воспользуемся методом, предложенным фирсовым /7/. Введем обозначение  $\zeta(b) = \frac{A}{b^2} \ll K_c(\omega)$ . При прицельных параметрах, для которых  $\zeta(b) >> I$ ,  $sih^2 \zeta(b)$  можно заменить I/2, т.е. в этой области сечение не зависит от виде  $\zeta(b)$  и определяется видом  $\zeta(b)$  в сблэсти, где  $\zeta(b) \sim I$ . При тепловых скоростях это осуществляется при больших прицельных параметрах, поэтому сечение можно представить в виде

$$G_n = \frac{Tb^2}{2} + \int 2Tb \, db \, \sin^2 \zeta(b),$$
 (14)

где  $b_{o}$  определяется из условия  $\zeta(b_{o}) = \frac{e}{2} = 0,28$ , а остаточный член легко оценить, используя асимптотику для функции  $\zeta(b)$ . В рассматриваемом случае его вклад в сечение оказался небольшим и поэтому при численной оценке величины  $\delta_{n}$  не учитывался. Для расчета величины  $b_{o}$  воспользуемся разложением функции  $K_{1}(d)$  в ряд

$$K_{1}(d) = \sqrt{\frac{1}{2d}} e^{-d} \left[ i + \frac{g}{g_{d}} + \dots \right].$$
 (15)



- 17 -

Осраничиваясь первыми членами этого ряда, получим

$$\zeta(b) = \frac{4\Delta \varepsilon}{b\pi v} \sqrt{\frac{T\pi v}{2b\Delta \varepsilon}} e_{-p} \left(-\frac{\Delta \varepsilon b}{\pi v}\right). \tag{16}$$

Искомур величину 6. найдем тогда из решения уравнения

$$\frac{\#}{b_0^{3/2}} \sqrt{\frac{T}{2\pi}} \exp\left(-\frac{\Delta \mathcal{E}b_0}{\pi v}\right) = 0,29.$$
(17)

Подставляя полученное численное значение *b*, в формулу (14), определим эффективное сечение ПЭВ.

Как видно из полученных формул, сечение зависит от двух параметров – дефекта резонанса  $\Delta \mathcal{E}$  и интеграла перекрытия колебательных волновых функций молекулы для молекулярного перехода v' - v' (или, что то же самое, фактора Франка-Кондона  $q_{v'v'}$ ). Сечение оказывается эначительным только при одновременном выполнении двух условий: малый дефект резонанса ( $\Delta' \mathcal{E} \sim 10 \text{ см}^{-1}$  и менее) и сравнительно большое значение фактора Франка-Кондона ( $q_{v'v'} \sim 0.02$  и более).

Такая зависимость сечений от  $\Delta \mathcal{E}$  и  $q_{\gamma' \gamma'}$  позволяет объяснить наблюдаемые экспериментально небольшие сечения ПЭВ в тех случаях, когда дефект резонанса мал, но одновременно и факторы Франка-Кондона малы, как, например, для процесса

# Na, (E'nu, v'3') + Na (3251/2) - Na2(X'Eq, v'3") + Na (32)(18)

В случае же процесса (I) для ряда переходов (см. таблицу I) указанные условия выполняются одновременно, и именно для этих случаев сечения ПЭВ оказываются большими. Для переходов с известными факторами Франка-Кондона сечения ПЭВ нами были рассчитаны, и сравнение с экспериментом показало хорошее согласие модельных расчетов с измеренными значениями.

### Таблица I

Эффективные сечения ПЭВ для процесса (I), рассчитанные теоретически в приближении эффективного потенциала в зависимости от параметров дефекта резонанса  $\Delta \mathcal{E}$  и факторов Франка-Кондона  $\mathcal{G}_{\mathbf{x}'\mathbf{y}''}$ 

v'	3'	v"	3"	48, см <sup>-1</sup>	9 v'v" .	Øn.·10 <sup>-14</sup> ,см <sup>2</sup>
14	45	22	46	5,05	0,0346	9,1
25	87	32	88	4,99	0,0184	7,9 '
22	86	29	87	15,0I	0,0244	2,2
16	17	25	-16	18,34	0,0441	I,9
					Server - States	

Список литературы

- Грушенский В.Б.- В кн.: Сенсибилизированная флуоресценция смесей паров металлов. Рига: ЛГУ им. П. Стучки, 1975, выл. 5, с. 77-94.
- Грушевский В.Б., Клявиныш Я.П., Янсон М.Л.- В кн.: Процессы переноса энергии в парах металлов. Рига: ЛГУ им. П. Стучки, 1981, с. 21-30.
- Копейкина Э.К., Янсон М.Л., Смирнов Б.М. В кн.: Сенсибилизированная флуоресценция смесей паров металлов. Рига: ЛГУ им. П. Стучки. 1975, вып. 5, с. 95-104.
- 4. Kabitz H.-J. Chem. Phys., 1972, vol. 57, N 4, p. 1718-1725.
- Gray C.G., Van Kranendonk I. Can. J. Phys., 1966, vol.44, p.2411-2430.
- 6. Makamura H. Mol. Phys., 1973, vol. 25, p. 577-602.
- 7. Impcos 0.E. E3T1, 1951, T.21, c. 1001-1008.

М.А.Лиепкаула,С.М.Папернов, Ж.Л.Швегжда ЛГУ им.П.Стучки (Рига)

## ОПТИЧЕСКОЕ ВОЗЕУЖДЕНИЕ ПАРОВ НАТРИЯ В ПРИСУТСТВИИ ИНЕРТНЫХ ГАЗОВ

В ранее проведенных работах /1,2/ нами исследованы меканизмы заселения атомных и молекулярных состоялий натрия при оптическом возбуждении уровней *Na* (3<sup>2</sup>P). Было установлено, что в атомно-молекулярных столкновениях согласно реакции

 $Na_2(X'\Sigma_g^+) + Na(3^2P) - Na_2(A'\Sigma_u^+, B'\Pi_u) + Na(3^2S)$  (I) заселяются электронные  $A'\Sigma_u^- + B'\Pi_u^-$  - состояния  $Na_2$ , из которых высвечиваются хорошо известные молекулярные полосы  $A - \chi$  (570-630 нм) и  $B - \chi$  (460-560 нм), а также неидентифитированное  ${}^{3}Y_{g}$  - состояние, ответственное за появление диффузной полосы в области 420-450 нм. Кроке того, в спектрах наблюдались этомные линия, связанные с появлением высоковозбущенных состояний атомов натрия в парных столиновениях  $3^{2}P$ -атомов.

Цель настоящей работы - исследование этих же явлений в присутствии инертного газа. Акцент при этом делался на анализ зипиоических фактов, позволяющих выяснить возможную роль в процессах переноса энергии метастабильных молекулярных состояний.

В работе использовалась энспериментальная установка, описанная в /I,2/, несколько измененная. Источником возбухдения служил лазер на врасителе (родамин бЖ) фирмы "Спентра бизмис", генерировавший в стациснарном режиме излучение на джине волны 569,0 ны ( $\Delta \lambda = 0,0$  I нм) при плотности модности Р < 10 Вг/см<sup>2</sup>. Настройка частоты лазера на D – линии производилась по максамуму интенсивности резоненсной флуоресценции.

блуоресценция возбундалась в ячейке, которая через стеклянный жиф соединилась с вакуумной системой, обеспечивающей откачку до 10<sup>-6</sup> мм рт.ст. и напуск аргона. Давление аргона менялось в пределах I-90 мм рт.ст. и измерялось U - образным масляным манометром.

Спектрометр МСД-I служил для регистрации флуоресценции в диапазоне 400-900 нм, а также для записи поглощения на линии 819,5 нм (ФЭУ-79). Монохроматор МДР-3 использовался для регистрации флуоресценции в области 900-1100 нм (ФЭУ--83).

Исследования проводились в дианазоне температур от ростка с металлом 550-630 К, что соответствовало концентрации невозбужденных атомов натрия I,I-10<sup>14</sup>-1,6-10<sup>15</sup> см<sup>-3</sup>.

Для определения концентрации возбужденных атомов использовалась методика, основанная на измерении поглощения спектральных линий, для которых нижним уровнем является  $3^{2P}$ /3/. В качестве зондирующего лалучения использовалась линия диффузной серии Na 819,5 нк ( $3^{2}D - 3^{2}P$ ) натриевой дуговой лампы ДНаСІ8. Параметры данной линии, необходимые для расчетов кривых роста, приведены в /3/. Поскольку эксперименты проводились в присутствии инертного газа, то кроме уширения контура поглощения, обусловленного резонансным диполь-дипольным взаимодействием, учитывалось столкновительное уширение, связанное с ван-дер-вальсогым взаимодействием между атомами натрия и инертного газа. Кривые роста  $A = A(M_0 l)$  при разных давлениях инертного газа приведены на рис. I.

Важным вопросом является установление особенности возбуждения резонансных состояний натрия в присутствии инертного газа. С этой целью была определена зависимость концентрации возбужденных 3<sup>2</sup>Р-атомов от давления аргона при разных температурах ячейки, т.е. при разных концентрациях атомов в основном состоянии (рис.2). Как видно из рис.2, основная тенденция состоят в уменьшении эффективности накачки 3<sup>2</sup>Рсостояний при добавлении аргона (в указанном выше интервале давлений, температур и спектральной ширины личии лазера). Эффективность накачки 3<sup>2</sup>Р-уровня Ма зависит от перекрывания контура лазерной линии и контура линии поглощения, а также от херактера пленения излучения. В наших экспериментальных условиях всобуждение атомов Ма осуществлялось при значительной отстройке частоть лазера от центра *D* -линии,

- 21 -



<u>Рис. I.</u> Кривые зависимости относительного поглощения A от оптической плотности  $\mathcal{X}_o\ell$  паров натрия при разных давлениях инертного газа: I - без Ar, 2 - 25 мм рт.ст., 3 - 50 мм рт.ст., 4 - 100 мм рт.ст., 5 - 200 мм рт.ст., 6 - 500 мм рт. ст., T = 625 K,  $\lambda$  = 819,5 нм.

т.е. в далеком крыле контура поглощения. Присутствие инертного газа, с одной стороны, увеличивает дисперсионную часть поглощающего контура и тем самым улучшает перекрывание контуров. С другой стороны, инертный газ может повлиять из процесс пленения излучения, поскольку увеличивается лоремцовская часть эмиссионного контура, что может способство – вать выходу излучения из объема. Преобладание одного или другого фактора определяет характер зависимости концентрация 3<sup>2</sup>P-втомов от давления аргона.

В случае резонансного возбуждения атомов натрия при-

- 22 -



<u>Рис.2.</u> Зависимость концентрации возбужденных  $3^{2}$ Р-атомов от давления аргона при разных температурах ячейки. Концентрация нормирована на единицу мощности лазерного излучения, кривые нормированы на одну величину при  $P_{Ar} = 0$ .

давлении аргона в несколько десятков мм рт.ст. общая картина спектра флуоресценции несколько изменяется.

Как известно, полоса А – Х имеет резкий край со стороны больтих длин волн, которому предшествует так называемый классический сателлит в области ~ 800 нм. Полоса представтяет собой квазисплошной спектр, колебательно- вращательная структура которого не проявляется из-за тесного перекрывания элементов структуры спектра.

При уселичении давления аргона происходит уменьшение интенсивности спектра в районе сателлита до полного его исчерновения и одновременное сглаживание и увеличение интенсивности полосы в облысти 580-720 нм. Вид спектра отвечает проявлению и росту крыльев резонансных  $\beta$  - линий Na. Такое явление в щелочных металлах было описано Галлахером и др. /4, 5/ при больших давлениях (порядка атмосферного) инертного газа, и оно интерпретируется как переход между электронными состояниями  $n S \Sigma 1/2$  и  $n P \Pi 1/2$ ,  $n P \Pi _{3/2}$ ,  $n P \Sigma 1/2$  эксимерной молекулы X \* У, где X\*- атом щелочи,

 $n P \sum 1/2$  эксимерной молекулы X <sup>\*</sup> У, где X<sup>\*</sup>- атом целочи, У - атом инертного газа. Надо отметить, что уже при давле нии аргона IO мм рт.ст. мы могли выделить эксимерную полосу как подложку полосы A - X.

Полоса В - Х представляет собой квазисплошной спектр с ярко выраженными максимумами в области 490-520 км, которые свидетельствуют об относительно высокой заселенности уров ней вблиси дна ямы потенциальной кривой  $\beta'/_{\mathcal{U}}$  -состояния.При добавлении аргона интенсивность полосы В - Х увеличивалась, но структура спектра оставалась прежней. На рис.З показана зависимость интенсивности полосы В - Х от давления аргона.



<u>Fuc.3.</u> Зависимость интенсизности полосы В - X ст давления аргона при температуре ячейхи 625 К.

Поскольку с изменением модности и частоты лазесного излуче-

ния или температуры ячейки во время эксперимента концентрация возбужденных атомов натрия менялась, интенсивность по лосы нормировалась на один возбужденный атом, а также на интенсивность полосы при рас =0. Вид зависимости интенсивности полосы В - Х от давления Аг наводит на мысль, что дополнительное заселение В'Пи - состояния в присутствии инертного газа может осуществляться через метастабильные молекулярные состояния Na, при соударениях с Ar . Засе ление этих метастабильных состояний может реализоваться также как заселение  $A' \Sigma_{\mu}^{*}$  и  $B' \Pi_{\mu}$  - состояний - в процессе (I) переноса энергии от ЗР-атомов к молекуле . Действительно, в работе /6/ при возбуждении полосы В-Х Na2 линиями Ar<sup>+</sup> - дазера в импульсном режиме в присутствии инертного газа (20-700 мм рт.ст.) наблюдалось затухание молекулярной и атомной флуоресценции. поичем молекулярная флуоресценция характеризовалась двумя компонентами - короткоживущей (время жизни В'Пи - состояния ≈ 7 нс /7/) и длительной ( 2 = 0, I мкс), сильно зависящей от давления инертного газа. Отсюда сделан вывод, что длительная компонента молекулярной флуоресценции подтверждает участие электронных состояний, не связанных разрешенными переходами с основным X' Z q - состоянием, в перераспределении энергии по внутренним степеням свободы молекулы Na2. При возбуждении паров цезия импульсным неодимовым лазером ( $\lambda = 1.05$  мкм) в области молекулярного перехода  $\chi' \Sigma_{g}^{+} - A' \Sigma_{u}^{+}$  в атмосфере ксено-со ( $\rho \approx 600$  км рт.ст.) наблюдалась длительная компочента молекулярной флуоресценции ( Z ~ 0,2 мкс) /8/. Наличие такой компоненты сречения паров Сз было объяснено как прямое спектроскопическое проявление метастабильного триплетного 3Пи - состояния, которое неаднабатически связано спин-орбитальным взаимодействием с синглетным А'Е" - со стоянием.

Эти факты подтверждают мысль о том, что в заселении  $\mathcal{B}'\Pi_{\mu}$  - состояния принимают участие метастабильные состояния. Исходя из схемы термов /9/ (рис.4), такими состояниями могут быть синглетные  $\Sigma_{g}^{*}$ ,  $\Pi_{g}^{*}$  и триплетные  $\Sigma_{g}^{*}$ ,  $\Im_{g}^{*}$ ,  ${}^{3}\Pi_{\mu}$  -состояния.

Чтобы оценить константы скорости процессов переноса

энергии, был выбран упрощенный вариант, когда только одно электронное состояние  $\Sigma_{g}$  принимает участие в обмене энергией с  $B'\Pi_{\alpha}$  - состоянием  $N\alpha_{2}$  при столкновении с атсмами Ar. Это состояние было выбрано как из энер: етических соображений (рис.4), так и оценивая изменения в спектре полосы В - X при добавлении аргона.

- 23 -

Процессы переноса энергии описываются следующими реакциями:

Na, (X'Eg)	$+ Na(3^2P)$	-Na2 (B'ITu	() + Na(35)	; (2)
Na, (X'E'	) + Na(32P)	1 ky Nag ('E'.	) + Na (35);	(3)

$$Na_{2}('\Sigma_{g}') + Ar \stackrel{k_{2}}{\longrightarrow} Na_{2}(B'\Pi_{\mu}) + Ar; \qquad (4)$$

$$Na_{\alpha}(B'\Pi_{\mu}) + Ar \xrightarrow{K_{3}} Na_{\alpha}(\Sigma_{\alpha}^{+}) + Ar, \qquad (5)$$

Ураднения баланса для состояний В'П<sub>и</sub> и 'Σ<sup>4</sup><sub>9</sub> в стационарном режиме выражаются следующим образом:

 $k_1 N_{3P} N_{ON} + k_2 N_{EM} N_{Ar} = N_{BM} (A_8 + k_3 N_{Ar});$  (6)

Ky NSD NON + K3 NBM NAM = NEW (AE + K2 NAM), (7)

где  $k_1$ ,  $k_2$ ,  $k_3$ ,  $k_4$  - константы скорости реакций (I - 4),  $N_{OM}$ ,  $N_{IN}$ ,  $N_{BM}$ - концентрации молекул в основном  $X'\Sigma_{g}^{*}$ ,  $^{I}\Sigma_{g}^{*}$  и  $B'\Pi_{u}$  - состояниях, соответственно;  $N_{3p}^{*}$  - концентрация возбужденных ЗР-атомов;  $N_{Ar}$  - концентрация аргона;  $A_{B}$ ,  $A_{\Sigma}$  - вероятность излучательных береходов из  $B'\Pi_{u}$ ,  $^{I}\Sigma_{g}^{*}$  - состояний, определяемые исходя из радиационного времени жизни данного электронного состояния. При решении уравнений (6,7) было сделано допущение, что

$$\frac{n_2}{k_3} \cdot k_3 \ll k_2 . \tag{8}$$

Поскольку  $A_{B-\chi} \approx 1.4 \cdot 10^8 c^{-1}/7/$ ,  $A_{\chi} = 1.9 \cdot 10^6 c^{-1}/6$ , и маловероятно, что константа  $k_3$  много больше  $k_2$ , то это допущение является оправданным.

Решение уравьений дало следующее выражение:

$$\frac{N_{BM}A_{B-X}}{k_{i}N_{M}N_{AP}} = \int + \frac{\frac{k_{2}k_{4}}{k_{i}}N_{AP}}{A_{\xi}+N_{AP}k_{p}}$$
(9)

Величина в левой части равенства (9) соответствует нормировачной интенсивности, отложенной на рис.3, и это равенство описывает зависимость интенсивности  $I_{\mu}$  полосы В - X от дав-



27.



ления аргона. Используя при обработке результатов метод наименьших квадратов и значение  $k_1 = 1,3 \cdot 10^{-12} \text{ см}^3 \text{c}^{-1} / 2$ , мы определили константы скорости  $k_4 = 6 \cdot 10^{-12} \text{ см}^3 \text{c}^{-1}$  и  $k_2 =$ =4  $\cdot 10^{-11} \text{ см}^3 \text{c}^{-1}$ . Относительно большое отличие полученной нами константи  $k_2$  от константы скорости тушения для Ar k = $1,02 \cdot 10^{-12} \text{см}^3 \text{c}^{-1}$  в /6/ может быть связано с тем, что значение  $A_{\Sigma}$ , используемое в расчетах, получено при очень длинной экстраноляции плетности аргона от  $1 \cdot 10^{-18} \text{ см}^{-3}$  до нуля. Константа  $k_4$ , характеризующая перенос энергии от ЗР-атома к молекуле в  $\Sigma_{g}^{-2}$  -состоянии, в 4 раз больше константы  $k_1$ , которая соответствует такому же процессу при возбуждении молекулы в  $\mathcal{B}' \Pi_{\mu}$  -состояние. Поскольку оценки сделаны для упрощенного варианта, различье между константами может указывать на необходимость учета и других молекулярных состояний.

Подтверждающим результатом в этсм смысле можно считать тот факт, что в области 850-1100 на была зарегистрирована молекулярная полоса, которую в соответствии с литературными данными /10-13/ можно отнести к триплет-триплетному переходу  ${}^{3}\Sigma_{9}^{*} - {}^{3}\Sigma_{4}^{*}$ . Это указывает на возможность участия метастабильного  ${}^{3}\Sigma_{9}^{*} - {}^{5}\Sigma_{4}^{*}$ . Состояния в перераспредельнии энергии между модекулярными состояниями //2,

.Список литературы

- I. Папернов С.М., Пветида Д.Л.-В кн.: Процессы переноса энергии в парах металлов. Рига: ЛГУ им. П. Стучки, 1981, с. 31-41.
- Папернов ...М., Швегжда М.Л., Янсон М.Л.- В кн.: Процессм переноса энергии в парах металлов. Рига: ЛГУ им. П. Стучки, 1983. с. 40-58.
- Путниня С.Я., Швегжда К.Л., Ансон М.Л. .ЖПС, 1984; т. 40, вып. 5, с. 731-737.
- Hedges R.E.M., Drummond D.L., Gallagher A. Phys. Rev.A , 1972, vol.6, N 4, p. 1519-1544.
- Gallagher A.-In:Atomic Physics 4. New York and London : Plenum Press, 1975, p. 559-574.
- 6 . König B., Weber H.G.-Z. Phys. A. 1979, vol. 293, p. 351-352.
- 7 Demtröder W., Stetzenbach W., Stock M.et.al. J. Mol. Spectrosc., 19%, vol.61, N 4, p.382-394.
- 8. Вонч-Бруевич А.М., Вартанян Т.А., Хромов В.В.- ЖЭТФ, 1982, т.82. вып. I. с. 101-108.
- 9 . Gwanghi Jeung.-J. Phys. B: At. Mol. Phys., 1953, vol. 16 ,p. 4289-4297.
- 10. Allegrini M., Not L.-Opt.Commun., 1980, vol. 32, NI, p. 91-95.
- 11. Vasilakis A., Bhaskar N. D., Happer W.-J. Chem. Phys., 1980 , vol.73, N 4, p. 1490-1493.
- 12. Woerdman J.P., de Groot J.J.-Ohem. Phys. Lett., 1981, vol . 80, N 2, p. 220-224.
- -13. Konowalow D.D., Julienne P.S. -J. Chem. Phys., 1980, vol. 72 , # 11, p. 5815-5818.

А.З.Девдариани, А.Л.Загребин ЛГУ им.А.А.Жданова (Ленинград)

# НЕАДИАБАТИЧЕСКИЕ ПЕРЕХОДЫ ПРИ СТОЛКНОВЕНИЯХ ВОЗБУЖДЕННЫХ АТОМОВ ВТОРОЙ ГРУППЫ С АТОМАМИ ИНЕРТНЫХ ГАЗОВ

Переходы между компонентами тонкой структуры являются одними из наиболее эффективных неупругих процессов при медленных атомных столкновениях. К настоящему времени такие процессы достаточно хорошо как экспериментально, так и теоретически исследованы для столкновений резонанско возбужденных атомов целочных металлов с атомами инертных газов (см., например,/1-5/). Другим примером таких процессов являвтся реакции

 $M(ns np {}^{3}P_{i}) + \chi({}^{\prime}S_{o}) \rightarrow M(ns np {}^{3}P_{i}) + \chi({}^{\prime}S_{o}),$  (I) где M - возбужденный атом второй группы,  $\chi$  - атом инертного газа. В работах /6-8/ сформулирована полуклассическая теория процессов (I) и получены численные оценки сечений. В указанных работах рассматривался характерный для большинства пар МХ случай "слабоге поляризационного взаимодействия", корреляционная диаграмма для которого найдена авторами /9/. В работах /IO,II/ методом сильной связи выполнен расчет сечений переходов  $j \rightarrow j'$  при столкновениях ( $a({}^{3}P_{i}), Mg({}^{3}P_{i})$ +He. Экспериментально реакции ( $a({}^{3}P_{i})$ +He и  $Sr({}^{3}P_{i})$ +Ar исследовались в работах /I2-I4/.

Целью данной работы является полуклассический анализ процессов (I) в случае "сильного поляризационного взаимо – действия" и оценка сечений для тепловых столкновений  $le(2^{3}P)$ + + Ar, Kr, Xe.

В области больших и средних межьядерных расстояний адиабатические термы  $U_i(R)$  квазимолекулы  $M(ns np {}^{5}P) - X({}^{1}S_{o})$  выражаются через потенциалы взаимодействия атомов  $M({}^{3}P)$  и  $X({}^{1}S_{o})$ в  $\Sigma - и \Pi$  -состояниях без учета спин-орбитального расщепления  $H_G(R)$ ,  $H_T(R)$  и через спин-орбитальные расщепления  $\Delta \tilde{\mathcal{E}}_{j}^{rs}$ . между компонентами тонкой структуры в свобсдном атоме  $M({}^{3}P)$ /6,9/. Для большинства пар МХ характерно "слабое поляриза ционное взаимодействие" /6-8/. В этом случае при больших значениях  $\mathcal{R}$  в области преобладания поляризационного взаимодействия ( $\Delta H - H_G - H_T < 0$ ) величина  $|\Delta H| < \Delta \varepsilon$  так, что для каждой пары состояний одинаковой симметрии  $\mathcal{Q} = O^{-}(^{3}P_{2})$ ,  $O^{-}(^{3}P_{0})$  и I( $^{3}P_{2}$ ), I( $^{3}P_{1}$ ) имеется лис по одной области сильной связи состояний в окрестности межьядерных расстояний  $\mathcal{R}_{ex}^{O^{-}}$ ,  $\mathcal{R}_{ex}^{i}$  /6/, где преобладает обменное взаимодействие ( $\Delta H > 0$ ) и достигается условие  $\Delta H(\mathcal{R}_{ex}^{O^{-}}) = \Delta \varepsilon_{O2}$ ,  $\Delta \varepsilon_{I2}$ .

