

СТОЛКНОВИТЕЛЬНЫЕ
И РАДИАЦИОННЫЕ
ПРОЦЕССЫ
С УЧАСТИЕМ
ВОЗБУЖДЕННЫХ
ЧАСТИЦ



РИГА 1987

Министерство высшего и среднего специального образования

Латвийской ССР

Латвийский ордена Трудового Красного Знамени
государственный университет имени Петра Стучки

Проблемная лаборатория спектроскопии

СТОЛКНОВИТЕЛЬНЫЕ И РАДИАЦИОННЫЕ ПРОЦЕССЫ С УЧАСТИЕМ ВОЗБУЖДЕННЫХ ЧАСТИЦ

СБОРНИК НАУЧНЫХ ТРУДОВ

LVU ZB
LVU izdevumi
ARHĪVS

Латвийский государственный университет им. П. Стучки

Рига 1967



Latvijas
Universitātes
BIBLIOTĒKA

УДК 539.18 + 621.38

Столкновительные и радиационные процессы с участием возбужденных частиц: Сборник научных трудов/ Отв.ред. Э.К.Крауляня. - Рига: ЛГУ им. П.Стучки, 1987. - 168 с.

В статьях, вошедших в сборник, приводятся результаты экспериментальных и теоретических исследований процессов переноса энергии возбуждения и миграции ее, поляризации и ионизации при столкновениях атомов и молекул тепловой энергии в парах металлов. Рассматриваются вопросы, касающиеся анизотропных столкновений атомов в неоне и возбуждения атомов рубидия при ударах второго рода с атомами натрия, пленение излучения резонансной линии натрия. Приводятся формулы для расчета электронных термов двухатомных систем на больших межъядерных расстояниях. В сборник включены также статьи, содержащие данные исследований высокочастотного разряда, ртутных и рубидиевых ламп, устройству счетчика фотонов с микропроцессорным управлением. Работы выполнены в Латвийском, Московском и Ленинградском университетах, ИХФ АН СССР, ИТПМ СО АН СССР.

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. 14, ил. 42, библиогр. 230 назв.

Статьи, вошедшие в сборник, закончены и переданы в научную часть ЛГУ им. П.Стучки в августе 1986 года.

РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ:

проф. Э.К.Крауляня (отв.ред.), доц. О.А.Шмит,
ст.науч.сотр. Э.М.Андерсон

С 20408-010у 30.87.1704070000
МВ12(11)-87



Латвийский
государственный
университет
им. П.Стучки,
1987



Цель настоящего сборника — дать новейшую информацию об эффективности протекания ряда элементарных процессов с участием возбужденных атомов при тепловых энергиях. Как экспериментально, так и теоретически исследован широкий круг реакций.

Экспериментальная работа И. Пирагса, М. Таманиса и Р. Фербера посвящена малоизученным вопросам миграции энергии возбуждения в щелочных парах. Авторами установлена существенная роль в миграции энергии столкновительных процессов с участием возбужденных молекул. Я. Клявиньш, С. Папернов и Ж. Швэгжда впервые установили возможность эффективного заселения ряда состояний атома рубидия при ударах второго рода с лазерно возбужденными атомами натрия и получения больших концентраций возбужденных атомов в таких смесях с целью генерации электронов. В работе С. Папернова и М. Янсона анализируется роль процесса пленения излучения резонансных линий натрия в условиях паронаполненной ячейки. К. Боярским, Е. Котликовым и О. Перчуком выявлены зависимости констант релаксации и сечений деполаризующих соударений уровня $2p_4$ неона от скорости сталкивающихся частиц по сигналам Ханле, что позволяет определить потенциалы их взаимодействия. Н. Лукомский, В. Полищук и М. Чайка обнаружили новые свойства плазмы разряда в неоне, связанные с анизотропными столкновениями атомов. Используя аппарат поляризационных моментов, М. Аузиньш описывает оптическую накачку частиц с большим угловым моментом, С. Загребин и А. Самсон получили экспериментальные значения констант скоростей столкновительной ионизации при селективном оптическом возбуждении пучков атомов лития, натрия и бария. А. Убелис и У. Берзиньш определили вероятности переходов атомов селена и теллура.

Е. Дашевская и Е. Никитин теоретически рассматривают новые поляризационные эффекты при столкновениях атомов, что позволяет глубже понять картину процессов, протекающих при атомных столкновениях и стимулирует экспериментальные исследования в этом направлении. Н. Кузьменко и В. Еремин разработали метод расчета отталкивательных потенциальных кривых по ин-

тенсивностям непрерывных спектров двухатомных молекул. В. Круглевским предложены удобные формулы для расчета электронных термов двухатомных систем на больших межъядерных расстояниях.

Спектроскопические методы являются основой при проведении подобных экспериментальных исследований, поэтому в сборник включены также статьи, посвященные вопросам создания и совершенствования новых перспективных источников света и приборов для регистрации излучения. Сюда относятся работы по улучшению спектральных характеристик высокочастотных безэлектродных ламп на основе ртути (А. Лездинь, А. Скудра, С. Гитиня) и рубидия (В. Хуторщиков, Г. Юшина). А. Булышевым, Н. Денисовой, Н. Преображенским и А. Суворовым предложена математическая модель высокочастотного разряда. Счетчик фотонов с микропроцессорным управлением описан в работе А. Круминьша, А. Грозы и У. Янсона. Оптимизации свойств инфракрасных фотоприемников близ порога чувствительности посвящена работа Я. Спигулиса, А. Брюховецкого и Р. Орлова.

Представленные в сборнике результаты являются оригинальными. Работы выполнены в Латвийском, Московском и Ленинградском государственных университетах, ИХФ АН СССР и ИТМ СО АН СССР. Сборник посвящается 20-летию Проблемной лаборатории спектроскопии ЛГУ им. П. Стучки.

Э.К.Краулия, В.А.Круглевский
ЛГУ им.П.Стучки
(Рига)

ПЕРЕНОС ВОЗБУЖДЕНИЯ ПРИ СТОЛКНОВЕНИИ АТОМОВ В ПАРАХ МЕТАЛЛОВ

В настоящей статье показано развитие экспериментальных и теоретических исследований сечений ударов второго рода между атомами тепловой энергии в парах металлов в 80-х годах. Рассматриваются только атом-атомные столкновения и перенос энергии возбуждения между компонентами тонкой структуры либо между различными энергетическими уровнями атомов. Работы, посвященные определению сечений тушения атомов в основном состоянии, не включены. Перенос анизотропии, удвоение энергии и другие процессы столкновений также не рассматриваются. Кроме того, не затронуты вопросы, связанные с ридберговскими состояниями.

Сечения переноса возбуждения в парах атомов I группы. Результаты исследований сечений переноса возбуждения между компонентами тонкой структуры атомов щелочных металлов при столкновениях с собственными атомами приведены в табл. I (ΔE - разность энергий соответствующих уровней, дефект энергии).

Из табл. I видно, что в последние годы исследовались в основном D-уровни щелочных атомов. Только авторы работы /1/ исследовали 2P -уровень натрия, поскольку данные предыдущих экспериментальных /9, 10/ и теоретических /11, 12/ работ сильно различались. Полученный ими экспериментальный результат ($1,72 \cdot 10^{-14} \text{ см}^2$) лучше всего согласуется с данными теоретической работы /12/ - $1,31 \cdot 10^{-14} \text{ см}^2$. Однако авторы /1/ считают целесообразным провести расчеты, основываясь на более точных квазимолекулярных термах, приведенных в работе /13/.

Таблица I

Сечения внутримultipлетного перемешивания при столкновении возбужденных атомов щелочных металлов с собственными нормальными атомами.

Партнеры столкно- вений	Переход	ΔE , см ⁻¹	T, K	n	$Q(n^2P_{3/2} \rightarrow n^2P_{1/2}), Q(n^2P_{1/2} \rightarrow n^2P_{3/2}),$ $n(n^2D_{5/2} \rightarrow n^2D_{3/2}), n(n^2D_{3/2} \rightarrow n^2D_{5/2}),$ см ² · 10 ⁻¹⁴	Q_{260M}	n^*	Лит. источ- ник	
$Na^* - Na$	$P_j = P_{j-1}$	17	575	3	1,72(±18%)	3,30(±18%)	-	-	/1/
$Rb^* - Rb$	$D_j = D_{j-1}$	2,96	378-453	5	2,9±0,6	4,4±0,9 I)	4,9	3,71	/2/
		2,26	378-453	6	6,9±1,4	10,4±2,1 I)	11,7	4,68	/2/
		2,26	423	6	7,4±2,5	11,1±3,8 I)	11,7	4,68	/3/
		1,51	378-453	7	11,5±2,3	17,1±3,5 I)	24,4	5,67	/2/
		1,51	393-460	7	18,0±3,0	30,0±5,0	24,4	5,67	/4/
		1,01	378-453	8	17,1±3,0	25,7±4,5 I)	45,6	6,66	/2/
		1,01	373-451	8	28,1±5,7	43,1±8,6	45,6	6,66	/5/
		0,70	378-453	9	26,0±5,0	39,0±7,5 I)	78,9	7,66	/2/
		0,70	520	9	-	65,0±20	78,9	7,66	/6/
$Cs^* - Cs$	$D_j = D_{j-1}$	42,94	413-533	6	2,1±0,4	2,7±0,5	2,5	3,54	/7/
		20,97	413-533	7	2,7±0,5	3,7 ±0,7	7,7	4,53	/7/
		11,69	413-533	8	6,0±1,2	8,6±1,7	18,3	5,53	/7/
		7,16	413-533	9	12,6±2,7	18,4±3,7	36,9	6,53	/7/
		4,68	413-533	10	20,2±4,0	29,8±6,0	66,4	7,53	/7/
		3,25	398-453	11	55±17	83±25 I)	117		/8/
		2,33	398-453	12	87±26	131±39 I)	182		/8/
		1,70	398-453	13	114±34	171±51 I)	271		/8/

В табл. I сечения обратных переходов, отмеченные 1), вычислены по принципу детального равновесия.

Данные по D -уровням рубидия, приведенные в табл. I, показывают (на рис. I это также видно), что значение сечений, полученное авторами работы /2/, во всех случаях меньше, чем у других исследователей. Причина отличия, по мнению самих авторов, заключается в источниках возбуждения. В работе /2/ использован источник непрерывного излучения малой мощности, а в остальных работах - импульсный лазер, который может дать систематические побочные эффекты, например фотоионизацию. Однако авторы работы /8/ отрицают такое объяснение и предлагают продолжить подобные исследования. Необходимо отметить, что в работе /2/ при определении сечения для RbD -состоя-

$Q \cdot 10^{-14} \text{ см}^2$

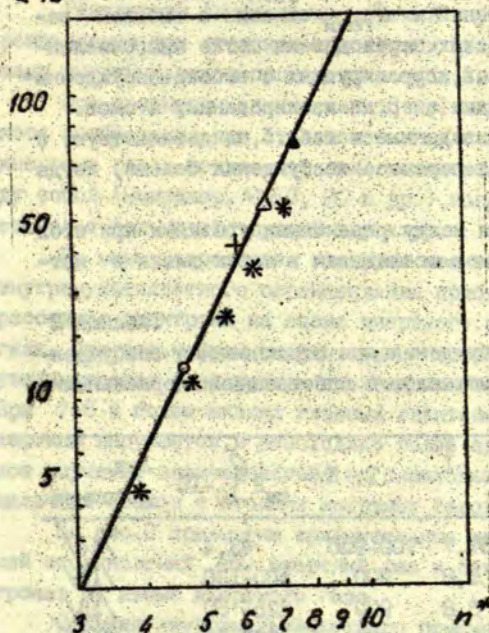


Рис. I. $Q(nD_{3/2} - nD_{5/2})$ для рубидия в зависимости от n^* .

* - работа /2/;

o - работа /3/;

+ - работа /4/;

Δ - работа /5/;

$\blacktriangle$ - работа /6/.

Сплошная кривая -

- Q_{geom} .

ния. использованы другие значения коэффициентов Эйнштейна A и τ .

Так как теоретические расчеты сечений переноса возбуждения в нижних D -уровнях щелочных атомов отсутствуют, авторы оценивают свои результаты, сравнивая их со значениями геометрических сечений $Q_{\text{геом}}$, которые для столкновений возбужденных атомов рубидия определяли при помощи водородных функций с эффективным главным квантовым числом $n^* = 1/\sqrt{\epsilon}$, где ϵ - потенциал ионизации возбужденного уровня в ридбергах.

Рис. I показывает, как сечения внутримultipлетного перемешивания nD -уровней рубидия ($n = 5-9$), определенные различными методами в разных лабораториях, приближенно совпадают с $Q_{\text{геом}}$. Значение величин $Q(nD_j \rightarrow nD_{j-1})$ при $n < 10$ для атомов цезия также одного порядка с $Q_{\text{геом}}/7$. По-видимому, близость измеренных сечений к $Q_{\text{геом}}$ связана с высокой вероятностью неадиабатических переходов на сетке многочисленных адиабатических термов, коррелирующих с высоковозбужденными близлежащими уровнями энергии изолированных атомов.

Все результаты, приведенные в табл. I, свидетельствуют о том, что значение сечения переноса возбуждения больше, когда ΔE меньше.

Перенос возбуждения между различными уровнями при столкновении одинаковых атомов исследован в парах лития и натрия /I4-I6/ (табл. 2).

Таблица 2

Сечения переноса возбуждения при столкновении возбужденных атомов щелочных металлов с собственными нормальными атомами.

Партнеры столкнов.	Переход	$\Delta E, \text{см}^{-1}$	T, K	$Q, \text{см}^2 \cdot 10^{-16}$	Лит. источник
$Li^* - Li$	$3^2P - 3^2D$	357,7	700-950	43,4	/I4/
	$4^2D - 4^2F$	6,8	900	400 $\pm$ 130	/I5/
	$4^2F - 4^2D$	6,8	900	225 $\pm$ 50	/I5/
$Na^* - Na$	$4D - 4F$	39,9	483	32 $\pm$ 11	/I6/
			500	10 (теор.)	/I6/

Как видно из табл.2, теоретическое значение сечения для перехода $Na(4D-4F)$ в три раза меньше экспериментального результата, правда, относящегося к несколько иной температуре. Авторы работы /16/ при рассмотрении реакции $Na(4D) + Na(3s) = Na(4F) + Na(3s)$ адиабатические термы системы двух щелочных металлов вычисляли диагонализацией матрицы в базисе многоэлектронных волновых функций, построенных в соответствии с методом валентных связей. В базис включены молекулярные состояния, коррелирующие с атомными состояниями $(3s, nl)$, где $n = 3, 4, 5$, $l = 0, 1, 2, 3$, а также состоянием $3p$. Для оценки сечения авторы ограничивались только рассмотрением квазимолекулярных термов симметрии Σ_g^+ . Ввиду того, что точки пересечения адиабатических термов хорошо разделяются, сечения в области неадиабатичности рассчитаны по формуле Ландау-Зинера.

Результаты определения сечений внутримультиплетного перемешивания при столкновении атомов щелочных металлов с атомами инертных газов приведены в табл.3.

При сравнении данных табл.3 и I видно, что сечения переноса возбуждения при столкновении щелочных атомов с атомами инертных газов меньше, чем при столкновении тех же атомов между собой (например, $Rb6D$, $7D$ и др.), когда взаимодействие имеет более дальнodelствующий характер.

По мере возрастания главного квантового числа сечение внутримультиплетного перемешивания приближается к сечению рассеяния электрона на атоме инертного газа при низких энергиях. При дальнейшем возрастании n сечение убывает, так как увеличивается вероятность прохождения электрона мимо мишени. При $n=6$ и более низких главных квантовых числах эта простая картина нарушается, и необходимо более подробное теоретическое изучение взаимодействия не слишком высоковозбужденных щелочных атомов с атомами инертных газов.

На рис.2 приведены сравнительные данные изменения сечений столкновений Rb - инертный газ и сечений рассеяния электронов на атоме инертного газа.

Сечения внутримультиплетного перемешивания 7^2D - и 8^2D - уровней рубидия в зависимости от атомного номера инертного газа имеют выраженный минимум в случае столкновений с неоном.

Таблица 3

Сечения внутримultipлетного перемешивания при столкновении возбужденных атомов щелочных металлов с атомами инертных газов.

Переход	ΔE , см^{-1}	T, K	Значение сечения при разных партнерах столкновений					Лит.ис- точник
			He	Ne	Ar	$\text{см}^2 \cdot 10^{-16}$ Kr Xe		
I	2	3	4	5	6	7	8	9
${}^7\text{Li} (2^2\text{P}_{1/2} - 2^2\text{P}_{3/2})$	0,34	556	$70,3 \pm 2,7$	$61,2 \pm 3,7$	$102,6 \pm 5,4$	$115,7 \pm 4,1$	$119,3 \pm 5,4$	/17/
${}^7\text{Li} (2^2\text{P}_{3/2} - 2^2\text{P}_{1/2})$	0,34	556	$37,3 \pm 3,3$	$31,4 \pm 1,3$	$53,1 \pm 2,3$	$60,2 \pm 3,4$	$66,0 \pm 3,1$	/17/
$\text{K} (4^2\text{P}_{1/2} - 4^2\text{P}_{3/2})$	58	370	-	-	19 ± 3	-	-	/18/
		I720	-	-	55 ± 6	-	-	/18/
		342	-	-	$16,0 \pm 2,4$	-	-	/19/
		342	-	-	18,54(теор.)	-	-	/20/
		380	-	-	20,72(теор.)	-	-	/20/
		390	-	-	21,28(теор.)	-	-	/20/
		I720	-	-	61,7 (теор.)	-	-	/20/
		342	-	-	13,74(теор.)	-	-	/21,22/
		380	-	-	15,62(теор.)	-	-	/21,22/
		390	-	-	16,10(теор.)	-	-	/21,22/
		I720	-	-	52,7 (теор.)	-	-	/21,22/

Таблица 3
(продолжение)

I	2	3	4	5	6	7	8	9
K ($4^2P_{3/2}-4^2P_{1/2}$)	58	342	-	-	11,2 $\pm$ 1,7	-	-	/19/
		342	-	-	11,82(теор.)	-	-	/20/
		1720	-	-	32,4(теор.)	-	-	/20/
		342	-	-	8,76(теор.)	-	-	/21,22/
		1720	-	-	27,8(теор.)	-	-	/21,22/
K ($4^2P_{1/2}-4^2P_{3/2}$)	58	380	36,5 $\pm$ 9,5	9,4 $\pm$ 4,0	-	40 $\pm$ 10	-	/23/
K ($4^2P_{3/2}-4^2P_{1/2}$)	58	380	18,8 $\pm$ 7,0	5,9 $\pm$ 2,6	-	25 $\pm$ 7	-	/23/
Rb($6^2P_{3/2}-6^2P_{1/2}$)	77,5	337	17,1 $\pm$ 3,4	5,6 $\pm$ 1,1	13,2 $\pm$ 2,6	14,6 $\pm$ 2,9	31,3 $\pm$ 6,3	/24/
		337	15,6(теор.)	-	-	-	-	/25/
Rb($7^2P_{3/2}-7^2P_{1/2}$)	35,1	353	70,8 $\pm$ 14,2	24,7 $\pm$ 4,9	32,9 $\pm$ 6,6	32,7 $\pm$ 6,5	34,8 $\pm$ 7,0	/24/
		353	63,9(теор.)	-	-	-	-	/25/
Rb($6^2D_{5/2}-6^2D_{3/2}$)	2,26	380	240 $\pm$ 90	310 $\pm$ 120	260 $\pm$ 100	580 $\pm$ 220	930 $\pm$ 560	/26/
		373-473	450 $\pm$ 70	410 $\pm$ 60	360 $\pm$ 60	550 $\pm$ 80	-	/27/
Rb($6^2D_{3/2}-6^2D_{5/2}$)	2,26	380	360 $\pm$ 140	460 $\pm$ 180	400 $\pm$ 170	870 $\pm$ 340	1410 $\pm$ 840	/26/
		373-473	660 $\pm$ 10	610 $\pm$ 90	530 $\pm$ 80	850 $\pm$ 130	-	/27/
Rb($7^2D_{5/2}-7^2D_{3/2}$)	1,51	393-460	580 $\pm$ 90	400 $\pm$ 60	690 $\pm$ 100	-	-	/4/
		373-450	-	-	-	900 $\pm$ 100	1050 $\pm$ 150	/5/
		450	-	-	-	-	-	-

Таблица 3
(продолжение)

1	2	3	4	5	6	7	8	9
<i>Rb7D</i>	1,5I	393- 460	750(теор.)	-	1000(теор.)	-	-	/4/
<i>Rb(7²D_{3/2}-7²D_{5/2})</i>	1,5I	393- 460	880±130	650±100	1040±160	-	-	/4/
		373- 450	-	-	-	1410±150	1550±200	/5/
<i>Rb(8²D_{5/2}-8²D_{3/2})</i>	1,0I	373- 450	580±90	320±60	940±190	1510±300	1760±270	/5/
<i>Rb(8²D_{3/2}-8²D_{5/2})</i>	1,0I	373- 450	890±140	490±100	1240±250	2490±500	2580±390	/5/
<i>Rb8D</i>	1,0I	393- 460	800(теор.)	-	1250(теор.)	-	-	/4/
<i>Rb(9²D_{3/2}-9²D_{5/2})</i>	0,70	520	510±100	-	-	-	-	/28/
<i>Rb(10²D_{3/2}-10²D_{5/2})</i>	0,48	520	455±150	-	-	-	-	/28/
<i>Rb(11²D_{3/2}-11²D_{5/2})</i>	0,30	520	220±60	-	-	-	-	/28/
<i>Cs (7²P_{3/2}-7²P_{1/2})</i>	18I	320	12,8±2,6	0,047±0,01	0,075±0,02	0,20±0,04	0,65±0,13	/24/
		405	11,7(теор.)	-	-	-	-	/25/
<i>Cs (8²P_{1/2}-8²P_{3/2})</i>	82,6	420	59(теор.)	-	-	-	-	/25/

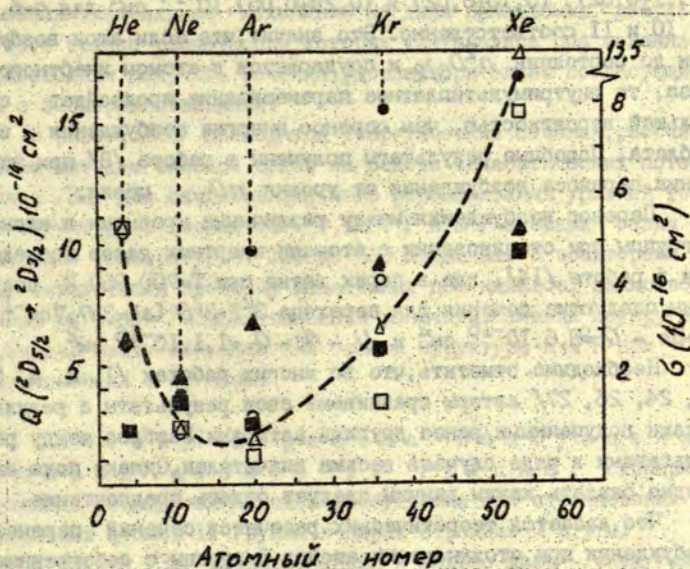


Рис.2. Изменение сечения столкновений Rb -инертный газ в зависимости от атомного номера инертного газа и сечения упругого рассеяния (σ) электронов на атоме инертного газа. $\blacksquare$ - $Q(6^2D)$, $\blacktriangle$ - $Q(7^2D)$, $\bullet$ - $Q(8^2D)$, $\square$, Δ , $\circ$ - сечения σ , соответствующие орбитальным скоростям рассматриваемых D -электронов.