Тонкое расщепление  $\Delta \mathcal{E}_{jj'}$  в атоме  $\mathcal{B}e$  мало, и для пар  $\mathcal{B}e$ - Ar, Kr, Xe значения  $|\Delta H(R)| > \Delta \mathcal{E}$  могут достигат: ся в области преобладания поляризационного взаимодействия ( $\Delta H < 0$ ), что и соответствует случаю "сильного поляризационного взаимодействия". Выполнение условия  $|\Delta H| > \Delta \mathcal{E}$  при  $\Delta H < 0$  приводит к появлению дополнительных областей сильной связи состояний одинаковой симметрии (состояния с  $\mathcal{Q} = 0$  и состояния с  $\mathcal{Q} = I$ ). Центры соответствующих областей определяются условиями /5,6/  $Q^-$ 

$$-\Delta H(R_{pol}) = \Delta \mathcal{E}_{02}, \qquad (2)$$
$$-\Delta H(R_{pol}) = \Delta \mathcal{E}_{12}.$$

Если области сильной связи вблизи  $R_{pol}$  и  $R_{ex}$  достаточно разделены ( $R_{pol} - R_{ex} > \Delta R_{pol}$ ,  $\Delta R_{pol} - R_{pol}/6$ , см. ниже), то область сильной связи вблизи  $R_{et}$  представляет собой извипересечения  $\mathcal{Q}$  -компонент  ${}^{3}\Sigma$  – и  ${}^{3}\Pi$  - термов ( ${}^{5}\Sigma_{0}^{*}$ -и  ${}^{3}\Pi_{0}^{*}$ ,  ${}^{3}\Sigma_{1}^{*}$  и  ${}^{3}\Pi_{1}$ ) с расщеплением между адиабатическими термами  $\Delta U_{min} - 2a \sim \Delta \mathcal{E}$ . Качественная картина термов для такой ситуации показана на рис. I, причем отмеченные выше квазилересечения  ${}^{3}\Pi_{2}^{*}$  – и  ${}^{3}\Gamma_{2}^{*}$  – термов заменены пересечениями.

Рассмотрим неациабатические переходы при столкновеннях  $Be(2^{3}P_{j}) + Ar, Kr, Xe$ . Переходы между компонентами тонкой структуры в атоме  $Be(2^{3}P)$  при столкновениях с атомами Ar, Kr, Xe рассматриваются в предположении, что для этих пер реализуется случай "сильного поляризационного взаимодейст вля",  $R_{pol} \cdot R_{ex} > \Delta R_{pol}$  й в области  $R \ge R_{pol}$  величины  $H_{d}$  и  $H_{T}$  определяются дисперсионным взаимодействием ( $H_{d,T}$  =  $C_{d,T} / R^{6}$ ). Отметим, что случай "сильного поляризационного взаимодействия" для столкновений резонансно возбужденных щелочных атомов с атомами инертных газов, который реализуется для пар  $Li(2^{2}P) + Ar$ , Kr, Xe, рассмотрен в работах /4,5/.



<u>Рис. I. Качественная картина термов квазимолекулы</u>  $M(ns np {}^{3}P - \chi('S_{o}))$  при сильном поляризационном взаимодействии. Квазипересечения  $\mathcal{Q}$  -компонент  ${}^{3}\Sigma^{+}$  и  ${}^{3}\Pi$  - термов вблизи  $\mathcal{R}_{ex}$  заменены пересечениями.

При тепловых столкновениях Be(2<sup>3</sup>P)+ X (T≥300 K) параметры Месси для радиальных и кориолисовых переходов малы:

JAE Root <<1; (3) AERpol <<1, (4)

так, что реализуются квазирезонансные условия столкновения (такие условия для случая "слабого поляризационного взаимодействия" рассмотрены в /7/). Основным механизмом неаднабатических переходов, которые приводят к изменению тонкого состояния, являются: 1) индуцированные радиальным движением переходы между термами одинаковой симметрии 0 -0 и I -I в окрестности Rpol с полушириной A Rpol (вероятности - таких переходов рого. и рн 1; 2) индуцированные вращением межьядерной оси в области R < Rpol кориолисовы переходы Q-Я между 2 -компонентами 57 -терма (их вероятности Род) и £ -компонентами <sup>3</sup>Σ<sup>\*</sup> - терма (их вероятности <sup>+</sup> 𝔅𝒫'). Переходы в области извазипересечения термов 20 и 32 вблизи Rer маловероятні, так как параметр модели Ландау -Зинера 2Ta2/AF J- << 1. Аналогичное диабатическое прохождение областей квазипересечений термов 2 21/2. и 2/11/2 при столк новениях Li (2<sup>2</sup>P)+ Ar, Kr, Xe установлено в /5/. Переходы 3Ло -320, , также несущественны /6,7/. Таким образом, суммируя по всем возможным последовательностям переходов, для полных вероятностей переходов 3P; -3P; получаем

$$\begin{split} & \mathcal{P}({}^{3}P_{2} - {}^{3}P_{1}) = \frac{2}{5} \left[ {}^{9}P_{21}P_{H} + {}^{9}P_{20} \cdot \right] \star \\ & \star \frac{2}{5} \left[ p_{H} {}^{2} \mathcal{P}_{H} (1 - p_{H}) + (1 - p_{H}) {}^{9} \mathcal{P}_{H} + (1 - p_{H}) {}^{9} \mathcal{P}_{10} \star \right] \star \end{split}$$
(5) + 5 [ poo Poi (1-pn)+ (1-poo) Poi pu];

 $\begin{array}{c} P({}^{3}P_{2}-{}^{3}P_{0}) = \frac{2}{3} P_{20} - p \sigma \sigma^{-+} \\ + \frac{2}{3} \left[ p_{11} P_{10} \left( l - p \sigma \sigma \right) + \left( l - p_{11} \right)^{n} P_{10} p \sigma \sigma^{-+} \right] + \end{array}$ + \$ [poo Poo (1-poo)+(1-poo) Poo poo ];

(6)

(7)

P(3P,-3P)=3[(1-p1) P10- (1-P00)+ + P11 P10 P00 ].

- 32 -

Переходн между состояниями одинаковой симметрии могут онть описаны в рамках экспоненциальной модели Никитина /15/, причем для дисперсионного взаимодействия ( $I/R^{6}$ ) параметр модели  $4 \cdot 6/R_{pol}$ ,  $R_{pol} - (\frac{C_4 \cdot C_T}{\Delta t_{op}})^{2}$ , полуширина области неадиа-

батичности  $\Delta R_{pol} = \frac{5pol}{6}$ . Для перехода  $\mathcal{D} = I = I$  параметр соне= 0 (модель Демкова / 16/), а для перехода  $0^{-} = 0^{-}$  величина соне= 1/3 аналогично переходам в целочных металлах в случае сильного поляризационного взаимодействия / 1/. Вследствие квазирезонансности столкновения (3) вероятности  $Po_{00} \cdot P_{H}$ совпадают с предельными значениями приближения внезапнох возмущений  $P = (1 + cot \theta)/2$  так, что  $P_{000} = 2/3$ ,  $P_{11} = 1/2$ .

Вероятности кориолисовых переходов  $P_{QQ'}$ ,  $P_{QQ'}$  при условии (4) определяются углами  $\Phi_{\Sigma}$  и  $\Phi_{\Pi}$  поворота молекулярной оси при прохождении области  $R < R_{pol}$  по термам  ${}^{3}\Sigma^{*}$ и M /7,17/:

"By - "Pri - "Pri - "Pro - 2"Pro - 2"Pro - + sin \$p; "Pop "Pop + 2 P20 + 2 P20 + + [1-cos \$ ]2; "S22 - "Yoo" - "Poor - +[1+ cos \$ 12; Pi = cos da: (8)  ${}^{z}P_{p_{1}} - 2{}^{z}P_{10} - sin^{2}\phi_{z};$  $P_{p_{2}} = cos^{2}\phi_{s}, P_{p_{1}} = \frac{1}{2}[1+cos^{2}\phi_{s}].$ 

В поиближении прямолинейного пролета получаем следурщие оценки сечений

$$\begin{split} &\mathcal{G}({}^{3}P_{2}-{}^{3}P_{1}) \cdot \frac{29}{90} \, \overline{TR_{pol}^{2}} \,, \quad \mathcal{G}({}^{3}P_{1}-{}^{3}P_{2}) \cdot \frac{29}{54} \, \overline{TR_{pol}^{2}} \,; \\ &\mathcal{G}({}^{3}P_{2}-{}^{3}P_{0}) \cdot \frac{16}{135} \, \overline{TR_{pol}^{2}} \,, \quad \mathcal{G}({}^{3}P_{0}-{}^{3}P_{2}) \cdot \frac{16}{27} \, \overline{TR_{pol}^{2}} \,; \quad (9) \\ &\mathcal{G}({}^{3}P_{1}-{}^{3}P_{0}) \cdot \frac{2}{27} \, \overline{TR_{pol}^{2}} \,, \quad \mathcal{G}({}^{3}P_{0}-{}^{3}P_{1}) \cdot \frac{2}{9} \, \overline{TR_{pol}^{2}} \,; \quad (9) \end{split}$$

Отметим, что выражения (9) совпадают ( с точностью до замыны  $R_{pel}$  на  $R_{ex}$ ) с полученными в работе /7/ для случая слабого поляризационного взаимодействия, что естественно в приближении прямолинейного пролета в квазирезонансных условиях. Для сценки сечений воспользуемся асимптотическими значениями величины  $C_{G} - C_{T} = \frac{3}{5} \beta < r^{2} > /18/$ , где  $\beta$  - поляризуемость атома  $X('S_{o}) < r^{2} > -$  средний квадрат радиуса возбужденного  $\beta$  - электрона атома M. Для пар  $\beta e + Ar$ , Kr, Xe по лучаем слерующие значения величины  $TR_{pel}^{2}$ : 480, 550, 650  $a_{o}^{2}$ соответственно.

Основная неточность формул (9) связана с использованием приближения прямолинейного пролета при усреднении по параметрам  $\rho$  величины  $3in^2 \phi_{z,n}$ . Влияние отталкивательной части  $32^n$  - терма можно было бы учесть точнее в приближении рассеяния на твердой сфере /19/. При вычислении  $\phi_n$  может оказаться необходимым учет влияния сил притяжения. Отсут ствие надежных данных о взаимодействии Be - Ar, Kr, Xe не позволяет выполнить отмеченные уточнения.

### Список литературы

- I. Nikitin E.E.-Adv. Chem. Phys., 1975, vol. 28, p. 317-377.
- Дашевская Е.И., Резников А.И. Опт.и спектр., 1980, т. 48, вып.4, с. 644-650.
- Nikitin E.E., Reznikov A.I.-J. Phys. B, 1979, vol. 13, N 3. p. 157-160.
- 4. Reznikov A.I.-J. Phys. B, 1982, vol. 15, N 5, p. L157-L161.
- 5. Reznikov A.I.-Chem. Phys. Lett., 1976, vcl. 44, N 1, p. 41-45.
- 6. Девдариани А.З.,Загребин А.Л.-Хим.физика,1982,т.1,№ 7,с. 947-956.

24	1141-1143.
8.	Девдариани А.З.,Загребин А.ЛХим.физика, 1983, т.2, # 2, с. 163-167.
9.	Voronin A.I., Kvlividze V.ATheoret.Chim.Acta, 1967, vol. 8.N 3.p. 334-340.
10.	Alexander M.H., Orlikowski T., Straub J.EPhys.Rev.A, 1983, vol. A28, N 1, p. 73-82.
п.	Orlikowski T., Alexander M.HJ. Phys. B, 1984, vor. 17, N 11,
12.	Yuh J.H., Dagdigian P.JPhys. Rev. A, 1983, vol. 28, N 1, p.
13.	Hale M.O., Leone S.RJ. Chem. Phys., 1983, vol.79, N 7, p. 3352-3362.
14.	Борисов Е.Н., Редько Т.ПВ кн.: Тезисы докладов IX ВКЭАС, Часть I. Рига, 1984, с. III.
15.	Nikitin E.EAdv. Quant. Chem., 1970, vol.5, p.135-184.
16.	Демков Ю.НЖЭТФ, 1963, т. 45, № 2, с. 195-201.
17.	Дашевская Е.ИОпт.и спектр., 1979, т. 46, вып. 3, с. 423-430.
18.	Смирнов Б.М. Асимптотические методы в теории атомных столкновений. М.: Атомиздат, 1973, 294 с.
TO	Tamapayar F. M. Masur & May Kappar P. Huyumuu F. F. Omm

 Дагэвская Е.И., Масну Ф., Мак-Кэррол Р., Никитин Е.Е.-Спт. и спектр., 1974, т. 37, вып. 2, с. 209-215.

7. Девдариани А.2., Загребин А.Л.-Хим. физика, 1902, т. 1, # 8, с.
В.А.Круглевский ЛГУ им.П.Стучки (Рига)

### РАСЧЕТ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ МЕЖДУ АТОМАМИ С НЕСКОЛЬКИМИ ОТКРЫТЫМИ ОБОЛОЧКАМИ

Вероятности неупругих переходов при атомных столкновениях и радиационных столкновений определяются характером межатомного взаимодействия на больших межьядерных расстояниях. Взаимодействие слабо связанных атомов существенно также в некоторых задачах физики твердого тела. В отличие от большинства квантовохимических задач, в которых основным метопом расчета является решение уравнений самосогласованного поля в приблыжении молекулярных орбиталей, для слабо связанных или отталкивающихся атомов целесообразнее использовать различные модитикации метода Гайтлера-Лондона /1-5/. В работах /3,5/ в рамках этого метода найдены выражения матричных элементов электронного гамильтониана двухатомной системы, в которой каждый атом представлен одной оболочкой с эквивалентными электронами. Однако при учете взаимодействия конфигурация, а также вклада ионных состояний появляется необходимость вычисления матричных элементов, не диагональных по конфигурации. Кроме того, хотя матричные элементы /5/. выраженные непосредственно через генеалогическое разложение атомных волновых функций по функциям связанных моментов . обладают однотипностью, удобной для программирования на ЭВМ, высокая кратность суммирования по конным термам затрудняет вычисление членов, соответствующих высоким степеням одноэлектронных интегралов перекрытия. Поэтому в настоящей работе матричные элэменты эператоров взаимодействия между двумя оболочками, центрированными на разных атомах, выражены через приведенные матричные элементы операторов  $\mathcal{U}^{k}$  и  $V_{*}^{k'}$ . широко используемых в теории атомных спектров.

"олученные выражения легко распространить на случай взаимодействия двух ат чов с нескольними открытыми оболочками, используя формализм обобщенных генеалогических коэффициентов /7-8/. Электронные термы двухатомной системы вычисляются диагонализацией матрицы  $\|H_{ik} - ES_{ik}\|$ , где  $H_{ik}$  - матрич ные элементы оператора:

- 37 -

$$\hat{I} = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^{N_0} \Delta_i - \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{j=1}^{N_0} \Delta_j - \sum_{i=a,b} \sum_{a=a,b}^{eHe^2} \left( \sum_{j=1}^{N_0} \frac{1}{T_{aj}} + \frac{1}{T_{aj}} \right)$$

$$\sum_{i=1}^{n} \frac{1}{r_{ij}} + e^{2} \left( \sum_{i=1}^{n} \frac{1}{r_{ij}} + \sum_{i=1}^{n} \frac{1}{r_{ij}} \right)$$

Здесь і , і, і - номера влектронов атома " a ", а ј , ј. је - номера олектронов атома " b ".

Матрица гамильтониана диагонализуется в базисе функций:

(1)

 $\Psi_{i} = \hat{A} \sum_{M_{S_{1}},M_{S_{2}}} \begin{bmatrix} S_{1} & S_{2} & S \\ M_{S_{1}},M_{S_{2}} & M_{S_{2}} \end{bmatrix} \Psi_{S_{1}L_{1}}M_{S_{1}}M_{L_{1}} & \Psi_{S_{2}L_{2}}M_{S_{2}}M_{L_{2}}, \quad (2)$ 

где

4SLMSM = Starst S [S' \$ S ][L' L ] gem (Fn) OIA (Sen). (2a)

Оператор антисимметризации между атомами

 $\hat{A} = \begin{pmatrix} N_a + N_b \end{pmatrix}^{-N_a} \begin{pmatrix} 1 - \sum_{i=1}^{N_a} \hat{P}_{ij} + \sum_{i=1}^{N_a} \sum_{j=1}^{P_{ij}} \hat{P}_{i_2 j_2} - \dots \end{pmatrix}$ (3)

выражается через операторы парных межатомных перестановок электронов. Поскольку перестановки высокой кратности приводят к появлению матричных элементов, пропорциональных высоким степеням одноэлектронных интегралов перекрытия, в интересущей нас области межьядерных расстояний в выражении (3) можно ограниючться небольшим количеством членов.

Для понижения кратности суммирования по ионным термам в генеалогическом разложении, а также для облегчения перехода к кногооболочечному случав представим в отличие от /3, 5/ матричные элементы сператора  $\frac{\mathcal{L}^2}{\mathcal{L}^2} \cdot \hat{A}$  через приведенные матричные элементы тензорных операторов  $\mathcal{U}^{\kappa}$  и  $V^{kT}$ , введенных Ракахом. Для этой цели используем разложение двух коэффициентов Клебша-Гордана по произведениям коэффициентов Клебша-Гордана и  $\delta_{\ell}^{\prime}$  - символа:

 $\begin{bmatrix} L_{i}^{\prime} \ La \ L_{i} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} L_{i}^{\prime} \ la \ L_{i}^{*} \end{bmatrix}^{2} \sqrt{(2L+i)(2L_{i}^{*}+i)} (-i)^{L_{i}^{*}+M_{i}+l_{a}-m_{3}} \times M_{i}^{*} \end{bmatrix}^{2} \sqrt{(2L+i)(2L_{i}^{*}+i)} (-i)^{L_{i}^{*}+M_{i}+l_{a}-m_{3}} \times M_{i}^{*} = \sqrt{(2L+i)(2L_{i}+i)} (-i)^{L_{i}+m_{3}} \times M_{i}^{*} = \sqrt{(2L+i)(2L_{i}+m_{3})} \times M_{i}^{*} = \sqrt{(2L+i)(2L_{i}+m_$  $\times \sum_{kq} (-0^{L_{1}^{\prime}+k-t_{a}+L_{1}^{\prime}+q} \left\{ \begin{array}{c} l_{a} L_{1} L_{1}^{\prime} \\ L_{1}^{\prime \prime} l_{a} k \end{array} \right\} \left[ \begin{array}{c} l_{a} l_{a} k \\ m_{1} - m_{3} \end{array} \right] \left[ \begin{array}{c} L_{1} L_{1}^{\prime \prime} k \\ M_{1} - M_{1}^{\prime \prime} \end{array} \right] \left[ \begin{array}{c} L_{1} L_{1}^{\prime \prime} k \\ L_{1}^{\prime \prime} l_{a} k \end{array} \right] \left[ \begin{array}{c} L_{1} L_{1} L_{1}^{\prime \prime} k \\ M_{1} - M_{1}^{\prime \prime} \end{array} \right] \left[ \begin{array}{c} L_{1} L_{1} L_{1}^{\prime \prime} k \\ L_{1}^{\prime \prime} L_{2} L_{1}^{\prime \prime} L_{2} L_{1}^{\prime \prime} \right] \left[ \begin{array}{c} L_{1} L_{1} L_{1} L_{1}^{\prime \prime} L_{1} L_{1}^{\prime \prime} L_{1}^{\prime \prime} L_{1}^{\prime \prime} L_{1}^{\prime} L_{1}^{\prime} L_{1}^{\prime \prime} L_{1}^{\prime} L_{1}^{\prime$ Сравнивая правую часть формулы (4) с определением приведенных матричных элементов оператора И\*  $(l_a^n f_{S_1} L_1 \| u^k \| l_a^n f^* S_1 L_1^*) =$ (5)  $= N \sum_{\substack{j \in S_{1}'L_{1}' \\ j_{1}'S_{1}'L_{1}'}} G_{j_{1}'S_{1}'L_{1}'}^{\frac{1}{2}} G_{j_{1}'S_{1}'L_{1}'}^{\frac{1}{2}} (-1)^{L_{1}'+k-\ell+L_{1}'} \frac{1}{\sqrt{(2L_{1}'+1)(2L_{1}''+1)}} \int_{L_{1}''L_{0}''}^{\ell_{0}} L_{1}'L_{1}'} L_{1}''L_{$ можно получить выражение коэффициента при двухэлектронном кулоновском интеграле А m, m2 m3 m4, определяемого CTBA:  $< SM_{s}S_{1}L_{1}M_{1}S_{2}L_{2}M_{2} | \sum_{ij} \frac{e^{c}}{r_{ij}} | SMS_{1}^{*}L_{1}^{*}M_{1}^{*}S_{2}^{*}L_{2}^{*}M_{2}^{*} \rangle =$  $= \sum_{m_{1}m_{2}} A_{m_{1}m_{2}m_{3}m_{4}} \langle m_{1}(i)m_{2}(j) | \frac{e^{2}}{r_{ij}} | m_{3}(i)m_{4}(j) \rangle.$ (6) Здесь и в дальнейших формулах m; с нечетным индексом. относится к атому "а", а с четным - к атому "б". Из формул (2), (4) и (5) следует, что  $A_{m_1m_2m_3m_4} = (-1)^{L_1^* + M_1 + L_2^* + M_2 + l_a - m_3 + l_b - m_4} \times$ x E E (-1) ga+qb [la la ka ][lb lb kb ] x kaga kgb [m1 - m3 ga][m2 - m4 gb] x  $\times \left[ \begin{array}{c} L_{1} & L_{1}^{*} & k_{a} \\ M_{1} & -M_{1}^{*} & q_{a} \end{array} \right] \left[ \begin{array}{c} L_{2} & L_{2}^{*} & k_{b} \\ M_{2} & -M_{2}^{*} & q_{b} \end{array} \right] \left( \begin{array}{c} S_{1} L_{1} & \| \, U^{k} a \| \, S_{1} \, L_{1}^{*} \right) \times \\ \end{array}$ x (S2 L2 11 U Ko 11 S2 L2) S52 S2 OS, 5. . (7) Запишем многоэлектронный обменный интеграл в виде: < SMs S, L, M, S2 L2 M2 / S Pij / S Ms S, \*L1 M, \*S2 L2 M2 >= (8)  $= \sum_{m_1m_2m_3m_4} B_{m_1m_2m_3m_4} \langle m_1(i) m_2(j) | \frac{e^2}{r_{ij}} | m_3(j) m_4(i) \rangle.$ Поскольку оператор парной перестановки

- 38

 $P_{ij} = P_{ij}^{(x)} (-\frac{1}{2} + 4\overline{s_i} \overline{s_j}),$  (9) где  $P_{ij}^{(x)}$  - оператор перестановки координат электронов *i* и *j* коэффициент  $B_{m_1m_2m_3m_4}$  содержит матричные элементы оператора

- 39 .

$$\begin{pmatrix} l_{a}^{h} j_{i}^{*} s_{i} L_{i} \parallel V^{h} \parallel l_{a}^{h} \delta_{i}^{*} s_{i}^{*} L_{i}^{*} \end{pmatrix} = \\ = N_{a} \sum_{j_{i}^{h} s_{i}^{*} L_{i}^{*}} G_{j_{i}^{h} s_{i}^{+} L_{i}^{h}}^{j_{i}^{*}} S_{i}^{*} L_{i}^{*} (-1)^{L_{i}^{h} + S_{i}^{+} + k + L_{i} + S_{i} - L_{a} - \frac{1}{2} + 1} \times \\ = N_{a} \sum_{j_{i}^{h} s_{i}^{*} L_{i}^{+}} G_{j_{i}^{h} s_{i}^{+} L_{i}^{+}}^{j_{i}^{*}} S_{i}^{*} L_{i}^{+} (-1)^{L_{i}^{h} + S_{i}^{+} + k + L_{i} + S_{i} - L_{a} - \frac{1}{2} + 1} \times \\ = N_{a} \sum_{j_{i}^{h} s_{i}^{*} L_{i}^{+}} G_{j_{i}^{h} s_{i}^{+} L_{i}^{+}}^{j_{i}^{*}} S_{i}^{*} L_{i}^{+} (-1)^{L_{i}^{h} + S_{i}^{+} + k + L_{i} + S_{i} - L_{a} - \frac{1}{2} + 1} \times \\ = N_{a} \sum_{j_{i}^{h} s_{i}^{*} L_{i}^{+}} G_{j_{i}^{h} s_{i}^{+} L_{i}^{+}}^{j_{i}^{*}} S_{i}^{*} L_{i}^{+} (-1)^{L_{i}^{h} + S_{i}^{+} + k + L_{i} + S_{i} - L_{a} - \frac{1}{2} + 1} \times \\ = N_{a} \sum_{j_{i}^{h} s_{i}^{*} L_{i}^{+}} G_{j_{i}^{h} s_{i}^{+} L_{i}^{+}}^{j_{i}^{*}} S_{i}^{*} L_{i}^{+} (-1)^{L_{i}^{h} + S_{i}^{+} + k + L_{i} + S_{i} - L_{a} - \frac{1}{2} + 1} \times \\ = N_{a} \sum_{j_{i}^{h} s_{i}^{*} L_{i}^{+}} G_{j_{i}^{h} s_{i}^{+} L_{i}^{+}}^{j_{i}^{h}} S_{i}^{h} L_{i}^{h} (-1)^{L_{i}^{h} + S_{i}^{+} + L_{i} + S_{i} - L_{a} - \frac{1}{2} + 1} \times \\ = N_{a} \sum_{j_{i}^{h} s_{i}^{h} L_{i}^{h}} \sum_{j_{i}^{h} s_{i}^{h} L_{i}^{h}} S_{i}^{h} L_{i}^{h} (-1)^{L_{i}^{h} + S_{i}^{h} + S_{i} + L_{i} + S_{i} - L_{a} - \frac{1}{2} + 1} \times \\ = N_{a} \sum_{j_{i}^{h} s_{i}^{h} L_{i}^{h}} \sum_{j_{i}^{h} L_{i}^{h}} \sum_{j_{i}^{h} s_{i}^{h} L_{i}^{h}} \sum_{j_{i}^{h} L_{i}^{h} L_{i}^{h} L_{i}^{h}} \sum_{j_{i}^{h} L_{i}^{h} L_{i}^{h}} \sum_{j_{i}^{h} L_{i}^{h}}$$