О зависимости Q от атомного номера никаких предположений не делается.

Следует отметить, что подобную зависимость наблюдали и другие исследователи при изучении столкновительного l -перемешивания щелочных атомов ^{29}P и даже подуровневой тонкой структуры резонансного уровня ^{29}P /19/, хотя в последнем случае электрон находится в более тесном связанном состоянии.

В работе /26/ авторы измеряли сечения для переноса возбуждения от $n^2D_{5/2}$ -уровня рубидия на другие уровни вне

дублета. Значение сечений равно $(0,00 \pm 0,12)$, $(0,30 \pm 0,10)$, $(0,11 \pm 0,02)$, $(0,15 \pm 0,02)$ и $(0,29 \pm 0,05) \cdot 10^{-14} \text{ см}^2$ для $n=6, 7, 9, 10$ и II соответственно. Это значит, что если атом возбужден до состояния $n^2D_{5/2}$ и соударяется с атомом инертного газа, то внутримультиплетное перемешивание произойдет с большей вероятностью, чем перенос энергии возбуждения вне дублета. Подобные результаты получены в работе /8/ при изучении переноса возбуждения от уровня $nD_{3/2}$ цезия.

Перенос возбуждения между различными уровнями в атомах I группы при столкновении с атомами инертных газов исследован в работе /14/, где в парах лития при $T=700-950 \text{ К}$ получены следующие сечения для перехода 3^2P-3^2D ($\Delta E=357,7 \text{ см}^{-1}$): $Li+He - Q=8,6 \cdot 10^{-16} \text{ см}^2$ и $Li - Ne - Q=1,1 \cdot 10^{-16} \text{ см}^2$.

Необходимо отметить, что во многих работах /1, 2, 4, 5, 18, 24, 26, 27/ авторы сравнивают свои результаты с результатами полученными ранее другими авторами. Разброс между результатами в ряде случаев весьма значителен. Однако пока еще трудно сказать, каким данным следует отдать предпочтение.

Что касается теоретических расчетов сечений переноса возбуждения при столкновении атомов I группы с собственными атомами или атомами инертных газов, то в рассматриваемый период опубликованы статьи, посвященные как внутримультиплетному перемешиванию уровней, так и расчету сечений столкновительного возбуждения резонансных уровней.

Курбен-Госсорг с соавторами исследовали возбуждение $Na(3s-3p)$ в соударениях с атомами неона /30/ и гелия /31/. Они рассматривали два механизма неупругих столкновений - квазимолекулярный (при относительной энергии сталкивающихся партнеров от 30 до 300 эВ), связанный с изменением состояния возникающей квазимолекулы, и прямой механизм, который объясняется взаимодействием слегка возмущенного валентного электрона щелочного атома слабо искаженным зарядовым распределением инертного газа при более высоких энергиях.

В случае соударений натрия с неоном выбранная авторами модель столкновений привела к хорошему совпадению теоретических и экспериментальных результатов. При столкновениях

натрия с гелием в области низких энергий расчеты, основанные на квазимолекулярном механизме не дали приемлемых результатов, и только расчеты, при которых учитывались оба механизма, позволили получить сечения, удовлетворительно согласующиеся с экспериментальными.

В работе /25/ приводятся теоретические сечения, рассчитанные методом сильной связи на основе адиабатических потенциалов /32/ для столкновительного перемешивания уровней тонкой структуры в атомах $Rb\ 6^2P$, $Cs\ 7^2P$ и 8^2P атомами гелия в интервале температур от 320 до 630 К. Паскаль с соавторами /21/ осуществили проверку межатомных потенциалов, заимствованных из работ /22, 20/, выполнил расчеты сечений неупругих переходов между компонентами тонкой структуры $K\ 4^2P$ при столкновениях с аргоном.

Сечения переноса возбуждения в парах атомов II группы. Экспериментально исследован перенос возбуждения при столкновении одинаковых атомов II группы в парах стронция и ртути.

В работе /33/ Борисов, Пенкин и Редько дают следующие значения сечения для переноса возбуждения между компонентами тонкой структуры $5^3P_{0,1,2}$ атома стронция в столкновениях с невозбужденными атомами того же стронция: $Q(5^3P_2 \rightarrow 5^3P_1) < 10^{-16}\text{ см}^2$ и $Q(5^3P_1 \rightarrow 5^3P_0) < 1,6 \cdot 10^{-15}\text{ см}^2$ при $T=700\text{ К}$.

Изучен процесс переноса энергии между изотопами в парах ртути по схеме



где i, j - одна из компонент сверхтонкой структуры ртути в переходе $6^3P_1 \rightarrow 6^1S_0$ (253,7 нм). Сечение при температуре 335 К равно $(1,1 \pm 0,3) \cdot 10^{-13}\text{ см}^2$ /34/.

Процессы внутримногочетного перемешивания в щелочно-земельных атомах при соударении с атомами инертных газов исследованы больше чем процессы при столкновении с собственными атомами (табл. 4).



Таблица 4

Сечения мультиплетного перемешивания при столкновении возбужденных атомов II группы с атомами инертных газов.

Переход	ΔE , см ²¹	T, K	Q , см ² ·10 ⁻¹⁶			
			He, эксперим.	He, теорет.	A', эксперим.	A', теорет.
Ca(4 ³ P ₂ -4 ³ P ₁)	105,9	1335	31,9 ^{±4,2} /35/	11,2 [±] /36/		
Ca(4 ³ P ₂ -4 ³ P ₀)	158,1	1335	5,5 ^{±1,6} /35/	0,8 /36/		
Ca(4 ³ P ₁ -4 ³ P ₀)	52,2	1335	2,0 ^{±5,0} /35/	2,5 /36/		
Zn(4 ³ P ₁ -4 ³ P ₀)	190,1	583			5·10 ⁻⁴ ±20%/37/	1,2·10 ⁻³ /38/
Sr(5 ³ P ₂ -5 ³ P ₁)	394,2	700			16,8(2,6)·10 ⁻⁴ /33/ ¹⁾	
Sr(5 ³ P ₁ -5 ³ P ₀)	186,8	700			5,4(1,0)·10 ⁻⁴ /33/ ¹⁾	
Sr(5 ³ P ₂ -5 ³ P ₀)	581,0	700			0,8·10 ⁻⁴ /33/	
Cd(5 ³ P ₀ -5 ³ P ₁)	542,1	445			10,3·10 ⁻³ ±15% /39/	
		475	1,6·10 ⁻³ ±15% /39/		9,1·10 ⁻³ ±15% /39/	
		575	1,5·10 ⁻³ ±15% /39/		5,1·10 ⁻³ ±15% /39/	
		675	1,5·10 ⁻³ ±15% /39/		5,1·10 ⁻³ ±15% /39/	
		775	1,4·10 ⁻³ ±15% /39/		4,6·10 ⁻³ ±15% /39/	
		475	1,5·10 ⁻³ ±15% /39/ ²⁾		8,2·10 ⁻³ ±15% /39/ ²⁾	
		575	1,2·10 ⁻³ ±15% /39/ ²⁾		4,1·10 ⁻³ ±15% /39/ ²⁾	
Cd(5 ³ P ₁ -5 ³ P ₀)	542,1	520			2,8·10 ⁻³ /40/	
		553	<3·10 ⁻⁴ /41/		<8·10 ⁻⁴ /41/	

1) Значения в скобках являются доверительными интервалами для вероятности 0,95.

2) Вычислено по принципу детального равновесия.

В 80-х годах, как видно из табл. 4, расширились исследования элементов II группы. В 70-е годы велись работы только по ртути и кадмию, а сейчас уже имеются данные по Ca , Sr , Zn . Однако результатов по уровням ^3P еще мало, и трудно объяснить расхождения между экспериментальными и теоретическими значениями, например, в случае кальция. В качестве примесных газов использовали только гелий и аргон. Необходимо было бы провести исследования также по другим элементам и с другими инертными газами.

Александр, Орликовский и Страуб /36/ провели расчеты сечений неупругих переходов между уровнями тонкой структуры атомов кальция в состоянии $4s4p\ ^3\text{P}_j$ в столкновениях с атомами гелия методом сильной связи в формулировке Миса /42/, а также в приближении сохраняющейся проекции полного момента (приближении связанных состояний Cs), предложенном Мак Гуайром и Коури /43/. Расчеты показали, что приближение связанных состояний дает результаты в разумном соответствии с полученными методом /42/, однако значения сечений переходов в этом приближении оказываются заниженными примерно в два раза. Значительно хуже совпадение теоретических сечений с экспериментальными, особенно вычисленных отношений сечений между различными компонентами тонкой структуры кальция с соответствующими экспериментальными значениями. Сопоставляя теоретические и экспериментальные результаты аналогичного неупругого процесса в столкновениях атомов натрия и гелия /44/, авторы работы /36/ высказывают предположение, что можно добиться лучших результатов, пользуясь при расчете сечений более точными эмпирическими потенциальными кривыми вместо квазимолекулярных термов, вычисленных методом псевдопотенциала для двухэлектронной системы Мальверна /45/.

Девдариани и Загребин в ряде работ /46-49/ исследовали переходы между компонентами тонкой структуры атомов II группы при столкновениях с атомами инертных газов. Обсуждаются возможные механизмы реакций $\text{M}(^3\text{P}_j) + \text{X} \rightarrow \text{M}(^3\text{P}_{j'}) + \text{X}$ в адиабатических и квазирезонансных условиях (M - атом II группы, X - атом инертного газа). Адиабатические термы оценивали



асимптотическими методами, причем обменное взаимодействие рассчитывали по формулам /50,51/, а в поляризационном взаимодействии учитывали дисперсионный член.

В статье /49/, посвященной переходам в тонкой структуре атомов цинка и стронция при столкновениях с инертными газами, сечение перехода $^3P_2 - ^3P_1$ представлено в виде суммы вкладов радиального и кориолисова механизмов. Суммарное расчетное сечение хорошо согласуется с экспериментальным сечением для пары стронций-аргон, измеренный авторами работы /33/.

Орликовский и Александер /52/ на основе потенциальных кривых, построенных Мальверном /45/ методом модельного потенциала, рассчитали сечения неупругих переходов между подуровнями $Mg(^3s3p\ ^3P)$ в столкновениях с гелием, решая уравнение сильной связи при различных энергиях сталкивающихся партнеров. Сечение $Q(^3P_2 - ^3P_1)$, как и в работе Дендариани и Загребина, оказывается наибольшим, следующим по величине $Q(^3P_2 - ^3P_0)$. В обеих работах для пары $Mg-He$ наименьшим сечением является $Q(^3P_1 - ^3P_0)$. В энергетической зависимости сечений $Q(^3P_2 - ^3P_1)$ и $Q(^3P_1 - ^3P_0)$ Орликовский и Александер обнаружили осциллирующую структуру.

Перенос возбуждения между различными уровнями атомов II группы при столкновении с атомами инертных газов исследован в работе /53/ (Табл.5).

Таблица 5

Сечения переноса возбуждения между различными уровнями при столкновении атомов II группы с атомами инертных газов /53/.

Переход	E_i см ⁻¹	T, K	$Q, \text{ см}^2 \cdot 10^{-16} (\pm 25\%)$				
			He	Ne	Ar	Kr	Xe
$Ca(^1P_1 - ^3P_1)$ 8412	900	0,025	0,028	0,046	0,064	1,15	
$Sr(^1P_1 - ^3P_1)$ 7194	800	0,38	0,61	1,6	1,4	0,25	

При сравнении значений сечения для Ca и Sr в табл.5, видно, что при одинаковых газах, за исключением Xe, сечения для



стронция на порядок больше, чем для кальция. У кальция сечения возрастают при переходе к более тяжелым инертным газам. Аномально большое сечение получено для системы Ca-Xe.

Мальверн /45/ рассчитал потенциальные кривые на больших межъядерных расстояниях для взаимодействия кальция в различных возбужденных состояниях с гелием и неоном. Отталкивательные состояния $\sum(D)$ и $\sum(D)$ имеют пересечение термов с состоянием $^1\Pi(P)$. В случае тяжелых газов, обладающих более высокой поляризуемостью, состояние $^1\Pi$ характеризуется большей энергией связи, тогда как ход отталкивательных кривых меняется незначительно. При этом пересечения термов в состоянии $^1\Pi$ приближаются к энергии свободного атома в состоянии 1P_1 на величину, не превышающую кТ, что может привести к аномально большим сечениям столкновений Ca-Xe. Малое значение сечений неупругих столкновений кальция с другими инертными газами могло бы найти объяснение в результате анализа расчета соответствующих межатомных взаимодействий.

Сечения переноса возбуждения между разными состояниями атомов при столкновениях неодинаковых атомов (Табл.6).

Таблица 6

Сечения переноса возбуждения при столкновении разных атомов.

Партнеры столкновений	Переход	ΔE , эВ	T, К	$Q \cdot 10^{-16}$ cm^2	Лит. ис- точ- ник
$Na^+ - Cs$	$Na 3^2P_{1/2} - Na 3^2P_{3/2}$	0,002	550	323 ± 30	/54/
	$Na 3^2P_{3/2} - Na 3^2P_{1/2}$	0,002	550	165 ± 15	/54/
$Hg^+ - Cd$	$Hg 6^1P_1 - Cd 6^3S_1$	0,32	540	12 ± 5	/55/
$Hg^+ - Zn$	$Hg 6^1P_1 - Zn 5^3S_1$	0,49	650	30 ± 12	/55/
$Sr^+ - Ca$	$Sr 5^3P_2 - Ca 4^3P_2$	0,085	900- 1000	$k=1,1 \cdot 10^{-11}$ $cm^3 \cdot mol^{-1} \cdot s^{-1}$	/56/

Из данного материала видно, что в 80-е годы число исследуемых элементов расширилось. Однако как экспериментальных, так и теоретических работ пока еще недостаточно, чтобы иметь более точное представление об эффективности переноса возбуждения в атомах II группы, не говоря о более сложных атомах. Желательно было бы исследовать смеси, для которых имеются потенциалные кривые, например $Mg(^3P) + He$, $Ne / 45, 57 /$, $Na(^2P) + Ar / 58 /$ и др.

Список литературы

1. Huennekens J., Gallagher A. // Phys. Rev. A. - 1983. - Vol. 27. - N4. - P. 1851.
2. Parker J.W., Schuessler H.A., Hill R.M., Zollars B.G. // Phys. Rev. A. - 1984. - Vol. 29. - N 2. - P. 617.
3. Hill R.M., Schuessler H.A., Zollars B.G. // Phys. Rev. A. - 1982. - Vol. 25. - N 2. - P. 834.
4. Wolkinowski J., Atkinson J.B., Supronowicz J., Krause L. // Phys. Rev. A. - 1982. - Vol. 25. - N 5. - P. 2622.
5. Supronowicz J., Atkinson J.B., Krause L. // Phys. Rev. A. - 1984. - Vol. 30. - N 1. - P. 112.
6. Hugon M., Gounand F., Fournier P.R. // J. Phys. B: Atom. Mol. Phys. - 1980. - Vol. 13. - N 3. - P. 1109.
7. Tam A.S., Yabuzaki T., Curry S.M., Hou M., Happer W. // Phys. Rev. A. - 1978. - Vol. 17. - N 9. - P. 1862.
8. Sirko L., Rosinski K. // J. Phys. B: Atom. Mol. Phys. - 1985. - Vol. 18. - N 8. - P. L221.
9. Seiwert R. // Ann. Phys. (Leipzig). - 1956. - B. 18. Hfb. I/2. - S. 54.
10. Pitre J., Krause L. // Can. J. Phys. - 1968. - Vol. 46. - N 2. - P. 125.
11. Dashevskaya E.I., Voronin A.I., Nikitin E.E. // Can. J. Phys. - 1969. - Vol. 47. - N 12. - P. 1237.
12. Вдовин Д.А., Галицкий В.М., Добродеев Н.А. // ЖЭТФ. - 1969. - Т. 56. - Вып. 4. - С. 1344.
13. Movre M., Pichler G. // J. Phys. B: Atom. Mol. Phys. - 1977. - Vol. 10. - N 13. - P. 2631; 1980. - Vol. 13. - N 4. - P. 697.
14. Chaleard C., Dubreuil B., Catherinet A. // Phys. Rev. A. - 1982. - Vol. 26. - N 3. - P. 1431.

15. Dubreuil B., Chaleard C. // Phys. Rev. A. - 1984. - Vol. 29. - N 2. - P. 958.
16. Allegrini M., Gabbanini G., Moi L., Colle R. // Phys. Rev. A. - 1985. - Vol. 32, N 4. - P. 2068.
17. Edward-Berry J., Berry M.J. // J. Chem. Phys. - 1980. - Vol. 72. - N 8. - P. 4500.
18. Mestdagh J.M., Cuvellier J., Berlande J., Binet A., de Pujo P. // J. Phys. B: Atom. Mol. Phys. - 1980. - Vol. 13. - N 23. - P. 4589.
19. Ciryto J., Krause L. // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. - 1982. - Vol. 28. - P. 457.
20. Chebanier de Guerra A., Mesnou-Seeuws F. - Abstracts of Papers of the I3 International Conference on the Physics of Electronic and Atomic Collisions. - Berlin, 1983. - P. 314.
21. Pascale J., Mestdagh J.M., Cuvellier J., de Pujo P. // J. Phys. B: Atom. Mol. Phys. - 1984. - Vol. 17. - N 13. - P. 2627.
22. Pascale J., Vandeplanque J. // J. Chem. Phys. - 1974. - Vol. 60. - P. 2278.
23. Boggy R., Franz F.A. // Phys. Rev. A. - 1982. - Vol. 25, N 4. - P. 1887.
24. Münster P., Marek J. // J. Phys. B: Atom. Mol. Phys. - 1981. - Vol. 14, N 6. - P. 1009.
25. Pascale J. - Abstracts of Papers of the I3 International Conference on the Physics of Electronic and Atomic Collisions. - Berlin, 1983. - P. 342.
26. Zollars B.G., Schuessler H.A., Parker J.W., Hill R.H. // Phys. Rev. A. - 1983. - Vol. 28. - N 3. - P. 1329.
27. Supronowicz J., Atkinson J.B., Krause L. // Phys. Rev. A. - 1985. - Vol. 31, N 4. - P. 2691.
28. Hugon M., Gounand P., Fournier P.R., Berlande J. // J. Phys. B: Atom. Mol. Phys. - 1980. - Vol. 13. - N 2. - P. 1585.
29. Gallagher T.F., Edelstein S.A., Hill R.M. // Phys. Rev. A. - 1977. - Vol. 15. - N 5. - P. 1945.
30. Courbin-Gaussorgues C., Wahnö P., Barat M. // J. Phys. B: Atom. Mol. Phys. - 1979. - Vol. 12. - N 18. - P. 3047.
31. Courbin-Gaussorgues C., Sidis V. // J. Phys. B: Atom. Mol. Phys. - 1985. - Vol. 18. - N 4. - P. 699.
32. Pascale J. // Phys. Rev. A. - 1982. - Vol. 26. - N 6. - P. 3709.

33. Борисов Е.Н., Пенкин Н.П., Редько Т.П. // Хим.физ.-1986. - Т.5, № 5.- С.605.
34. Lagushenko R., Grossmann M.W., Maya J. // Chem. Phys. Lett.- 1985.- Vol.120, N 1.- P.21.
35. Yuh H.J., Dagdigian P.J. // Phys. Rev. A.- 1983.- Vol. 28, N 1.- P.63.
36. Alexander M.H., Orlikowski T., Straub J.E. // Phys.Rev. A.- 1983.- Vol.28.- N 1.- P.73.
37. Czajkowski M., Walentynowicz E., Krause L. // J. Quant. Spectrosc.Radiat.Transfer.-1982.-Vol.28.-N 6.-P.493.
38. Voronin A.J., Kvilivdze V.A. // Theor. Chim. Acta.-1967. - Vol.8.- P.334.
39. Пенкин Н.П., Редько Т.П. // Опт. и спектр. - 1984.- Т. 57.- Вып.6.- С.979.
40. Czajkowski M., Walentynowicz E., Krause L. // J. Quant. Spectrosc.Radiat.Transfer.-1982.-Vol.28, N 1.-P.13.
41. Breckenridge W.H., Broadbent T.W., Moore D.S. // J.Phys. Chem.- 1975.- Vol.79, N 13.- P.1233.
42. Mies F.H. // Phys. Rev. A. - 1973. - Vol. 7, N 3. - P.942.
43. McGuire P., Kouri D.J. // J.Chem.Phys. - 1974. - Vol.60, N 6. - P.2488.
44. Reid R.H.G. // J. Phys. B: Atom. Mol. Phys. - 1973. - Vol.6. - P.2018.
45. Malvern A.R. // J. Phys.B: Atom. Mol. Phys. - 1978. - Vol.II, N 5.- P.831.
46. Девдариани А.З., Загребин А.Л. // Хим.физ.- 1982. - Т.1, № 7.- С.947.
47. Девдариани А.З., Загребин А.Л. // Хим.физ.- 1982. - Т.1, № 8.- С.1141.
48. Девдариани А.З., Загребин А.Л. // Хим.физ. -1983. - Т.2, № 2.- С.163.
49. Девдариани А.З., Загребин А.Л. // Хим.физ.- 1986. - Т.5, № 5.- С.592.

50. Umanskij S.Ja., Nikitin B.E. // Theor. Chim. Acta. - 1969.- Vol.I3, N 2.- P.91.
51. Umanskij S.Ja., Yoronin A.I. // Theor. Chim. Acta. - 1968.- Vol.I2, N 3.- P.I66.
52. Orlikowski T., Alexander M.H. // J. Phys. B: Atom.Mol. Phys.- 1984.- Vol.I7, N II.- 1.2269.
53. Wright J.J., Balling L.C. // J. Chem. Phys.- 1980.- Vol.73, N 4.- P.I617.
54. Harris M., Lewis B.L. // J. Phys. B: Atom. Mol. Phys.- 1982.- Vol.I5, N I7.- P.L613.
55. Cremer G., Cheron B. // Opt. Commun. - 1981. - Vol.40, N 2.- P.I25.
56. Malins R.J., Logan D., Bernard D.J. // Chem. Phys.Lett. - 1981. - Vol.83. - P.I269.
57. Demetropoulos I.N., Lawley K.P. // J.Phys. B: Atom.Mol. Phys.- 1982.- Vol.I5, N I2.- P.I855.
58. Düren R., Haessenbrink E., Moritz G. // Z. Phys. A.- 1982.- B.307.- Hft.I.

Я. П. Клявиньш, С. М. Папернов,
Ж. Л. Шведжа
ЛГУ им. П. Стучки
(Рига)

ПРОЦЕССЫ ПЕРЕНОСА ЭНЕРГИИ В СМЕСИ ПАРОВ НАТРИЯ И РУБИДИЯ, ВОЗБУЖДЕННЫХ НА ЧАСТОТЕ D-ЛИНИЙ НАТРИЯ

Возможность создания больших концентраций атомов натрия в ЗР-состоянии при облучении паров натрия лазером на кристаллах способствовало изучению целой совокупности каналов трансформации энергии оптического возбуждения. Получены константы скорости атомно-молекулярного переноса энергии /1,2/, константы скорости заселения вышележащих уровней в столкновениях двух возбужденных ЗР-атомов натрия /1, 3/. Детально изучались процессы ионизации /4,5/. Все это делает указанную систему весьма привлекательной для тестирования возможностей реализации ряда технических проектов, связанных с оптической генерацией электронов.

Менее изучены элементарные процессы в двухкомпонентных системах - Na и другой щелочной металл. Однако эффективный перенос населенности от Na ЗР к другим легче ионизируемым щелочным атомам может существенно облегчить задачу оптической генерации электронов.

В обзоре /6/ приведены эффективные сечения переноса энергии возбуждения с резонансных уровней калия на резонансные уровни рубидия. Известны также сечения аналогичного переноса для пары $Rb^*5P - Cs$ /7/. Для натрия определены эффективные сечения переноса возбуждения с резонансных 3^2P -уровней на резонансные 4^2P -уровни калия /8/. Полученные сечения имеют значения в пределах $10^{-15} - 10^{-16} \text{ см}^2$. Процессы переноса энергии от Na ЗР к атомам рубидия и цезия ранее не изучались. Рубидий и цезий привлекают внимание еще и тем, что, возможно, при переносе энергии от Na ЗР заселяются и первые возбужденные S - и D - состояния (см. рис.1).

В настоящей работе сообщается о первых полученных результатах изучения переноса энергии от оптически возбужденных атомов Na ЗР к атомам рубидия.

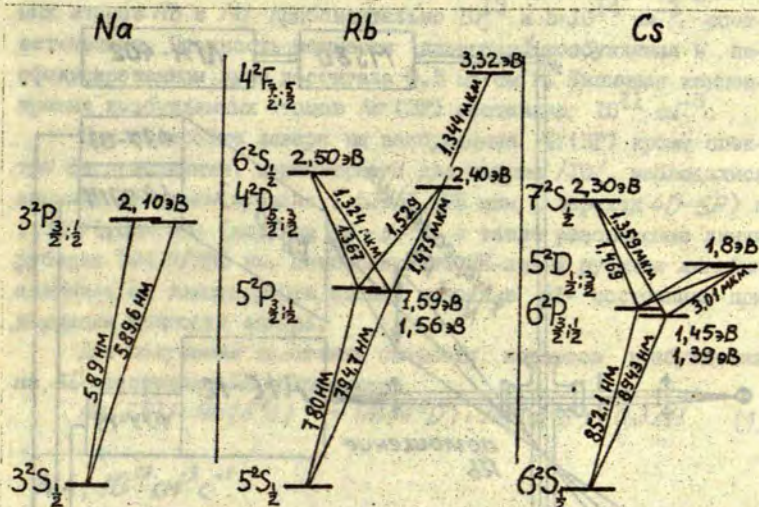


Рис.1. Схема низлежащих уровней атомов натрия, рубидия и цезия.

Блок-схема экспериментальной установки представлена на рис.2. Откачиваемая ячейка флуоресценции содержала в себе металлический *Na* и небольшую примесь ($\sim 5\%$) *Rb*, чтобы концентрации атомов *Na* и *Rb* в парах были примерно одного порядка. Возбуждение осуществлялось на D_2 -линии *Na* ($589,0 \text{ nm}$) лазером на красителе *M* 580-Спектрафизикс ($\Delta\lambda = 0,01 \text{ nm}$), накачиваемым аргоновым лазером ЛГН-402.

Флуоресценция в инфракрасной (ИК) области $1,2 - 1,6 \text{ мкм}$ регистрировалась тремя отобранными по ИК-чувствительности охлажденными *Ge* фотодиодами ФД-9ЭIII, размещенными вдоль выходной щели монохроматора МДР-3. Фототок усиливался предусилителем, синхронным усилителем (СД) и записывался потенциометром КСП-4. При этом лазерное возбуждение модулировалось. Для получения абсолютных значений интенсивности линий флуоресценции регистрирующую систему калибровали по эталонному источнику (вольфрамовая ленточная лампа СИ-10-300).

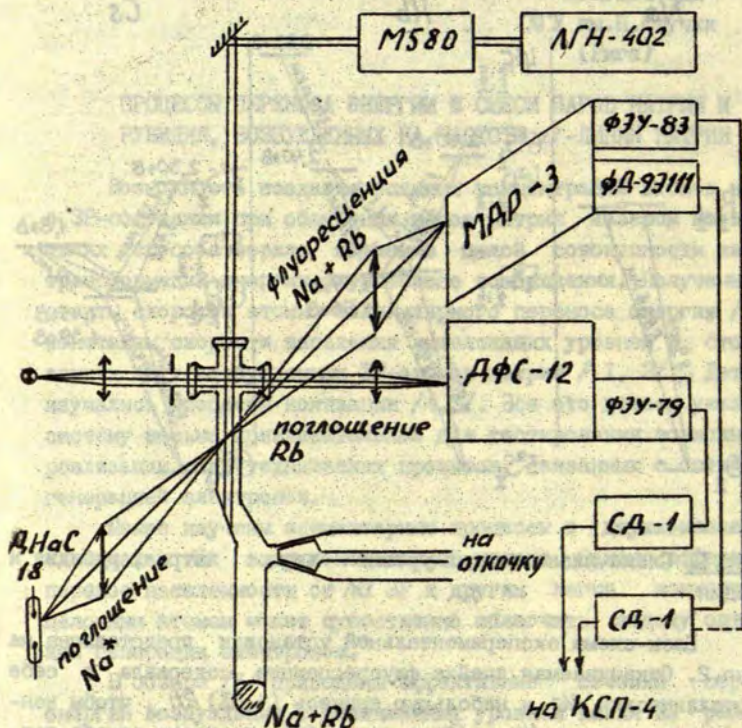


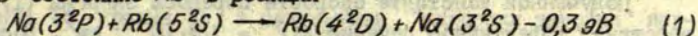
Рис.2. Блок-схема экспериментальной установки.

Концентрацию атомов натрия в ЗР-состоянии определяли по поглощению линий $818,3/819,5$ нм от натриевой разрядной лампы ДНас-18 с промеренным контуром линии по ранее разработанной методике [9]. Концентрацию невозбужденных атомов рубидия определяли по полному поглощению на резонансной линии $Rb D_1$. Для этого на ЭВМ была рассчитана зависимость полного поглощения A_0 от концентрации невозбужденных атомов Rb при определенной толщине поглощающего слоя с учетом сверхтонкой структуры линии и изотопного состава рубидия.

Эксперименты проводились при концентрациях невозбужденных атомов Rb и Na приблизительно 10^{15} и $5 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$ соответственно. Плотность мощности лазерного возбуждения в не-сфокусированном луче достигала $0,5 \text{ Вт} \cdot \text{см}^{-2}$. Типичная концентрация возбужденных атомов Na (ЗР) составляла 10^{11} см^{-3} .

При настройке лазера на возбуждение Na (ЗР) кроме спектра флуоресценции, характерного для натрия /10/, наблюдались атомные ИК-линии рубидия $1,529/1,475 \text{ мкм}$ (переход $4D-5P$) и $1,367/1,324 \text{ мкм}$ (переход $6S-5P$), а также резонансные линии рубидия $794,7/780 \text{ нм}$. Интенсивность ИК-линий рубидия линейно зависела от концентрации атомов натрия в ЗР-состоянии при вариации мощности лазера.

Для получения константы скорости переноса возбуждения на $4D$ -состояние Rb в реакции



$NA, 10^{13} \text{ см}^{-3} \cdot \text{с}^{-1}$

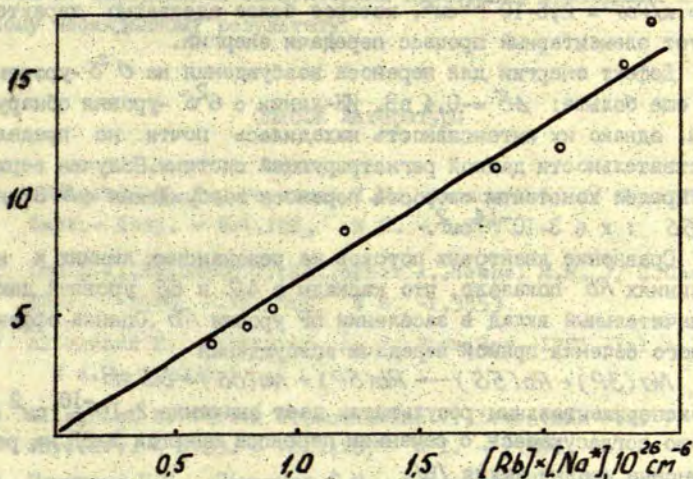


Рис.3. Зависимость квантового потока на линиях $4D-5P$ перехода Rb от произведения концентраций невозбужденных атомов Rb и атомов Na в ЗР-состоянии.

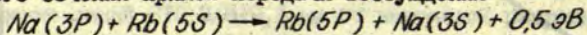
при практически неизменной температуре (630K) в верхней части ячейки флуоресценции определяли зависимость квантового потока на соответствующих ИК-линиях *Rb* от произведения концентраций невозбужденных атомов *Rb* и атомов *Na* в ЗР-состоянии (рис.3).

Константа скорости процесса (I), определенная по наклону кривой этой зависимости, $k = (6,3 \pm 0,6) \cdot 10^{-13} \text{ см}^3 \cdot \text{с}^{-1}$ при $T=630 \text{ K}$. Приведенная погрешность отражает статистический разброс точек на кривой экспериментально определенной зависимости. Истинная погрешность может быть больше и достигает приблизительно 50%, так как включает возможные систематические ошибки в определении квантового потока флуоресценции и двух концентраций атомов.

Полученной константе скорости переноса энергии (I) соответствует эффективное сечение $k/\bar{v} = 7,3 \cdot 10^{-18} \text{ см}^2$. Поскольку процесс (I) эндотермический, следует учитывать долю столкновений с достаточной кинетической энергией, что дает сечение $Q = k/\bar{v} \alpha = 2,5 \cdot 10^{-16} \text{ см}^2$, которое более адекватно характеризует элементарный процесс передачи энергии.

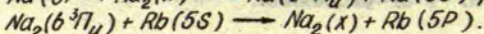
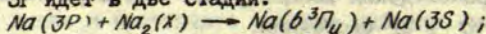
Дефект энергии для переноса возбуждения на 6^2S -уровень *Rb* еще больше: $\Delta E = -0,4 \text{ эВ}$. ИК-линии с 6^2S -уровня обнаружены, однако их интенсивность находилась почти на пределе чувствительности данной регистрирующей системы. Получен верхний предел константы скорости переноса возбуждения с *Na* ЗР на *Rb* $6S$: $k \leq 3 \cdot 10^{-14} \text{ см}^2$.

Сравнение квантовых потоков на резонансных линиях и на ИК-линиях *Rb* показало, что каскады с 4D и 6S уровней дают незначительный вклад в заселении 5P уровня *Rb*. Оценка эффективного сечения прямой передачи возбуждения



по экспериментальным результатам дает значение $2 \cdot 10^{-16} \text{ см}^2$, хорошо согласующееся с сечением переноса энергии *Na*ЗР на резонансные уровни калия /8/.

Однако, судя по известным константам скорости атомно-молекулярных процессов /2,10/, можно предположить, что заселение *Rb* 5P идет в две стадии:



Более вероятно, по нашему мнению, передача возбуждения через метастабильное 6^3P_u -состояние Na_2 , поскольку при этом легче диссипирует сравнительно большой избыток энергии. Сказанное относится также к результатам работы [8], в которой изучался перенос возбуждения $Na\ 3P \rightarrow K\ 4P$, также осуществляющийся с довольно большим избытком энергии.

При возбуждении паров $Na+Rb$ сфокусированным лазерным лучом была обнаружена линия 1,344 мкм перехода $4F - 4D$ атома Rb при почти полном отсутствии линий с других, близлежащих уровней ($7S, 5D, 6P$). Квадратичная зависимость интенсивности этой линии от концентрации атомов Na в $3P$ -состоянии указывает на ступенчатый характер заселения высоколежащего $4F$ -уровня рубидия. Селективное и достаточно эффективное заселение $4F$ -уровня Rb в результате "удвоения энергии" первоначального возбуждения $Na\ 3P$ представляется нам весьма интересным. В настоящее время проводится экспериментальная работа по определению элементарных процессов, приводящих к такому неожиданному результату.

Список литературы

1. Shvegzhda Zh.L., Papernov S.M., Janson M.L. // Chem.Phys. Lett.- 1983. - Vol.101, N 2. - P.187.
2. Lam L.K., Fujimoto T., Gallagher A., Hessel M.M. // J.Chem. Phys. - 1978. - Vol.68, N 8. - P.3553.
3. Allegrini M., Gabbanini C. // Phys.Rev.-1985.-Vol.A.32, N 4. - P.2068.
4. Allegrini M., Carver W., Kushawaha V., Leventhal J.J. // J. Phys.Rev. - 1983. - Vol.A28, N 1. - P.199.
5. Безуглов Н.Н., Папернов С.М., Швежда Ж.Л., Сепман В.Ю. Тезисы докладов IX ВКЭАС. - Рига: ИФ АН ЛатвССР, 1984. - Ч.1. - С.139.

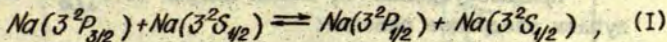
6. Краулия Э.К., Круглевский В.А. Сенсибилизированная флуоресценция смесей паров металлов. - Рига: ЛГУ им. П. Стучки. - 1973. - Вып.4. - С.4.
7. Czajkowski A., McGilis D.A., Krause K. // Can. J. Phys. - 1966. - Vol. 44. - P.741.
8. Allegrini M., Alzetta G., Moi L., Giuletetti D. // Il Nuovo Cimento. - 1975. - Vol.28B, N 1. - P.69.
9. Путнина С.Я., Швэгжда Ж.Л., Янсон М.Л. // ЖПС. - 1984. - Т. 40. - Вып. 5. - С.731.
10. Папернов С.М., Швэгжда Ж.Л. Процессы переноса энергии в парах металлов. - Рига: ЛГУ им. П. Стучки. - 1983. - С.40.

С.М.Папернов, М.Л.Янсон,
В.Б.Грушевский
ЛГУ им.П.Стучки
(Рига)

КИНЕТИКА РАСПАДА ОПТИЧЕСКИ ВОЗБУЖДЕННЫХ РЕЗОНАНСНЫХ СОСТОЯНИЙ АТОМА НАТРИЯ

Закономерности оптического возбуждения паров металлов в режиме пленения резонансного излучения теоретически изучены достаточно хорошо /1/. В то же время экспериментальных работ по этой проблеме считанное число. Кинетика распада резонансных состояний атомов в парах щелочных металлов изучена авторами работ /2-5/. В данной работе впервые делается попытка изучения кинетики радиационного распада населенности резонансных состояний $Na\ 3P$ в условиях осевого лазерного возбуждения цилиндрической ячейки капиллярного типа. Такого рода эксперимент позволяет провести сравнение с теорией, поскольку в случае бесконечного цилиндра (таковым можно считать цилиндр с отношением длины к диаметру $H/D > 10$), а также бесконечного плоского слоя получены точные аналитические выражения для эффективных времен жизни.