 $\times \sqrt{\frac{3}{2}(2L_{i}+1)(2S_{i}+1)(2L_{i}^{*}+1)(2S_{i}^{*}+1)} \begin{pmatrix} L_{i} & L_{i} & L_{i} \\ L_{i}^{*} & \ell & k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L_{i} & L_{i} \\ L_{i}^{*} & \ell & k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L_{i} & L_{i} \\ L_{i}^{*} & \ell & k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L_{i} & L_{i} \\ L_{i}^{*} & \ell & k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L_{i} & L_{i} \\ L_{i}^{*} & \ell & k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L_{i} & L_{i} \\ L_{i}^{*} & \ell & k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L_{i} & L_{i} \\ L_{i}^{*} & \ell & k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L_{i} & L_{i} \\ L_{i}^{*} & \ell & k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L_{i} & L_{i} \\ L_{i}^{*} & \ell & k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L_{i} & L_{i} \\ L_{i}^{*} & \ell & k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L_{i} & L_{i} \\ L_{i}^{*} & \ell & k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L_{i} & L_{i} \\ L_{i}^{*} & \ell & k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L_{i} & L_{i} \\ L_{i}^{*} & \ell & k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L_{i} & L_{i} \\ L_{i}^{*} & \ell & k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L_{i} & L_{i} \\ L_{i}^{*} & \ell & k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L_{i} & L_{i} \\ L_{i}^{*} & \ell & k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L_{i} & L_{i} \\ L_{i}^{*} & \ell & k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L_{i} & L_{i} \\ L_{i}^{*} & \ell & k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L_{i} & L_{i} \\ L_{i}^{*} & \ell & k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L_{i} & L_{i} \\ L_{i}^{*} & \ell & k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L_{i} & L_{i} \\ L_{i}^{*} & \ell & k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L_{i} & L_{i} \\ L_{i}^{*} & \ell & k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L_{i} & L_{i} \\ L_{i}^{*} & \ell & k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L_{i} & L_{i} \\ L_{i}^{*} & \ell & k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L_{i} & L_{i} \\ L_{i}^{*} & L_{i} \\ L_{i}^{*} & \ell & k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L_{i} & L_{i} \\ L_{i}^{*} & L_{i} \\ L_{i}^{*} & L_{i} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L_{i} & L_{i} \\ L_{i}^{*} & L_{i} \\ L_{i}^{*} & L_{i} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L_{i} & L_{i} \\ L_{i}^{*} & L_{i} \\ L_{i}^{*} & L_{i} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L_{i} & L_{i} \\ L_{i}^{*} & L_{i} \\ L_{i}^{*} & L_{i} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L_{i} & L_{i} \\ L_{i}^{*} & L_{i} \\ L_{i}^{*} & L_{i} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L_{i} & L_{i} \\ L_{i}^{*} & L_{i} \\ L_{i}^{*} & L_{i} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L_{i} & L_{i} \\ L_{i}^{*} & L_{i} \\ L_{i}^{*} & L_{i} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L_{i} & L_{i} \\ L_{i}^{*} & L_{i} \\ L_{i}^{*} & L_{i} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L_{i} & L_{i} \\ L_{i}^{*} & L_{i} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L_{i} & L_{i} \\ L_{i}^{*} & L_{i} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L_{i} & L_{i} \\ L_{i}^{*} & L_{i} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L_{i} & L_{i} \\ L_{i}^{*} & L_{i} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L_{i} & L_{i} \\ L_{i}^{*} & L_{i} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L_{i} & L_{i} \\ L_{i} & L_{i} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L_{i} & L_{i} \\ L_{i} & L_{i} \end{pmatrix} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L_{i} & L_{i} \\ L_{i} & L_{i} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L_{i} & L_{i} \\ L_{i} & L_{i} \end{pmatrix} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L_{i} & L_{i} \\ L_{i} & L_{i} \end{pmatrix} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L_{i} & L_{i} \\ L_{i} & L_{i} \end{pmatrix} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L_{i} & L_{i} \\ L_{i} & L_{i} \end{pmatrix} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L_{i} & L_{i} \\ L_{i} & L_{i} \end{pmatrix} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L_{i} & L_{i} \end{pmatrix} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L_{i} & L_{i} \\ L_{i} & L_{i} \end{pmatrix} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L_{i} & L$ (10)

Так как первый член в уревнении (9) имеет нулевой ранг по спину, а второй член является скалярным произведением двух спиновых тензоров первого ранга:

$$B_{m_1m_2m_3m_4} = -\frac{f}{2}A_{m_1m_2m_3m_4} + B_{m_1m_2m_3m_4}^{(0)}, \quad (11)$$

где

 $B_{m_{1}m_{2}m_{3}m_{4}}^{(l)} = 4(-1)^{s_{1}^{*}+s_{2}+s} \left\{ \begin{array}{c} S_{1} & S_{2} & S \\ S_{2}^{*} & S_{1}^{*} & 1 \end{array} \right\} \sum_{k_{a}q_{a}} \sum_{k_{b}q_{b}} (-1)^{q_{a}+q_{b}} x$ 

 $\times (-1)^{L_{1}^{*}+M_{1}+L_{1}-m_{3}} \begin{bmatrix} l_{a} l_{a} k_{a} \\ m_{4}-m_{3} q_{a} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} L_{1} L_{1}^{*} k_{a} \\ M_{4}-M_{1}^{*} q_{a} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} l_{b} l_{b} k_{b} \\ m_{2}-m_{4} q_{b} \end{bmatrix} \times \\ \times \begin{bmatrix} L_{2} L_{2}^{*} k_{b} \\ M_{2}-M_{2}^{*} q_{b} \end{bmatrix} (-1)^{L_{2}^{*}+l_{2}^{*}-m_{4}^{*}+M_{2}^{*}} (S_{1}L_{1}N^{*} M_{3}L_{1}^{*}) (S_{2}L_{2}N^{*})^{K_{3}^{*}} (S_{2}L_{2}).$   $\times \begin{bmatrix} M_{2} - M_{2}^{*} q_{b} \\ M_{2} - M_{2}^{*} q_{b} \end{bmatrix} (-1)^{L_{2}^{*}+l_{2}^{*}-m_{4}^{*}+M_{2}^{*}} (S_{1}L_{1}N^{*} M_{3}L_{1}^{*}) (S_{2}L_{2}N^{*})^{K_{3}^{*}} (S_{2}L_{2}^{*}).$ 

Формулы (1.) и (12) совпадают с многоэлектронным коэффици ентом при двухэлектронных обменных интегралах, приведенных в работе /6/. Несколько сложнее выразить через  $\mathcal{U}^k$  и  $V^{kl}$ матричные элементы трех- и четырехэлектронных операторов.

Например, в случая произведения гибридного интеграла на интеграл перекрытия необходимс вычислить многоэлектроннуъ часть матричного элемента оператора  $\sum_{i=1}^{N_0} \sum_{i=1}^{N_a} \sum_{j=1}^{N_b} \frac{e^{ij}}{r_{ij}} P_{ij}, (j, \neq j).$ 

Изпосредственное отщепление двух электронных состояний на атоме " $\dot{c}$ " повышает кратность суммирования по ионным термам в генеалогическом разложении. Целесообразно сгруппировать члены в сумме таким образом, чтобы они содержали либо все электронные переменные атомов, либо минимальное количество отщепленных электронов, а именно:

 $\sum_{i=1}^{N_a} \sum_{j=1}^{N_b} \frac{e^2}{r_{ij}} \hat{P}_{ij} = \sum_{l=1}^{N_a} \sum_{j=1}^{N_b} \frac{e^2}{r_{ij}} \hat{P}_{ij} = \sum_{l=1}^{N_a} \sum_{j=1}^{N_b} \frac{e^2}{r_{ij}} \hat{P}_{ij} = \sum_{l=1}^{N_a} \sum_{j=1}^{N_b} \frac{e^2}{r_{ij}} \hat{P}_{ij} = \sum_{l=1}^{N_b} \sum_{j=1}^{N_b} \sum_{j=1}^{N_$ 

По аналогии с (6) и (6) введем обозначение

< 5Ms 5, L, M, So L2 M2 / 2 = 2 M2 / 2 = 2 Pij / SMs 5, \*L, M, So L2 M2 >= (14)

 $= \sum_{m_1m_2m'_1} C_{m_4m_2m'_1m_3m_4m'_4} \langle m_1(i)m_2(j) | \frac{e^2}{r_{ij}} | m_4(i)m'_4(j) \rangle \langle m'_2| m_3 \rangle.$ m, m, m!

Рассмотрим сначала вклад второго слагаемого в выражении (13). Это сумма двухэлектронных операторов, аналогичная оператору, порождающему обменный интеграл. Первое слагаемое содержит произведение операторов первого ранга по спину и нулевого ранга по спину, действующих на атом  $\mathcal{B}$  ( координати соответственно / и // ).

Таким образом,

Cm, m'2m2, m3 m'4 m4 = Bm, m2 m3 m'4 Sm2 m4+ +  $+ \sum_{T=0}^{r} C_{T} \sum_{k_{a} q_{a}} \frac{\Gamma l_{a} l_{a} k_{a}}{m_{r} - m_{s} q_{a}} \frac{\Gamma l_{r} + I_{a} + M_{r} + l_{a} - m_{s}}{M_{r} - M_{r} + q_{a}} \frac{\Gamma l_{r}}{l_{r}} + \frac{\Gamma l_{r}}{m_{r} + m_{s}} \frac{\Gamma l_{a} + M_{r}}{q_{a}} \frac{\Gamma l_{r}}{l_{r}} + \frac{\Gamma l_{a} - m_{s}}{m_{r} - m_{s}} \frac{\Gamma l_{a} + L_{r}}{q_{a}} \frac{\Gamma l_{r}}{l_{r}} + \frac{\Gamma l_{a} - m_{s}}{m_{r} - m_{s}} \frac{\Gamma l_{a} + L_{r}}{q_{a}} \frac{\Gamma l_{r}}{l_{r}} + \frac{\Gamma l_{a} - m_{s}}{m_{r} - m_{s}} \frac{\Gamma l_{a} + L_{r}}{q_{a}} \frac{\Gamma l_{r}}{l_{r}} + \frac{\Gamma l_{a} - m_{s}}{m_{r} - m_{s}} \frac{\Gamma l_{a}}{q_{a}} \frac{\Gamma l_{r}}{l_{r}} \frac{\Gamma l_{a}}{m_{r}} \frac{\Gamma l_{a}}{m_{s}} \frac{$  $\times (S_{1}L_{1} \parallel V^{k_{a}} T_{\parallel} S_{1}^{*} L_{1}^{*}) \sum_{S_{1} \vdash q} \sum_{M_{2}} \left[ \frac{l_{b}}{m_{2}} \frac{l_{5}}{m_{2}} k_{b}}{m_{2}} \right] \left[ \frac{l_{2}}{m_{2}} \frac{l_{2}}{m_{2}} \frac{l_{2}}{m_{2}} k_{b}}{m_{2}} \right] x$  $\times (-1)^{\frac{1}{2}+M_{2}+l_{5}-m_{4}'}(S_{2}L_{2}\|\mathcal{U}^{k}\|S_{2}\overline{L}_{2})\delta_{S_{2}}S_{2}\sum_{s}\sum_{q}\left[\frac{l_{s}}{m_{2}},\frac{l_{s}}{m_{4}}\frac{s}{q}_{s}\right]\times$ 

Аналогичные формулы в работе /2/ относятся к случаю несвя - занных спиновых моментов отдельных атомов. 2

(15)

Действие четырехэлектронного оператора  $\sum_{k,\ell} \sum_{i=k} \sum_{j \neq \ell} P_{ij}$  приводит к матричным элементам, которые содержат произведение двухэлектронного кулоновского интеграла на два интеграла перекрытия.

В этом случае удобно вывести выражения матричных элементов, записав сператор в следующем виде:

 $\sum_{\substack{k \neq i \\ l \neq j}} \frac{e^2}{r_{kl}} \hat{P}_{ij} = \sum_{i=l}^{N_a} \sum_{j=l}^{N_b} \sum_{k=l}^{N_a} \frac{e^2}{r_{kl}} \hat{P}_{ij} - \left(\sum_{k=l}^{N_a} \sum_{l=l}^{N_b} \sum_{k=l}^{e} \hat{P}_{iN_b} + \frac{e^2}{l+j} \right)$ 

 $+\sum_{k=1}^{N_{a}}\sum_{l=1}^{N_{b}}\sum_{j=1}^{R_{b}}\frac{e^{2}}{r_{kl}}\hat{P}_{N_{a},j}-\sum_{k=1}^{N_{a}}\sum_{l=1}^{N_{b}}\frac{e^{2}}{r_{kl}}\hat{P}_{N_{a}}\hat{P}_{N_{b}}\Big).$  (16)

Как и в рассмотренных выше случаях, многоэлсктронный множитель при произведении двухэлектронного кулоновского интеграла на два одноэлектронных интеграла перекрытия можно выразить через ( $SL \parallel U^k \parallel S^*L^*$ ) и ( $SL \parallel V^{kT} \parallel S^*L^*$ ).

В рамках изложенной методики можно получить остальные выражения для козфициентов при интегралах, соответствующих однократным перестановкам электронов между атомами. В частности, многоэлектронные козфрициенты при произведениях йнтегралов перекрытия можно выразить через матричные элементы произведения одноэлектронных спиновых операторов. Следует отметить, что при рассматриваемом подходе многоэлектронные функции пеортогональны. При этом усеченный базис, в котором фактически осуществляются вычисления, сохраняет свою физическую обоснованность.

Существуют различные способы построения многоэлектронных волновых функций атомов, содержащих несколько открытых оболочек. Наиболее простым и универсальным является детер -

 $* \left[ \frac{L_2}{M_2} \frac{L_2^* k_b}{M_2^* - M_2^* q_k} \right] (\bar{S}_2 \bar{L}_2 \parallel V^{k_b} \bar{l}_{\parallel} \bar{S}_2^* L_2^*) (-i)^{L_2^* + \bar{M}_2 + l_b - m_2'}$ 

мичантный базис, однако в этом случае отдельные базисные функции не являются собственными функциями оператора полного спина.

При другом подходе волновая функция сложной конфигурации строится в виде антисимметризованной функции связанных моментов отдельных оболочек, а волновые функции оболочек строятся с помощью генеалогических коэффициентов. Кроме того, можно распространить понятие генеалогических коэффициентов на несколько оболочек, вводя так называемые обобщенные генеалогические коэффициенты /7-8/.

Хотя связывание моментов и антисимметризацию в случае неэквивалентных электронов можно проводить независимо, преимуществом обобщенных генеалогических коэффициентов является однотипность математических операций при вычислении матричных элементов (суммирование по ионным термам) и создание базисных функций, которые являются собственными функциями моментов количества движения. Использование обобщенных генеалогических коэффициентов освобождает от необходимости программировать разнообразные и сложные выражения недиагональных по конфигурации многооболоченых матричных элементов, существенно различающихся в разных случаях изъятия или добавления электрона в конфигурациях базисных функций.

Недостатком метода обобщенных генеалогических коэффициентов является довольно громоздкое суммирование по термам многих ионных конфигураций.

Для двухатомной системы на больших межъядерных расстояниях целесообразно строить волновые функции отдельных многообслочечных атомов при помощи обобщенных генеалогических коэфрициентов в виде разложения:

 $\mathcal{Y}_{SLM_{S}M_{1}}^{A}(l_{1}^{n_{1}}l_{2}^{n_{2}}l_{3}^{n_{3}})=$ 

(17)

 $= \sum_{r=1}^{S} \sum_{a'l's'} G_{a'l's'}(r) \sum_{M'_{s}m_{i}} \sum_{M'_{s}m_{i}} \left[ \sum_{M'_{s}m_{i}}^{s' \frac{1}{2}s} M_{s} \right] \left[ M'_{i}m_{i}M_{i} \right] \times$ × "S'L'M'S'M' ( ling - dr 2 13 ng- dr3) yerm, (Fr.) Giter (Sen).

- 42 -

Формула (17) записана для случая трех оболочек, где </br>
мер оболочки.

Базисные функция (2) содержат антисимметризатор, который можно представить в виде разложения по перестановкам электронов между центрами:

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} N_a + N_b \end{pmatrix}^{-\frac{1}{2}} (1 - \sum_{r_a} \sum_{r_b} \sum_{i=1}^{n_{r_a}} \sum_{j=1}^{n_{r_b}} \hat{\rho}_{ij} r_a r_b + \dots ).$$
(18)

Здесь оператор  $P_a$  з обозначает перестановку i -го элек трона оболочки  $P_a$  атома "a", и j -го электрона оболочки  $r_b$  атома "b". Необходизме матричные элементы гамильтониана легко получить, распространяя приведенные матричные элементы  $U^k$  и  $V^{kT}$  при помощи обобщенных генеалогических, коэффициентов на случай нескольких оболочек на каждом атоме.

#### Список литературы

- I. Дружикин В.В. ФТТ, 1967, т.9, гып. 9, с. 2463-2468.
- Гарифулли: з Р.Л., Еремин М.В., Леушин А.М. ФТТ, 1972, т. 14, вып. 2, с. 382-390.
- 3. Круглевский В.А.-В кн.: Процессы переноса энергии ь парах металлов. Рига: ЛГУ им.П.Стучки, 1981, с. 71-79.
- 4. Gerratt J.-Proc. Roy. Soc., 1976, vol. A350, p. 363-380.
- Круглевский В.А. Изв.АН ЛатвССР, сер.физ. и техн., 1984,
   № 1, с. 21-27.
- Umanskij S. Ja., Nikitin E.E.-Theor. Chim. Acta. ( Berlin ), 1969, Bd. 13, p. 91-105.
- 7. Левинсон И.Б.- Liet.TSR MA Darbai, B, (Тр.АН ЛитССР, Б) , 1957, т.4.# 12. с. 17-31.
- 8. Armstrong L. Jr. Phys. Rev., 1968, vol. 172, p. 18-23.

#### С.Б.Загребин, А.В.Самсон ЛГУ им.П.Стучки (Рига)

### ИОНИЗАЦИЯ ПРИ СТОЛКНОВЕНИЯХ ОПТИЧЕСКИ ВОЗБУЖДЬННЫХ АТОМОВ В ПУЧКЕ

В настоящей работе с помощью пучковой методики изучались процессы столкновительной иснизации при селективном оптическом возбуждении *пР* -состояний атома натрия. Процесс ионизации при столкновениях возбужденного атома *A*<sup>\*</sup> с атомом в основном состоянии иожет протекать по следующим каналам:

	A second	-	42	+ 2	1	(a)	
A*	+ A		A"	+ A' +	e	(6)	(1)
Surger.		-	_A*	+ A .	Shire I	.(B)	

Канал (Ia) носит название процесса ассоциативной ионизации и является преобладающим для не очень больших значений главного квантового числа  $n \leq 20$ .

Традиционная методика исследования процессов ассоциативной ионизации атомов целочных метаклов основана на измерении полного ионного тока при селективном оптическом возбуждении паров металла в ячейке. Для повышения чувствительности регистрации ионов иногда используется метод компенсации объемного заряда, позвол яющий на несколько порядков увеличить регистрируемый ионный сигнал. В условиях паронаполненной ячейки за последние 15 лет выполнены исследования процессов ионизации (I), а также ассоциативной ионизации при парных столкновениях резонансно возбужденных атомов

В последние годы для исследования процессов ионизации при атом-атомных столкновениях все более широко применяется методика, основанная на использовании атомного пучка ( или пересекающихся пучков) в сочетании с его оптическим возбуждением (обычно с помощью перестраиваемых лазеров на краси – телях). Это позволяет прогодить эксперименты в более чистых условиях. Кроме того, пучковая методика наилучшим образом приспособлена для регистрации и масс-анализа заряженных продуктов реакций. В частности, для натрия была измерена константа скорости процесса (2) при лазерном возбуждении резонансных ЗР-состояний /4/. В условиях пересекающихся пучков были определены константы скоростей реакции (1) для атомов Na(nP) при 5  $\leq n \leq$  15 /5/.

Методика настоящего эксперимента ранее была описана в работе /6/. Схема установки приведена на рис. І. Пучок атомов натрия создавали нагреванием металла в тигле до 700-730 К . При этом максимальная концентрация атомов в зоне оптического возбуждения достигала 8.10<sup>11</sup>см<sup>-3</sup>. Система диафрагм, определяющая геометрию пучка, при подаче на нее определенных потенциалов использовалась в качестве защиты от проникновения в зону оптического возбуждения ионов, образующихся на горячей поверхности источника атомного пучка. Атомы конденсировались на коллекторе, охлаждаемом жилким азотом. Давление остаточных паров внутри рабочей камеры не превышало 10-6 мм рт.ст. Атомы пучка возбуждали излучением ксеноновой лампы ДКсШ-3000; селектируемым монохроматором с дифракционной решеткой 1200 штр./мм. Спектральная плотность излучения в интересующей нас области длин волн от 240 до 285 ны составляла 4 - 40 эрг/с.нм. Рабочий ток лампы варьировали в пределах 60-100 А. Абсолютное значение потока возбуждающего излучения измерялось градуированным фотоэлементом Ф-29, включенным на входе электрометрического усилителя ИМТ-05. Ионы, образующиеся в результате столкновительной ионизации, а также прямой фотононизации атомов Na и молекул Na, регистрировали вторично-электронным умножителем ВЗУ-6, работавшим в режиме счета отдельных ионных импульсов. Эти импульсы детектировали счетчиком F5 -3 /7/. Область распространения атомного пучка экранировали медным цилиндром, жестко связанным с охлаждаемой ловушкой (на рис. І цилиндр не показан). Ввод и вывол излучения, вытягивание заряженных частиц осуцествляли через отверстия на боковой поверхности цилиндра.



Рис. I. Схема эхспериментальной установки. I - источник атомного пучка, 2 - формирующие диафрагмы и защита от термоно нов, 3 - ловушка с жидним азотом, 4 - лампа ДХсШ-3000, 5 - монохроматор, 6 - фокусирующие кварцевые линзы, 7 - фотоэлемент Ф-29, 8 - электрометрический усилитель ИМТ-05, 9 - ионные линзы, 10 - вторично-електронный унножитель ВЭУ--6, II - счетчик F5 -3, I2 - времяпролетный масс-спектро метр, I3 вторично-электронный умножитель ВЭУ-2В, I4 - си стема регистрации.

На рис.2, где приведена запись зависимости ионного сигнала на выходе системы регистрации от длины волны возбуждающего излучения ри лирине выделяемого спектрельного интер-



<u>Рис.2.</u> Зависимость числа регистрируемых ионов натрия от длины волны возбуждающего излучения ( $\Delta \lambda = 0.03$  нм).

вала  $\Delta \lambda = 0.03$  нм, отчетливо наблюдаются ионные пики, соответствующие возбуждению отдельных  $\pi P$  -состояний и обусловленные столкновительной ионизацией, а также сигналы прямой фотоионизации атома Na и молекулы  $Na_2$ , видна структура ионного спектра молекулярной полосы.

Для того, чтобы корректно идентифицировать образующиеся ионы с конкретным каналом столкновительной ионизации, была пр: менена простейшая времяпролетная масс-спектрометрическая система, позволяющая разделять ионы Na<sup>\*</sup> и Na<sup>\*</sup><sub>2</sub>. Особен ность системы регистрации заключалась в возможности рабочать в режиме накопления сигнала, что значительно повышало ен чувсигительность /8/. -

- 48 -

Масс-спектрометрические измерения показали, что при оптическом возбуждении нижних  $n^{\rho}$  -состояний в результате процесса ассоциативной измизации образуются только молекулятоные ионы (Ia). С ро и и возрастает вклад и других каналов столкновительные ионизации. Так, для n = 15 сигнал, обусловленный ионами  $Na^{*}$ , уже уверенно регистрируется, хотя и остается заметно меньше сигнала ассоциативной ионизации.

Установим связь между измеряемыми нами величинами и константой скорости процесса столкновительной ионизации . Прежде всего заметим, что образование ионов в результате реакции (I) происходит не только в зоне оптического возбуждения пучка, но и на всем дальнейшем его протяжении вплоть до охлаждаемой ловушки. Концентрация атомов меняется в направлении распространения пучка, и это необходимо учитывать в уравнении баланса числа ионизаций. Чтобы учесть пространственные неоднородности, запишем уравнение ионизационного баланса в виде, явно завчсящем от времени. Для этого выделим в поперечном сечении пучка слой толщиной Δh и рассмотрим ионизацию в объеме этого слоя в зависимости от времени. Обозначим через l длину зоны оптического возбуждения, 29 расходимость пучка (рис.3). Примем в качестве точки отсчета времени t = 0 момент прохождения атомами зоны сптического возбуждения, концентрацию нормальных атомов в этой зоне обозначим  $N_{r}(0)$ , объем -  $V(0) - S(0)\Delta h - l^{2}\Delta h$ . В момент време-ни  $t = V(t) = S(t)\Delta h - (l + 2 \overline{v}ttq \varphi)^{2}\overline{v}t - V(0)(l + 2 \overline{v}ttq \varphi)^{2}/l^{2}$ , где  $\overline{\Psi}$  - средняя скорость атомов пучка в направлении его оси, и  $N_i(t) = N_i(0) l^2 \overline{\Psi} t / (l + 2\overline{\Psi} t t q \varphi)^2 \overline{\Psi} t - N_i(0) l^2 / (l + 2\overline{\Psi} t t q \varphi)^2$ Сбщее число н эмальных атомов в рассматриваемом объеме  $N_1(t) V(t) - N_1(0)V(0)$ . Временная зависимость концентрации воз-бужденных атомов  $N^*(t)$ , обусловленная расходимостью пучка, имеет такой же вид. Однако необходимо учитывать изменение концентрации N\*(t) в результате радиационного распада возбужденных состоя ий. При доста гочно больших значениях л могут также сказываться процессы столкновительного тушения возбужденных состояний, роль которых будет рассмотрена ниже.



#### Рис.З. К выводу формулы (3).

Запишем уравнение ионизационного баланса в виде, явно зависящем от времени:

 $\frac{dn_i}{dt}(t) = N_i(t)N_i(t)V(t)K_{hp} = N_i(0)N_i(0)V(0)K_{hp} \frac{t^2}{(t+2\pi t t_2 \varphi)^2}e^{t},$ где  $t^*$  - радиационное время жизни возбужденного а ома,  $K(\varphi)$ константа скорости процесса (I),  $\frac{dn_i}{dt}(t)$  - число ионов, образующихся в зыделенном в момент времени t объеме. Для того, чтобы определить общее число ионов  $\frac{dn_i}{dt}$ , образующихся во всем объеме столжновительного взаимодействия, необходино проинтегрировать это уравнечие по времени от 0 до  $T_o$ , где  $T_o$ - $\frac{t}{dt}$ время пролета атома от зоны оптического возбуждения до ловушки. В результате интегрирования получим:  $\tau$ 

dni = N,10) N \*(0) Y10) K(na) [1 = 12 dt - (1+21 tq+)2 (3)

Залее мы везде для упрощения будем писать N, N, V, подразумевая значения этих величин в зоне оптического воз-

буждения. Таким образом, в отличие от случая паронаполненной ячейки, здесь появляется дополнительный множитель, учитывающий геометрию пучкового эксперимента. Заметим,что этот множитель в наших условиях начинал сказываться на конечном результате лишь для уровней с достаточно большими n,для которых  $\mathcal{T}^* \gtrsim \mathcal{T}_o$ . Максимальная возможная ошибка, вызванная неучетом этого множителя, не превышает 20% для n = 21.

Константы скоростей процессов столкновительной ионизации определяли из уравнения (3). Для этого необходимо было измерить число образующихся ионов, определить концентрации атомов в основном и возбужденных состояниях в зоне оптического возбуждения и учесть конкретную геометрию эксперимента.

Концентрацию атомов в основном состоянии  $N_i$  определяли по известным значениям эффективных сечений ионизации атомов натрия электронным ударом, измеренным с высокой точностью в ряде работ /9-II/. Для этого атомный пучок пересекали пучком электронов заданной энергии Е, получаемым с помощью электронной пушки. Образующиеся при этом ионы собирали на коллектор и детектировали электрометрическим усилителем ИМГ-05. Ток электронного пучка  $I_e - en_e / \frac{2E}{m} S$ , ионный ток  $I_i =$  $= e N_i n_e G_i(E) \sqrt{\frac{2E}{m}} V$ . Здесь e - заряд и m - масса электрона,  $n_e$  - концентрация электронов,  $G_i(E)$  - эффективное сечение ионизации /IO/. Отсюда

 $N_{l} = I_{i}/I_{e}G_{i}(E)l$  (4) Заметим, что при измерениях ионных токов необходимо было обеспечить надежную экранирсвку цепи ионного коллектора от внешних помех, а также максимально снизить влияние всевозможных утечек.

По известному значению концентрации атомов в основном состоянии, знея спектральную плотность возбуждающего излучения, определим концентрацию возбужденных атомов  $N^*$ . Количество энергии, поглощенное в слое толщиной в единицу времени  $\mathcal{E} = \phi_o - \phi_e$ , где  $\phi_o -$  падающий и  $\phi_e -$  вышедший из слоя световые потоки. Введем величину  $A_G - \Delta$   $\frac{\phi_e - \phi_e}{\phi_o}$ , называемую полным поглощением /12/. Здесь  $\Delta$  = выделенный участок сплошного спектра, в пределах которого функция распределения яркости имеет постоянное значение (в нашем случае  $\Delta$ ) - достаточно узкий участок спектра ксеноновой лам -

- 50 -

- 5I -

$$-\phi_o/h \lambda \Delta V = N^* \tau^*.$$
 (5)

Величина A<sub>6</sub> однозначно связана с концентрацией атомов N, /12/:

гдо f - сила осциллятора возбуждаемого перехода. Нами использованы энсчения f из /13/. Отсюда

$$V^* = \frac{\overline{Te^2}}{mc} \frac{\phi_o}{AV} \frac{lf\tau^*}{AVV} N_1.$$
 (6)

Формула (6) получена в предположении малой оптической толщины поглощающего слоя, т.е.  $\mathcal{X}_{o}l << I$  ( $\mathcal{X}_{o}$  - коэффициент поглощения в центре контура линии). Как показали проведен – ные оценки, для наших условий эксперимента это требование всегда выполняется.

Основными количественными измерениями у нас являлись измереныя ионных сигналов с помощью ВЭУ.В связи с этим следует заметить, что даже при работе в режиме счета отдельных ионных импульсов эффективность регистрации ВЭУ не равна единице /14/. Кроме того, она может быть различна для различных регистрируемых частиц. Наконец, необходимо учитывать и возможность того, что не все ионы, образующиеся в объеме столкновений, попадают на вход ВЭУ. Учтем это обстоятельство, введя коэффициенты  $\gamma_i$  и  $\gamma_2$  -эффективность регистрации и сбора ВЭУ соответственно атомарных и молекулярных ионов натрия. Тогда число импульсов, регистрируемых в единицу времени в результате процесса (Ia).

$$I - \gamma_2 \frac{dn_i}{dt}$$
 (7)

Число регистрируемых в единицу времени ионных импульсов в результате фстоионизации атомов  $I_1$  и молекул  $I_2$  на длине всль. 241,2 нм, соответствующей порогу фотоионизации атома,

$$I_{1} = 2I \cdot \frac{N_{1} G_{1} \ell \Phi_{241,2}}{h \gamma_{241,2}}; \qquad (8)$$

$$I_2 = \eta_2 \frac{N_2 G_2 (\phi_{241,2})}{h v_{241,2}}$$
(9)

Здесь  $\Phi_{24I,2}$  - световой поток;  $N_2$  - концентрация молекул;  $G_1$  и  $G_2$  - эффективные сечения фотоионизации соответ ственно атома и молекулы на данной длине волны. Из (8) и (9) получим

$$\frac{\gamma_i}{\gamma_2} = \frac{I_i}{I_2} \left(\frac{N_2}{N_i}\right)_T \frac{\mathcal{B}_2}{\mathcal{B}_i}$$
(10)

Отношения концентраций (<sup>1/2</sup>/<sub>M</sub>), оценивали по термодинамике /15/, значения G, и G<sub>2</sub> брали из работы /16/.Используя уравнения (3), (6)-(10) и переходя от частот к длинам волн , окончательно получим для константы скорости процесса (1)

$$K(np) = \mathcal{L}\beta \left(\frac{N_2}{N_1}\right)_T \frac{I}{I_2} \frac{\Phi_{24I,2}}{\Phi_0} \frac{G_2}{N_1}, \qquad (11)$$
  

$$rge \mathcal{L} = \frac{mc^2}{Te^2}; \beta = \frac{\lambda 24I,2}{\lambda^3 f \tau^*} \left[I - \frac{l^2}{(l+2Lt_9\varphi)^2}e^{-\frac{T_0}{T}}\right]; N, \text{ on per-}$$

деляли из уравнения (4). Значения  $\eta_1$  и  $\eta_2$  зависят от времени и режимов работы ВЗУ и могут быть весьма различны для различных используемых экземпляров. В связи с этим при проведении каждой новой серии измерений необходимо было заново определять  $\eta_1$  и  $\eta_2$ . Несмотря на большой разброс значёний этих коэффициентов от серии к серии,  $\eta_2 \gtrsim \eta_1$ .

При выведении формулы (II) предполагалось, что в результате столкновительной ионизации образуются только молекулярные ион., т.е. процесс идет по каналу (Ia). Оценки, выполненные с использованием данных /2,17/, а также результаты масс-спектрометрических измерений показали, что образо вание атомарных ионов в процессе (I) и изменение в связи с этим эффективности регистрации ионов вторично-электронным умножителем может привести к увеличению константы скорости не более чем на несколько процентов даже для максимальных в наших экспериментах значений n.

Для состояний с большими h возможен процесс иониза -

- 52 -

ции их электрическим полем. Критическое значение голя, необкодимое для ионизации атома,  $E_{kper}$  //  $(n^* - )$  эффективное главное квантовое число) при  $n^* = 20$ , I4 (максимальное значение, для которого определялась константа скорости ионизации) равно 2,0 кВ/см. Это значительно больше, чем значение поля в наших условиях.

При селективном оптическом возбуждении nP - состояний возможны последующие радиационные переходы на нижележащие уровни конфигураций 5 и D. Такие каскадно заселяемые состояния также могут участвовать в процессах стоякновительной ионизации. Оценки, выполненные нами с использованием значений f из работы /18/, показали, что заселенность таких S - и D- уровней не превышает 10% от заселенности nPсостояний.

При выведении формулы (II) предполагалось, что разру – шение оптически возбужденных л Р – атомов происходит только вследствие радиационного распада. Однако с ростом и все более заметную роль начинает играть механизм безызлучательного тушения л Р -состояний в результате передачи возбуждения на близколежащие уровни других электронных конфигура – ций. Этот процесс перемещивания особенно существем в усло – виях паронаполненной ячейки, где концентрации атомов на двачетыре порядка больше, чем в эффузионном пучке. При наличии интенсивного перемещивания уравнение баланса (5) следует записать в виде

$$\frac{A_{\theta}\phi_{0}}{h\gamma_{0}\gamma_{V}} = N^{*}\left(\frac{1}{\tau^{*}} + N_{j}\sum_{k}\langle Q_{k}\psi_{j}\rangle\right). \quad (12)$$

Здесь  $\sum \langle Q_k \phi \rangle$  - суммарная константа сворости тушения h Pуровня в результате передачи возбуждения на близколежащие уровни k. Оценим роль безыалучательного тушения в наших условиях. Для этого необходимо сравнить члены в правой части уравнения (12). Для n = 5-7 мы использовали значения  $2^{**}$ из работы /19/, для n = 8-13 - результаты теоретической работы /20/, для n > 13 проводилась экстраполяция этих данных по формуле, рекомендуемой авторами /20/. Заметим, что данные /19/ и /20/ хорошо согласуются. По известной функции распределения частиц в пучке по относительным скоростям/17/ была найдена средняя скорость их относительного движения  $\overline{\vartheta} * \sqrt{\frac{2kT}{Tm}}$ . Она в  $2\sqrt{2}$  раз меньше, чем для стучая паронаполненной ячейки. Суммарное значение эффективного сечения тушения  $Q_T = \sum_{r} \langle Q_k \varphi r \rangle / \overline{\varphi}$  можно оценить по формуле /2I/:

$$a_{\tau} = \frac{(n^{*})}{2} \left[ 5(n^{*})^{2} + 1 - 5\ell(\ell + 1) \right] a_{0}^{2}, \quad (13)$$

где  $a_o = 5,29 \cdot 10^{-9}$  см - радиус первой боровской орбиты. Оценки показали, что, например, для n = 14 скорости радиационного и столкновительного тушения оказываются равными уже при  $N_{f} \approx 6 \cdot 10^{11}$  сн<sup>-3</sup>, что соответствует условиям нашего эксперимента. Таким образом, п чессы перемешивания играют существенную роль даже при сравнительно небольших концентрациях, карак – терных для атомного пучка. В этом случає понятие времени жизі і отдельного атомного уровня теряет смысл, и следует говорить о времени жизни блока возбужденных состояний. Возьмем вместо использованного нами выше  $\mathfrak{T}^*(nP)$  время жизни блока возбужденных состояний для данного значения n /22/

$$\tau^{*}(n) = \left[\frac{1}{n}\sum_{\tau^{*}(n\ell)}\frac{2\ell+1}{\tau^{*}(n\ell)}\right]^{-1},$$
 (14)

где  $\overline{c}^{*}(nl)$  - время жизни состояния с данными n, l. Проведенные оценки показали, что такая замена в условиях, когда скорость перемешивания больше скорости радиационного распада Р-состояния, а это справедливо в наших условиях при  $n \ge 16$ , приведет к возрастанию  $\mathcal{K}(np)$  не более чем на 20%, причем эта ошибка максимальна при  $n \ge 16$ .

На рис.4 приведены полученные из уравнения (II) значения констрат скоростей процес а (I) в зависимости от  $n^*.0т$ резки по оси ординат характеризуют систематическую погрешность, соответствующую доверительной вероятности 0,95;

 $\frac{\delta K(np)}{K(np)} = \pm \frac{2}{43} \left[ \left( \frac{\delta N}{N_{2}} \right)^{2} \left[ \left( \frac{\delta (\frac{\Phi}{244,2})}{\Phi_{0}} \right)^{2} \left( \frac{\delta (\frac{\Phi}{224,2})}{\Phi_{0}} \right)^{2} \left( \frac{\delta (\frac{\Phi}{224,2})}{\Phi_{0}} \right)^{2} \left( \frac{\delta (\frac{\Phi}{22})}{\Phi_{0}} \right)^{2} \left( \frac{\delta (\frac{\Phi}{2})}{\Phi_{0}} \right$ 



<u>Рис.4.</u> Зависимость константы скорости реакции (I) от  $n^*$ : <u>I</u> - результаты, полученные в настоящей работе; <u>I</u> - данные работы /5/.

На рис.4 представлены таюже результаты, полученные авторами работы / J/, выполненной в условиях пересекающихся пучков. Заметим, что сравнение этих данных с нашими не вполне корректно в силу существенного различия распределений сталкивающихся частиц по этносительным скоростям.

Нами выполнены расчеты констант скоростей процесса (1) для различных распределений сталкивающихся частиц на основе теоретической модоли, предложенной в работе /2/.Расчеты показали, что для малых *п* константы скорыстей ионизации в пучке должны быть на несколько порядков меньше,чем для случая ячейки и пересекающихся пучков. Это,однако, не согласуется с данными эксперимента, в котором наблюдается весьма значительный ионизационный сигнал при возбуждении нижних *п*Рсостояний (см.рис.2). Различие констант скоростей, предсказываемое теорией, существенно уменьшается с ростом *п*.

#### Список литературы

- I . Ключарев А.Н. В кн.:Химия плазмы. М.:Атомиздат, 1980 , вып.7, с. 109-144.
- 2. Думан Е.Л., Шматов И.П.-ЖЭТФ, 1980, т. 78, вып. 6, с. 2116-2125.
- 3. Mihailov A.A., Janev R.K.-J. Phys. B: At. Mol. Phys., 1981 , vol.14, p.1639-165<sup>-</sup>.
- 4 De Jong A., van der Valk F.-J. Phys. B: At. Mol. Phys., 1979, vol.12, N 18, p. 1561-1566.
- 5. Boulmer J., Bonanno R., Weiner J.-J. Phys. B: At. Mol. Phys. , 1983, vol.16, p. 3015-3024.
- 6. Загребин С.Б., Самсон А.В.-Письма в ЖТФ, 1984, вып. 2, с. 114-118.
- Вичитис О.Е., Круминыт А.П., Янсон У.В.-ПТЭ, 1982, вып. 3, с.248.
- 8. Спигулис Я.А. Настоящий сборник, с. 58.
- 9 . Brink G.O. Phys. Rev., 1964, vol. 134, N 2A, p. 345-316.
- McFarland R.H., Kinney J.D.-Phys. Rev., 1965, vol. 137, N 4A, p.1058-1061.
- II. Запесочный И.П., Алексахин И.С.-ЖЭТФ, 1968, т. 55, вып. I, с. 76-85.

- Фриш С.Э. Оптические спектры атомов.М.; Л.: Физматгиз ., 1963. 640 с.
- Шабанова Л.Н. В кн.: Фотопроцессы возбуждения и ионизации. Л.: ЛГУ им. А.А. Жданова, 1984, с. 8-12.
- Айбунд М.Р., Поленов Б.В. Вторично-электронные умножители открытого типа и их применение. М.: Энергоиздат, 1981.
   138 с.
- Несмеянов А.Н. Давление паров химических элементов. М.: АН СССР, 1961, с. 380.
- 16. Hudson R.D.-Phys. Rav., 1964, vol. 135, N 5A, p. 1212-1217.
- Ключарев А.Н., Безуглов Н.Н. Процессы возбуждения и ио низации атомов при поглощении света. Л.: ЛГУ им. А.А. Жданова, 1983. 272 с.
- Андерсон Э.М., Зилитис В.А.-Спт.и спектр., 1964, т. 16, вып. 2, с. 177-181.
- Веролайнен Я.Ф., Николаич А.Я.-УФН, 1982, т. 137, вып. 2, с. 305-338.
- 20. Груздев П.Ф., Афанасьева Н.В.-Опт.и спектр., 1980, т.49, вып.4, с. 625-632.
- Eates D.R., Damgaard A.-Phyl. Trans. Roy. Soc. A, 1949, vol. 242, p.101-122.
- Вете Г:, Солпитер Э. Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами.М.: Физматгиз, 1960. 562 с.
- Рабинович С.Г. Погрешности измерений.Л.: Энергия, 1973.
   264 с.

Я.А.Спигулис - ЛГУ им.П.Стучки (Рига)

### МАСС-СПЕНТРОМЕТРИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ИОНОВ В ПУЧКОВОМ ЭКСПЕРИМЕНТЕ

При поглощении оптического излучения парами металлов кроме возбужденных атомов и молекул могут образоваться атомарные и молекулярные ионы и электровы /1/. Фотопроцесси с участием заряженных частиц в последние годы привлеяли осоовй интерес и интенсивно исследуются каж в экспериментах с паронаполненными ячейками /1-3/, так и в пучковых экспериментах /4-8/. Множество возможных каналов ионизации. (фотоионизация, ассоциативная и пеннынговская ионизация, неупругие соударения в электронами и др.) обуславливает необходимость комплексного подхода к изучению этих процессов. В частности, для полного представления о механизме переноса энергии оптического возбуждения в парах требуются измерения пяти видов спектров - оптического, временного , ионизационного, масс-спектра ионов и энергетического спектра электронов.

В настоящей работе сообщается о методике и некоторых результатах масс-спектрометрического исследования ионов, образующихся в условиях квазимонохроматического некогерентного возбуждения атомного пучка /8/. Для разделения ионов по массам была ссадана лабораторная времяпролетная установка, работающая в режиме многоканального счета ионов с время-амплитудным преобразованием /9/.

Схема экспериментальной установки приведена на рис. I. В качестве источника оптического возбуждения использована ксеноновая лампа непрерывного действия ДКсШ-3000. Излучение лампы, пройдя через монохроматор МСД-36 ( $\Delta\lambda \leq 0.4$ нм), квардевое окно и и диафлагму Д<sub>I</sub>, фокусируется на ленточный эффузионный атомный пучок сечением 4х9 мм. Пучок П направлен по оси цилиндрическ й закуумной намеры К из нержавеющей стали (d = 140 мм) перпендикулярно плоскости рисунка. С



. Рис. І. Схема экспериментальной установки.

- 59 -

обеих сторо.: области фотовозбуждения пучка .а изоляторах установлены плоские сетки I и 2, расстояние между которыми составляет I8 им. При положительном потенциале сетки I относительно сетки 2 моны, образувщиеся в результате фотовозбуждения, отклоняются в эквипотенциальную область 3, ограниченную сетками, а затем в подобную область 4. После этого они попадают на открытый катод вторично - электронного умножителя ВЗУ-2В. Длина пролета нонов в области 3 составляет 40 мм, а в области 4-190<sup>±</sup>10 мм; расстояние между сетками 2-3 и 3-4 не превышает 5 мм. К итроны из области возбуждения, отклоненные в противоположную сторону, регистрировались каналовым электронным умножителем ВЗУ-6. Диафрагмы Д<sub>I</sub>, Д<sub>2</sub> и отражавщий клин. ОК установлены, чтобы предотвратить попадание рассеянного излучения на сетки I и 2.

Конструктивно источник атомного пучка, диафрагмы, элементы I-3 и ВЗУ-6 (с элементами схемы включения  $R_i = 9.1$  кОм,  $R_2 = 270$  кОм,  $C_I = 330$  пФ,  $C_2 = 1500$  пФ), а также "ловушка" с жидким азотом для вымораживания паров закреплены на верхнем фланце вакуумной камеры К. Сн служит также для вывода эле"тродов, которые на рис. I обведены пунктиром. Через фланец Ф<sub>I</sub> к боковой стенке камеры присоединена труба Т из нержавеющей стали ( $\alpha = 50$  мм), внутри которой на изоляторах закреплен цилиндр 4 ( $\alpha = 40$  мм). Злектроды умнокителя ВЗУ-29 и цилиндра 4 рыведены через торцевой фланец Ф<sub>2</sub>.

Время пролета однозарядного кона до приемника (BBV-2B) можно выразит как

$$T = \sqrt{\frac{m}{2e U_{R}}} (2s + l), \qquad (1)$$

где m - масса иона;  $\mathcal{C}$  - варяд влектрона;  $\mathcal{U}_{12}$  - разность потенциалов сеток I и 2;  $\mathcal{S}$  - расстояние от точки обрагования иона до сетки 2;  $\ell$  - длина пролета в эквипотенциальном пространстве. Например, время пролета атомарного иона натрыя при данной геометрии и значении  $\mathcal{U}_{12}$  = 100 В согласно (I) составляет 9 мкс, а время пролета молекулярного иона  $Na_2^*$  - I3 мкс. Следовательно, временное разрешение устройства регистрат ции, требуемое для различения этих монов, должно быть не хуже 10<sup>-6</sup> с.

В проведенных экспериментах разность потенциалов И и создавалась импульсами длительностью I мкс и частотой следования 6 кГц от генератора Г5-15. Отклоненные импульсами "пакеты" монов за время пролета до ВЭУ-2В разделялись по массам. В моменты времени to . соответствующие началу отклоняющих импульсов. от Г5-15 подавались синхроимпульсы на вход "старт" время-амплитудного преобразователя ВАП (временное разрешение 10-7 с). При регистрации иона, долетевшего до ВЗУ-2В. анодный одноионный импульс преобразовывался дискриминатором Д<sub>т</sub> (быстродействие 10<sup>-7</sup>с) и подавался на вход "стоп" ВАП-а. Момент поступления стоп-импульса характеризует время пролета мона T = t-to, пропорциональное его массе (1). На выходе ВАП генерировал пилообразные импульсы с амплитудами А ~ Т, которые затем, в зависимости от А. фиксировались в тех или иных каналах амплитулного анализатора АИ-256-6. Таким образом, на экране анализатора был накоплен масс-спектр ионов, который далее записывался на ленте самописца КСП-4. Количество зарегистрированных ионов контролировалось счетчиком Сч І.

Кроме ионов, возникающих при фотовозбуждении пучка, установка позволяет регистрировать электроны. Электроны отклоняются с помощые сетки I и под влиянием потенциала +  $U_5 > > + U_1$  поступают на вход БЗУ-6. Однозлектронные сигналы с анода ВЗУ-6 через высоковольтный разделяющий конденсатор С<sub>I</sub> поступают на дискриминатор  $A_2$ , затем подсчитываются счетчиком Сч 2 и через цифро-аналоговый преобразователь (ЦАП) выводятся на самописец. Выходные импульсы  $A_2$ , кроме измерения электронного сигнала, могут также служить старт-импульсами ВАЛ-а при масс-анализе ионов, методом, описанным в работе /6/.