Для исследования выбрана область концентраций нормальных атомов натрия $n_0 \sim 10^{14} \text{ см}^{-3}$, где селективному оптическому возбуждению компонент тонкой структуры (КТС) $3^2P_{3/2}$ или $3^2P_{1/2}$ сопутствует процесс столкновительного перемешивания:



который существенно влияет на кинетику послесвечения D-линий натрия /4/. Приведем основные кинетические уравнения и их решения, полученные в /4/, но требующие некоторых уточнений:

$$\dot{n}_2(t) = -(\Gamma_{23\phi} + R_{21})n_2(t) + R_{12}n_1(t); \quad (2)$$

$$\dot{n}_1(t) = -(\Gamma_{13\phi} + R_{12})n_1(t) + R_{21}n_2(t).$$

Здесь $n_1(t)$ и $n_2(t)$ - населенности уровней $3^2P_{1/2}$ и $3^2P_{3/2}$ атома натрия; $\Gamma_{13\phi}, \Gamma_{23\phi}$ - эффективная радиационная скорость распада соответствующего уровня; R_{12}, R_{21} - скорости передачи возбуждения в реакции (1):

$$R_{12} = K_{1/2-3/2} n_0; \quad (3)$$

$$R_{21} = K_{3/2 \rightarrow 1/2} n_0,$$

где n_0 - концентрация атомов Na в основном $3^2S_{1/2}$ состоянии, а $K_{1/2 \rightarrow 3/2}$ и $K_{3/2 \rightarrow 1/2}$ - константы скорости столкновительного перемешивания КТС.

Схема процессов, описываемых системой уравнений (2), представлена на рис.1.

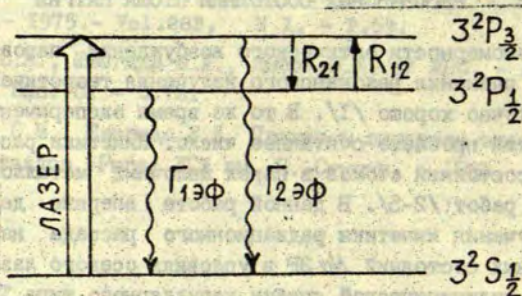


Рис.1. Схема процессов, определяющих заселение и распад резонансных состояний натрия.

Система уравнений (2) может быть сведена к дифференциальному уравнению второго порядка, решение которого имеет вид суммы двух экспонент с коэффициентами, определяемыми из начальных условий.

При возбуждении D_1 -линии натрия ($3^2P_{1/2} \leftarrow 3^2S_{1/2}$) получаем следующее решение:

$$n_1(t) = \frac{n_1(0)}{\omega_+ - \omega_-} \left[(\omega_+ - \Gamma_{13\phi} - R_{12}) \exp(-\omega_- t) + \right. \\ \left. + (\Gamma_{13\phi} + R_{12} - \omega_-) \exp(-\omega_+ t) \right]; \quad (4)$$

$$n_2(t) = \frac{n_1(0) R_{12}}{\omega_+ - \omega_-} \left[\exp(-\omega_- t) - \exp(-\omega_+ t) \right].$$

При возбуждении D_2 -линии ($3^2P_{3/2} \leftarrow 3^2S_{1/2}$) решение имеет

аналогичный вид при соответствующей перестановке индексов I и 2. Здесь ω_+ и ω_- - решения характеристического уравнения, соответствующего системе (2):

$$\omega_{\pm} = \frac{1}{2} (\Gamma_{13\Phi} + \Gamma_{23\Phi} + R_{12} + R_{21}) \pm \frac{1}{2} [(\Gamma_{13\Phi} - \Gamma_{23\Phi})^2 + (R_{12} + R_{21})^2 + 2(R_{12} - R_{21})(\Gamma_{13\Phi} - \Gamma_{23\Phi})]^{1/2}. \quad (5)$$

Отметим попутно, что решение, приведенное в работе /4/, содержит ряд опечаток.

Кинетика флуоресценции D-линий изучалась по методу одноканального многоканального статистического анализа с использованием времени амплитудного преобразования (МВА-метод). Эксперимент проводился по схеме, приведенной на рис.2.

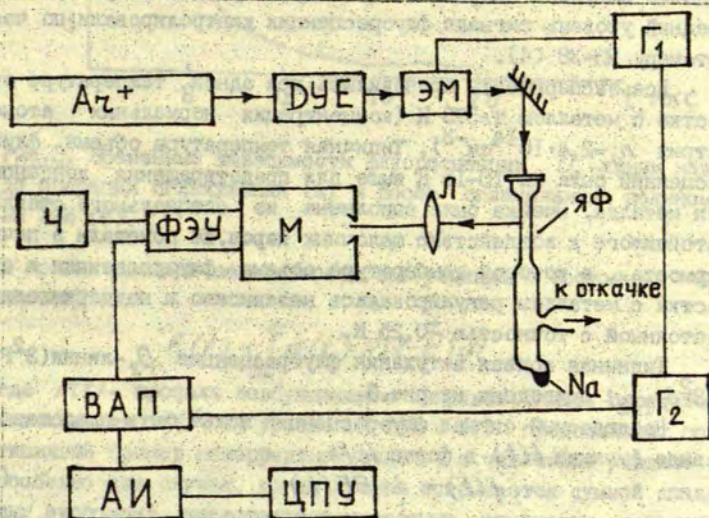


Рис.2. Схема эксперимента по изучению кинетики флуоресценции D-линий.

Излучение лазера на красителях фирмы "Спектра Физикс" модель 580-01 с длиной волны $589,0/6$ нм, $\Delta\lambda = 0,01$ нм пропускалось через электрооптический модулятор МЛ-102(ЭМ), питаемый от генератора Г5-15 (Γ_1), в результате чего в ячейку флуоресценции (ЯФ) излучение попадало в виде импульсов шириной примерно 400 нс с частотой следования 4 кГц. Лазерный луч слегка фокусировали таким образом, чтобы сечение луча совпадало с сечением капилляра ячейки, имевшим диаметр $D \approx 3,5$ мм и длину $H \approx 60$ мм. Флуоресценция D-линий натрия из приосевой части ячейки с помощью линзы Л фокусировалась на входную щель монохроматора МСД-1 (М), регистрировалась ФЭУ-79, сигнал с которого после предварительного усиления попадал на время амплитудный преобразователь (ВАП) и далее на амплитудный анализатор АИ-256 (АИ) с выходом на цифropечатающее устройство (ЦПУ). Генератор Г5-15 (Γ_2) запускал ВАП синхронно с подачей импульса напряжения на модулятор с генератора Γ_1 . Средний уровень сигнала флуоресценции контролировали по частотомеру ЧЗ-38 (4).

Все эксперименты проводились при одной температуре отжига с металлом $T=573$ К (концентрация нормальных атомов натрия $n_0 = 2,4 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$). Типичная температура объема флуоресценции была на 10-15 К выше для предотвращения конденсации металла. Ячейка была выполнена из специального стекла, устойчивого к воздействию щелочных паров. Ее помещали в печь-термостат, в которой температура объема флуоресценции и отжига с металлом регулировалась независимо и поддерживалась постоянной с точностью $\pm 0,25$ К.

Типичная кривая затухания флуоресценции D_2 -линии ($3^2P_{3/2} \rightarrow 3^2S_{1/2}$) приведена на рис.3.

Наблюдаемый сигнал флуоресценции может быть представлен в виде функции $f(t)$ в форме /6/:

$$f(t) = A + BF(t), \quad (6)$$

где A - некоторая подложка (обычно фоновый сигнал); B - масштабный фактор; $F(t)$ - свертка профиля импульса возбуждения и отклика системы, т.е. функция вероятности испускания системой фотонов в момент времени t после возбуждения. Но вероятность испускания фотонов изменяется по тому же закону, что

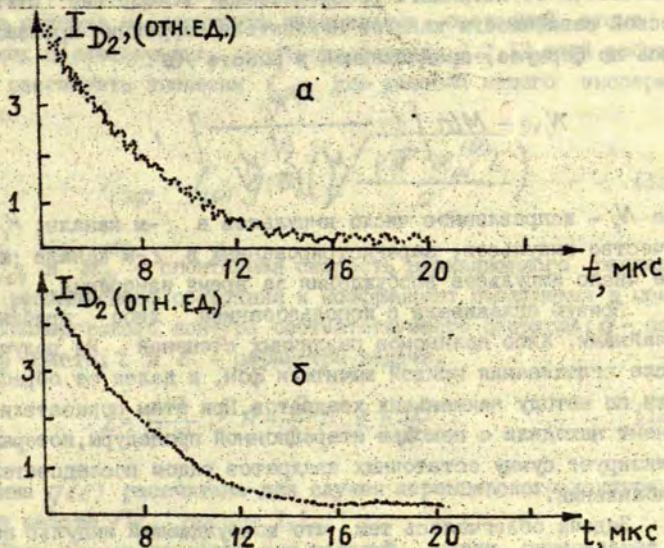


Рис.3. Временные зависимости флуоресценции D_2 -линии натрия до операции сглаживания (а) и после сглаживания полиномами на ЭВМ (б).

и кривая распада заселенности возбужденного состояния - $n_i(t)$ поэтому

$$F_i(t) = \int_{-\infty}^{\infty} n_i(t') P(t-t') dt', \quad (7)$$

где $P(t)$ - профиль возбуждающего импульса. Задача определения зависимости $n_i(t)$ из уравнений (6) и (7) представляет собой типичный пример некорректной задачи, а численное решение ее, особенно для случая, когда кривая описывается суммой спадающих экспонент, представляет известные трудности вследствие плохой устойчивости решений [7].

Для получения информации о радиационных скоростях распада сигнал флуоресценции с помощью статистических методов обрабатывали на ЭВМ. Обработка включала следующие процедуры. Вначале производилась коррекция наблюдаемого сигнала флуорес-

ценции, поскольку в методе МВн сигнал в "старших" каналах отличается от истинного распределения вследствие статистической зависимости каналов накопителя. Коррекция производилась по формуле, предложенной в работе /8/:

$$N_i = -M \ln \left[1 - \frac{K_i}{M - \sum_{j=1}^{i-1} K_j} \right], \quad (8)$$

где N_i - исправленное число импульсов в i -м канале; K_i - количество импульсов, зарегистрированных в i -м канале; M - полное число импульсов возбуждения за время измерения.

Кривую сглаживали с использованием либо приближения сплайнами, либо полиномов различных степеней. Из полученной после сглаживания кривой вычитали фон, и далее ее обрабатывали по методу наименьших квадратов. При этом показатели экспонент находили с помощью итерационной процедуры, которая минимизирует сумму остаточных квадратов рядом последовательных приближений.

Задача облегчалась тем, что возбуждающий импульс по длительности был более чем на порядок короче сигнала флуоресценции, поэтому сигнал на "хвостах" экспонент был пропорционален $n_i(t)$. К данному моменту после обработки результатов эксперимента удалось получить значение показателя долгоживущей экспоненты $\omega_- = 1,02 \cdot 10^5 \text{ с}^{-1}$, причем это значение было получено при обработке сигнала флуоресценции как при возбуждении на частоте D_2 -линии, так и при возбуждении на частоте D_1 -линии.

В области концентраций невозбужденных атомов $Na \cdot n_0 > 10^{14} \text{ см}^{-3}$ отношение

$$\Gamma_{1\text{эф}}/\Gamma_{2\text{эф}} \approx 1,11 \quad (9)$$

в соответствии с данными /4/, а также выполняется соотношение $R_{21} \gg \Gamma_{2\text{эф}}$. Это позволяет получить следующее приближенное уравнение:

$$\omega_- \approx 0,34 \Gamma_{1\text{эф}} + 0,66 \Gamma_{2\text{эф}}. \quad (10)$$

Из уравнений (9) и (10) получаем

$$\begin{aligned} \Gamma_{1\text{эф}} &\approx 1,07 \omega_- = 1,09 \cdot 10^5 \text{ с}^{-1}; \\ \Gamma_{2\text{эф}} &\approx 0,96 \omega_- = 0,98 \cdot 10^5 \text{ с}^{-1}. \end{aligned}$$

Рассмотрим, как этот результат согласуется с известными теоретическими моделями. В работе /1/ проведен тщательный анализ распада населенности резонансных состояний атома в условиях послесвечения. Используя формулу 2.7.13 этой работы можно рассчитать значения $\Gamma_{эф}$ для условий нашего эксперимента:

$$\Gamma_{эф} = \Gamma_{исп} g(\epsilon) \left(\sqrt{\frac{V\pi \alpha_{oi}^{(D)} L}{a}} \right)^{-1}, \quad (II)$$

где $\Gamma_{исп}$ и $\alpha_{oi}^{(D)}$ - спонтанная скорость радиационного распада i -го резонансного состояния и коэффициент поглощения в центре доплеровского контура соответствующего перехода; a - параметр Фойгта; L и ϵ - параметры задачи,

$$L = \frac{HR}{H+R}; \quad R = \frac{D}{2}; \quad \epsilon = \frac{H}{R}. \quad (I2)$$

Величина $g(\epsilon)$ рассчитана для случая лоренцевского контура в той же работе /1/, $g(\epsilon) \simeq 1,1$.

Весь расчет проведен для условий, когда центральная часть контура линии излучения, определяемая доплеровским уширением, полностью поглощена и процесс пленения излучения определяется лоренцевскими крыльями.

По расчету, проведенному по формуле (II) для случая перехода $3^2P_{3/2} \rightarrow 3^2S_{1/2}$, $\lambda = 589,0$ нм, $\Gamma_{эф} = 2,87 \cdot 10^5$ с⁻¹.

Таким образом, имеется существенное отличие теории и эксперимента, явно выходящее за систематические погрешности эксперимента и объяснить которое пока не представляется возможным. Дальнейшее накопление экспериментального материала, расширение рабочей области концентраций нормальных атомов, а также улучшение методики обработки кривых распада на ЭВМ должно внести ясность в этот вопрос.

Список литературы

1. Ключарев А.Н., Безуглов Н.Н. Процессы возбуждения и ионизации атомов при поглощении света.-Л.:ЛГУ им.А.А.Жданова, 1983.- 272 с.
2. Безуглов Н.Н., Добролеж Б.В., Ключарев А.Н., Сепман В.В. // Опт. и спектр.-1977.-Т.43.-Вып.1.-С.23.
3. Kibble B.P., Copley G., and Krause L. // Phys.Rev. - 1967. - Vol.153.-P.9.
4. Huennekens I., Gallagher A. // Phys.Rev.A.- 1983.-Vol.28, N 1.-I.238.
5. Kopystynska A., Kowalczyk P. // Opt. Commun. - 1979.-Vol. 28, N 1.-P.78.
6. Birch D.I.S., Imhof R.E. // J.Phys.E.- 1977.- Vol.10 .- P.1044.
7. Julius R.S. // Comput. Biomed. Res.- 1972.- Vol.5.-P.473.
8. Coates P.B. // J.Phys.E.-1968.-Ser.2.-Vol.1.-P.878.

И.Я.Пирагс, М.Я.Таманис, Р.С.Фербер
ЛГУ им.П.Стучки
(Рига)

СТОЛКНОВИТЕЛЬНАЯ ДЕЗАКТИВАЦИЯ ЭНЕРГИИ ВОЗБУЖДЕНИЯ В $K_2(B^1\Pi_u)$

Поскольку двухатомные молекулы щелочных металлов присутствуют в виде малой примеси в преимущественно атомарных щелочных парах, процессы дезактивации энергии электронного возбуждения димеров при соударениях с атомами играют важную роль в фотопроцессах. Так, для оптимизации параметров лазера на В-Х-полосе K_2 /1/ необходимы данные о скоростях и эффективных сечениях столкновительной дезактивации рабочих уровней генерации. Настоящая работа посвящена получению методом лазерно-индуцированной флуоресценции (ЛИФ) количественных данных о константах скорости и суммарных эффективных сечениях таких процессов для возбужденного состояния $K_2(B^1\Pi_u)$ при соударениях как с примесными атомами инертных газов, так и с атомами калия. Процессы в основном электронном состоянии $K_2(X^1\Sigma_g^+)$ нами изучались ранее /2,3/.

Рассмотрим возможные каналы дезактивации энергии с селективно заселенного электронно-колебательно-вращательного (ЭКВ) уровня α', ν', J' двухатомной молекулы. Известно, что в результате неупругих столкновений с другими атомами или молекулами может произойти переход на другие КВ-уровни либо того же электронного состояния α' с эффективным сечением $\sigma_{\alpha\alpha'}$, либо другого электронного состояния β' с сечением $\sigma_{\beta\alpha'}$. Для характеристики суммарного процесса вводят полное сечение неупругих процессов $\sigma_{tot} = \sigma_{\alpha\alpha'} + \sigma_{\beta\alpha'}$. Сечение $\sigma_{\alpha\alpha'}$, в свою очередь, включает как индуцированные столкновениями переходы в системе электронных термов молекул $\sigma_{\alpha\alpha'}^N$, так и перенос энергии возбуждения к атому-партнеру столкновения $\sigma_{\alpha\alpha'}^A$.

В случае молекул K_2 полное сечение неупругих процессов приведено в литературе только для соударений $K_2^* + Ar$ (см./4/) Авторы /4/ методом эффекта Ханле определили сечение разрушения выстраивания $\sigma_2(K_2^* + Ar) = (150 \pm 30) \text{ \AA}^2$, усредненное по нескольким КВ-уровням $B^1\Pi_u$ -состояния. Представляют интерес данные о σ_{tot} для $K_2(B^1\Pi_u, \alpha', \nu', J')$ при соударениях с ато-

мами калия К. Атомы калия играют роль теплового резервуара для небольшой ($\sim 10^{-3}$) примеси димеров K_2 в насыщенных калиевых парах (см./5/). Авторы работ /6,7/ методом сдвига фаз измеряли зависимость эффективного времени жизни τ_{ef} В - X-полосы K_2 от температуры паров T , и, следовательно, от концентрации К при возбуждении линией 632,8 нм He-Ne лазера. При этом в работе /3/ обнаружено увеличение τ_{ef} с ростом T , что, повидимому, связано с некорректной постановкой эксперимента. Более определенные результаты получены авторами работ /7,8/. Величина сечения, равная $(150 \pm 30) \text{ \AA}^2$, измеренная в /7/ методом сдвига фаз, согласуется с величиной $(162 \pm 7) \text{ \AA}^2$, определенной авторами /8/ по кинетике распада при импульсном возбуждении. Сечения, измеренные в /7,8/, следует интерпретировать как сечения электронного тушения $\sigma_{el}(K_2^* + K)$ так как для регистрации ЛИФ использовались фильтры, пропускающие всю В - X-полосу, возбужденную линией 632,8 нм. В связи с этим из σ_{tot} исключалось сечение σ_{AVAJ} , парциальный вклад которого может быть весьма значительным, на что указывают, например, данные для $K_2(X^1\Sigma_g^+)$ (см./2/) и для $Na_2(B^1\Pi_u)$ (см./9/).

В Проблемной лаборатории спектроскопии Латвийского университета измерено сечение σ_{el}^A столкновительной передачи энергии возбуждения от уровней $K_2(B^1\Pi_u)$, возбуждаемых той же линией 632,8 нм He-Ne лазера, на атомарные уровни $K(4^2P_{1/2,3/2})$, равное приблизительно $100 \text{ \AA}^2$ (см./10/).

Таким образом, данные о значении σ_{tot} для выделенного ЭКВ-уровня $K_2(B^1\Pi_u)$ отсутствуют в литературе. В данной работе для определения σ_{tot} применен метод тушения ЛИФ примесным газом R, с учетом того, что реально имеется трехкомпонентная смесь $K_2 + R + K$. Метод был предложен нами ранее /11,12/ для $NaK(D^1\Pi_u)$.

Известно, что наличие примесного газа R при давлении p приводит к зависимости отношений интенсивности ЛИФ $J(0)/J(p)$ от давления p в виде (прямая Штерна-Фольмера)

$$J(0)/J(p) = 1 + b p \quad (1)$$

Принимая во внимание, что $J \sim \Gamma^{-1}$, где Γ - полная скорость распада населенности, зависящая от концентрации N_R примесного газа R , как

$$\Gamma = \Gamma_{sp} + G'_{tot} (K_2^* + R) \bar{V} (K_2 + R) N_R, \quad (2)$$

можем выразить связь между G'_{tot} и δ следующим образом: (δ^{-1} в миллиметрах ртутного столба, остальное - в единицах СИ)

$$\delta^{-1} = \frac{\kappa \sqrt{T T_0} \Gamma_{sp}}{133,3 G'_{tot} (K_2^* + R) \bar{V} (K_2 + R)} \quad (3)$$

Здесь T_0 - температура резервуара с примесным газом (комнатная); $\bar{V} (K_2 + R)$ - средняя относительная скорость партнеров столкновения; Γ_{sp} - скорость спонтанного распада $K_2(B^1\Pi_u, v', J')$.

В трехкомпонентной смеси скорость распада $K_2 + K + R$ при температуре T , которой соответствует концентрация $N_K(T)$ атомов K , и при давлении инертного газа p'' (точка В на рис.1)

$$\Gamma_B = \Gamma_{sp} + \Gamma_T + \Gamma'', \quad (4)$$

где $\Gamma_T = G'(K_2^* + K) N_K(T) \bar{V} (K_2 + K)$ и $\Gamma'' = G'_{tot} (K_2^* + R) N_R'' \bar{V} (K_2 + R)$ а N_R'' - концентрация газа R при давлении p'' . При давлении p' (точка А на рис.1) соответственно $\Gamma_A = \Gamma_{sp} + \Gamma_T + \Gamma'$. Изменение скорости столкновительной релаксации $\Gamma_B - \Gamma_A$ по отношению к скорости столкновительной релаксации при температуре T и нулевом давлении газа R

$$\frac{\Gamma_B - \Gamma_A}{\Gamma_{sp} + \Gamma_T} = \frac{\Gamma'' - \Gamma'}{\Gamma_{sp} + \Gamma_T} = \frac{G'_{tot} (K_2^* + R) \bar{V} (K_2 + R) (N_R'' - N_R')}{\Gamma_{sp} + G'_{tot} (K_2^* + K) N_K(T) \bar{V} (K_2 + K)} \quad (5)$$

Здесь $\bar{V} (K_2 + K)$ - относительная скорость сталкивающихся молекул K_2 и атомов калия при температуре T . Принимая во внимание, что $J \sim \Gamma^{-1}$, получаем

$$\frac{\Gamma'' - \Gamma'}{\Gamma_{sp} + \Gamma_T} = \frac{J(0)}{J(p')} - \frac{J(0)}{J(p'')} = \Delta C, \quad (6)$$

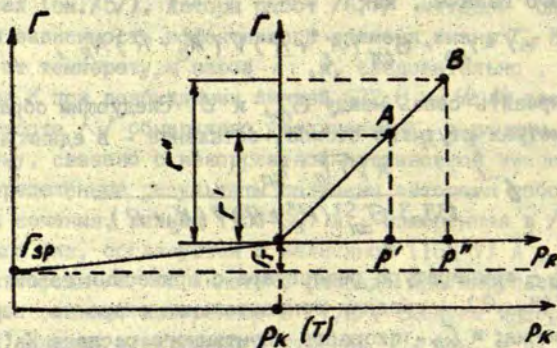


Рис. 1. Скорость распада в трехкомпонентной смеси $K_2 + K + R$. Температуре T соответствует давление атомов калия $p_K(T)$ и их концентрация $N_K(T)$,

где $J(0), J(p'), J(p'')$ - интенсивности флуоресценции без примесного газа и в присутствии газ соответственно при давлениях p' и p'' . Перепишем уравнение (5) с учетом уравнения (6) в виде

$$\frac{\kappa \sqrt{T_0} \Delta C}{133,3(p'' - p')} = \frac{G_{tot}(K_2^* + R) \bar{V}(K_2 + R)}{G_{sp} + G_{tot}(K_2^* + K) N_K(T) \bar{V}(K_2 + K)} \quad (7)$$

После несложных преобразований, помня, что $\Delta C/p'' - p' = b$, а относительная скорость сталкивающихся частиц $\bar{V}(K_2 \cdot X) = \sqrt{8kT/\pi \mu}(K_2 \cdot X)$, где X - инертный газ R или атом калия K , μ - приведенная масса сталкивающихся частиц, получаем

$$b^{-1} = \frac{G_{sp} \sqrt{\kappa \mu}(K_2 + K) T_0 / 8}{133,3 G_{tot}(K_2^* + R)} + \frac{\kappa \mu(K_2 + R) \sqrt{T_0} G_{tot}(K_2^* + K)}{133,3 \mu(K_2 + K) G_{tot}(K_2^* + R)} N_K \sqrt{T}. \quad (8)$$

Из уравнения (8) видно, что если построить зависимость b^{-1} от произведения $N_K \sqrt{T}$, то коэффициент наклона прямой даст отношение сечений $G_{tot}(K_2^* + K)/G_{tot}(K_2^* + R)$, а ордината при $N_K \sqrt{T} = 0$ даст величину $G_{tot}(K_2^* + R)$. Следовательно, ме-

тод позволяет отдельно определить обе величины $G_{tot}(K_2^*+R)$ и $G_{tot}(K_2^*+K)$. Значения δ^{-1} определяются из зависимостей (I), получаемых в эксперименте по тушению ЛИФ примесным газом для разных температур T , а значит, и для разных концентраций N_K (см. рис. 2). Интересно отметить, что этим способом удается непосредственно получить значения сечений, а не констант скорости. Если известно значение сечения столкновительной релаксации, то для конкретной температуры можно перейти к соответствующей константе скорости

$$K_p(K_2^*+X) = G_{tot}(K_2^*+X) \bar{v}(K_2+X).$$

Используя описанный метод, мы получили значения скоростей и сечений релаксации ЭКВ-уровня $K_2(V^I \Pi_u, V'=8, J'=73)$, приведенные в табл. I.

Остановимся подробнее на методике эксперимента. Как показали исследования спектра ЛИФ K_2 при возбуждении гелий-неоновым лазером типа ЛГ-38 ($\lambda=632,8$ нм) (см. 13/), наиболее подходящими линиями резонансной серии с $K_2(V^I \Pi_u, 8, 73)$ для проведения измерений по тушению флуоресценции являются линии Q_9 и Q_{16} . Мы проводили измерения на линии Q_9 как наиболее спектрально чистой и в то же время достаточно интенсивной для регистрации флуоресценции при весьма низких концентрациях молекул K_2 .

Эксперименты по выявлению зависимости интенсивности флуоресценции от давления инертного газа проводили при узких щелях спектрального прибора ДФС-12 - 30 мкм. Этой ширине соответствует спектральная ширина выходной щели, равная 0,016 нм. Время накопления при работе в режиме счета фотонов выбирали таким, чтобы погрешность отношения $J(0)/J(p)$ была не более 1%. Постоянство значения величины $J(0)$ контролировали, измеряя его до и после напуска газа. Учитывался сплошной фон, который возрастал с повышением температуры паров калия и увеличением давления инертного газа. Наличие фона было обнаружено неоднократным прописыванием спектра ЛИФ в диапазоне длин волн $\Delta\lambda = \pm 0,5$ нм от линии наблюдения. В этой области спектра не появлялись новые отдельные сателлитные линии флуоресценции, вызванные столкновительными переходами на соседние вращательные уровни $J' = 73 \pm \Delta J$. Фон измеряли на расстоянии $\pm 0,2$ нм от основной линии при каждом значении температуры и

давления инертного газа. Тушение ЛИФ измеряли в диапазоне температур $T=(555-628)$ К. Концентрацию насыщенных паров калия определяли по температуре резервуара ячейки согласно [5]. Диапазон изменения концентрации атомов калия $N_K=(2,73 \cdot 10^{15}-2,03 \cdot 10^{16})$ см $^{-3}$ и молекул $N_{K_2}=(8,52 \cdot 10^{13}-1,21 \cdot 10^{14})$ см $^{-3}$.

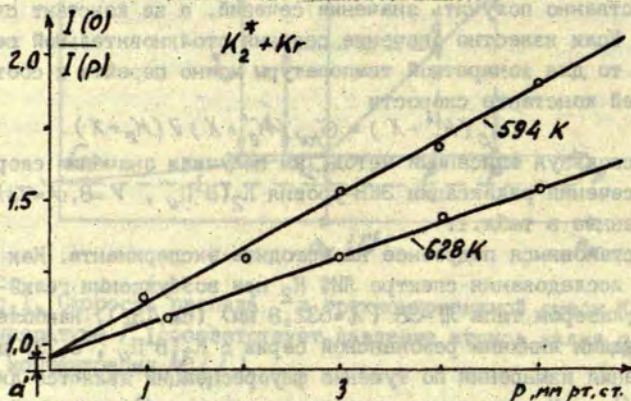


Рис.2. Зависимость $I(0)/I(p)$ от давления p инертного газа Kr при двух температурах резервуара ячейки с металлическим калием. Прямая, проведенная по методу наименьших квадратов через экспериментальные точки, пересекает ось ординат при значении α' .

Из графика зависимости $I(0)/I(p)$ от давления p инертного газа Kr при двух температурах 594 и 628 К. (рис.2) видно, что если через экспериментальные точки по методу наименьших квадратов провести прямую, то она пересечет ось ординат при значении α' , отличающемся от единицы. Это может быть связано с процессами, которые не относятся к тушению флуоресценции, а могут быть вызваны, например, проявлением оптической накачки основного состояния "опустошением" (см. [3]). Такой процесс нельзя полностью исключить, несмотря на наличие фильтров, ослабляющих лазерный луч примерно в 10 раз. Более сильное ослабление нецелесообразно из-за слишком малой интенсивности ЛИФ при низких температурах. Возможны и другие причины (например, связанные с фоном). Чисто тушащие процес-

сы происходят при высоком давлении благородного газа ($p \geq 1$ мм рт.ст.), и поэтому

$$\frac{J(0)}{J(p)} = a' + bp = a'(1 + \frac{b}{a'}p) = a'(1 + b'p) \quad (9)$$

Поскольку значение a' мало отличалось от единицы (реально $a' = 0,92-0,96$), то это в самом худшем случае могло внести в определение сечения погрешность не более (5-8)%.

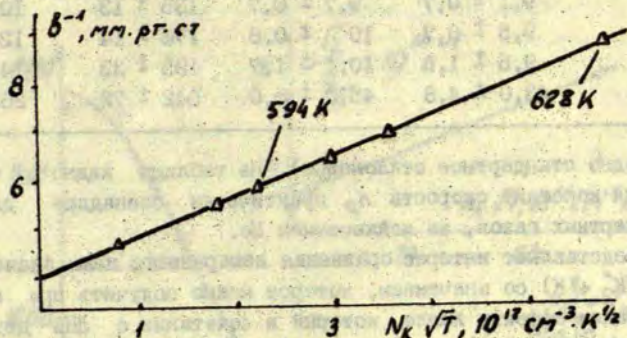


Рис.3. Зависимость величины $(b')^{-1}$, обратной коэффициенту наклона пр.ых Штерна-Фольмера, от произведения $N_K \sqrt{T}$ при добавлении инертного газа Kr . Две указанные точки соответствуют прямым на рис.2.

Полученные таким образом значения b' использовались при построении зависимости $1/b'$ от произведения $N_K \sqrt{T}$. На рис.3 приведена типичная зависимость $(b')^{-1}$ от $N_K \sqrt{T}$ при добавке Kr . Линейная аппроксимация экспериментальных значений по выражению (8) позволила получить значение эффективного суммарного сечения дезактивации $K_2(B'\Pi_u, v'=8, J'=73)$ при соударениях с атомами Kr , равное $\sigma_{tot}(K_2^* + Kr) = (176 \pm 14) \text{ \AA}^2$ (здесь погрешность означает одно стандартное отклонение). Величина $\tau_{sp}^{-1} = \tau_{sp} = 11,6$ нс взята согласно данным [14].

В табл. I приведены результаты измерения σ_{tot} для всех пяти инертных газов. Значение сечения $\sigma_{tot}(K_2 + K) = (642 \pm 72) \text{ \AA}^2$, приведенное в табл. I, рассчитано как среднее по всем сечениям, полученным для каждого инертного газа (погрешность

Таблица I

Константы скорости и сечения релаксации при соударении K_2^* (B/μ , 8, 73) с атомами

Атом - партнер	$K_p \cdot 10^{-10}, \text{с}^{-1} \cdot \text{см}^3$		$\sigma_{tot}(K_2^* + X),$ $\text{\AA}^2$	$\sigma_c,$ $\text{\AA}^2$
	при 555 К	при 628 К		
He	$15,0 \pm 1,2$	$16,7 \pm 1,3$	87 ± 7	53
	$11,0 \pm 0,9$	$14 \pm 1,1$	126 ± 12	66
	$9,1 \pm 0,7$	$9,7 \pm 0,7$	136 ± 13	105
	$9,5 \pm 0,7$	$10 \pm 0,8$	176 ± 14	120
Xe	$9,5 \pm 1,6$	$10,1 \pm 1,7$	195 ± 33	141
K	$43,0 \pm 4,8$	$45,0 \pm 5,0$	642 ± 72	263

также одно стандартное отклонение). Из таблицы видно, что значения констант скорости K_p практически совпадают для всех инертных газов, за исключением He.

Представляет интерес сравнение измеренного нами значения $\sigma_{tot}(K_2^* + K)$ со значением, которое можно получить при использовании эффекта Ханле, который в сочетании с ЛИФ двухатомных молекул был впервые применен в работе /15/. Для этого мы измерили зависимость степени линейной поляризации ЛИФ $P = (I_{\parallel} - I_{\perp}) / (I_{\parallel} + I_{\perp})$ от величины магнитного поля B (см. рис. 4). Измерения проводили для уровня $K_2(B/\mu, 6, 18)$; идентификация КВ-чисел приводится согласно данным из работы /16/. Уровень с минимальным значением $J' = 18$ при возбуждении линией 632,8 нм выбран для того, чтобы эффект Ханле $P(B)$ разыгрывался при наименьших значениях индукции магнитного поля B , так как фактор Ланде $g_J = 1/J'(J'+1)$ (см. /15/). Необходимая величина индукции магнитного поля (до 0,8 Тл) может быть достигнута с помощью имевшегося в нашем распоряжении электромагнита с зазором равным 4,5 см.

Характерный вид сигнал Ханле приведен на рис. 4 (точки). Сигналы обрабатывали по выражению

$$P(B) = \frac{P(0)}{1 + 4(\mu_0 g_J B / \hbar \Gamma_2)^2 + F}, \quad (10)$$

в котором Γ_2 - скорость разрушения выстраивания; N_B - магнетон Бора; F - подложка сигнала. При обработке варьировали значения $\Gamma_2/g_{J'}$, $P(0)$, F . Полученные таким образом значения $\Gamma_2/g_{J'}$, приведены на рис. 4 в зависимости от $N_K \sqrt{T}$. Температуру изменяли в диапазоне (470-607) К. Линейная аппроксимация позволила согласно $\Gamma_2 = \Gamma_{sp} + G_2 \bar{V} (K_2 + K) N_K$ определить сечение разрушения выстраивания $G_2 (K_2 + K) = (1000 \pm 300) \text{ \AA}^2$ и спонтанное время жизни $\tau_{sp} = (10,4 \pm 1,0) \text{ нс}$.

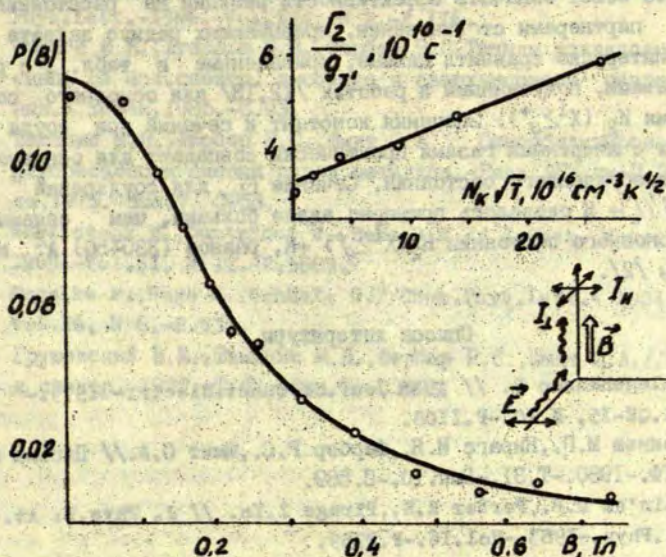


Рис. 4. Зависимость степени линейной поляризации P для ЛИФ с уровня K_2 (B/μ_B , 6, 18) от магнитного поля B , полученная по изображенной рядом схеме эксперимента. Вверху справа приведена зависимость от $N_K \sqrt{T}$ скорости релаксации выстраивания Γ_2 отнесенной к фактору Ланде уровня $g_{J'}$.

Следует отметить, что полученное значение сечения в пределах погрешностей эксперимента совпадает с приведенным в табл. I значением $G_{tot} (K_2 + K)$, полученным методом тушения ЛИФ.

В последнем столбце табл. I приведены значения сечения захвата σ_c , рассчитанные по методу, аналогичному описанному в работе В.В.Грушевского с сотр./17/, в предположении вандер-ваальсовского потенциала сталкивающихся партнеров. Из таблицы видно, что для соударений $K_2(B^1\Pi_u)$ с инертными газами рассчитанные сечения примерно в 1,5 раза меньше измеренных экспериментально, что следует считать хорошим совпадением для столь приближенной оценки. Для соударений $K_2^* + K$ сечение σ_c примерно втрое меньше полученного экспериментально. Это может означать эффективность реакции на расстояниях между партнерами столкновения, превышающих радиус захвата.

Интересно сравнить данные, приведенные в табл. I с результатами, полученными в работах /12,13/ для основного состояния $K_2(X^1\Sigma_g^+)$. Значения констант и сечений при соударениях с инертными газами практически совпадают для основного и возбужденного состояний. Сечение σ_{tot} для соударений $K_2^*(B^1\Pi_u) + K$ оказалось примерно вдвое большим, чем сечение для основного состояния $K_2(X^1\Sigma_g^+) + K$, равное $(330 \pm 50) \text{ \AA}^2$ по данным /2/.

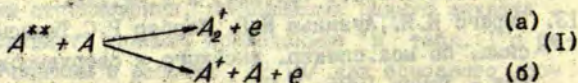
Список литературы

1. Wellegehausen B. // IEEE Jour. of Quant. Electr. - 1979. - Vol. QE-15, N 10. - P. 1108.
2. Аузиньш М.П., Пирагс И.Я., Фербер Р.С., Шмит О.А. // Письма в ЖЭТФ. - 1980. - Т. 31. - Вып. 10. - С. 589.
3. Auzin'sh M.P., Ferber R.S., Pirags I.Ya. // J. Phys. B: At. Mol. Phys. - 1983. - Vol. 16. - P. 2759.
4. Isaksen S., Ramanujam P.S. // J. Chem. Phys. - 1978. - Vol. 69, N 5. - P. 2259.
5. Несмеянов А.Н. Давление пара химических элементов. - М.: АН СССР, 1961. - 395 с.
6. Baumgartner G., Demtröder W., Stock M. // Z. Phys. - 1970. - Vol. 232. - P. 462.
7. Tango W.J., Zare R.N. // J. Chem. Phys. - 1970. - Vol. 53, N 8. - P. 3094.
8. Lemont S., Giniger R., Flynn G.W. // J. Chem. Phys. - 1977. - Vol. 66, N 10. - P. 4509.

9. Демтрёдер В. Лазерная спектроскопия: Основные принципы и техника эксперимента. Пер. с англ./Под ред. И.И. Соболева.-М.: Наука, 1985.- 608 с.
10. Kraulinya E.K., Koreikina E.K., Janson M.L.//Chem. Phys. Lett.-1976.-Vol.39, -N 3.-P.565.
11. Пирагс И.Я., Фербер Р.С., Харья Я.А. Тезисы докладов IX Всесоюзн. конф. по физ. электр. и атомн. столкн. Рига, 1984.- С.127.
12. Auzin'sh M.P., Ferber R.S., Narys Ya.A., Pirags I.Ya.//Chem. Phys. Lett.-1986.-Vol.124, N 2.-P.116.
13. Пирагс И.Я., Аузиньш М.П., Фербер Р.С. Тезисы докладов Всес. симп. по мол. спектр. высокого и сверхвысокого разреше- ния.- Томск, 1985.-С.93.
14. Таманис М.Я., Фербер Р.С., Шмит О.А. Сенсibilизированная флуоресценция смесей паров металлов.-Рига: ЛГУ им.П.Стуч- ки, 1979.-Вып.7.-С.53.
15. McClintock M., Demtröder W., Zare R.N.// J.Chem. Phys.- 1969.-Vol.51, N 12.-P.5509.
16. Engelke F., Hage H., Cohnhile U.//Chem. Phys. Lett.- 1984.- Vol.16, N 6.-P.535.
17. Грушевский В.Б., Таманис М.Я., Фербер Р.С., Шмит О.А.//Опт. и спектр.-1977.-Т.42.-Вып.5.-С.993.

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ СТОЛКНОВИТЕЛЬНОЙ ИОНИЗАЦИИ ПРИ
СЕЛЕКТИВНОМ ОПТИЧЕСКОМ ВОЗБУЖДЕНИИ ПУЧКА АТОМОВ МЕТАЛЛОВ

В последние годы в Проспектной лаборатории спектроскопии ЛГУ им. П. Стучки был выполнен цикл работ по исследованию процессов ионизации при столкновениях оптически возбужденных атомов A^{**} с собственными атомами A в основном состоянии



для лития, натрия и бария /1-12/. Эксперименты проводились в условиях эффузионного атомного пучка. Применение пучковой методики для исследования процессов такого типа позволяет значительно расширить круг изучаемых объектов, недоступных для исследований в паронаполненной ячейке вследствие их химической агрессивности при высоких температурах. Кроме того, пучковая методика наилучшим образом приспособлена для регистрации и масс-анализа заряженных продуктов реакций.

Ранее процессы такого типа с участием nP -атомов элементов I группы исследовались для калия ($n=6-14$) /13/, рубидия ($n=7-14$) /14/ и цезия ($n=9-15$) /15/ в паронаполненной ячейке, для натрия ($n=5-15$) /16/ - в пересекающихся пучках. Качественно характер зависимостей констант скоростей ионизации K_i от n в этих работах совпадает, все они проходят через максимум.