Вид получаемого масс-спектра определяется выбором значений потенциалов  $\mathcal{U}_{\ell} - \mathcal{U}_{4'}$ . Для иллюстрации на рис.2 приведены два спектра, полученных при одинаковых условиях образования ионов в пучке атомо натрия. В первом случае (рис. 2,а) элементы 2, 3 и 4 зазеклены, что обеспечивает полную эквипотенциальность зоны пролета ионов. При этом расположение пиков  $Na^{+}$  и  $Na^{+}_{2}$  хороно согласуется с расчетом по формуле (1), однако сигналы "размазаны" по времени. Разность потенциалов между элементами 2, 3 и 3, 4 существенно повысила качество масс-спектра (рис.2,6); интенсивность сигнала в максимумах пиков при этом пятикратно возросла. Большинство экспериментов проведено при следующих значениях потенциалов :  $U_1 = +(100-130)$ В (импульсы),  $U_2 = 0$ ,  $U_3 = -(30 - 70)$ В,  $U_4 = -(100-200)$ В,  $U_5 = +(150-250)$ В; напряжения питания ВЭУ : +  $U_{12} = +(2,2-2,8)$ кВ,  $-U_{12} = -(3,6-4,0)$ кВ. При облучении пучка паров натрия полным спектром ксе-

- 32 -

При облучении пучка паров натрия полным спектром ксеноновой лампы ионы с другими массами, кроме  $Na^{+}_{a} Na^{+}_{2}$ , не обнаружены. Внимание привлекает полученное (см.рис.2) соотношение массовых компонент. Молекулярных ионов в области фотовозбуждения оказалось примерно вдвое больше, чем атомарных, даже при низких концентрациях атомов в пучке (когда вероятность соударений возбужденных частиц с невозбужденными пренебрежимо мала и основным каналом образования ионов можно считать фотоионизацию). Учитывая, что невозбужденных димерных молекул в пучке на два порядка меньше, чем атомов /10/, полученное соотношение  $Na^{+}_{2}/Na^{+}$  свидетельствует о высокоэффективной фотоиснизации молекул  $Na_{2}$  полным излучением лампы. Следовательно, мощные ксеноновые лампы наряду с лазерами /3/ можно использовать в качестве эффективных источников для создания молекулярных ионов натрия при исследованиях их структуры и свойств.

Совсем иное соотношение компонент  $Na^*$  и  $Na^*_2$  наблюдалось при квазимонохроматическом ( $\Delta \lambda = 0, 3^{\pm}0, 1$  нд.) возбуждении пучка. На участке за порогом фотоионизации атомов натрия более интенсивно образовывались атомарные ионы (рис. 3,а). При длинах волны возбуждения, соответствующих nP резонансам в ионизационном спектре (рис. 3, г), вид массспектра оказался зависящим от главного квантового числа h. При 5  $\leq h < 10$  в экспериментах была обнаружена только молекулярная компонента  $Na^*_2$ , как показано на примере уровня 8Р (рис.2,6). Атомарные ионы  $Na^*$  даже при восьмикратном повышения чувствительности при h < 10 не обнаружены. Это согласуется с предположением о доминирувщей ролк ассоциативного процесса

 $Na(nP) + Na(3S) - Na_2^{\dagger} + e$  (2) при образования чиснов в nP - резонансах /5,8/. Однако при





<u>Рис.2.</u> Времяпролетный масс-спектр ионов натрия при облучении атомного пучка полным спектром ксеноновой лампы:

- a)  $U_2 = U_3 = U_4 = 0;$
- 6)  $U_2 = 0, U_3 = -50B, U_4 = -150B.$ 
  - U, =+IIOB (импульс, T.= I, 0 мкс), N(Na)= 9-10<sup>9</sup> см<sup>-3</sup>.

 $n \ge 10$  в масс-спектрах была констатирована атомарная компонента  $Na^{\dagger}($ рис.2,в), что свидетельствует о наличии конкурирующего канала (-ов) ионизации. Таким каналом может быть, например, пеннинговская ионизация /2,4/, а также фотоконкзация возбужденных атомов /1/.



2 250

200 258 285 A.m

240

<u>Рис.3.</u> Масо-спектры нонов натрял, образующихся при облученки пучка различными длинами волны:  $a - \lambda = 241$  нм (за пределом фотоионивация атомов),  $6 - \lambda = 254.4$  нм (возбуждение уровня СР),  $B - \lambda = 245.6$  нм (возбуждение уровня I3Р);  $\Delta \lambda_{60} = 0.4$  нм,  $N(N_2) = 7.10^{+11}$  см<sup>3</sup>, P = интегральный ионизационный спектр натрия /8/.

- 64 -

Отметим, что измерения проводились при ширине спек – траяьной полосы возбуждения, которая намного больше допплеровского уширения этомных линий. В данных условиях продук – тами только ассоциативного процесса (2) можно считать ионы  $Na_{z}^{c}$ , верегистрированные в nP – резонансах при n = 5, 6, и 7. При n > 7 конкурирувщим (причем более эффективным) каналом образования молекулярных ионов явилась прямая фотоионизация димерных молекуля натрия, которая имеет место при  $\lambda < 258$  нм и создает фоновую полосу в спектре монизации. В частности, на фоне этой полосы получены также масс-спектры, представленные на рис.3. В связи с этим оценить относятельную эффективность канала (-ов) ионизации, приводящего (-их) к образованию асомарных ионов Na при  $n \ge 10$ ; по полученному соотношению массовых компонент монов (рис. 3, в ) нельзя.



Puc.4. Macc-cnewip Mohos, nonyuennal mon cenewinshom zasep-How Bosfyrgennin B nyuke personanchore nonyposhs  $Na 3^2 P_{1/2}$ ( $\lambda = 569,6$  Hm).  $N(Na) = 4 \cdot 10^{11}$  cm<sup>-3</sup>,  $\Delta \lambda < 10^{-4}$  Hm,  $P_{bejd} =$ = 10 MBT.

Для оптического возбуждения пучка атомов натрия, кроме

ксеноновой лампы, использовался одночастотный сканируемый лазер на красителе (модель 580-01 фирмы " Spectra Physics "). Узкая полоса генерации дала возможность селективно заселять каждый из резонансных 3<sup>°</sup>P-подуровней. Образующиеся при этом йоны натрия были провнализированы по массам на описанной выше установке. На рис.4 приведен масс-спектр, полученный при возбуждении уровня Na  $3^{2}P_{1/2}$  нефокусированным лазерным излучением; идентичный масс-спектр получен при лазерном возбуждении уровня Na  $3^{2}P_{3/2}$ . Наличие в масс-спектрах только молекулярной компоненти Na<sub>2</sub> подтверждает основную роль ассоциативного процесса

- 00 -

 $N_a \ 3^{e} P_{1/2}, \frac{3}{2} + N_a \ 3^{e} P_{1/2}, \frac{3}{2} - N_a^{*} + e$  (3) в формировании ионов натрия при данных условиях эксперимента.

#### Список литературы

- Ключарев А.Н., Безуглов Н.Н. Процессы возбуждения и ионизации атомов при поглощении света. Л.: ЛГУ им. А.А.Жданова, 1983. 272 с.
- Cheret M., Lindinger W., Barbler L. et al.- Chem. Phys. Lett., 1982, vol.88, N 2, p.229-232;
- Roussel F. Carré B., Breger P. et al. J. Phys. B: At.Mol. Phys., 1983, vol.16, N 10, p.1749-1765.
- Kimura M., Saikan S. Chem. Phys. Lett., 1981, vol. 84, N 2 , p.276-279.
- Boulmer J., Bonanno R., Weiner J. J. Phys. B: At. Mol. Phys., 1983, vol.16, N 16, p. 3015-3024.
- Suemitsu H., Samson J.A.R.-Phys.Rev., 1983, vol. A28, N 5, p. 2752-2758.
- Bizau J.M., Carré B., Dhez P. et al. In: Abstracte XIII ICPEAC.W-Berlin, 1983, p. 689.
- Загребин С.Б., Самсон А.В.-В кн.: Процессы переноса энер гии в парах металлов. Рига: ЛГУ им. П. Стучки, 1983, с. 90-96.
- Спитулис Я.А., Загребин С.Б., Самсон А.В.-В кн.: Фотопро цессы возбуждения и нонизации.Л.:ЛГУ им.А.А.Жданова, 1984, с.71-74.
- IO. Несмеянов А.Н. Давление пара химических елементов. М. АН СССР, 1961 2 392 с.

#### И.В.Дмитриева, Е.Н.Котликов, О.В.Перчук ЛГУ им.А.А.Жданова (Ленинград)

## ИССЛЕДОВАНИЕ НЕЛИНЕЙНЫХ ИНТЕРФЕРЕНЦИОННЫХ СИГНАЛОВ С УРОВНЯ 2р. НЕОНА

Использование лазерного излучения в качестве источника возбуждения при исследовании интерференции состояний привело к наблюдению широкого класса нелинейных интерференционных сигналов /I,2/. В ряде случаев их наблюдение позволило получить дополнительную к сигналам пересечения уровней информацию о структуре уровней и о столкновительных процессах.

В настоящей рыботе приводятся результаты исследования нелинейного интерференционного сигнала, обусловленного двухквантовым процессом перепоглощения. Этот сигнал наблюдался во флуоресценции на частоте модуляции  $2f_o$  ансамбля атомов, взаимодействующего с модулированным на частоте  $f_o$  лазерным излучением.

Как известно /3/, линейно-поляризованное лазерное излучение выстраивает ансамбль атомов. Внешнее магнитное поле  $\vec{H}$ , направленное под углом к оси выстраивания, разрушает его. В простейшем случае, когда магнитное поле  $\vec{H}$  ортогонально вектору поляризации лазерного излучения  $\vec{E}$ , зависимость интенсивности флуоресценции от магничного поля имеет вид лоренцовского контура, ширина которого при экстраполяции к нулевой мощности лазерного излучения определяется постоянной релаксации выстраивания. Этот эффект носит название эффекта Ханле и проявляется в линейном отклике среды, т.е. при ее возбуждении модулированным на частоте  $f_0$  лазерным излу чением сигнал Ханле можно наблюдать в модулированной на той же частоте флуоресценции. При достаточно большой мощности лазерного излучения сигнал Ханле искажается различными нелинейными эффектами.

Если наблюдать отклик среди, модулированный на частоте 24, то регистрируются только чисто нелинейные эффекты. В частности, при экстраполяции к нулевой мощности лазерного поля набладение сигнала Ханле на удвоеннной частоте модуляции позволит разрешить интерференционный сигнал, обусловленный только двухквантовыми процессами перепоглощения. Усло – вимся в дальнейшем называть такой сигнал двухквантовым сигналом Ханле.

Двухквантовый сигнал Ханле описывается теорией возмущений четвертого порядка /5/. При возб, ядении монохроматической стоячей лазерной волной его форма описывается /4/ выражением

$$Re \sum_{\substack{k=a,b \\ q=\pm 1}} C_{kq} \cdot \frac{1}{\Gamma_{k}(2) - 2i \mathcal{R}} \cdot \frac{1}{\Gamma_{ab} - i \cdot \frac{q+1}{2} \mathcal{R}}, \quad (I)$$

где  $\Gamma_{a}(2)$  и  $\Gamma_{b}(2)$  - постоянные релаксации выстраивания верхнего (2) и нижнего (3) уровней генераций,  $\Gamma_{ab}$  - однородная ширина линии перехода,  $\mathcal{Q} = \frac{k_{a}g}{\lambda}$  - ларморовская частота.  $C_{kq}$  - коэффициент, содержащий 3 и 6 - символы, определяемые поляризацией лазерного излучения и мо ментами количеств движений уровней (2) и (3), а таюже постоянные релаксаций выстраивания и однородную ширину линии излучения.

Формула (I) описывает двухквантовый сигнал Ханле при наблюдении его в разности интенсивностей линейно поляризованных излучений I(X) - I(V) при Е I X и H I Z .

Экспериментальная установка для наблюдения двухквантового сигнала Ханле с уровня 2р<sub>4</sub> неона включала одномодовый гелий-неоновый лазер, генерирующий на длинах волн 0,63 и I,15 мкм, поглощающую ковету, установленную внутри резонатора дазера, систему модуляции лазерного излучения и систему регистрации. Блок-схема установки приведена на рис. I. Внутри резонатора дазера, образованного одним плоским и одним сферическим зеркалами 3, помещалась разрядная трубка РТ, обеспечивающая генерацию на линиях 0,63 и I,15 мкм, ковета К, в которой поддерживался разряд на смеси гелия и неона, а также поглощающая плэнка ПП, обеспечивающая одночастотный режим генерации /4/. Спонтанное издучение наблюдалось через боковме стенки Яветы. Катушки Гельмгольца, управляемые уси-



# Рис. І. Блок-скема экспериментальной устан. вки.

лителем постоянного тока УПТ и источником п.стоянного тока ИПТ, создавали необходимое магнитное поле, направленное вдоль оси чазера. Исследуемал линия выделялась монохроматором И и регистрировалась двумя фотовлектрическими умножите-

- 69 -

лями. В эксперименте регистрировалась величина I(x) - I(y) на линиях, начинающихся с уровня 2p<sub>4</sub> неона.

Сигналы с фотоэлектрических умножителей поступали на электронную систему регистрации, которая была организована таким образом, что позволяла попеременно регистрировать обычный сигнал Ханле и двухквантовый сигнал Ханле. Для этого модуляция лазерного излучения проводилась поочередно Ha. частотах 35 и 70 Гц, а регистрировался сигнал только на частоте 70 Гц. Система регистрации включала селективный усилитель с дифференциальным входом ДУ, синхронный детектор СД, фазовращатель ФВ, преобразователь напряжения в частоту И-f, блок управления БУ, анализатор импульсов АИ-256-6, генератор пилообразного напряжения ГПН и усилитель постоянного тока УПТ. Аналоговый сигнал с ФЗУ после усиления и синхронного детектирования на частоте 70 Гц преобразовывался в цифровой код и накапливался в анализаторе импульсов, работавшим в режиме синхронного детектирования /4,7/. В этом режиме последовательно во времени и синхронно с линейно-растущим маг нитным полем, задаваемым ГПН, сигналы накапливаются в ячейках памяти анализатора импульсов.

Сигнал Ханле накапливался в первых 128 ячейках памяти анализатора импульсов, двухквантовый сигнал Ханле – последующих 129-256 ячейках памяти. Для организации такого режима работы звуковой генератор ЗГ вырабатывал меандр с частотой 70 Гц, поступавший на вход триггера, формирующьго меандр с частотой 35 Гц. Оба меандра поступали на коммутатор К.При накоплении сигнала в первых 128 ячейках памяти анализатора он пропускал меандр с частотой 70 Гц, а при накоплении в последующих 128 ячейках памяти – меандр с частотой 35 Гц.

После прохождения ключа К меандр усиливался усилителем УС и поступал на пъезокерамику ПК, на которой было закреплено зеркало З. Наличие поглощающей пленки приводило к тому, что при перемещении пъезокерамикой зеркала З происходила 100%-ная модуляция мощности генерации. Подробно такой режим работы лазера описан в работе /6/.

Наблюдение интерференционных сигналов проводилось на линии 667,8 нм неона (переход 2p<sub>4</sub> - IS<sub>2</sub>) при возбуждении генерациями на длинах волн 0,63 и 1,15 мкм. Состав смеси в ковете во всех экспериментах поддерживался постоянным - соотношение He /Ne = 4/I. Общее давление смеси варьировалось от 0.8 до 4 мм рт.ст., ток разряда составлял I5 мА.

Типичная запись сигнала Ханле и двухквантового сигнала Ханле приведена на рис.2. Форма сигнала Ханле хорошо аппроксимируется лоренцовским контуром, из ширины которого мы опредаляли постоянную релаксации выстраивания. Малое отношение сигнал/шум для двухквантового сигнала Ханле не позволяет сделать однозначный вывод о его форме. Наиболее надехный параметр, определяемый по этому сигналу - ширина сигнала на половине высоты.

Ными проведены серии измерений ш.рин сигнала Ханле и двухквантового сигнала Ханле при различных мощностях лазерного излучения и давлениях смеси. Уширение сигнала Ханле лазерным полем было значительным (в два-три раза) и нос:ло. нелинейный характер, уширение двухквантового сигнала Ханле было незначительным (не более 30%) и носило линейный характер. Такая зависимость ширин сигналов от мощности лазерного излучения вполне естественна. Действительно, в уширении сигнала Ханле принимеют участие уже двухквантовые процессы перепоглощения фотонов. Для уширения же двухквантовый процесс перепоглощения, который происходит при значительно больших, чем двухквантовый процесс перепоглощения, полях лазерного излучения.

На рис.3 приведены зависимости ширин сигналов от давления смеси гелия и неона, экстраполированные к нулевой мощности лазерного поля. По зависимости ширины сигнала Ханле от давления нами определены радиационное время жизни уровня 2р<sub>4</sub> иеона (IO<sup>±</sup>I) МГц и уширение столкновениями равное (5,5<sup>±</sup>I) МГц/Т. Полученные данные согласуются с известными в литературе.


<u>Рис.2.</u> Экспериментальная запись сигналов: а - двухквантового сигнала Ханле; в - сигнала Ханле.



Рис.3. Зависимость уширения сигналов от девления смеси, эксперьментальная - сплошная линия, расчеткая - пунктир.

- 72 -

Из (I) следует, что ширина двухквантового сигнала Ханле в общем случае меньше, чел ширина сигнала Ханле. Используя формулу (I), полученные данные по уширению уровня 2p<sub>4</sub> неона столкновениями, а также данные по уширению линии I,I5 мкм неона (переход 2 s<sub>2</sub> - 2p<sub>4</sub>) /8/, мы рассчитали зависымость ширины двухквантового сигнала Ханле от давления. Результаты расчата приведены на рис.3. В пределах погрешности результаты расчета совпадают с данными эксперимента.

- 73 -

Проведенное исследование показывает, что двухквантовый сигнал Ханле может быть использован для определемия однородной ширины линии переходь.

#### Список литературы

- Деком Б., Дюмонт М., Дрклей М. Линейные и нелинейные явления при дазерной накачке. - В кн.: Лазерная спектроскопия ачомов и молекул. М.: Мир, 1979, с. 325-391.
- Котликов Е.Н., Кондратьева В.А.-Опт.и спектр., 1980, т. 48, вып.4, с. 667-674.
- Чайка М.П. Интерференция вырожденных атомных состояний.
   Л.:ЛГУ им.А.А.Жданова, 1975. 192 с.
- Дмитриева И.В., Кондратьева В.А., Котликов Е.Н. и др. -Опт. и спектр., 1983, т. 54, вып. 3, с. 605-611.
- 5. Lamb W.E. Phys. Rev., 1964, vol. 134A, p. 1429.
- Котликов Е.Н., Токарев В.И.-Опт. и спектр., 1979, т. 47, вып. 1, с. 27-32.
- 7. Котликов Е.Н. Вестн. ЛГУ, 1976, т. 10, с. 159.
- Летохов В.С., Чеботаев В.П. Принципы нелинейной лазерной спектроскопии. М.: Наука, 1975, 279 с.

А.П.Убелис ЛГУ им.П.Стучки (Рига)

## ИССЛЕДОВАНИЕ ПАРОВ СЕРЫ, СЕЛЕНА И ТЕЛЛУРА МЕТОДОМ ИМПУЛЬСНОГО ФОТОЛИЗА

Нормальной электронной конфигурацией для серы, селена и теллура является  $s^2p^4$ . Эти элементы имеют четыре метастабильных состояния  $s^2p^4$   $^3P_{I,0}$ ,  $^ID_2$ ,  $^IS_0$ . с энергиями соответственно 0,049, 0,071, 1,143, 2,744 эВ для серы,0,247, 0,314, 1,187, 2,783. эВ для селена и 0,589, 0,584, 1,309, 2,875 зВ для теллура /I/. Кроме того, двухатомные молекулы этих элементов также имеют метастабильные электронные состояния, аналогичные состояниям молекулы кислорода  $^I\Delta$ ,

<sup>1</sup> Х и расположенные выше основного состояния на 0,5 - 1,2 эВ /2/. Такая ситуация вызывает повышенный интерес к этим элементам как со стороны фундаментальных исследований, так и с точки зрения прикладных задач дазерной технологии и плазменных приборов. Для решения конкретных задач необходимы детальные исследования активности перечисленных метастабиль ных частиц в столкновениях с различного рода партнерами.

Известно, что для исследования метастабильных атомов и молекул очень эффективен метод импульсного фотолиза, а в случае использования труднолетучих соединений-высокотемпературный вариант метода /3-5/. Последний оказался полезным и для случая серы, селена и теллура.

Цель настоящей статьи, опираясь на уже известные результаты исследования методом высокотемпературного импуль сного фотолиз: паров серы, селена и теллура, наметить направления дальнейших исследований.

Среди рассматриваемых элементов методом импульсного фотолиза наиболее полно изучен теллур /6-9/.

Для рассмотрения процессов, протекающих в ковете фотолиза после воздействия импульса фотовозбуждения на пары теллура, разбавленные инертным газом, неооходимо проанализировать информацию, приведенную на рис. I. Из этого рисунка видно, что после импульса фотовозбуждения молекулы теллина



Рис. I. Кинетика концентрации атомов и молекул теллура по результатам измерения, атомарного (253, I, 238, 6, 238, 3 нм) и молекулярного поглощения (400 нм) и хемилюминесценции (530 нм) в ковете фотолиза длинов 30 см при температуре Т<sub>КОВ</sub> = =1000 К, давлении паров теллура 0,26 км рт.ст., давлении ксенона 20 мм рт.ст. Энергия разръда импульсной дампы 575 Дк. диссоциированы и атомы теллура находятся в основном, а также в метастабильных состояниях  ${}^{3}P_{0,I}$ . Их концентрацию можно измерять методом линейного поглощения на соответствующих линиях Те I. Кроме того, следить за восстановлением молеку – лярной концентрации Te<sub>2</sub> можно по молекулярному поглощению на полосах, расположенных вблизи 400 нм. Особый интерес вызывает наличие спектра хемилюминесценции ( послесвечения). Его кинетика на длине волны 530 нм также отражена на рис.I. В работах /6,8/ показано, что при давлении паров теллура свыше I мм рт.ст. населенность состояния  ${}^{1}D_{2}$  теллура ста – новится доступной для измерений, но ее значение на I,5 - 2 порядка меньше населенности состояний  ${}^{3}P_{1.0}$ .

Приведенный на рис. I экспериментальный материал покаэывает, что созданная к использованная в работах /5-8/ установка позволяет провести эксперимент, в котором можно одновременно следить за кинетикой концентрации атомов в основном и метастабильных состояниях, а также невозбужденных и возбужденных молекул в ковете фотолиаа. Это открывает возможности для изучения различных процессов столкновения с участием атомов и молекул теллура. По-видимому, смесь фотолиза, первоначально состоявшая из равновесного молекулярного пара теллура и атомов инертного газа М,после воздействия возбуждающего импульса света оказывается выведенной из равновесия, и его восстановление представляет собой сложную последовательность элементарных процессов, которую условно можно разделить на несколько групп:

а) процессы тушения уровней Те(<sup>1</sup> D<sub>2</sub>, <sup>3</sup>P<sub>0,1</sub>) компонентами смеси фотолиза

Te( I D 2, 3P0, 1) + Te2 - Te( 3P2) + Te2 ;

Te(1D 2, 3PO\_T)+ M --- Te(3P2) + M ;

6) процессы рекомбинация в молекулы атомов основного состояния  $Te({}^{3}P_{2})$ , а также (учитывая относительно небольшое энергетическое расцепление) атомов  $Te({}^{3}P_{C,1})$ ;  $Te({}^{3}P_{0,1,2}) + Te({}^{3}P_{0,1,2}) + M - Te_{2} + M$ ;  $Te({}^{3}P_{0,1,2}) + Te_{2} + M - Te_{3} + M$ ;

$$Te({}^{3}P_{0,1,2}) + Te_{2} + Te_{2} - Te_{3} + Te_{2} = Te({}^{3}P_{0,1,2}) + M + M - TeM + M$$

$$Te({}^{3}P_{0,1,2}) + TeM - Te_{2} + M$$

- 77 -

 в) процессы тушения или рекомбинация всех перечисленных атомов на поверхности кюветы фотолиза

Те(<sup>ID</sup><sub>2</sub>, <sup>3</sup>P<sub>0,1,2</sub>) — рекомбинация или тушение на стенках.

Большинство перечисленных реакций дезактивации атомов теллура приводит к образованию возбужденных молекул теллура, при этом наряду с колебательно-возбужденными могут образоваться молекулы в низколежащих метастабильных состояниях, дезактивация которых также может протекать по различным каналам:

 $\begin{array}{l} \operatorname{Te}_{2}(0_{g}^{+}, I_{g}^{+}, \mathscr{I}=n) + M & \longrightarrow \operatorname{Te}_{2}(\mathscr{I}=0) + M ; \\ \operatorname{Te}_{2}(^{I}\Delta, ^{T}\Sigma) + \operatorname{Te}(^{3}P) + M & \longrightarrow \operatorname{продукты} ; \\ \operatorname{Te}_{2}(^{I}\Delta, ^{I}\Sigma) + M & \longrightarrow & \operatorname{Te}_{2} + M ; \\ \operatorname{Te}_{2}(^{I}\Delta, ^{I}\Sigma) & \longrightarrow & \operatorname{desaktubauus ha ctehkax cocyda.} \end{array}$ 

К сказанному следует добавить, что наличие спектра послесвечения указывает на необходимость вести поиск реакций, в которых образуются электронно-возбужденные молекулы. При этом прежде всего следует выяснить, какие из ранее перечисленных реакций имеют фоторекомбинационные каналы протекания.