Авторы работы /17/ наблюдали монотонный рост константы скорости реакции (I) nP -атомов цезия для $n=7-40$ в условиях эксперимента, близких к условиям работы /15/. Авторы /18/ предположили, что в условиях работы /17/ переход в ионизационный континуум осуществляется через промежуточные близлежащие состояния в результате многократных столкновений возбужденных атомов с атомами в основном состоянии. Предложенная в /18/ диффузионная модель ионизации подтверждает отмеченный авторами /17/ монотонный характер зависимости константы ско-

рости ионизации от n .

Были выполнены эксперименты по ступенчатому лазерному возбуждению паров элементов II группы - кальция, стронция и бария /19,20/. Выявлены некоторые уровни, с которых эффективно идет процесс столкновительной ионизации, однако константы скоростей этих процессов определены не были.

Теоретические модели реакции (I) были предложены в работах Думана и Шматова /21/ и Михайлова и Янева /22/ (в зарубежной литературе часто используется термин "модель" *DSMJ*). Основное упрощающее предположение, сделанное авторами /21,22/ и позволившее им в рамках теории возмущений найти аналитические выражения для сечений и констант скоростей, заключалось в том, что ионизация происходит на больших межъядерных расстояниях. Это предположение оправдано в том случае, когда один из сталкивающихся атомов находится в состоянии, имеющем большое значение главного квантового числа ($n \gg 1$). При этом для описания поведения термов системы в исходном и конечном состояниях оправдано применение асимптотической теории /23/, в рамках которой энергии термов можно записать в следующем виде:

$$U_i(^2\Sigma_u^+) = -\frac{\alpha}{2R^4} + \frac{\Delta(R)}{2};$$

$$U_f(^2\Sigma_g^+) = -\frac{\alpha}{2R^4} - \frac{\Delta(R)}{2},$$

где R - расстояние между сталкивающимися партнерами (здесь и далее используется атомная система единиц); α - поляризуемость атома в основном состоянии; $\Delta(R)$ - энергия обменного взаимодействия поля со своим атомом /23/.

Выражение для константы скорости процесса (I) при энергии столкновения E имеет вид /21/:

$$K_i(E) = \frac{cg}{2f} \int_0^\infty R^4 [\Delta(R)]^2 \sigma_{\text{фн}}(\epsilon) \sqrt{1 - \frac{U_i(R)}{E}} d\epsilon \quad (2)$$

при условии $\Delta(R) = E_n + \epsilon$.

Здесь $E_n = 1/2n_{\text{эф}}^2$ - энергия связи высоковозбужденного электрона; ϵ - энергия электронов, образующихся в результате ионизации; $\sigma_{\text{фн}}(\epsilon)$ - эффективное сечение фотоионизации атома A виртуальным фотоном энергии $\Delta(R)$; c - скорость света;

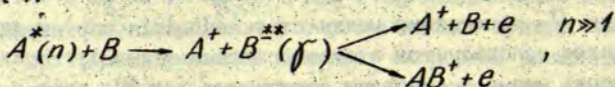
$g = g_f / g_A g_{A^{**}}$, где g_A , $g_{A^{**}}$, g_f - статистические веса A , A^{**} и конечного электронного состояния. При наличии определенного распределения сталкивающихся частиц по относительным скоростям $f(E)$ полная константа скорости ионизации (I)

$$K_i = \int_{U_i(R_n)}^{\infty} K_i(E) f(E) dE, \quad (3)$$

где R_n - точка пересечения термов. Как видно из уравнения (2), конечный результат сильно зависит от используемых эффективных сечений фотоионизации.

Расчеты, выполненные в рамках данной теории, дали хорошее согласие с экспериментальными данными [14, 15], полученными в условиях паронаполненной ячейки.

Пресняковым и Уланцевым [24] был предложен механизм ионизации высоковозбужденного атома за счет захвата электрона в автоионизационное состояние отрицательного иона. Поскольку атомы щелочных элементов в основном состоянии обладают сходством с электроном, то стабильные и автоионизационные состояния отрицательного иона, влияя на ширину и сдвиг ридберговских уровней при столкновениях высоковозбужденных атомов с невозбужденными, могут вносить свой вклад в процессы ионизации. В работе [24] ионизация ридберговского атома рассматривается как перезарядка в автоионизационное состояние отрицательного иона:



где f - метастабильное состояние, лежащее в непрерывном спектре. Модель применима при больших значениях n , для которых экспериментальные данные в литературе отсутствуют.

В настоящей работе были выполнены систематические исследования процессов столкновительной ионизации (I) с участием атомов лития, натрия и бария.

На рис. I приведены полученные нами значения констант скоростей K_i реакции (I) для лития и натрия в зависимости от эффективного главного квантового числа $n_{\text{эф}}$ в полулогарифмическом масштабе. При расчетах использовались значения сил осцилляторов f исследованных переходов, рекомендованные

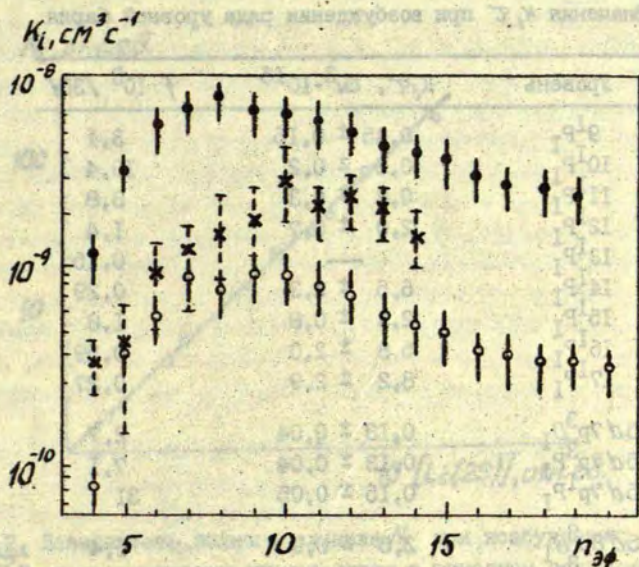


Рис.1. Зависимость константы скорости процесса (1) от $n_{\text{эф}}$ при возбуждении nP -атомов: $\bullet$ - литий, $T=1130 \text{ K}$; $\circ$ - натрий, $T=720 \text{ K}$; $\times$ - натрий, результаты работы /16/.

в работе /25/, и радиационные времена жизни τ из работ /26-28/. Для больших значений n проводилась экстраполяция по известным τ с помощью степенной функции. Качественно эти зависимости $K(n_{\text{эф}})$ для условий однонаправленного пучка согласуются с данными для калия, рубидия и цезия, полученными в условиях паронаполненной ячейки /13-15/ и для натрия в пересекающихся пучках /16/ (результаты этой работы также представлены на рис.1). Следует, однако, заметить, что непосредственное сравнение результатов экспериментов различных типов (ячейка, однонаправленный пучок, пересекающиеся пучки) не вполне корректно из-за существенного различия распределений сталкивающихся частиц по скоростям их относительного движения /29/.

Данные о радиационных временах жизни τ для уровней ато-

Таблица I

Значения $K_i \tau$ при возбуждении ряда уровней бария

Уровень	$K_i \tau$, $\text{см}^3 \cdot 10^{16}$	$f \cdot 10^3 / 30/$
9^1P_I	$0,45 \pm 0,15$	3,1
10^1P_I	$0,5 \pm 0,2$	10,4
11^1P_I	$0,8 \pm 0,3$	3,8
12^1P_I	$2,0 \pm 0,7$	1,4
13^1P_I	---	0,15
14^1P_I	$6,5 \pm 2,3$	0,29
15^1P_I	$2,3 \pm 0,8$	1,8
16^1P_I	$5,8 \pm 2,0$	0,59
17^1P_I	$8,2 \pm 2,9$	0,27
$5d7p^3D_I$	$0,13 \pm 0,04$	2,7
$5d7p^3P_I$	$0,13 \pm 0,04$	7,1
$5d7p^1P_I$	$0,15 \pm 0,05$	31
$5d8p^3D_I$	$2,6 \pm 0,9$	1,4
$5d8p^3P_I$	$1,8 \pm 0,6$	2,2

мов бария, при возбуждении которых мы наблюдали образование ионов, в литературе отсутствуют, поэтому мы смогли определить лишь произведения $K_i \tau$ (табл. I). Исключение составляет уровень $Ba(8^1P_I)$, для которого измерено в работе [28]. Соответствующее значение $K_i(8^1P_I) = (1,5 \pm 0,5) \cdot 10^{-9} \text{ см}^3/\text{с}$ при $T=1230 \text{ К}$. В табл. I приведены также использованные нами значения сил осцилляторов f соответствующих переходов /30/.

Погрешности, приведенные на рис. I и в табл. I, обусловлены, в основном, систематическими ошибками измерений, которые существенно превосходят случайные.

Для лития нам удалось измерить в довольно широких пределах зависимость сигналов столкновительной ионизации N_i от концентрации атомов $/Li(2S)/$ в основном состоянии. На рис. 2 приведена такая зависимость, наблюдаемая при возбуждении уровня 5P (масштаб логарифмический). Экспериментальные точки хорошо укладываются на прямую, соответствующую квадра-

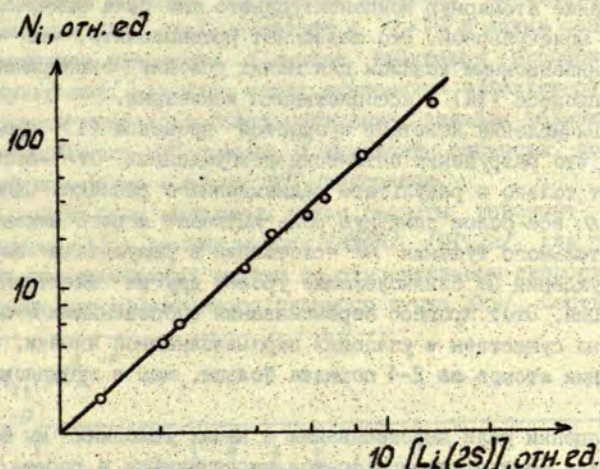


Рис. 2. Зависимость полного сигнала N_i при возбуждении уровня 5^2P от концентрации атомов лития в основном состоянии $[Li(2S)]$.

тичной зависимости. В то же время наблюдаемый сигнал ионизации линейно зависит от мощности возбуждающего излучения. Следовательно, квадратичная зависимость $N_i [Li(2S)]$ указывает на то, что ионы образуются в результате реакции $Li(5P) + Li(2S)$. Изменение концентрации атомов в пучке обусловлено изменением температуры источника от 1000 до 1300 К. Поэтому квадратичная зависимость $N_i [Li(2S)]$ указывает также на то, что в данном диапазоне изменений условий эксперимента константа скорости столкновительной ионизации не обнаруживает сколь-нибудь заметной температурной зависимости. Аналогичная картина наблюдается и при возбуждении уровня $4P$.

Проведение детальных количественных масс-спектрометрических измерений является весьма сложной экспериментальной задачей. В рамках настоящей работы были выполнены лишь предварительные измерения, которые, однако, позволили сделать ряд выводов об эффективности различных каналов процесса (1). Так, при $n \leq 10$ в ионном спектре натрия наблюдалась лишь моле-

кулярная компонента. При больших значениях n можно было наблюдать также атомарную компоненту, однако она была значительно слабее молекулярной. Это позволяет предположить, что основным ионизационным каналом для наших условий эксперимента является процесс (Ia) - ассоциативная ионизация.

При вычислении констант скоростей процесса (I) предполагалось, что разрушение оптически возбужденных nP -атомов происходит только в результате радиационного распада. Однако с ростом n все более заметную роль начинает играть механизм безызлучательного тушения nP -состояний в результате передачи возбуждения на близлежащие уровни других электронных конфигураций. Этот процесс перемешивания собственными атомами особенно существен в условиях паронаполненной ячейки, где концентрации атомов на 2-4 порядка больше, чем в эффузионном пучке.

Для оценки роли перемешивания в наших условиях мы воспользовались результатами расчетов, выполненными в работе /31/. Аналогичная модель одновременно и независимо была предложена в работе /32/. Авторами представлена квазиклассическая теория неупругих переходов между ридберговскими уровнями атома, которые происходят в результате рассеяния нейтральной частицы на слабосвязанном электроном. Анализ процессов n - и l -перемешивания проведен в модели псевдопотенциала Ферми и учитывает изменение энергии высоковозбужденного атома в рассматриваемых переходах. Результаты расчетов /31,32/ неплохо согласуются с данными экспериментов по тушению высоковозбужденных атомов щелочных металлов инертными газами.

Расчеты, выполненные нами по этой методике для условий эффузионного пучка, показали, что уже при сравнительно малых концентрациях атомов, характерных для наших экспериментальных условий, скорость столкновительной дезактивации сравнима со скоростью радиационного распада. Если механизм столкновительного тушения является преобладающим, то вместо τ при расчетах констант скоростей K_i следует использовать $\bar{\tau}$ - среднее время жизни блока возбужденных состояний для данного значения n /33/. Использование $\bar{\tau}$ вместо τ для определения K_i приводит для натрия к поправке $\leq 25\%$, которая максимальна при $n=12-14$. Для лития эта поправка монотонно рас-

тет и для $n=17-19$ достигает 30-45%.

Таким образом, полученные значения константы скорости ионизации для $n \geq 12$ в натрии и $n \geq 16$ в литии занимают промежуточное положение в смысле трактовки экспериментальных результатов, находясь между значениями эффективной константы скорости ионизации блока состояний, лежащих вблизи первично-возбужденного nP -уровня, и константы скорости, соответствующей ионизации с этого nP -состояния.

Нами были выполнены также расчеты констант скоростей реакции (I) в рамках модели *DSMJ* [21,22] для распределений сталкивающихся частиц по относительным скоростям, характерным для диффузионного атомного пучка [29]. Соответствующие

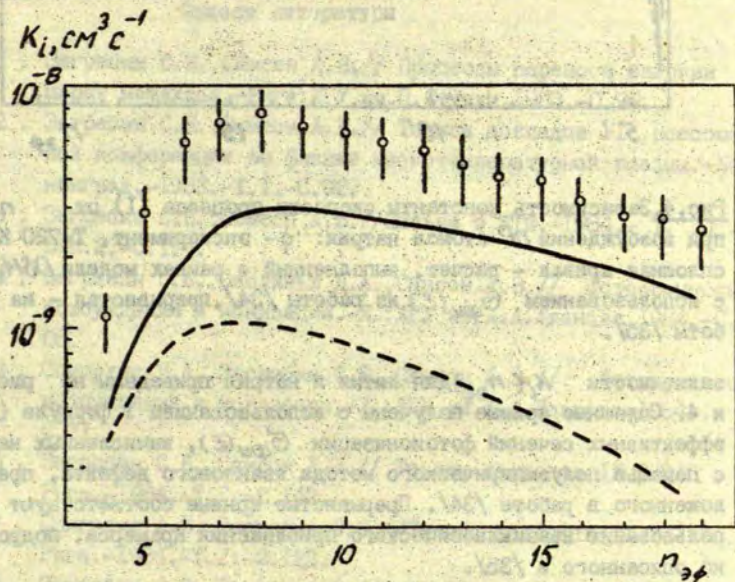


Рис.3. Зависимость константы скорости процесса (I) от $n_{\text{эф}}$ при возбуждении nP -атомов лития: ϕ - эксперимент, $T=1130\text{K}$; сплошная кривая - расчет, выполненный в рамках модели *DSMJ* с использованием $\sigma_{\text{фи}}(\varepsilon)$ из работы [34], прерывистая - из работы [35].

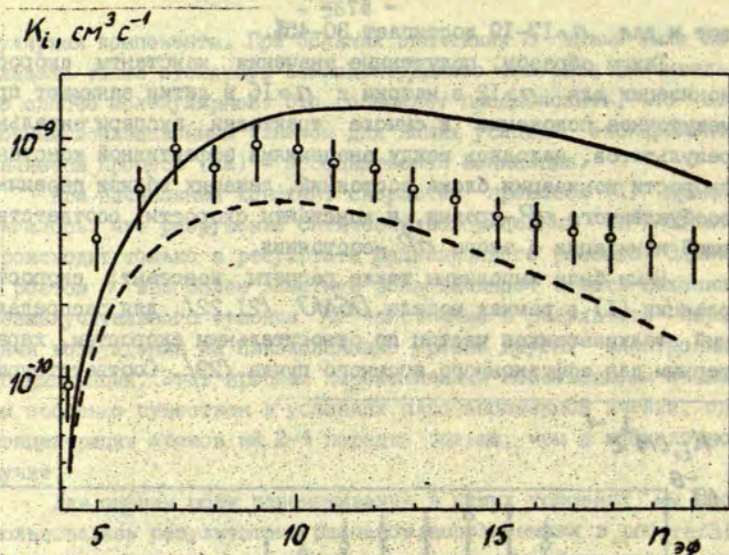


Рис. 4. Зависимость константы скорости процесса (I) от $n_{эф}$ при возбуждении nP -атомов натрия: ϕ - эксперимент, $T=720$ К; сплошная кривая - расчет, выполненный в рамках модели DSMJ с использованием $\sigma_{фи}(\epsilon)$ из работы /34/, прерывистая - из работы /35/.

зависимости $K_i(n_{эф})$ для лития и натрия приведены на рис. 3 и 4. Сплошные кривые получены с использованием в формуле (2) эффективных сечений фотоионизации $\sigma_{фи}(\epsilon)$, вычисленных нами с помощью полуэмпирического метода квантового дефекта, предложенного в работе /34/. Прерывистые кривые соответствуют использованию квазиклассического приближения Крамерса, подробно описанного в /35/.

Из рассмотрения рис. 3 и 4 можно сделать следующие выводы:

I. Качественный вид экспериментальных и теоретических зависимостей $K_i(n_{эф})$ совпадает: сначала наблюдается быстрый рост, затем более медленный спад; положение максимумов отли-

чается незначительно. 2. При малых n теоретические значения констант скоростей во всех случаях меньше экспериментальных. 3. Результаты расчетов по одной и той же модели $DSMJ$, но с использованием различных $G_{\text{фи}}(\epsilon)$ значительно расходятся; для больших значений n они превосходят расхождения с данными эксперимента.

В дальнейшем несомненный интерес представляло бы исследование ионизационных столкновений с участием ридберговских атомов с большими n , поскольку для них, согласно модели /24/, должен наблюдаться рост константы скорости ионизации. Кроме того, для лучшего понимания механизмов протекания исследованных процессов необходимо проведение детальных количественных масс-спектрометрических измерений.

Список литературы

1. Загребин С.Б., Самсон А.В. // Процессы переноса энергии в парах металлов. - Рига: ЛГУ им. П. Стучки, 1983. - С. 90.
2. Загребин С.Б., Самсон А.В. // Тезисы докладов VI Всесоюзной конференции по физике низкотемпературной плазмы. - Ленинград. - 1983. - Т. I. - С. 92.
3. Загребин С.Б., Самсон А.В. // Письма в ЖТФ. - 1984. - Т. 10. - Вып. 2. - С. 114.
4. Загребин С.Б., Озолиньш Д.А., Самсон А.В. // Фотопроцессы возбуждения и ионизации. - Л.: ЛГУ им. А.А. Жданова, 1984. - С. 68.
5. Спигулис Я.А., Загребин С.Б., Самсон А.В. // Фотопроцессы возбуждения и ионизации. - Л.: ЛГУ им. А.А. Жданова, 1984. - С. 71.
6. Загребин С.Б., Самсон А.В. // Тезисы докладов IX ВКЭАС. - Рига. - 1984. - Т. I. - С. 142.
7. Спигулис Я.А., Загребин С.Б. // Тезисы докладов IX ВКЭАС. - Рига. - 1984. - Т. 2. - С. 123.
8. Загребин С.Б., Самсон А.В. // Процессы переноса энергии в парах металлов. - Рига: ЛГУ им. П. Стучки, 1985. - С. 44.
9. Спигулис Я.А. // Процессы переноса энергии в парах металлов. - Рига: ЛГУ им. П. Стучки, 1985. - С. 58.
10. Zagrebin S.B., Samson A.V. // J. Phys. B: At. Mol. Phys. - 1985. - Vol. 18, N 8. - P. L217.

11. Загребин С.Б., Самсон А.В. // Письма в ЖТФ. - 1985. - Т. II. - Вып. II. - С. 680.
12. Загребин С.Б., Самсон А.В. // Изв. АН Латв. ССР. - Сер. физ. и техн. наук. - 1985. - № 6. - С. 118.
13. Ключарев А.Н., Лазаренко А.В. // Опт. и спектр. - 1980. - Т. 48. - Вып. 2. - С. 412.
14. Ключарев А.Н., Лазаренко А.В., Шеверев В.А. // Опт. и спектр. 1979. - Т. 46. - Вып. 6. - С. 1157.
15. Девдариани А.З., Ключарев А.Н., Лазаренко А.В., Шеверев В.А. // Письма в ЖТФ. - 1978. - Вып. 4. - С. 1013.
16. Boulmer J., Bonanno R., Weiner J. // J. Phys. B: At. Mol. Phys. - 1983. - Vol. 16, N 16. - P. 3015.
17. Шведас В.И., Стакишайтис И.-А.В. // Литовский физический сборник. - 1984. - Т. 24, № 1. - С. 102.
18. Каулакис Б.П., Чижонас А.Р., Шведас В.И. // Литовский физический сборник. - 1984. - Т. 24, № 3. - С. 48.
19. Paisner J.A., Conway J.G., Worden E.F. // JOSA - 1978. - Vol. 6, N 5. - P. 640.
20. Solarz R.W., Worden E.F., Paisner J.A. // Opt. Eng. - 1980. - Vol. 19, N 1. - P. 85.
21. Думан Е.Л., Шматов И.П. // ЖТФ. - 1980. - Т. 78. - Вып. 6. - С. 2116.
22. Mihailov A., Janev R.K. // J. Phys. B: At. Mol. Phys. - 1981. - Vol. 14, N 10. - P. 1639.
23. Смирнов Б.М. Асимптотические методы в теории атомных столкновений. - М.: Атомиздат. - 1974. - 294 с.
24. Пресняков Л.П., Уланцев А.Д. // Краткие сообщения по физике. - М.: ФИАН им. П.Н. Лебедева. - 1984. - № 1. - С. 38.
25. Шабанова Л.Н. // Фотопроцессы возбуждения и ионизации. - Л.: ЛГУ им. А.А. Жданова. 1984. - С. 8.
26. Viemont E. // Physica, Ser. C - 1976. - Vol. 85. - N2. - P. 393.
27. Груздев П.Ф., Афанасьева Н.В. // Опт. и спектр. - 1980. - Т. 49. - Вып. 4. - С. 625.
28. Ошеревич А.Л., Веролайнен Я.Ф., Николаич А.Я. и др. // Прикладная спектроскопия. - М.: АН СССР, 1977. - С. 33.
29. Шеверев В.А. Процессы ионизации при оптическом возбуждении некоторых атомов второй группы и их применение для создания эффективной предионизации объемного разряда повышенного давления. - Дис. ... канд. - Л., 1984. - 202 с.

30. Пенкин Н.П., Шабанова Л.Н. // Опт. и спектр. - 1962. - Т.12. Вып.1. - С.3.
31. Лебедев В.С., Марченко В.С. // ЖЭТФ. - 1985. - Т.88. - Вып. 3. - С.754.
32. Kaulakis B. // J. Phys. B: At.Mol.Phys. - 1985. - Vol. 18, N 5. - P.LI67.
33. Бете Г., Салпите́р Э. Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами. - М.: ГИФМЛ. - 1960. - 562 с.
34. Burgess A., Seaton M. // Mon.Not.Roy.Astr.Soc. - 1960. - Vol.120, N 2. - P.121.
35. Собельман И.И. Введение в теорию атомных спектров. - М.: Наука. - 1977. - С.263.

Е.И.Дашевская, Е.Е.Никитин
ИХФ АН СССР
(Москва)

ПОЛЯРИЗАЦИОННЫЕ ЯВЛЕНИЯ ПРИ АТОМНЫХ СТОЛКНОВЕНИЯХ

Индукцированные столкновениями неупругие переходы между атомными термами всегда сопровождаются изменением поляризационного состояния атомов. Это изменение, проявляющееся в трансформации атомных поляризационных моментов при рассеянии, обусловлено тем, что при образовании квазимолекулы AB ось квантования электронных угловых моментов двух сталкивающихся атомов A и B поворачивается от некоторого направления фиксированного в пространстве (и заданного обычно условиями эксперимента), к направлению молекулярной оси $\vec{l}$. Так как квазимолекула поворачивается в плоскости столкновения на некоторый угол, то направление вектора $\vec{l}$ меняется за время одного столкновения. Что касается ориентации этой плоскости в пространстве, то она определяется начальным $\vec{k}$ и конечным $\vec{k}'$ волновыми векторами относительного движения и, следовательно, задается в той мере, в какой фиксированы эти векторы.

Наиболее полное задание условий рассеяния осуществляется в экспериментах по измерению дифференциальных сечений. В этом случае положение плоскости рассеяния точно фиксировано векторами $\vec{k}$ и $\vec{k}'$, и естественной осью квантования для описания таких процессов служит вектор $[\vec{k}, \vec{k}']$. В экспериментах такого типа можно наиболее подробно проследить связь между характеристиками одного столкновения (матрица рассеяния) и характеристиками столкновительного ансамбля (дифференциальное сечение трансформации поляризации).

Менее детальная информация может быть извлечена из экспериментов по анизотропному, но аксиально-симметричному рассеянию. В этом случае возможные плоскости столкновения ориентированы равновероятно по всем направлениям нормаль к этой плоскости, которая остается перпендикулярной вектору $\vec{k}$, так что естественной осью квантования для описания таких процессов является вектор $\vec{k}$. Такое рассеяние характеризуется интегральными сечениями трансформации поляризации, которые ши-

роко используются для интерпретации экспериментов, проводимых в условиях анизотропной ячейки (например, в разрядной трубке).

Наконец, столкновения атомов в изотропных условиях отбечают полностью равновероятному распределению плоскостей столкновения в пространстве. В таких столкновениях проявляются только простейшие поляризационные явления - разрушение из начально существующей поляризации. Характеристикой таких процессов служат интегральные сечения деполяризации.

Рассмотрим неупругое столкновение атома A с бесструктурным сферически-симметричным атомом B (B - атом инертного газа). Будем характеризовать состояние атома A полным электронным угловым моментом j (для простоты мы опускаем все остальные квантовые числа электронного терма, а также предполагаем отсутствие сверхтонкого взаимодействия) и поляризационными моментами $\rho_s^z(j)$ матрицы плотности (z - ранг момента, s - номер сферической компоненты). Сферические компоненты $\rho_s^z(j)$ известным образом выражаются через матричные элементы $\rho_{m\bar{m}}^j$ матрицы плотности в "обычном" представлении [1]:

$$\rho_s^z(j) = \sum_{m, \bar{m}} (-1)^{j-m} \begin{bmatrix} j & j & z \\ m & -\bar{m} & s \end{bmatrix} \rho_{m\bar{m}}^j \quad (1)$$

В идеальном эксперименте по рассеянию

$$A(j, \hat{j}) + B \longrightarrow A(j', \hat{j}') + B \quad (2)$$

измеряется скорость возрастания сферической компоненты $\rho_s^z(j')$ при рассеянии атома A на углы θ, φ в системе центра масс при условии, что начальный поток характеризовался матрицей плотности $\hat{\rho} = \{\rho_s^z(j)\}$. Указанный процесс описывается следующим кинетическим уравнением:

$$\frac{d}{dt} \rho_s^z(j'; \theta, \varphi) = \sum_{z, s} N v q_{s's}^{z'z} (j'j; \theta, \varphi) \rho_s^z(j), \quad (3)$$

в которое входят дифференциальные сечения трансформации поляризации (ДСТП) $q_{s's}^{z'z} (j'j; \theta, \varphi)$, относительная скорость v и число рассеивающих центров N . Если связать систему координат, в которой задается матрица плотности, с плоскостью рассеяния, то азимутальная зависимость ДСТП пропадает. Мы выберем систему так, чтобы ось x была направлена против вектора

$\vec{k}$, ось y расположена в плоскости рассеяния и направлена в сторону детектора, а ось z была бы нормальна плоскости рассеяния. Тогда индекс s задает сферическую компоненту именно относительно этой оси. Для наблюдателя, для которого положительное направление оси z соответствует направлению вверх, описанное выше рассеяние представляется как рассеяние вправо. В той же системе координат можно рассмотреть и рассеяние влево, так что для этих двух возможностей кинетическое уравнение (3) принимает вид

$$\frac{d}{dt} \rho_{s's'}^{z'z}(\vec{j}; \theta, \pm) = \sum_{z,s} N v q_{s's}^{z'z}(\vec{j}; j, \theta, \pm) \rho_s^z(j), \quad (4)$$

причем $\pm$ обозначают рассеяние вправо и влево соответственно.

Симметрия задачи рассеяния в плоскости позволяет установить правила отбора для ДСТП, а также связь сечений для рассеяния вправо и влево. Используя инвариантность задачи рассеяния при отражении в плоскости рассеяния и зеркальную связь между направлениями вправо и влево, нетрудно получить

$$q_{s's}^{z'z}(\theta, \pm) = 0 \quad \text{при } (-1)^{s'-s} = -1; \quad (5)$$

$$q_{s's}^{z'z}(\theta, \pm) = (-1)^{z'-z} q_{-s'-s}^{z'z}(\theta, \mp).$$

Наиболее просто правила отбора (5) проявляются в порождении ориентации ($z' = 1$, $s' = 0$): векторы, характеризующие ориентацию, направлены вверх или вниз при рассеянии неполяризованных атомов ($z = 0$, $s = 0$) вправо или влево соответственно, однако возникающее выстраивание одинаково для рассеяния вправо и влево [2].

Проследим теперь переход от рассеяния в плоскости к рассеянию в пучке. Для осуществления этого перехода удобно при расчете ДСТП выбрать в качестве оси квантования не ось z , а ось x . Новые сечения, в которых индекс проекции обозначен через ρ , выражаются через старые преобразованием поворота на угол $\pi/2$ вокруг оси y :

$$q_{\rho'\rho}^{z'z}(\theta, \pm) = \sum_{s's} \Delta_{s'\rho'}^{z'} \Delta_{s\rho}^z q_{s's}^{z'z}(\theta, \pm) \Delta_{sp}^z. \quad (6)$$

Здесь Δ - частные значения D -функций Вигнера (см. [3]).

Правила отбора (5) для сечений $q_{\rho'\rho}^{z'z}$ принимают следующий

вид:

$$q_{p'p}^{z'z}(\theta, \pm) = (-1)^{z'-z} q_{p'-p}^{z'z}(\theta, \pm); \quad (7)$$

$$q_{p'p}^{z'z}(\theta, \pm) = (-1)^{p'-p} q_{p'p}^{z'z}(\theta, \mp),$$

откуда, в частности, следует, что рассеянные, но вначале не поляризованные атомы не приобретают ориентацию вдоль вектора относительной скорости.

Квантование на ось $\hat{p}$ удобно для описания столкновения в плоскости, наклоненной под углом φ к первоначальной плоскости рассеяния. Соответствующие сечения

$$\tilde{q}_{p'p}^{z'z}(\theta, \varphi) = \exp[i\varphi(p'-p)] q_{p'p}^{z'z}(\theta, +) \quad (8)$$

Интегральные сечения переноса поляризации (ИСПП) определяют изменение поляризации пучка при однократном рассеянии. Эти сечения могут быть рассчитаны через ДСП посредством интегрирования по всем углам рассеяния и вычисления сечения для свободного пролета, при котором состояние поляризации не меняется. Таким путем, учитывая (8) при интегрировании по φ , найдем

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \left[\int_0^{\pi} \tilde{q}_{p'p}^{z'z}(j'j; \theta, \varphi) \sin\theta d\theta = \int_0^{\pi} \delta_{z'z} \delta_{pp} \delta_{jj} b db \right] =$$

$$= \delta_{pp} 2\pi \left[\int_0^{\pi} q_{p'p}^{z'z}(j'j; \theta, +) \sin\theta d\theta - \delta_{z'z} \delta_{jj} \int_0^{\pi} b db \right] = \delta_{pp} \sigma_p^{z'z}(v). \quad (9)$$

Возникающие в правой части уравнения (9) ИСПП диагональны по p (следствие цилиндрической симметрии) и зависят от величины и направления вектора начальной скорости $\vec{v}$, так как он определяет ось симметрии пучка (ось квантования $\hat{p}$). Дополнительное (кроме диагональности по p) правило отбора для $\sigma_p^{z'z}$ следует из симметрии задачи относительно отражения в плоскости, проходящей через $\vec{v}$. Требование инвариантности дает

$$\sigma_p^{z'z}(\vec{v}) = (-1)^{z'-z} \sigma_p^{z'z}, \quad (10)$$

что является интегральным выражением свойства симметрии (7).

Из выражения (10) видно, например, что в неполяризованном потоке ($z=0, \rho=0$) может порождаться аксиально симметричное выстраивание ($z'=2, \rho=0$), но не ориентация ($z'=1, \rho=0$).

Если усреднить ИСПП по всем направлениям оси столкновения, то получится величина, диагональная по индексу z . Соответствующее сечение описывает скорость гибели (при $j'=j$) или переноса (при $j' \neq j$) тензорной компоненты ранга z , причем эта скорость не зависит от номера проекции. Результат усреднения по всем направлениям эквивалентен, конечно, результату усреднения $\sigma_p^{z'z}(\vec{V})$ по всем проекциям ρ , так что

$$\langle \sigma_p^{z'z}(\vec{V}) \rangle_p = \frac{\delta_{zz'}}{(2z+1)} \sum_{\rho} \sigma_p^{z'z}(\vec{V}) = \delta_{zz'} \sigma^z(V). \quad (11)$$

Интегральное сечение релаксации (ИСП) $\sigma^z(V)$ зависит только от величины относительной скорости и от одного индекса z (а также от j' и j). Данные о влиянии повышения симметрии в ряду групп $C_s \rightarrow C_{\infty V} \rightarrow K$ и соответствующем редуцировании сечений представлено в табл. I. Заметим, что в рассматриваемом случае (когерентность только между компонентами атомного термина определенной четности) операция инверсии не существенна, поскольку относительно ее все компоненты $\rho_p^z(j)$ инвариантны.

Перейдем теперь к вопросу, в какой степени детали межатомного взаимодействия влияют на величины различных сечений или, если мы будем рассматривать обратную задачу восстановления взаимодействия по сечениям, какая информация может быть извлечена из экспериментов, в которых исследуются поляризационные характеристики рассеяния. При этом для простоты ограничимся рассмотрением адиабатически изолированного атомного состояния j , т.е. будем считать возможными переходы только между m -компонентами одного атомного термина j .

Простейшая задача заключается в вычислении ИСП. Она решалась для различных значений j в ряде работ методом прицельного параметра в предположении, что кориолисово взаимодействие между терминами может быть вычислено в базисе функций свободного атома [4]. Для достаточно крутых потенциалов (например, ван-дер-ваальсова) удовлетворительное приближение к

Поляризационные эффекты и их описание при рассеянии

Условия столкновения	Процесс	Сечение
Рассеяние в объеме (полная изотропия, трехмерная группа вращений K). Нет выделенных направлений	Релаксация моментов ρ^z при сохранении ρ . Скорость релаксации не зависит от ρ : $v' = v$ $\rho' = \rho$	Интегральное сечение деполаризации $\sigma^z(v)$
Рассеяние в пучке (аксиальная симметрия, двумерная группа вращений $C_{\infty v}$). Одно выделенное направление $\vec{v}$	Трансформация моментов ρ^z при сохранении ρ : $v' \neq v$ $\rho' = \rho$	Интегральное сечение переноса поляризации $\sigma_p^{v'v}(\vec{v})$
Рассеяние в плоскости (симметрия отражения в плоскости, группа C_s). Два выделенных направления $\vec{K}$ и $\vec{K}'$	Трансформация моментов ρ^z : $v' \neq v$ $s' \neq s$	Дифференциальное сечение трансформации поляризации $q_{s's}^{v'v}(\theta, \vec{v})$

численному расчету может быть получено в рамках так называемого приближения внезапной сшивки [5]. В основе этого приближения лежит представление, что атомные функции преобразуются в молекулярные на некотором расстоянии R_M путем простой проектировки. Результат проектировки зависит от угла между молекулярной осью и вектором скорости в момент проектировки. Следовательно, искривление траектории в принципе может заметно влиять на величины ИСР. Метод внезапной сшивки дает простой способ оценки этого эффекта и в этом смысле позволяет выйти за рамки приближения прямолинейной траектории. Оказывается, что сечения ИСР заметно зависят от углов рассеяния атомов при их адиабатическом движении по молекулярным термам [5]. В этом отношении задача о деполаризации существенно от-

личается от других задач резонансного рассеяния : например , при вычислении интегрального сечения резонансной перезарядки искривление траекторий движения ядер в квазимолекулярной области весьма слабо влияет на окончательный результат /6/.

Выполним ряд расчетов ИСПП методом прицельного параметра. Наиболее интересны расчеты сечений трансформации поляризации, например, превращения выстраивания в ориентацию /4, 7-10/. Вместе с тем метод прицельного параметра предсказывает невозможность поляризации изолированного состояния $j = 1/2$.

Методом внезапной сшивки можно получить значения сечений порождения поляризации при учете различного искривления траекторий на различных термах /11/, но нельзя описать трансформацию одного типа поляризации в другой. Причина этого противоречия была понята при исследовании эталонной задачи рассеяния для состояния $j = 1/2$. Оказалось, что существенным моментом в трансформации поляризации является конечная протяженность области превращения атомных функций в молекулярные. Этот факт корректно учитывается при численном интегрировании уравнений рассеяния вдоль прямолинейной траектории, однако именно это приближение вводит дополнительную, не существующую в реальности симметрию задачи, результатом которой является исчезновение сечений возникновения поляризации. Метод сшивки, учитывающий внезапность превращения атомных функций в молекулярные и позволяющий описать этот эффект в приближении локально-линейной траектории /13, 14/, является, вероятно, наилучшим подходом для расчета ИСПП. Его приближенный вариант позволяет понять ряд закономерностей в поведении сечений СПП, обнаруженных при численных расчетах /14/.

Перейдем, наконец, к ДСПП. Они описывают ряд эффектов, простейшим из которых является зависимость полного сечения рассеяния от поляризационного состояния атомов до столкновения (набор сечений Q_{sp}^{00}) или от сечения порождения поляризации при рассеянии неполяризованных атомов (набор сечений Q_{sp}^{10}). Эти эффекты подробно исследованы для простейшего случая $j = 1/2$ /13, 14/.

Особенно интересно то обстоятельство, что ряд явлений невозможно интерпретировать в рамках однотоекторного описа-

ния движения атомов. Простейшая полуклассическая интерпретация этих явлений требует привлечения представлений об одно-временном движении квазимолекулы по нескольким траекториям, которые исходят из различных точек фронта падающей плоской волны и после рассеяния идут параллельно, создавая таким образом условия для интерференции. Быстрые (штокельберговские) осцилляции обусловлены интерференцией волн, распространяющихся по разным молекулярным термам, а их медленная модуляция - плавной зависимостью вероятности превращения атомных функций в молекулярные на некотором расстоянии R_M в области шириной ΔR_M .

В заключение отметим, что экспериментальное исследование поляризационных явлений на уровне дифференциальных сечений затруднено именно тем, что ряд этих явлений проявляется в быстрых осцилляциях, которые весьма трудно детектировать. Можно, однако, предполагать, что использование техники совпадений совместно с приготовлением поляризованных атомов при лазерном возбуждении в ближайшее время позволит получить достаточно точные результаты, для интерпретации которых требуется достаточно точное знание ДСП.

Список литературы

1. Чайка М.П. Интерференция вырожденных атомных столкновений. - Л.: ЛГУ им. А.А. Жданова. - 1975. - 192 с.
2. Дашевская Е.И., Никитин Е.Е. // Хим. физика. - 1985. - Т.4. С.1174.
3. Варшалович Д.А., Москалев А.Н., Херсонский В.К. Квантовая теория углового момента. - Л.: Наука. - 1975. - 440 с.
4. Ребане В.Н. Столкновительная релаксация в мультипольных моментах матрицы плотности и ее проявление в атомной спектроскопии: Дис. ... д-ра физ.-мат. наук. Л. - 1980. - 348 с.
5. Дашевская Е.И. Релаксационные процессы в атомах щелочных металлов при оптической накачке и сенсibilизированной флуоресценции: Дис. ... д-ра физ.-мат. наук. - М. 1980. - 254 с.

6. Галицкий В.М., Никитин Е.Е., Смирнов Б.П. Теория столкновений атомных частиц.-М.:Наука.-1981.- 254 с.
7. Петрашень А.Г., Ребане В.Н., Ребане Т.К.// Опт. и спектр.-1983.-Т.55.-Вып.5.-С.819.
8. Петрашень А.Г., Ребане В.Н., Ребане Т.К.// Опт. и спектр.-1984.-Т.55.-Вып.2.-С.376.
9. Петрашень А.Г., Ребане В.Н., Ребане Т.К. // ЖЭТФ. - 1984.-Т.87, № 1.-С.147.
10. Ребане В.Н., Ребане Т.К. // Опт. и спектр. - 1985.-Т. 59. Вып.4.-С.771.
11. Дашевская Е.И., Никитин Е.Е., Уманский С.Я.// Хим.физика.-1984.-Т.3, № 5.- С.627.
12. Никитин Е.Е. // Хим. физика.-1986.-Т.3.-№ 6.-С.792.
13. Никитин Е.Е. // Опт. и спектр. - 1985. - Т. 58. - Вып.5. С.864.
14. Никитин Е.Е. // Хим. физика.-1985.-Т.4, № 3.-С.310.