К настояще ј времени среди множества перечисленных реакций олределены константы скорости для процесса тушения атомов Те( ${}^{3}P_{0,1,2}$ ) молекулами теллура и для процессов рекомбинации двух атомов теллура в основном состоянии в присутствии инертного газа и атома в основном состоянии с двухатомной мслекулой Тр<sub>2</sub> и атомом инертного газа /7,8/.В /7,8/ также выявлена роль гетерогенных процессов тушения и рекомбинации метастабильных атомов теллура на кварцевой поверхности коветы фотолиза. Результаты исследования теллура методом импульсного фотолиза и накопленный опыт работы с теллуром позволяют наметить пути дальнейших исследований. Логическим продолжением начатых исследований является определение температурных зависимостей полученных констант скорости предессов рекомбинации и тушения, что даст возможность выявить механизмы этих реакций. Примечательно то, что эти работы на требуют чэменения созданной ранее установки /5/. Наряду с инертными газами представляется интересным также изучить процессы тушения и рекомбинации атомов теллура с другими газами.

Значительный . итерес представляет исследование дезактивации метастабильных атомов теллура <sup>I</sup>D<sub>2</sub>, но из-за малой их концентрации в условиях импульсного фотолиза паров теллура это затруднительно. Приходится работать в области больших давлений паров теллура, когда возникают сложности с учетом степени нагрова смеси фотолиза.

Вольшой интерес представляют дальнейшие исследования спектрального распределения фоторекомбинационного послесвечения, что позволит в дальнейшем выяснить механизм фоторе – комбинационных реакций и оценить возможности их использования в активных средах очтических квантовых генераторов /10/.

По аналогии с кислородом можно ожидать, что в процес сах фотолиза образуются метастабильные молекулы теллура  $\operatorname{Te}_2({}^{I}\Delta, {}^{I}\Sigma)$ . Интересным представляется поиск способов их детектирования и изучение их роли в различного рода столкновительных процессах.

Часть перечисленных исследований можно провести на уже созданной установке высокотемпературного импульсного фотолиза /5/, несколько модифицировав ее. Вместе с там очень интересным и полезным будет развитие метода высокотемпературного лазерного фотолиза при помощи эксимерных лазеров на инертных газах (ArF - 193 нм, KrCl - 222 нм, XeBr - 282 нм, XeCl - 308 нм). Преимущества этого метода заключаются в чозможности селективного фотовозбуждения и фоторазложения исходных молекул. Это позволит изучить первичные процессы фотолиза молекул Te<sub>2</sub>, до сих гор совсем не изученные.

Селен методом липульсного фотолиза паров менее изучен, чем телдур. Результаты таких ис.ледований приведены в ра - ботах /6.7. II/. Авторами этих работ установлено, что после фотовозбуждения паров селена происходит заселение метастабильных состояний <sup>3</sup>Ро. 1, <sup>1</sup> D 2 селена и имеет место послесвечение, связанное с реакциями фоторекомбинации атомов селена. Восстановление нарушенного импульсом фотовозбуждения равновесия, по-видимому, происходит, так же как и в случае теллура. в столкновительных процессах, и в приведенной ранее схеме процессов необходимо заменить теллур селеном. В указанных ранее работах изучены только процессы / рекомбинации атомов селена с молекулами селена в присутствии атомов инертных газов, в которых образуются полимерные молекулы Se2. В работе /II/ изучалось также спектральное распределение послесвечения. При дальнейшей работе с селеном актуальны все те задачи, которые перечислены для теллура. Постановка экспериментов, очевидно, будет очень сходной, поскольку в случае селена, так же, как в случае теллура, пооле импульса фотовозбуждения можно измерять линейное поглощение на атомарных линиях селена, молекулярное поглощение на молекулярных полосах Se, а также спектр послесвечения.

С точки эрения проведения эксперимента работа с селе ном представляется более простой, поскольку опыты можно проводить при меньших температурах. С другой стороны, интерпретация результатов в ряде случаев может быть затруднительна из-за сложного молекулярного состава паров селена, в которых наряду с двухатомными молекулами селена присутствуют молекулы с числом атомов до восьми включительно.

Пары серы методом импульсного фотолиза изучались только в одной работе /10/. Целью этих исследований было установление наличия спектра послесвечения в условиях импульсного фотолиза паров серы. Спектр послесвечения оказался расположенным в области 280-550 нм, имел более выраженную структуру, по которой можно было установить, какие электронные состояния молекулы серы заселяются в результате реакции фоторекомбинации атомов серы. Измерения заселенности метастабильных состояний атома серы не проводились и кинетика ее распада не изучалась, посколь у все пригодные для этих измерений линии серы расположены в области вакуумного уль трафиолета. Насколько можно судить по результатам этой работи, в перспективе на уже имеющейся установке /5/ придется ог раничиться изучением процессов фоторекомбинации. Для проведения комплексного эксперимента, аналогичного случаю теллура (рис.1), необходимо преодолеть значительные трудности, связанные с созданием установки высокотемпературного импульсного фотолиза, работающей в области вакуумного ультрафиодета.

В заключении отметим, что в последние годы исследования газовой фазы серы, селена и теллура различными експериментальными методами становятся все более интенсивными, и одним из наиболее подходящим для развития этих работ явля ется метод высокотемпературного импульсного фотолиза.

## Список литературы

- I . Moore Ch.E. Atomic Energy Levels. Washington: Natl.Bur . Stand.Circular.USA, 1958, vol. 3, p. 96-97.
- Хыкбер К.-П., Герцберг Г. Константы двухатомных молекул.
   М.: Мир, 1984, ч. I 408 с.; ч. II 366 с.
- J. K.K., Burne G. Disc.Farad.Soc., 1967.vol.44, p.241-251.
- 4. Trainer D.W., Ewing J.J. J.Chem. Phys: 1976, vol. 64, N 1, p.222-227.
- 5. Убелис А.П., Силиньш D.А.-ЖПС, 1979, т.31, № 4, с. 755-757.
- Убелис А.П., Силиньш D.А.-Опт. и спектр., 1975, т. 33, вып. 3, с. 479-485.
- 7 . Убелис А.П.-Изв. АН ЛатвССР, 1978, № 2.с. 20-35.
- Убелис А.П. Спектроскопические исследования газообразного теллура метедом импульсного фотолиза. Дис. на соиск. учен.степ.канд.физ.-мат.наук. Рыга, 1983. 185 с.
- 9. Убелис А.П. Спектроскопическиэ исследования газообразного теллура методок: импульсного фотолиза. Автореферат на соиск.учен.степ.канд.физ.-мат.наук.Ленинград, 1983. 16 с.
- Кочелап В.Л., Измайлов И.А.-Укр.физ. хурнал, 1981, т. 26,
   № 6, с. 881-903.
- II. Лездинь А.Э.,Убелис.А.П.-Х:м.физ., 1984, т.3, № 6, с.833 -835.

## И. Ю. Лукс ИНХ АН Латвийской ССР (Саласпилс)

## ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МЕТОДА АППРОКСИМАЦИИ ДЛЯ АНАЛИЗА КОНТУРОВ СПЕКТРАЛЬНУХ ЛИНИЙ СО СЛОЖНОЙ СТРУКТУРОЙ

Задача определения характеристик спектральной линии значительно усложняется, если исследуемый участок спектра содержит линию с перекрывающимися сверхтонкими или изотоп ными компонентами.

Одним из распространенных методов определения характеристик спектральных линий является аппроксимация контура линии с помощью модельных функций. Наиболее часто используется функция Фойгта /I-3/. Сопоставление модельных функций с экспериментальными данными и эценка параметров профиля линии обычно осуществляется пссредством метода максимального правдоподобия /4,5/. Метод аппроксимирующих функций обладает устойчивостью относительно экспериментальных погрешностей, позволяет анализировать и перекрывающиеся ли нии. При этом оценки параметров функции профиля содержат информацию о расположении центра линии, ширине ее профиля и интенсивности.

Для аппроксимации сложного участка спектра используем модель вчиде выражения

$$I(\vartheta) - \varphi(\vartheta) + \sum_{i=1}^{\infty} f_i(\vartheta - \vartheta_i), \qquad (1)$$

где I(v) - распредэление суммарной интенсивности по v;  $\varphi(v)$ функция, аппроксимирующая фон;  $f_i(v)$  - функция формы контура i-й составляющей;  $v_i$  - положение центра i-й составляющей; m - количество компонентов, формирующих суммарную интенсивность на данном участке спектра. В качестве функции профиля отдельных компонентов используем функцию Фойгта. Для описания фона в ограниченном участке спектра достаточно использовать линейную функцию.

Подгонку модели (I) к экспериментальному участку спектрэ следует проводить по методике нелинейного оценивания пара..етров /6/ для минимизации целевой функции:

 $\phi - \sum_{i=1}^{N} \frac{1}{G_{i}^{2}} \left[ I_{j} - I(\lambda_{j}) \right]^{2},$ 

- 82 -

где N – количество экспериментальных точек;  $I_i$  – изме – ренная интенсивность,  $I(v_i)$  – интенсивность по модели (I) в точке  $V_i$ ;  $G_i^2$  – дисперсия, характеризующая точность измерений. Если измерения про-одятся с помощью счетчика квантов, то можно принять, что  $G_i^2 = I_i$ . При правильно выбранной дисперсии минимум целевой функции (2) имеет распределение  $\frac{2}{3}$ с  $N-\ell$  степенями свободы ( $\ell$  – общее количество оцениваемых параметров) и может применяться для статистического анализа качества аппроксимации.

При такой постановке задачи для описания участка спектра, содержащего *т* компонентов, необходимо определить 2+4*т* параметров – два параметра фона и четыре параметра для каждой компоненты (расположение, интенсивность, гауссовскув и лоренцовскую доли уширения). С увеличением числа параметров задача становится плохо обусловленной. На практике часто используются соотношения между пареметрами, например, известные отношения интенсивностей, одинаковость формы отдельных компонентов. В работе /7/ предложены такие линейные соотношения между параметрами ввести в матричной форме:

- Ap+6,

где  $\vec{q}$  - вектор полного набора (2 + 4 m) параметров;  $\vec{p}$  вектор  $l \leq 2 + 4m$  независимых параметров, которые должны варьироваться в процессе подгонки; A - матрица (2+4m) lтрансформации;  $\vec{b}$  - вектор 2 + 4m смещений.

Выражение всех параметров через независимые уравнения (3) также позволяет постепенно анализировать весьма сложные участки слектра, если невозможно оценить одновременно все интересующие нас параметры, путем введения жестких соотношений и ограничений, вплоть до фиксации отдельных параметров.

На основе изложенной методики создана программа анализа сложных участков спектра, рассчитанная на использование ЭВМ типа ЕС и работающая под управлением операционной систем: ОС ЕС. В программе применен комплекс подпрограмм нелинейной регрессии *REGEST* /8/. Для расчета функция фойг-

(2)

(3)

та использовались рациональные аппроксимации /9, 10/.

- 83 -

Проиллюстрируем возможности изложенной методики NOTI анализе контуров спектральных линий с перекрывающейся сверхтонкой и изотопной структурой, регистрированных при помощи интерферометра фебри-Перо. Анализ усложняется перекрыванием соседних порядков интерреренции вследствие периодичности аппаратурной функции. Степень перекрывания определяется константой интерферометра Δ о и коэффициентом отражения sepкал Q. Если линия имеет сложную структуру, то перекрывание дает сложное распределение интенсивности, даже если Аб выбрана так, чтобы все компоненты находились в пределах одного порядка интерференции. Исследования нами задачи опре деления параметров контура единичной спектральной линии с использованием дискретного преобразования Фурье /I2/ показали, что обусловленность определения параметров возрастает при увеличении Δ б и R , т.е. при уменьшении степени Haложения порядков. Учитывая это, исследуем возможность восстановления параметров контура со сложной структурой без применения преобразования фурье.

На машине моделирозали контур спектральной линии 546, I нм изотопа ртути-202 по методике /II/. В табл. I приводены данные об относительной интенсивности сверхтонких и изотоп-

Таблица І

"你有 行	Contraction of the	No.	日本公本	199				
Номпон.	201-f	201-9	204	202	200	198	201-0	201-e
Относит. интенсив- ность	1,97	.0,78	13,95	74,34	1,98	1,0	3,76	1,02
Располо-	-0,227	-0,157	-0,061	-0,031	0	1,0	3,76	1,02

Относительные интенсивности и расположение сверхтонких и изотопных компонентов спектральной линии 516, I ны обогашенного изотопа ртути-202 нь компонент и расположении их на шкале волновых чисел. Обозначения компонент и значения расщепления взяты из работы /13/.

борма контура каждой компоненты описывается функцией фойгта. Дисперсионная часть уширения регистрируемого конту-



<u>Рис. I.</u> Рассиитание я ичтерферограмма линии 546. I нм ртути, обогащенной изотопом 202, при  $\Delta V_g = 0.018 \text{ см}^{-1}$ ,  $\Delta G = 0.5 \text{ см}^{-1}$  и разных значен. ях коэффициента отражения зеркал  $\mathcal{R}$ : I -  $\mathcal{R} = 0.75$ , 2 -  $\mathcal{R} = 0.80$ ; 3 -  $\mathcal{R} = 0.85$ , 4 -  $\mathcal{R} = 0.90$ . Езрти кальными отрезками показаны интенсивности и расположение составляющих комноментог. ра в основном определяется коэффициентом отражения зеркал инторферометра:  $\Delta V_L = \Delta G / N_R$ , где  $N_R = \frac{T R}{I-R} =$ эффек – тивное число интерферирующих лучей. В нашем случае  $\Delta G = 0.5$ см<sup>-1</sup>, R = 0.75; 0.80; 0.85; 0.90,  $\Delta V_G = 0.018$  см<sup>-1</sup>, что соответствует температуре разряда 100°С. Модель экспериментального контура показана на рис.1.

В табл. 2 приведены данные об относительных смещениях

Таблица 2

R	Относит. смещение, %		$\chi^2$	Примечание	
	DV0	AVL			
0,75 0,80 0,85 0,90	+34,7 +20,4 + 9,4 + 3,9	-9,0 -7,5 -5,5 -4,0	8,9 7,8 6,0 3,9	Без учета наложе- ния порядков.	
0,75 0,80 0,85 0,90	- 8,3 - 4,3 - 1,5 - 0,4		II,I 9,I 6,6 4,I	С фиксацией $\Delta \phi_L$ .	
0,75 0,80 0,85 0,90	+ 1,9 + 1,1 + 0,5 + 0,3	-0,4 -0,3 -0,2 -0,2	0,009 0,007 0,004 0,002	С учетом наложе - ния самых близких линий из соседних порядков.	

## Относительные систематические смещения оценок параметров уширения

от истинных значений параметров уширения при восстановлении их. Значение  $\chi^2$  характеризует суммарное значение систематических отклонений аппроксимации, что во всех случаях оказывается меньше возможных случайных отклонений (верхняя 95 %ная доверительная граница  $\chi^2 = 53$ ). Из данных табл.2 видно, что неучет наложения порядков вызывает значительные относи-"ельные смещения оценок параметров уширения  $\Delta \chi$ , и  $\Delta \chi$ , в



<u>Puc.2.</u> Результат подгонки распределения интексивности с учетом наложения порядков (сплошая линия) к данным машинного эксперимента (кружки).

поотивоположные ст эоны, уменьшающьеся при увеличении R. По-видимому, противоположность сдвигов параметров уши – рения связана со значительной отрицательной корреляцией между их оценками / 12/, поэтому Аиксация  $\Delta \lambda_{L}$  увеличивает точность определения  $\Delta V_6$  даже без учета наложения порядков.

Для проверки работоспособности метода обработки результатов измерений интер;ерометром Фабри-Перо в реальных условиях проведен машинный эксперимент по моделированию изкерений одного порядка интерференции с  $\Delta G = 0.5$ , R = 0.75 и  $\Delta v_G = 0.018$  см<sup>-1</sup>, искаженного случайным разбросом по закону распределения Пуассона (рис.2). Оценки параметров уширения, полученные после обработки моделированных данных, приведены в табл.3.

Таблица З

$\Delta v_0$ , cm <sup>-1</sup>	$\Delta v_L$ , cm <sup>-1</sup>	Общая полу- ширина, см <sup>-1</sup>	Примечание
0,029±0,005	0,041±0,003	0,056±0,002	Без учета наложения.
0,022±0,003	-	0,055±0,002	С фиксацией $\Delta V_L$ .
0,020±0,006	0,047±0,003	0,055±0,002	С учетом наложения.
0,018	0,045	0,053	Истинные значения.

# Оценки параметров уширения по данным машинного эксперимента

Итак, нами разработаны алгоритм и программа анализа контуров спектральных линий со сложной структурой, регистрированных с помощью интерферометра Фабри-Перо. Численным анализом модельной интерферограммы продемонстрированы возможности восстановления исходных параметров сложной спектральной линии. По сравнению с методом /II/, применяющим Фурьеразложение интерферограммы, нами разработанная методика позволяет непосредственно сравнивать результаты анализа с экспериментальными данными и более вироко применять апри орную информацию при анализе.

#### Список литературы

- 1. Armstrong B.H.-JQSHT, 1967, vol.7, N 1, p.61-88.
- 2. Kielkopf J.F.-JOSA, 1973, vol.63, N 8, p. 987-995.
- Puerza J., Martin P.-Appl.Opt., 1981, vol.20, N 22, p. 3923-3925.
- 4. Nomura H., Koda, Sh.-Appl. Spectr., 1979, vol. 33, N 3, p. 248 -253.
- 5. Holl R.J., Pores A.-Appl.Spectr., 1980, vol. 34, N 3, p. 351 360.
- Бард Й. Нелинейное оценивание параметров. М.: Статистика, 1979. 350 с.
- Hayakava M., Oka M.-J.Appl.Cryst., 1981, vol.14, N 2, p. 145-148.
- Лейтас А.М., Лукс И. Ю. Комплекс программ *RECEST* для построения и анализа нелинейных многофакторных моделей по данным эксперимента. -Информ.листок науч.-техн. достиж. ЛатНИИНТИ, 1982, # 82-14. 4 с.
- 9. Hui A.K., Armstrong B.H., Wray A.A.-JQSRT, 1978, vol.19, N5, p. 509-516.
- 10. Humliček J.-JQSRT, 1982, vol. 27, N 4, p. 437-444.
- 11. Донцов Ю.П., Завенятин Ю.А.-ЖПС, 1976, т. 24, вып. 5, с. 886-892.
- Лукс И.В.-В кн.: Процессы переноса энергии в парах металлов. Рига: ЛГУ им. П. Стучки, 1983, с. 123-131.
- Blaiss J., Chantrel H.-J.de Phys.Rad., 1957, vol.18, p.193-200.

- 88 -

А.С. Агапов, А.А. Матвеев, В.И. Хуторщиков (Ленинград)

## МЕТОДИ РАСЧЕТА ПАРАМЕТРОВ ВИСОКОЧАСТОТНИХ БЕЗЭЛЕКТРОДНИХ ЛАМИ

Высокочастотные безэлектродные спектральные лампы (ВЕЛ) с парами металла в настоящее время весьма широко используются как в промышленности, так и во всемозможных экспериментах по оптической накачке. по исследованию и наблюдению сенсибилизированной флуоресценции, в различных вариантах спектрального анализа. Широкий диапазон применения диктует и разнообразие в требованиях к характеристикам спектральных ламп. Обычно от них ожидают возможно большей плотности оптического излучения в заданных линиях, иногда нужна высокая экономичность источника света, в некоторых случаях важнее повышенная долговечность и стабильность. Кроме того, в разных экспериментах предъявляются сильно отличающиеся требования по интегральной интенсивности излучения этих ламп . Правильный обоснованный выбор конструкции и режима ламты возможен лишь в результате анализа модели, адекватной реальным процессам в лампе. В данной работе дан краткий обзор методов, которые разработаны нами и в настоящее время, используются при расчете таких характеристик ВЫ, как распределение атомов и электронов по объему лампи, баланс мощности, контур линии излучения, и для определения по интерферограммам исходного профиля излучаемых линий. Их же предполагается использовать для оптимизации режимов и конструкций ВЫ. Для определенности в работе исследовали разряд в смеси паров рубидил и криптона, причем давление криптона менялось в пределах от 0,7 до 7,5 торр, температура конденскрованного рубидия от 357 до 440 К, а радиус ламп варьировался от 0. I до 5 см.

При расчете распределений атомов и электронов по объему лампы и баланса мощности в ней мы решали, две задачи : с учетол и без учета возбуждения атомов криптона. Первоначально исследовалась модель, в которой были учтены упругие столкновения электронов с атомами и иснами рубидия и криптона, неупругие – лишь с атомами рубидия. Подобные режимы, внешне характеризующиеся отсутствием излучения спектральных линий криптона, легко реализуются при достаточно высокой упругости пара рубидия. Кроме того, нами были сделаны следующие продположения:

 ионизация атомов происходит лищь в объеме при столкновении электронов с атомами рубидия, а рекомбинация – лишь на стенкь баллона ламп;

 алектронная температура во всех точках лампы одинаковая;

 атомы металла описываются трехуровневой моделью (основное, возбужденное и ионизованное состояние).

Первое. условие достаточно торошо выполняется в иссле – довавшемся диапазене давлений. Лишь при наибольших давлениях можно ожидать ассоциативную диссоциацию, ксторую мы, однако, в данной работе не учитывали. Остальные предположения не требуют пояснений.



<u>Рис. I.</u> Зазисимость температуры электронов T<sub>e</sub>, интенсивнос ти излучения I и потока ионов на стенку лампы Г<sub>i</sub> от радиуса лампы. Некоторые из полученных результатов приведены на рис. 1,2, подробное изложение метода и результатов можно найти в /2/. Здесь же мы хотим обратить внимание на то, что в силу сделанных предположений решение оказалось существующим в сравнительно узком диапазоне условий.В частности, при уменьтении концентрации атомов рубидия в случае сохранения других характеристик решение перестает существовать, что естественно, так как в использованной модели электроны возникают лишь при ионизации атомов рубидия.

При анализе полученных результатов бросается в глаза весьма высокая при некоторых режимах температура электронов, что неизбежно должно вызывать возбуждение атомов криптона и нарушать исходное условие отсутствия неупругих столкновений электронов с атомами криптона. Учет возбуждения и ионизации атомов криптона приводит к возрастанию концентрации электронов и увеличению мощности, выделяющейся в разряде, а также к уменьшению температуры "хвоста" функции распределения электронов по скоростям. Однако пространственные распределения атомов рубидия и обусловленные ими параметры, в том числе





a - 91 -

потоки ионов и спектральные характеристики, определяются кой центрацией и температурой электронов, обладающих энергией меньшей, чем потемциал возбужления атомов криптона, и поэтому не должны существению изменяться при заданной концентрации и температуре электронов. Для более точного описания процессов в разряде в ВБЛ необходимо учесть возбуждение атомов криптона, что должно позволить более корректно описы – вать процесси в наиболее интересных для практики режимах в ВБЛ с однов менным возбуждением атомов рубидия и криптона. Составлена сиотем уравнений баланса концентраций электронов А, атомов рубидия в основном A, и возбужденном A, состояниях, в текже баланса мощности W :

$$D_{a} \Delta_{r} h * k(l,3) n_{i} h * k(2,3) n_{2} h * k(4, c) n_{4} h * k(5,6) n_{5} h = 0; (1)$$
  
$$D_{i} \Delta_{r} h - k(l,2) n_{i} h * k(l,3) n_{i} h * k(2,l) n_{2} h * \frac{n_{2}}{m} = 0; (2)$$

$$k(1,2)n_{1}n - k(2,1)n_{2}n - k(2,3)n_{2}n - \frac{n_{2}}{\tau_{3\neq 2}} = 0; \qquad (3)$$

$$D_{4}\Delta_{r}n_{4} - k(4.5)n_{4}n + k(4.6)n_{4}n + k(5.4)n_{5}n + \frac{n_{5}}{T_{0}4_{5}} = 0; \quad (4)$$

$$D_s \Delta_s n_s + k(4,5) n_4 n - k(5,4) n_s n + k(5,6) n_s n - \frac{h_s}{E_{ada}} = 0;$$
 (5)

$$W = -\frac{5}{2}kT_{e} \int [k(l,3)n_{l} + k(2,3)n_{2} + k(4,6)n_{4} + k(5,6)n_{5}] + Tr^{2}dr + (6)$$

$$+ \int (P_{yn} + P_{hoym})n + 4Tr^{2}dr;$$

$$\int (n_{4} + n_{5} + n_{c}) + 4Tr^{2}dr = N;$$
(7)

с граничными условиями

 $\frac{\partial n_i}{\partial r}\Big|_{r=0}^{-\frac{\partial}{\partial r}}\Big|_{r=0}^{-0}; \frac{n_i}{r_r}\Big|_{r=R}^{-\frac{\partial}{\partial r}}\Big|_{r=R}^{-\frac{\partial}{\partial r}} \frac{n_i}{r_r}\Big|_{r=R}^{-\frac{\partial}{\partial r}} \frac{n_i}{r_r}\Big|_{r=R}^{-\frac{\partial}$ 

стенки лампы; N - концентрация атомов криптона в лампе. Численные значения констант приведены в /2/. Функция распределения электронов по скоростям использована двухтемпературная в соответствии с критерием в /3/, а упругость пара определяется температурой капли металла и меняется независимо от условий разряда, что имеет место при использовании ламп с удлиненным резервуаром в термостате /4/.

Система уравнений решалась численно методом пристрелки с варьированием начальных концентраций атомов и электронов, температур и стрективных времен жизни Габа и Габа . Результаты решения этой системы обсуждены в /5/. На рис .3 приведены характерные распределения атомов и электронов в ВБЛ, полученные при расчете. Найти решение этой системы оказалось значительно сложнее, чем в случае отсутствия возбуждения криптона из-за большого числа переменных параметров . Полученные распределения атомов и электронов и их зависимости от мощности разряда, температуры и давления газа качественно близки измеренным экспериментально /4/. Для уточнения модели, для ее совершенствования необходимы более качест венные и систематические эксперименты по определению рас пределений атомов по объему лампы при одновременном измерении концентрации электронов, мощности разряда, интенсивности спектральных линий,

Ко: ечной целью любого расчета источника света является определение его оптических характеристик. Для расчета формы контура и интенсивности линий излучения нужно, неряду с распределением атомов по объему лампы, также знать исходный профиль линии излучения. С этой целью нами проводилось восстановление исходного профиля по экспериментально снятым на мультиплексе в ЛГУ им. А. А. Дденова доцентом М. С. Фриш интерферограммам. Для этого решалось интегральное уравнение

$$k(x, S)y(S)dS = f(x).$$
 (9)

Здесь  $k(x, 5) = \frac{\Delta y^2}{2 \sqrt{2+4(x-5)^2}}$  ядро, описывающее аппаратную функцию мультиплекса, причем  $\Delta y$  = 140 МГц – эксперимен – тально определенная ее ширина. А, R – числа, определяемые машинным "нулем" подинтегральной функции.

Уравнение (9) решали с помощью специально резработан-



<u>Рис.3.</u> Распределение атомов и электронов по объему лампы при  $n_e = 1 \cdot 10^{19}$  эл.м<sup>-3</sup>, T = 367 К, W = 0,589 Вт.1 – распределение электронов, 2 – атомы рубидия в основном состоянии, 3 – атомы криптона в основном состоянии, 4 – возбужденные атомы рубидия, 5 – возбужденные атомы криптона.

ного итеративного метода

Yi++ (2) = 2i(2) f(2) ;

где

$$\lambda_{i}(x) = \frac{y_{i}(x)}{\int_{x}^{B} k(x, s) y_{i}(s) ds}$$
  
 $i = 0, 1, \dots, n,$   
 $y_{0}(x) = '.$ 

Параметром регуляризации метода является число итера ций. Метод быстро сходится и дает при n = 15 гладкое решение с невлакой

 $\varepsilon_{n} = \int \frac{\sum_{k=1}^{200} \left[ \int_{k}^{B} (x, s) y_{k}(s) ds - f(x_{k}) \right]^{2}}{200} \int_{k}^{20} < 0.01$ 

- 95 -

При использовании методов /6,77 получить решение с невязкой менее  $\mathcal{E}_n < 0, I$  не удалось. Заметим, что гладкое решение  $y_n(x)$  с невязкой  $\mathcal{E}_h < 0,03$  удается также получить путем аппроксимации решения кубическими сплайн-функциями с 25 узлами на промежутке (A, P).

Полученный в результате контур аппроксимировался набором контуров Фойгта, относительное положение и интенсив – ность которых предполагались соответствующими теоретическим для линии рубидия 794,75 нм. Лоренцовская часть контура считалась известной и складывалась из естественного и столкновительного уширений, а гауссова – варьировалась. Одновременно варьировалась величина оптической плотности паров, через которые проходит излучение до выхода из лампы. Критерием качества аппроксимации являлись величины среднеквадратического отклонения, чебышевского отклонения и сдвига расчетных контуров по стношению к измеренным. В процессе поиска решения эти величины минимизировались, и в конечном итоге удавалось получить среднеквадратическое отклонение менее 5%.

В результате удалось определить атомную температуру в ряде режимов, которая при изменении мощности разряда от I до 3 Вт в лампах диаметром I3 мм, наполненных криптоном при давлении 3 мм рт.ст., составила от 400 до 510 К.

Следует отметить, что метод восстановления контуров оказался в случае атомов рубидия, обладающего сверхтонкой структурой, ограниченно применимым, так как в некоторых режимах определенно наблюдалось отклонение соотношения сверхтонких компонент от теоретического из-за явлений самонакачки /8/, которое в будущем будем стремиться учесть в расчете.

В дальнейшем рассчитанные распределения и исходные профили использовались для определения контура линии излучения в однолучевом приближении. Было обнаружено, что форма контура линии излучения из разных областей ВБЛ сильно различается, и это надо учиты вать при интерпретации экспериментов с этими лампами. Более подробный анализ полученных результатов приведен в /9/.

Для оценки гранки применимости методов расчета параметров ламп рассмотрим кратко особенности ВЕЛ, отличающие их от источников света, работающих на более низких и более высоких частотах возбуждающего поля. В отличие от СВЧ - разря цов в ВБЛ толщина скин-слоя существенно больше или сравнима с радиусом лампы. В результате неоднородность физических условий в ВБЛ значительно меньше, чем в СВЧ - разрядах, и это позволяет не рассматривать процесс введения мощности в разрян наи монелировании ВЕЛ. Специфической особенностью высокочастотных сикостных разрядов является возникновение 3H8чительного потенциала плазмы из-за периодического смещения электронов по отношению к иснам в условиях высокочастотного разряда /10/, причем потенциал плазмы сравним с потенциалом внешнего электрода. В случае безэлектродных разрядов потенциал плазмы сущ ственно меньше, но все же достаточно велик. В ВЕЛ подобные плазменные поля всегда присутствуют и в Е -, и в Н - разрядах, и их проявление несложно наблюдать. Так , при наличии резервуара для избытка металла в последнем иногда наблюдается разряд, который является причиной нестабильности спектральных ламп на уровне 0,5 - 26. Условием для его возбуждения является наличие проводящих поверхностей вблизи резервуара, например, при креплении лампы за резервуар /4/. Возникновению нестабильности излучения может способствовать и слишком большое количество металла (более 0,2 мг) в лампе. Отдельные капли металла заряжаются электронами отрицательно, и это приводит и появлению резности потенциалов между каплями металла и телом разряда, в результате чего появляются потоки Ионов, которые испаряют капли металла и вызывают флуктуации светового потока из-за локального новышения температуры жидкой фазы мегалла (на это явление, по-видимсму . впертые обратил внимание при исследовании. ВЧ разрядов Левитский /II/. Эти процессы должны учитываться также при исслодовании долговечности спектральных ламп. Они более существенны должны быть в Е - разряде, но важны и в Н - разриде, так как мы всегда в ВБ1 имеем дело со смешанным Е + Н раз-

рядом. Учет этого явления может сделать понятным и случай невоспроизводимости параметров ламп по напряжению поджига , по интенсивности и долговечности, их ускоренный выход из строя в некоторых случаях. Но, несмотря на все это, основным фактором, определяющим особенности характеристики ламп в Еи Н - разрядах, в том числе и старение спектральных ламп, остается концентрация заряженных частиц. Это св. зано с тем, что Е - разряд в ВЕЛ используется обычно в маломощных ис точниках света и возникающий в них потенциал оказывается сравнимым или меньшим, чем потенциал плазмы в обычных Н разрядах, даже без учета смещанного характера реального Н разряда. Практически удается подобрать такое расположение витков или пластин индуктора, при котором существенно уменьшается разность потенциалов в плазме, и в результате удается избавиться от возникновения связанной с этим нестабильности. Таким образом, при сопоставлении результатов расчета с ре зультатами эксперимента следует иметь в виду,что в эксперименте возможны распределения потенциалов, существенно влияющие на характеристики ВЕЛ, но имеющие в каждой конкретной конструкции свою величину и распределение, что делает в настоящее время их учет не совсем для нас ясным. При сопоставлении данных расчета с реальными данными эксперимента необходимо создать минимальные потенциалы в плазме. Границы применимости модели по давлению буферного газа у нас были оговорены выше, и они существенны для использования модели амбиполярного режима. При наибольших мощностях, давлениях газа и размерах лампы следует, по-видимому, учитывать возмож. ность ассоциативной ионизации и диссоциативной рекомбинации, которые могут привести к существенно иному характеру распределения атомов рубидия по объему лампы.

Таким образом, можно провести полный расчет параметров спектральной лампы при заданных ее размерах, наполнении и конструкции и использовать полученные результаты в дальнейшем для оптимизации режима и правильного выбора гонструкции при заданных требованиях к характеристикам источника света. В целом получаемые при расчетах результаты качественно согласуются с данными эксперимента, а о количественном совпадении говорить трудно из-за отсутствия надежных экспериментальных данных, в которых были бы известны набор исходных параметров и основные характеристики ламп. Дальнейшее совер шенствование методики расчета ВБЛ требует проведения углубленного экспериментального исследования этих ламп, но уже сегодня результаты расчета используются нами при разработке источников света с заданными характеристиками и при изуче нии особенностей их работы.

Приведенные методы расчета были опробованы лишь для случая смеси паров рубидия и криптона.Однако представляется возможным использовать их для анализа и другчх смесей в спектрельных лампах.

#### Список литературы

- I . Van Tongeren.-Phil. Res. Rept. Suppl., 1975, N 12. p. 5-130.
- Агапов А.С., Калашникова А.И., Матвеев А.А., Семенов С.В., Хуторщиков В.И.-Вопр.радиоэлектроники. Сер. ОВР, 1984, вып. 8, с. 80-88.
- Биберман Л.М., Воробьев В.С., Якубов К.Т.-УФН, 1979, т. 128, вып.2, с. 233-270.
- 4. Калашникова А.И., Хуторщиков В.И. В кн.: Процессы пе реноса энергии в парах металлов. Рига: ЛГУ им. П.Стучки . 1981.с.164-173.
- 5. Агапов А.С., Хуторщиков В.И.-Вопр.радиоэлектроники .Сер. ОБР, 1983, вып.9, с. III-II8.
- Верлань А.Ф., Сизиков В.С. Методы решения интегральных уравнений с программами для ЭВМ. Справ. пос. Клев: Наукова думка, 1978. 291 с.
- 7. Полак Э. Численные методы оптимизации. М.: Мир, 1974.376с.
- 8. Александров Е.В., Якобсон Н.Н.-УФН, 1980, т. 131, с. 721-722.
- 9. Агапов А.С., Смирнова Г.М., Хуторщиков В.И.-В кн.: Процессы переноса экергии в парах металлов. Рига: ЛГУ им. П. Стучки, 1983, с. 152-161.
- Райзер D.П. Основы современной физики газоразрядных приборов. М.:Наука, 1980, с. 208.
- II. Левитский С.М. ЖТФ. 1957. т. 27, с. 970.

- 98 -

А.Э.Лездинь, С.Я.Путниня, А.Я.Скудра ЛГУ им.П.Стучки • (Рига)

## СПЕКТРАЛЬНЫЕ ПАРАМЕТРЫ ГЕЛИЯ В ВИСОКОЧАСТОТНОМ РАЗРЯДЕ.

Высокочастотная безэлектродная лампа (ВБЛ) представляет собой цилиндрическую или сферическую колбу, заполненную определенными химическими элементами или их соединениями и инертным газом. Для зажигания разряда лампу помецают в индуктор высокочастотного генератора. Работ, содержащих описание ВБЛ на чистых инертных газах, мало, хотя для решения ряда научных и прикладных задач эти лампы необходимы ( например, как источник света при измерения преломления оптического стекла с помощью гоннометра-спектрометра).

В настоящей работе исследованы цилиндрические гелиевые ВЕЛ /1/, для возбуждения разряда в которых использовался генератор ППЕЛ-ЗМ. Выявлено оптимальное давление гелия в лампе, измерялись температура баллона, интенсивности и контуры спектральных линий в зависимости от наполнения и режима работы лампы.

Из рис. I видно, что при токе генератора 100 мА (кривые I) максимумы интенсивности излучения спектральных линий гелия 728, I ни (3<sup>1</sup>S - 2<sup>1</sup>P) и 587, 6 ни (3<sup>3</sup>D - 2<sup>3</sup>P) наблюдаются при различных давлениях гелия в лампе:для 728, І ны при 0,6-0,9 мм рт.ст., а для 587,6 нм при 1,0-1,8 мм рт.ст. При увеличении тока генератора максимумы интенсивности сближаются: для 728, I ны максимальная интенсивность отмечена при 0,7-0,9 мм рт.ст., а для 587,6 нм при 0,8-1,1 мм рт.ст. Это свидетельствует о различном возбуждении синглетных и трыплетных уровней. При больших токах возбуждающего генератора увеличивается концентрация атомов гелия на метастабильном уровне 2<sup>3</sup> . что и способствует возбуждению других триплетных уровней при меньших давлениях, чем в случае маленького тока генератора. Аналогичные зависимости максимума интен сивности излучения инертного газа от давления наблюдались для аргона, криптона и ксенона в области давления 0, 1-0.5





мм рт.ст./2/, причем оптимальное давление уменьшалось с увеличением атомной массы газа.

Измерена интенсивность линии 728, 1 им в зарисимости от тока возбуждающего генератора для ламп с различным давлени-



<u>Рис.2.</u>Интенсияность спектральной линии 728, I ны в зависимости от тока возбуждающего генератора для ламп с различным давлением гелия: I-0,35 км рт.ст.; 2-0,65 км рт.ст.; 3- I,35 мм рт.ст.; 4- 2,20 мм рт.ст.; 5- 3,15 км рт.ст.; 6-5,10 км рт. ст. ем гелия (рис.2). С уменьшением давления гелия в лампе интенсивность-возрастает при всех режимах возбуждающего генератора (наклон кривых увеличивается). При давлении гелия 0,35 мм рт.ст. (кривая I) уменьшагся интенсивность линии 728,I нм по сравнению с лампой, в которой давление газа составляет 0,65 мм рт.ст., из-за малой концентрации электронов и атомов. Из рис.2 видно,что в случае больших мощностей возбуждающего генератора лучше использовать лампы с меньшим давлением гелия, что обусловлено уменьшением роги тушащих столкновений возбужденных атомов гелия.

Температура наружной стенки баллона лампы, которус измеряли с помощью термопары, в зависимости от тока возбуждающего генератора изменяется, подобно интенсивности линий (рис.3). Только при давлении больше 2 мм рт.ст. электроны теряют больше энергии в термических столкновениях, и реже получается смергия, достаточная для возбуждения атомов (кривые 4,5,6), поэтому с увеличением давления гелия повышается и температура лампы, и одновременно уменьшается интенсивность спектральных линий.

Нами исследованы контуры спектральных линий ряда синтлетных переходов атома гелия – 728, I нм ( $3^{I}S_{0} - 2^{I}P_{1}$ ),667,8 нм ( $3^{I}D_{2} - 2^{I}P_{1}$ ), 501,6 нм ( $3^{I}P_{1} - 2^{I}S_{0}$ ) и 492,2 нм ( $4^{I}D_{2} - 2^{I}P_{1}$ ). Контуры снимали при помощи сканирующего интерферо метра Фабри-Перо. На зеркала интерферометра фокусировалось излучение только от центральной области лампы. В качестве математической модели для аппроксимации экспериментальной интерферограммы использовали интеграл Фойгта. Разделение регистрируемого контура на гауссовскую и лоренцовскую составляющие проводили на мини-ЭЗМ ДЗ-28, используя метод, предложенный в работе /3/. Принятые специальные меры позволили аппаратный контур спектральной линии аппроксимировать перекрывающимися лоренцовскими контурами. Тогда ширина лорен цовской составляющей экспериментального контура представляет собой сумку:  $\Delta y_{L}^{I} - \partial y_{R} + \Delta y_{ecr} + \Delta y_{L}^{I}$ ,

где  $dV_{R}$  - ширина аппаратного контура,  $\Delta V_{ec.}$  - естествен ная ширина линии,  $\Delta V_{L}$  - уширение при соударениях с невозбужденными атомами гелия. Температура внутри ламлы была определена по гауссовской части контура спектральной линии 728, I нм (рис. 4). Таким образом, получается на 60-80°С выше, чем температура на-



Рис.3. Температура наружной стенки баллона лампы в зависи мости от тока возбуждающего генератора для лемп с различным давлением гелия: I- 0,35 мм рт.ст.; 2- 0,65 мм рт.ст.; 3- I,35 мм рт.ст.; 4- 2,20 мм рт.ст.; 5- 3,15 мм рт.ст.; 6-5,10 мм рт. ст.



Рис.4. Зависимость гауссовской составляющей экспериментального контура спектральной линии 728, I нм от тока генератора при давлении гелия 0,65 : м рт.ст.(1) и 2,20 мм рт.ст.(2).

#### ружной стенки баллона.

Ударная теория столкновений предсказывает линейную зависимость уширения линии от концентрации возмущающих частии. Исследовались контуры ламп с разным давлением гелия - от 0,2 до 5 мм рт.ст.

Наклон прямой на рис.5, где показано изменение ширины лоренцовской части спектральной линии 492,2 нм в зависимости от давления гелия в лампе при токе генератора 90 мА, характеризует константу уширения линии в соударениях с атомвми гелия в основном состоянии. Точка пересечения проведенной прямой с осью ординат соответствует сумме ширины аппаратного контура и естественной ширины линии. Естественную ширину линий рассчитывали по известным вероятностям перехо-

- 104 -



<u>Рис.5.</u>Изменение ширины лоренцовской составляющей спектральной линии 492,2 нм в зависимости от давления гелия в лампе при разных константах интерферометра и токе генератора 90 мА. (I-0,3I3 см<sup>-1</sup>;2-0,4I7 см<sup>-1</sup>;3-0,500 см<sup>-1</sup>).

дог /4/. Данные, приведенные на рис.5, получены при трех разных константах интерферометра. Длина отсекаемого отрезка  $\Delta V_L = \partial V_R$  характеризуют изменение ширины аппаратного контура при различных константах интерферометра  $\partial V_R - \Delta G/N_R$ , где  $\Delta G$ константа интерферометра,  $N_R$  - эффективное число интерферирующих пучков.

Полученные нами константы улирения измеренных линий гелия, приведенные в таблице, определены как ударное уширение в расчете на один аточ (см<sup>-1</sup>/см<sup>-5</sup>).

Таблица

T

Константы уширения линий гелия в столкновениях с атомами гелия

λ,ΗΜ	Переход	Константа уширения см-1. см3. 10-20
501,6	$3^{I}P_{I} - 2^{I}S_{0}$	10,1 ± 0,7
492,2	$4^{I}D_2 - 2^{I}P_I$	I2,0 ± I,2
728,I	$3^{I}S_{0} - 2^{I}P_{I}$	8,8 ± 1,3
667,8	$3^{I}D_2 - 2^{I}P_I$	9,2 ± 2,2

Резулі аты работы показывают, что для достижения максимальной интенсивности спектральных линий оптимальное давление гелия в высокочастотной безэлектродной лампе должно составлять 0,7-1,2 мм рт.ст. Уменьшение интенсивности при давлениях, меньших, чем оптимальное, обусловлено уменьшением концентрации электронов, а при больших давлениях - снижением температуры электронов. Интерферометрические исследования позволили определить температуру разряда ,которая пре вышает температуру стенки баллона лампы. Аппроксимацией контура излучающей спектральной линии функцией фойгта определены константы уширения в столкновениях с атомами гелия для реда синглетных линий.

Список литературы

- I. Краулиня Э.К., Путниня С.Я., Скудра А.Я. В кн.: XIX Всесованый съезд по спектроскопии, ч.УІ. Томск, 1983, с. 63-65.
- Семенов С.В., Слирнова Г.М., Хуторщиков В.И. -Вопр. радио электроники. Сер. ОЕР, 1963, вып. 2, с. 95-99.
- 3. Kielkopf J.F.-JOSA, 1973, vol.63, N 8, p.987-995.
- Wiese W.L. In: Progress in Atomic Spectroscopy, Part B. New York-London, 1979, p. 1101-1155.

А.П.Брюховецкий, А.П.Круминью, Э.В.Пипин, И.И.Книпшис ЛГУ им. Й. Стучки (Рига)

### ИЗМЕРИТЕЛЬНО-УПРАВЛЯЮЩИЙ КОМПЛЕКС ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ЭФФЕКТА ХАНЛЕ

При исследовании эффекта Ханле (подробно схема эксперимента рассмотрена в /1,2/) информация о двух интенсивностях флуоресценции со взаимно перпендикулярными векторами поляризации (I, и I, ) накапливается двумя частотомердми ЧЗ-38. Магнитное поле измеряется либо по показанию миллиамперметра, включенного последовательно в цепь с обмотками магнита, либо по надению напряжения на образцовом сопротивлении при измерении цифровым вольтметром В7-23 с последующим пересчетом по известным формулам /I/. В упомянутых работах показания частотомеров и информация о магнитном поле снима лись вручную, затем все табулировалось, вводилось в ЭВМ и обрабатывалось обычно спустя довольно значительное время после эксперимента.

В настоящей работе сообщается о создании для исследования эффекта Ханле измерительно-управляющего комплекса Ha базе ЭВМ "Электроника ДЗ-28". Ранее /3/ уже сообщалось 0 сопряжении ДЗ-28 с периферийными устройствами (ПУ) "Оргтекста"-перфоратором ЕР-35 (ПЛ), фотосчитывателем ER-40 (ФС) и дисплеем (Д). Сопряжение было осуществлено в интерфейсной системе, в основу которой положено расширение шин . ввода и вывода машины /4/. Эта же система использовалась нами ИВ дальнейшем при подключении ПУ к ДЗ-28. Вычислительный KOMпленс на базе ДЗ-28 и ПУ "Оргтекста" с его возможностями отобрежения информации вошал составной частью в измечительноуправиянций комплекс. В основу системы сопряжения положен модульный принцип. Блок сопряжения /3/, включавший себя B магистральный расширитель (MPI), дешифратор адреса (ДША I), интерфейсные карты перфоратора (ИКП), фотосчитывателя (ИКФ), дисплея (ИКД), а также блок питания (БПІ) были первыми модулями крейта (KI).
Для облегчения процесса наладки новых интерфейсных узлов и ускорения поиска ошибок при отладке программ, предусматривающих обмён информацией между различными ПУ, был разработан блок индикации (БИ) состолния шин управления (ХЗ, уЗ), ввода (Вва, Ввв), вывода (Х2, У2) и прерывания. Этот блок также конструктивно выполнен в виде отдельного модуля и размещен в крейте (КІ).

Четвертый модуль в КІ - магистральный расширитель (МР2) - разработан с целью подключения к вычислительному комплексу трех экспериментальных установок. Посредством МР2 магистраль "ввод-вывод" преобразуется в три канала, каждый из которых содержит по 8 линий управления (ХЗ, УЗ), 8 линий ввода (Вва, Ввв), 8 линий вывода (Х2, У2), 4 линки прерывания (ПРІ, ПР2, ПР4, ПР8) и 3 линии синхронизации (Вв, СИМ, СИП).

К одному из каналов подключен крейт (К2), удаленный от ДЗ-28 на 40 м и максимально приближенный к эксперименталь – ной установке по исследованию эффекта Ханле. В К2 размещены: модуль – дешифратор адреса (ДША 2), два модуля с интерфейсными картами частотомеров (ИКЧ-I и ИКЧ-2,ИКЧ-3 и ИКЧ-4), модуль с интерфейсной картой вольтметра (ИКВ), модуль с интерфейсной картой цифроаналоговсго преобразователя (ИКЦАП) и три модуля – блоки питания. К каждой из ИКЧ можно одновременно подключить два частотомера ЧЗ-38, интерфейсным картам частотомеров присвоены адреса: 0I I5, 0I I4, 0I I3, 0I I2.К ИКВ подсоединяется цифровой вольтметр В7-23 (адрес 0I II ). Интерфейсные карты ИКЧ и ИКВ содержат преобразователи па – раллельного двоично-десятичного кода частотомера и вольт – метра в параллельно-последовательный код, а также согласователи логических уровней выхода частотомера и ДЗ-28.

ИХЦАП предназначена для управления генератором тожа (ГТ), который далее будет питать сбмотки магнита в эксперименте по исследованию эффекта Ханле. Этот блок сейчас на стадии разработки, и ток, а вместе с тем и магнитное поле тока, выставляется вручную.

На рис. І представлена схема подключения ПУ к ЭВМ ДЗ -28. При обмене информацией с ПУ, присоединенными к крейту К2, для адресации используются шины управления (Х2, УЗ ). Старжие биты (УІЗ, У2З, У4З, У6З) попользуются для адреса-





цим прейта, а младшие ( XI3, X23, X43, X83)-для адресации ПУ. Таким образом, по одному каналу можно к машине подсоединить 16 крейтов, каждый из которых может содержась интерфейсные карты 16 ПУ. Ввод информации в ДЗ-28 с ПУ крейта К2 происходит по следующей схеме. По команде обмена (с клавиатуры ДЗ-28 или по программе) на шинах управления выставляется адрес ПУ. В дежифраторе ДМА 2 происходит сравнение старшего бита адреса с предварительно присвоенным крейту адресом и далее вырабативается сытиал разрешения для преобразователя кода интерфейсной карты с адресом, соответствующим младшим битам на шине управления. После команды обмена на шине синхронизации выставляется сытиал "Готовность" (Ве) и формируется ситиал СИ (длительность 5 мкс), после чего одян байт информации с преобразователя кода, для которого

109 -

есть разрешение, поступает на шины ввода (Вва, Ввв) ДЗ-28. Через промежуток времени 7 после сигнала СИ формируется сигнал СИП. За это время данные поступают в память ЭЕМ. После прихода сигнала СИП снимается лигнал Вв, и ДЗ-28 подготавливается к приему следующего байта. Временная диаграмма ввода информации представлена на рис. 2.





Разгаботанная программа предусматривает съем с двух часто томеров 43-38 информации об интенсивностях излучения со взаимно перпендикулярными плоскостями поляризации, съем с В7-23 информации о магнитном поле, обработку всех данных и вывод окончательных результатов на ПМ. Программой предус мстрено несколько режимов работы:

режим I - расчет темнового фона в двух информативных каналах регистрации /I/ при закрытых входных окошках регистрирующих ФЭУ I<sub>т</sub>, к I<sub>т</sub>;

режим 2 - определение нормировочного коэффициента К для двух информативных каналов при одинаковой засветке обоих ФЭУ;

режим 3 - определение степени поляризации Р и погреш ности измерения ДР с учетом темнового фона и нормировоч-



Рис.3. Алгоритм программы управления и обработки результа тов эксперимента при исследовании эффекта Ханле. ного коэффициента, формирование массива данных P<sub>i</sub> ;  $\Delta P_i$  ; H<sub>i</sub> ; режим 4 - построение контура Ханле P = P(H).

Выбор режима работы осуществляется с клавиатуры дис плея. Программа обработки построена по пакетному принципу и в любой необходимый момент может быть дополнена и изменена.

Алгоритм разработанной программы представлен на рис. 3.

Работа по режиму 3 пока осуществляется при ручном изменении значения магнитного поля Н. В дальнейшем магнитное поле будет выставляться по команде с Д3-28.

Разработанный измерительно-управляющий комплекс легко адаптировать ко многим спектроскопическим экспериментам путем разработки соответствующих программ взаимодействия ПУ и обработки результатов. Большая гибкость комплекса станет возможной при подключении к нему блока управления реле и таймера, что значительно облегчит задачи по управлению экспериментом.

# Список литературы

- I. Таманис М.Я., Фербер Р.С., Шмит О.А. В кн.: Сенсибилизированная флуоресценция в смеси паров металлов. Рига: ЛГУ им.П.Стучки, 1979, с. 52 -67.
- Ferber R.S., Shmit O.A., Tamanis M.Ya. Chem. Phys. Lett., 1979, vol.61, p.441-445.
- Бриховецкий А.П., Круминыш А.П., Пипин Э.В. В кн.: Про цессы переноса энергии в парах металлов. Рига: ЛГУ им. П. Стучки, 1981, с. 175-179.
- Устройство специализированное управляющее вычислительное "Электроника ДЗ-28". Техническое описание. 1981. 126 с.

Р.В.Орлов ЛГУ им. П.Стучки . (Рига)

### ОБ ОТБОРЕ ФОТОПРИЕМНИКОВ ДЛЯ УГЛОМЕРНЫХ УСТРОЙСТВ

В угловых дискриминаторах угломерных устройств и в трактах автоматического сопровождения цели по направлению в качестве фотоприемников используются фоточувствительные матрицы /I/, имеющие множество элементов,часть из которых может быть непригодна для приема информации. Например, матрица МФ-I4 имеет 1024 элемента. По ТУ матрица считается работоспособной, если исправны 1000 элементов.

В настоящей статье обсуждается возможность отбора матриц по следующему признаку: матрица применима, если нет по маньшей мере двух рядом стоящих неисправных элементов (влово, вправо, вверх, вниз, по диагоналям). Отбор можно произвести, используя ЭВМ. Неисправные элементы запоминаются и в последующем проверяется, не являются ли они рядом стоящими. Если это так, то по указанию ЭВМ срабатывает сигнализация и матрица бракуется.

Однако временные затраты на составление программы для ЭВМ относительно большие, поэтому предпочтительнее аппаратные средства.

Возможно экономичное по времени сканирование, показанное на рис. Ia. Но, так как время проверки составляет доли секунды, можно упростить алгоритм сканирования, а вместе с тем и электронные схемы за счет некоторого увеличения времени сканирования. Как видно из рис. Ió, проверка происходит по четверкам элементов, т.е., если в какой-либо четверке больше одного неисправного элемента, матрица бракуется.

На рис. Ів показана Дункциональная схема проверки - по четверкам. Допустим, что при полном облучении матрицы на выходах исправных элементов выдается логическая "I", а при полном затемнении-логический "О". С генератора (Г) подается первый импульс на схегу сканирования (СС), которая обеспечивает подачу логического состояния выхода элемента матрицы (М) 6 - И строки и ј-И колонки на выход М. Если матрица об-





<u>Рис. I.</u> Сканирование, экономичное по времени (a) и по аппаратным средствам (б), и функциональная схема устройства проверки (в). лучена, выход М подключен к инвертору, выход которого подсоединен к информационному входу распределителя (Р). Если матрица затемнена, инвертор обходится. Первый импульс подается также на счетчик(С), выходы которого подключены к адресным входам Р. Состояние элемента i -й строки и j -й ко лонки записывается в первую ячейку памяти (П). Далее с Г подается второй импульс, который обеспечивает подачу состояния элемента i -й строки и (j + 1)-й колонки на выход М, а записывается это состояние во вторую ячейку П. Подобным образом опрашиваются элементы ( $i \pm 1$ )-й строки и (j + 1)-й колонки, затем (i + 1)-й строки и j -й колонки. Состояния элементов записываются в П. На выходе П подключена логическая схема (ЛС), которая выдает логическую "1", если любые две или более ячеек П содержат логическую "1".

Иногда пучок принимаемого излучения невозможно сузить до размеров двух элементов матрицы. Тогда проверку следует проводить с девятью или еще большим количеством рядом стоящих элементов.

# Список литературы

 Наймарк С.И. Многоэлементные МДП интегральные фотодиодные преобразователи оптических сигналов. Часть І. Могоэлементные преобразователи на МДП фотодиодных решетках : Обзоры по электронной технике. Сер.З. Микроэлектроника,-М.:ЦНИИ "Электроника", 1983, вып. Г (936). 60 с.

А.П.Круминыш, У.В.Янсон ЛГУ им.П.Стучки (Рига) О.Е.Вилитис ФЭИ АН ЛатвССР (Рига)

#### СЧЕТЧИК ФСТОНОВ FS-4

Счетчик фотонов F5 -4 предназначен для измерения слабых световых потоков в физике, астрономии, биологии, химии, медицине и других областях науки и техники.

Блок-схема счетчика фотонов показана на рис. I. Свет от источника света (ИС) через прерыватель (ПР) попадает на ка-



Рис. I. Влок-схема счетчика фотонов F5 -4.ИС - источник света, ФЭУ - фотоэлектронный умножитель, АД - амплитудный дискриминатор, ЦТ - цифровой термометр, БУ - блок управления . БП - блок питания, БШП - блок подавления помех, БВД - блок выбора диапазонов, Д - делитель, СЧ - счетчик, РГ - регистр, ГТ - генерстор теста, ТГ - тактовый генератор, СЧН - счет чик номера измерения. тод фотоэлектронного умножителя (ФЭУ). Импульсы с анода ФЭУ поступают на амплитудный дискриминатор (АД), который выделяет одновлектронные импульсы и нормирует их по амплитуде и длительности. Однозлектронные импульсы от дискриминатора по согласованному 50 См кабелю поступают на вход блока подавления помех.

Счет фотонов производится по принципу счета суммы сигнальных и шумовых импульсов с последующим вычитанием шумовых импульсов, Цикл счета состоит из 4 тактов (рис.2). В пер-



### Рис. 2, Еременная диаграмма цикла счета фотонов.

вом такте открывается прерыватель света ПР. Во втором такте импульси сигнала и шума поступают на суммирующий вход реверсивного счатчика. В тратьем такте прерыватель света закрывается. В четвертом такте вычитаются шумовые импульсы. Эдному це ту соответствует время измерения I с. Поске маждого импульса формируется импульс "Конец цикла".

В конце пер юго цикла блок выбора диапазонов (ЕЕД) определяет необходимое количество циклов от 1 до 1024 так, чтобы относительная погрешность не превышала заданное значение. Принцип работы БВД описан ранее /I/. БВД устанавливает коэффициент деления делителя (Д), равный количеству циклов.Содержимое реверсивного счетчика БВД пересылается через делятель в счетчик (Сч) после установления коэффициента деления и в конце последующих циклов.

После завершения необходимого количества циклов делитель Д формирует сигнал "Конец измерения", при помощи которого результат измерения записывается в регистр (РГ) и увеличивается содержимое счетчика номера измерения на единицу. Генератор теста (ГТ) формирует определенное число сигнальных 1. умовых импульсов для проверки работоспособности счетчика фотонов.

Блок подавления помех (БШ) предназначен для подавле ния внешних случайных электромагнитных помех. Блок содержит счетчик и скему сравнения кодов и работает по принципу, пред-

Таблица І

L <sub>M</sub>	См+Щ	D <sub>M</sub>	μ <sub>M</sub>
0	БПП сыключэн	0	ВПП выключен
I	IO	· · · · · · · · · · · · · · · · · · ·	. IO
2	20	2	20
3	40	3 .	40
4	IOO	4	100
5	200	. 5	200
6	400	6	400
7	1000	7	1000
8	2000	. 8	2000
9	4000	9	. 4000
IO	10000	. 10	10000
II	20000	· II	20000
12	40000	12	4000
13	100000	13	100000
14	200000	I4	200000
15	400000	15	400000

Максимально допустимый шум

ложенному в работе /3/. Одноэлектронные импульсы от дискри-



Рис. 3. Шина данных ЩД и шина адреса ША счетчика фотонов FS-4.

минатора поступают на счетчик. Результат счета суммы сигнальных и шумовых импульсов С + Ш и шумовых импульсов Ш в каждом цикле счета сравнивается с максимально доступными значениями  $C_M + \coprod_M$  и  $\amalg_M$ , которые устанавливаются переключателями  $L_M$  и  $D_M$ , расположенными на передней панели счетчика фотонов. При превышении максимально допустимых значений в конце цикла счетчики в БПП и БВД устанавливаются на ноль, . информация от БВД через делитель не проходит. Таким образом, цикл, содержащий случайную помеху, из общего результата исключается, а время измерения увеличивается на один цикл. Зависимость максимально допустимых значений С<sub>м</sub> + Щ<sub>м</sub> и щ, от положения переключателей  $L_M$  и  $D_M$  показана в табл. 1.

36

14

- 120 -

Вывод информации в счетчике фотонов F5-4 осуществляется по общей шине данных в параллельно-последовательном коде. Шина состоит из четырех линий данных ЩД и четырех линий адреса ША.

Блок-схема сбщей шины данных показана на рис.3. Счет чик, счетчик номера измерения, делитель, такторый генератор ТГ последовательно опрашиваются по шине адреса ША.

В режиме цифровой индикации и аналогового вывода адрес задается блоком управления индикатора, а в режиме вывода на ЭВМ – интерфейссм.К шине данных подключены цифровой индикатор (выполнен на свето одах), цифроаналоговые преобразователи ЦАП-Х и ЦАП-У, интерфейс и графический дисплей, построенный на базе матричного газорезрядного индикатора ИМГ-I-02.

Для счетчика фотонов FS -4 разработаны два вида интерфейса - интерфейс для сопряжении с ЭВМ "Электроника ДЗ-28 " и стандартный приборный интерфейс ГОСТ 26.003.-80.

Список литературы

- Круминыт А.П., Янсон У.В. В кн.: Сенсибилизированная флуоресценция смесей паров металлов. Рига: ЛГУ им.П. Стучки, 1979, вып. 7, с. 126-131.
- Круминыш А.П., Стродс А.Г., Янсон У.В. В кн.: Процессы переноса энергии в парах металлов. Рига: ЛГУ им. П. Стучки, 1981, с. 182-184.
- А.с. № 968624 (СССР). Открытия, изобретения, пром. образцы, човарн. знаки, 1982, № 39, с. 232.

# Содержание

Аузиныш М.П., Фербер Р.С. Квантовые биения в ос- новном электронном состоянии двухатомных молекул	3
Грушевский В.Б., Янсон М.Л. Эффект резонанса в пе- редаче энергии возбуждения при столкновении двух- атомной щелочной молекулы с атомом	13
Лиепкаула М.А., Папернов С.М., Швегжда Ж.Л. Оптичес- кое возбуждение паров натрия в присутствии инерт- ных газов	20
Девдариани А.З., Загребин А.Л. Нэадиабатические пе- реходы при столкновениях возбужденных атомов вто- рой группы с атомами инертных газов	29
Круглевский В.А. Расчет взаимодействия между ато- мами с.несколькими открытыми оболочками	<b>3</b> 6
Загребин С.Б., Самсон А.В. Ионизация при столкно- вениях оптически возбужденных атомов в пучке	44
Спигулис Я.А. Масс-спектрометрическое исследова- ние ионов в пучковом эксперименте	58
Дмитриева И.В., Котликов Е.Н., Перчук О.В.Исследо – вание нелинейных интерференционных сигналов с уровня 2р <sub>4</sub> неона	67
Убелис А.П. Исследование паров серы, селена и тел- лура методом импульсного фотолиза	• 74
Лукс И.D. Использование метода аппроксимации для анализа контуров спектральных линкй со сложной структурой	81
Агапов А.С., Матвеев А.А. Хуторщиков В.И. Методы расчета параметров высокочастотных безэлектродных	
TIBMTI	89

1

- 121 -

Лездинь А.Э., Путниня С.Я., Скудра А.Я. Спектральные параметры гелия в высокочастотном разряде ..... 99 Брюховецкий А.П., Круминыш А.П., П. тин Э.В., Книпшис-

И.И. Измерительно-управляющий комплекс для ис - следования эффекта Ханле	107
Орлов Р.В. Об стборе фотоприемников для угломер-	113
Круминыт А.П., Янсон У.В., Вилитис О.Е. Счетчик фо- тонов F5-4	IIö

2

6

.

\*

16

# ПРОЦЕССЫ ПЕРЕНОСА ЭНЕРТИИ В ПАРАХ МЕТАЛЛОВ

Сборник научных трудов

Рецензенти:	О.Бочкова,	мл. науч. сотр. НИИФ ДГУ им. А. Данова;
	A.Xaxaes,	доц. кафедры физичес- кой электроники Петро- заводского ун-та им. О.В.Куусинена;
	Я.Эйдус,	доп. кыфедры эксперимен- тальной физики ЛГУ им. П.Стучки.

Редакторы: Э.Краулиня, Н.Сарамонова Технический редактор М.Лиецкаула Корректор И.Балоде

Подписано и пе	чати 25 февраля 1985 года. НТ 13016.
Ф/б бох84/16.	Бумага № 1. 8.0 физ.печ.л. 7,4 усл.печ.л.
6,3 учизд.л	Тирах 400 экз. Зак. № 292. Цена I р.
Латвийский	государственный университет им. П.Стучки 226098 Рита, б. Райниса, 19
Отпечатано	в типографии, 226050 Рига, ул. Вейденбаума, 5
Латвийский	государственный университет им. П.Стучки

# УДК 539.196

Аузиныш М.П., фербер Р.С. Квантовые биения в основном электронном состоянии двухатомных молекул.-В кн.: Процессы переноса энергии в парах металлов. Рига: ЛГУ им. П. Стучки, 1985, с. 3-12.

Рассмотрена возможность регистрации магнитных квантовых биений уровня  $i^{*}$ ,  $J^{*}$  основного электронного состояния двухатомных молекул в кинетике переходного процесса после ослабления опустощающего лазерного луча до пробного. В аппарате поляризационных моментов рассчитаны ожидаемые сигналы биений. Приведен результат эксперимента для ( $i^{*}=3, J^{*}=43$ )  $\chi' \sum_{g}^{g}$ -состояния  $Na_{g}$  при оптической накачке линией 488,0 нм аргонового лазера.

Ил. 5, библиогр. 9 назв.

### УДК 539.196 , 539.198

Грушевский В.Б., Янсон М.Л. Эффект резонанса в передаче энергии возбуждения при столкновении двухатомной щелочной молекулы с атомом.-В кн. : Процессы переноса энергии в парах металлов. Рига:ЛГУ им.П.Стучки, 1985, с. 13-19.

В приближении эффективного потенциала Рабица рассчитано эффективное сечение передачи энергии от возбужденной молекулы к атому в предположении диполь-дипольного взаимодействия. Объясняется зависимость сечения от дефекта резонанса и факторов Франка-Кондона.

Табл. І, библиогр. 7 назв.

УДК 539.186.I , 539.196

Лиепкаула М.А., Папернов С.М., Швегжда Ж.Л. Оптическое возбуждение паров натрия в присутствии инертных газов.-В кн.: Процессы переноса энергии в парах металлов. Рига: ЛГУ им. П. Стучки, 1985, с. 20-28.

Исследованы механизмы заселения молекулярных состояний

 $Na_2$  при оптическом возбуждении уровней  $Na(3^{2}P)$  в присутствии инертного газа Ar. Показано, что в перераспределении энергии между возбужде иными молекулярными состояниями  $Na_2$  могут принимать участие и метастабильные состояния молекулы  $Na_2$ , роль которых проявляется при соударениях с  $A_r$ .

Ил. 4, библиогр. 13 назв.

улк / 19.196

Девлариани А.З., Загребин А.Л. Неадиабатические переходы при столкновениях возбужденных атомов второй группы с атомами инертных газов. - В кн.: Процесси переноса энергии в парах металлов.Рига: ЛГУ им.П. Стучки, 1985, с. 29-35.

Рассмотрены переходы между компснентами тонкой структуры возбужденных атомов эторой группы  $M(n_3 n_0^{3/2})$  при столкновениях с атомамы инертных газов  $X({}^{\prime}S_0)$  в случае сильного поляризационного взаимодействия. Показано, что п и тепловых энергиях (Т~300 К) случай сильного поляризационного взаи – модействия реали-уется совместно с квазирезонансными условиями столкновения. Получены оценки сечений внутрымульти – плетных переходов для столкновений Be \* Ar, Kr, Xe,

Ил. Ј, библиогр. 19 ( 1.

удк 539.186

Круглевский В.А.Расчет взаимодействия между ато мами с несколькими открытыми оболочками.-В кн.: Процессы переноса энергии в парах металлов. Рига:ЛГУ им.П.Стучки, 1985, с. 36-43.

M

Метод Гайтлера-Лондона обобщен на случай двухатомной системы с несколькими открытыми оболочками на важдом атоме. Атомные волновые функции строятся в виде генеалогического разложения с использованием обобщенных генеалогических коэффициентов. Даны выраженыя двух- и трехэлектронных матричных элементов через приведенные матричные влементы тензорных операторов  $\mathcal{U}^k$  и  $V^{kT}$  в неортогональном базисе. Библиогр. 8 назв.

# УДК 539.186

Загребин С.Б., Самсон А.В. Ионизация при столкновениях оптически возбужденных атомов в пучке. -В кн.:Процессы переноса энергии в парах металлов.Рига:ЛГУ им.П.Стучки, 1985, с. 44-57.

Определены константы скоростей процесса столкновительной ионизации высоковозбужденных атомов натрия с атомами в основном состоянии при селективном оптическом возбуждении.  $n\rho$ -уровней для 5 < n < 21. Эксперимент проводился в условиях атомного пучка. Подробно рассматриваются вопросы, связанные с получением констант скоростей столкновительной ионизации из пучковых экспериментов.

Ил.4, библиогр.23 назв.

### УДК 539.186.22 , 621.384.8

Спигулис Я.А.Масс-спектрометрическое исследование ионов в пучковом эксперименте. - В кн.:Процессы переноса энергии в парах металлов. Рига : ЛГУ им.П.Стучки, 1985, с. 58-66.

Описана экспериментальная установка для времяпролетного масс-анализа ионов, воэникающих вследствие оптического возбуждения атомного пучка. Приводятся и обсуждаются массспектры ионов, полученные при облучении пучка атомов натрия ксеноновой лампой (через монохроматор) и одночастотным лазером на красителе.

Ил.4, библиогр. 10 назв.

#### УДК 539.184

Дмитриева И.В., Котликов Е.Н., Перчук О.В. Исследование нелинейных интерференционных сигналов с уровня 2р<sub>4</sub> неона.-В кн.: Процессы переноса энергии в парах металлов. Рига: ЛГУ им.П. Стучки, 1985, с.67-73.

Приводятся результаты исследования нелинейного интер ференционного сигнала, обусловленного двухквантовым процессом перепоглощения.Этот сигнал наблюдался во флуоресценции неона с уровня 2р4 на удвоенной частоте модуляции лазерного излучения 0,63 и 1,15 мкм.Показано,что такой сигнал может быть использован для определения однородной ширины линии перехода генерации.

Ил.3, библиогр.8 назв.

УДК 539.18 , 539.19

Убелис А.П.Исследование паров серы, селена и теллура методом импульсного фотолиза.-В кн.: Процессы переноса энергии в парах металлов. Рига : ЛГУ им.П.Стучки, 1985, с. 74-80.

На примере Те проанализирован ряд элементарных процессов в виде реакций дезактивации атомов с метастабильных состояний, возвращающих смесь паров теллура и инертного газа к равновесному состоянию после воздействия возбуждающего импульса света. Намечены направления дальнейших исследований паров Те, Se и S для получения констант скоростей процессов рекомбинации и тушения, изучения метастабильных, молекул в различного рода столкновительных процессах. Наряду с экспериментами для проведения которых возможно успешное использование созданной в лаборатории установки высокотемпературного импульсного фотолиза, намечается развитие метода лазерного фотолиза при помощи эксимерных лазеров.

Ил. I, библиогр. II назв.

УДК 543.42

Лукс И. D. Использование метода аппроксимации для анализа контуров спектральных линий со сложной структурой.-В кн.:Процессы переноса энергии в парах металлов. Рига:ЛГУ им. П. Стучки, 1985, с.81-88. 1

Разработан алгоритм и программа анализа контуров спектральных линий со сложной структурой.Рассчитаны экспериментальные интерферограммы обогащенного изотопом 202 ртутной линии 546, I им при заданных параметрах уширения. Проведен машинный эксперимент по восстановлению параметров уширения. Табл.3, ил.2, библиогр. IЗ назв.

УДК 621.32 535.33

Агапов А.С., Матвеев А.А., Хуторщиков В.И. Методы расчета париметров высокочастотных безэлектродных ламп.-В кн.: Процессы переноса энергии в парах металлов. Рига: ЛГУ им. П. Стучки, 1985, с. 89-98.

Рассмотрены методы расчета основных параметров высокочастотных безэлектродных лами с парами металлов. Возможности методов проиллюстрированы на примере ламп, наполненных парами рубиция и криптоном. Обсуждены особенности физических процессов в ВЕЛ, отличающих их от источников света на более высоких и низких частотах.

Ил.З.библиогр. II назв.

#### УДК 621.327.535

Лездинь А.Э., Путниня С.Я., Скудра А.Я. Спектральные параметры гелия в высокочастотном разряде.-В кн.: Процессы переноса энергии в парах металлов. Рига: ЛГУ им. П. Стучки, 1985, с. 99-106.

Исследовано изменение абсолютных интенсивностей и контуров спектральных линий в высокочастотных безэлектродных лампах (ВБЛ) гелия в зависимости от наполнения и режима работы лампы с целью определения оптимальных условий изготовления и эксплуатации.

Табл. І, ил. 5, библиогр. 4 назв.

УДК 621.317

Брюховецкий А.П., Круминьш А.П., Пипин Э.В., Книпшис И.И.Измерительно-управляющий комплекс для исследования эффекта Ханле.-В кн.: Процассы переноса энергии в парах металлов.Рига: ЛГУ им.П. Стучки, 1985, с. 107-112.

Описывается сопряжение экспериментальной установки по

исследованию эффекта Ханле с ЭЕМ "Электроника ДЗ-28". Разработанная программа позволяет производить съем, обработку и отображение результатов эксперимента. объединяя периферийные устройства и ДЗ-28 в единый измерительно-управляющий ком плекс. Комплекс легко может быть адаптирован по многим спектроскопическим экспериментам, что достигается разработкой соответствующих программ.

Ил.З.библиогр.4 назв.

УДК 621.383.8.049.77.004

Орлов Р.В.Об отборе фотоприемников для угломерных устройств.-В кн.: Процессы переноса энергии в парах металлов. Рига: ЛГУ им. П. Стучки, 1985, с. 113-115.

Обсуждается возможность отбора фоточувствительных Maтриц, не имеющих двух рядом стоящих неисправных элементов . Предлагается функциональная схема устройства отбора.

Ил. І.библиогр. І назв.

53.082.52 УДК 621.383

> Круминыя А.П., Янсон У.В., Вилитис О.Е. Счетчик фотонов F5-4.-В кн.: Процессы переноса энергии в парах металлов. Рига: ЛГУ им. П. Стучки, 1985, с. 116-120 ...

Описана блок-схема счетчика фотонов с блоком автоматического выбора времени измерения и блоком подавления слу чайных электромагнитных помех. Счетчик фотонов имеет стан дартный приборный интерфейс ГОСТ 26.003-80.

Табл. І. ил. З. библиогр. З назв.