Н.Г. Лукомский, В.А. Полищук, М.П. Чайка
ЛГУ им. А.А. Жданова
(Ленинград)

АНОМАЛЬНОЕ МАГНИТНОЕ ВРАЩЕНИЕ В РАЗРЯДЕ НЕОНА, НАВЕДЕННОЕ АНИЗОТРОПНЫМИ СТОЛКНОВЕНИЯМИ

Исследования проводились в неоне на линии с длиной волны 607,4 нм. Цилиндрическая кювета с разрядом помещалась между скрещенными поляризаторами в аксиальное магнитное поле. Регистрировалась зависимость интенсивности прошедшего через кювету излучения одночастотного перестраиваемого лазера на красителе, настроенного примерно на центр линии, от величины напряженности магнитного поля (H). Как видно из рис. I, в окрестности H=0, где магнитное поле еще не раздвинуло зеемановские подуровни на расстояние, превышающее ширину уровня $3\rho_1$, имеется ярко выраженный резонанс: с ростом напряженности поля интенсивность прошедшего через кювету света растет, достигает максимума, а затем падает и выходит на параболическую подложку, обязанную своим происхождением обычному эффекту Зеемана.

Авторы работ /1-3/ наблюдали этот эффект и интерпретировали его как переход выстраивания в ориентацию, наведенную анизотропными столкновениями в присутствии слабого магнитного поля. Предложенная в этих работах модель учитывает: 1) скрытое выстраивание поглощающего уровня; 2) анизотропию столкновений; 3) поворот выстраивания в магнитном поле.

В настоящей работе показывается, что сигналы самоориентации могут дать информацию о константах распада.

Величина ориентации ρ_0' зависит от напряженности и направления магнитного поля. Эту зависимость можно найти, решив уравнение движения статистического тензора. Решение уравнений для ρ_0' в предположении одинаковых констант затухания ориентации и выстраивания $\gamma_1 = \gamma_2 = \gamma$ имеет вид /2/:

$$\rho_0' = F \frac{\beta \Omega}{\gamma^3} \sin^2 \psi \left[\frac{\sin^2 \psi}{1 + 4\Omega^2/\gamma^2} + \frac{\cos^2 \psi}{1 + \Omega^2/\gamma^2} \right], \quad (1)$$

где ψ - угол между направлением скорости атома и направле-

нием магнитного поля H , направленным по оси квантования; Ω - ларморовская частота; $\gamma = \gamma_{\text{пог}} + \gamma_{\text{ст}}$; β - коэффициент столкновительной связи между выстраиванием и ориентацией; F - накачка, вызывающая выстраивание в системе координат, связанной с движущимся атомом. Остальные компоненты ориентации $\rho'_{11} = 0$.

В выражение (1) входит зависимость от угла ψ . В эксперименте наблюдается некоторый усредненный по углам ψ сигнал, и только для центра доплеровской линии угол ψ для всех "наблюдаемых" атомов одинаков и равен $\pi/2$. При таком угле в выражении (1) второй член в скобках обращается в нуль, а величина ρ'_0 достигает максимума в полях $\Omega = \gamma/2$. Это позволяет использовать зарегистрированные в центре линии сигналы для измерения констант распада выстраивания поглощающего состояния. Появление ориентации приводит, как и эффект Фарадея (Макалузо-Корбино), к двум явлениям - к вращению плоскости поляризации и к циркулярному дихроизму. Но проявление этих эффектов в зависимости от частоты внутри доплеровской линии различное: вызванное ориентацией вращение, которое мы называем аномальным, достигает максимума на тех частотах, на которых фарадеевское вращение обращается в нуль. В центре линии аномальное вращение равно нулю. В центре линии фарадеевский дихроизм обращается в нуль, а аномальный достигает максимума.

В результате вращения плоскости поляризации и циркулярного дихроизма луч лазера, пройдя через квету, меняет состояние поляризации и частично проходит через выходной линейный поляризатор, скрещенный с первым поляризатором.

Выражение для прошедшего через нашу систему света можно записать в виде

$$\vec{E}_{\text{вых}} = \hat{A} \hat{T}^{-1} \hat{R} \hat{T} \vec{E}_{\text{вх}}; \quad (2)$$

где $\hat{A}$ - матрица анализатора в собственной (линейной) системе координат; $\hat{T}$ - оператор преобразования от линейной поляризации к циркулярной; $\hat{R}$ - оператор, описывающий характеристики среды (в нашем случае - кветы с разрядом). Поскольку в центре линии имеет место только дихроизм, оператор среды можно записать в виде

$$\hat{R} = \begin{vmatrix} e^{-\kappa' l} & 0 \\ 0 & e^{-\kappa'' l} \end{vmatrix}, \quad (3)$$

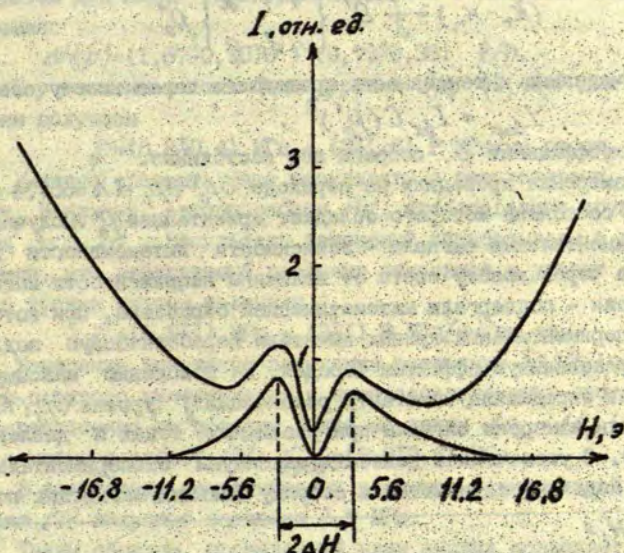


Рис. I. Пример экспериментальной зависимости интенсивности прошедшего света через кювету от величины магнитного поля. Некоторая асимметрия сигнала вызвана неточной "скрещенностью" анализатора с входным поляризатором.

где $K'_\pm$ - амплитудный коэффициент поглощения, связанный с энергетическим соотношением $K'_\pm = K_\pm / 2$. Интенсивность прошедшего через кювету света, учитывая два первых члена в разложении экспоненты,

$$I_{\text{вых}} = |E_{\text{вых}}|^2 \approx I_{\text{вх}} (K_+ - K_-)^2. \quad (4)$$

Величины K_+ и K_- легко можно найти из соотношения [4/

$$K(\vec{n}, \vec{e}) = \frac{I_{\text{вых}}}{I_{\text{вх}}} = D \sum_x (2x+1) \left\{ \begin{matrix} 1 & 1 & x \\ j_1 & j_2 & j_0 \end{matrix} \right\} \sum_q (-1)^q \rho_q^x \Phi_q^x(\vec{n}, \vec{e}), \quad (5)$$

где D - коэффициент пропорциональности.

Тогда для $K_+ - K_-$

$$(K_+ - K_-) = \frac{1}{3} D' \left\{ \begin{matrix} 1 & 1 & x \\ J_1 & J_1 & q \end{matrix} \right\} \rho_0' \quad (6)$$

и окончательно интенсивность прошедшего через ювету света

$$I_{\text{вых}} = I_{\text{вх}} C (\rho_0')^2, \quad (7)$$

где в коэффициент C собраны все постоянные.

Измерения проводили на переходе $3p_0 - 3p_1$ ($\lambda = 607,4$ нм), нижнее состояние которого обладает ориентацией ρ_0' . Полученные экспериментальные сигналы - зависимости интенсивности прошедшего через ювету света от величины напряженности магнитного поля - подвергали математической обработке, при которой из экспериментальных кривых вычитали параболическую подложку, обусловленную эффектом Фарадея. По положению максимумов сигналов определяли константу релаксации γ уровня $3p_1(1s_4)$.

Были измерены сигналы при различных токах и давлениях (рис.2). С увеличением давления максимумы экспериментальных кривых медленно сдвигаются в сторону больших магнитных полей H .

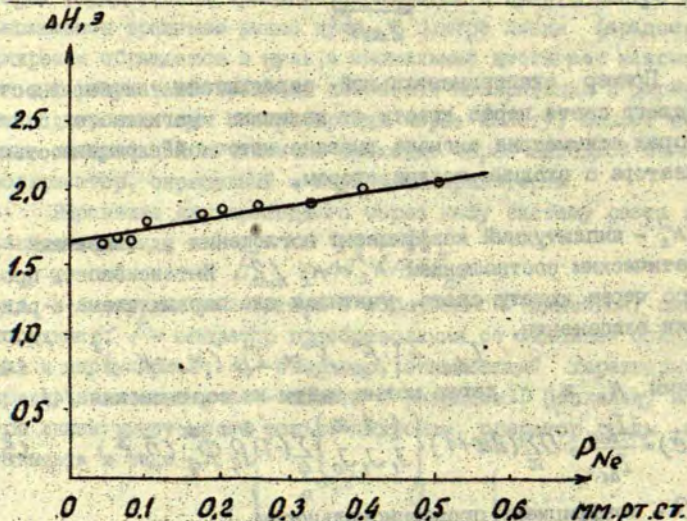


Рис.2. Зависимость ширины ΔH от давления неона. Ток разряда 60 мА.

При обработке результатов измерений методом наименьших квадратов для $\Delta H(\rho)$ (пропорциональной Ω) получено следующее значение:

$$\Delta H(\rho) = (1,67 \pm 0,10) \vartheta + (0,73 \pm 0,38) \text{ Р/Э.}$$

С учетом множителя Ланде уровня $3p_1$ (1,464) для полной ширины получаем

$$\gamma = (6,8 \pm 0,4) \text{ МГц} + (3 \pm 1,5) \text{ Р МГц/мм рт.ст.}$$

Уместно сравнить наши результаты с результатами других работ. Например, авторы работы /5/, исследовавшие другой переход $3s_2 - 2p_4$, результаты измерений обрабатывали в предположении, что наблюдаемый резонанс относится к уровню $3p_1$. Для этого уровня авторы получили

$$\gamma_2 = (6,3 \pm 1) \text{ МГц} + (2 \pm 1) \text{ Р МГц/мм рт.ст.}$$

Измерения константы затухания состояния $3p_1(1s_4)$ по сигналам скрытого выстраивания с вышерасположенных состояний и непосредственно по эффекту Ханле на линии $1s_4 - 1s_0$ ($\lambda = 74,3$ нм) описаны в работе /6/: $\gamma_{\text{раб}} = (7,0 \pm 0,6) \text{ МГц}$.

В результате теоретических расчетов радиационной ширины уровня /7/ получено значение 6,9 МГц.

Таким образом, проведенный нами анализ позволяет утверждать, что обнаруженное явление самоориентации может служить инструментом для получения информации о временах жизни и сечениях столкновений возбужденных состояний.

С п и с о к л и т е р а т у р ы

1. Лукомский Н.Г., Полищук В.А., Чайка М.П. // Опт. и спектр. - 1985. - Т.58. - Вып.2. - С.474.
2. Лукомский Н.Г., Полищук В.А., Чайка М.П. // Опт. и спектр. - 1985. - Т.59. - Вып.5. - С.1008.
3. Лукомский Н.Г., Полищук В.А., Чайка М.П. // Опт. и спектр. - 1986. - Т.60. - Вып.1. - С.20.
4. Чайка М.П. Интерференция вырожденных атомных состояний. - Л.: ЛГУ им.А.А.Жданова. - 1975. - 192 с.
5. Им Тхен-де, Сапрыкин Э.Г., Шелагин А.М. // Опт. и спектр. - 1973. - Т.35. - Вып.2. - С.202.
6. Казанцев С.А., Мищенко Е.Д., Телбизов П.К., Чайка М.П. // Опт. и спектр. - 1978. - 1.45. - Вып.4. - С.816.
7. Груздев П.Ф., Логинов А.В. // Опт. и спектр. - 1973. - Т.35. - Вып.1. - С.3.

К. К. Боярский, Е. Н. Котликов, О. В. Перчук
ЛГУ им. А. А. Жданова
(Ленинград)

ИССЛЕДОВАНИЕ СТОЛКНОВЕНИЙ С РАЗЛИЧНЫМИ СКОРОСТЯМИ ЧАСТИЦ В НЕОНЕ ПО СИГНАЛАМ ХАНЛЕ

В настоящей работе описываются результаты исследования зависимости ширин сигналов Ханле от скоростей сталкивающихся частиц. Показано, что эти измерения дают возможность определять уширение уровня и линии перехода столкновениями с частицами, обладающими заданной проекцией скорости. Исследования такого рода представляют интерес, так как позволяют определять тип взаимодействия сталкивающихся частиц /1/.

Описываемый эксперимент базируется на совмещении методов интерференции состояний и нелинейной лазерной спектроскопии и заключается в измерении методом пересечения уровней постоянной релаксации выстраивания как функции расстройки частоты линии поглощения и линии генерации. Монохроматическое лазерное излучение взаимодействует с теми атомами, проекция скорости которых на направление распространения лазерного излучения V_z удовлетворяет условию $V_z = \omega_0 - \omega_2/K = \Delta/K$, где ω_0 - частота линии поглощения, ω_2 - частота линии генерации, K - волновое число. Меняя частоту генерации, а следовательно, и среднюю скорость возбужденных атомов, можно исследовать уширение изучаемого уровня и уширение линии перехода столкновениями в зависимости от скорости сталкивающихся атомов /2,3/.

Уже первые попытки определения зависимости ширин сигналов Ханле $\Delta H_{1/2}$ от скорости V_z /2,3/ показали, что эти зависимости существуют, но они очень слабые. В связи с этим мы при проведении экспериментов большое внимание уделяли методике регистрации, накопления и обработки сигналов. Блок-схема использованной установки изображена на рис. 1. Установка включает одночастотный, перестраиваемый в пределах контура усиления гелий-неоновый лазер, генерирующий излучение на длине волны 1,15 мкм, внутрирезонаторную ячейку с исследуемым и буферными газами, систему регистрации спонтанного излучения

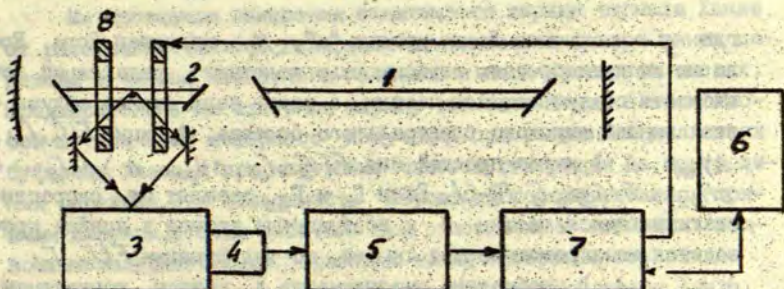


Рис.1. Блок-схема экспериментальной установки.

1 - гелий-неоновый лазер, 1,15 мкм, 2 - кювета с исследуемыми газами, 3 - монохроматор, 4 - фотоэлектрические умножители, 5 - система регистрации спонтанного излучения, 6 - ЭВМ "Электроника-60", 7 - блок сопряжения, 8 - катушки Гельмгольца, управляемые ЭВМ.

из ячейки и систему накопления и обработки результатов на базе микро-ЭВМ "Электроника-60". Использование ЭВМ для накопления и обработки данных позволило практически на порядок по сравнению с обычными методами регистрации сигналов Ханле [2, 3, 4] повысить точность измерений.

Исследования проводили традиционными [2-5] для наблюдения интерференции состояний методами. Флуоресценция наблюдалась через боковую стенку кюветы и регистрировалась зависимость интенсивности флуоресценции с уровня $2p_4$ неона (переход $2p_4 - 1s_2$) от магнитного поля H , накладываемого на кювету в направлении распространения лазерного излучения, при возбуждении лазерным излучением перехода $2s_2 - 2p_4$ неона. Сигналы, наблюдаемые параллельно и перпендикулярно вектору поляризации лазерного излучения, имели вид лоренцевских контуров, ширина которых на половине высоты $\Delta H_{1/2}$ связана со временем релаксации выстраивания Γ_a^{-1} , однородной шириной линии перехода $\Gamma_{ав}$, доплеровской шириной линии перехода $\Delta \nu_{Dop}$ и Δ некоторым соотношением

$$\Delta H_{1/2} = \hbar / 2g\mu_0 F(\bar{\Gamma}_a, \bar{\Gamma}_{ab}, \Delta\nu_{gon}, \Delta), \quad (I)$$

где g - множитель Ланде уровня "а", μ_0 - магнетон Бора. Если мы не пренебрегаем зависимостью констант релаксаций от скорости сталкивающихся частиц, а также если ячейка облучается линией широкого спектрального состава, функция $F(\bar{\Gamma}_a, \bar{\Gamma}_{ab}, \Delta\nu_{gon}, \Delta)$ имеет простой вид $F(\bar{\Gamma}_a, \bar{\Gamma}_{ab}, \Delta\nu_{gon}, \Delta) = \bar{\Gamma}_a$ и $\Delta H_{1/2} = \hbar / 2g\mu_0 \bar{\Gamma}_a$ [2-5]. Если Γ_a и Γ_{ab} зависят от скорости сталкивающихся частиц V и возбуждение атомов в ячейке проводится монохроматической линией, то вид функции $F(\bar{\Gamma}_a, \bar{\Gamma}_{ab}, \Delta\nu_{gon}, \Delta)$ необходимо рассчитывать в каждом конкретном случае. Для расчета явного вида $F(\bar{\Gamma}_a, \bar{\Gamma}_{ab}, \Delta\nu_{gon}, \Delta)$ необходимо предварительно определить сечение деполаризующих соударений для исследуемого уровня с буферными газами, уширение линии перехода $2s_2 - 2p_4$ и Δ .

Мы использовали в качестве буферных газов гелий, неон, аргон. В литературе отсутствовали данные об уширении линии перехода $2s_2 - 2p_4$ и уровня $2p_4$ с атомами аргона. Мы определили [6] для исследуемого уровня уширение деполаризующими столкновениями с атомами аргона по сигналам Ханле, а также уширение линии перехода $2s_2 - 2p_4$ по нелинейным резонансам насыщения. Результаты наших измерений приведены в табл. I, там же приведены данные по уширению линии перехода и уровня столкновениями с атомами неона и гелия, полученные нами и другими авторами [7, 8].

Таблица I

Уширения уровня $2p_4$ Ne деполаризующими столкновениями $\partial\bar{\Gamma}_a^o / \partial p$ и уширения столкновениями линии перехода $2s_2 - 2p_4$ в Ne ($\partial\bar{\Gamma}_{ab}^o / \partial p$) с атомами Ne, He и Ar, полученные в данной работе и авторами работ [7, 8].

	Ne* - Ne	Ne* - He	Ne* - Ar
	МГц/мм рт.ст.	МГц/мм рт.ст.	МГц/мм рт.ст.
$\partial\bar{\Gamma}_a^o / \partial p$	$3,4 \pm 0,2$	$5,7 \pm 0,2$	$6,3 \pm 0,5$
$\partial\bar{\Gamma}_{ab}^o / \partial p$	$9,8 \pm 0,5 / 7$	$60 \pm 7 / 8$	50 ± 15

Мы проводили измерения зависимости ширины сигнала Ханле от расстройки частоты генерации относительно центра линии перехода в чистом неоне, неон-гелиевой и неон-аргоновой смесях. Предварительно мы измеряли ширину сигналов Ханле в зависимости от мощности лазерного излучения при различных давлениях буферных газов и при настройке частоты генерации на центр линии перехода. Эти зависимости хорошо аппроксимировались прямыми линиями, т.е. мы работали при относительно небольших мощностях лазерного поля. Обработка таких измерений позволила нам в дальнейшем устранить полевое уширение сигналов Ханле.

В чистом неоне мы провели измерение зависимости $\Delta H_{1/2}$ от Δ при давлениях смеси 2, 3 и 4 мм рт.ст. На рис.2 приведены результаты измерения ширин $\Delta H_{1/2}$, экстраполированных к нулевой мощности лазерного поля, в зависимости от расстройки Δ , нормированной на доплеровскую ширину линии перехода. Используя в эксперименте изотопы неона 20 и 22, мы провели измерения при значениях $\Delta/\Delta\nu_{Dop}$ от 0 до 1,1. Как видно из рисунка, с ростом давления зависимость $\Delta H_{1/2}$ от $\Delta/\Delta\nu_{Dop}$ слабеет. При математической обработке этих зависимостей мы аппроксимировали их полиномом второй степени и по методу наименьших квадратов вычисляли коэффициенты полинома.

Аналогичные измерения и математическую обработку полученных результатов мы провели в гелий-неоновой смеси при соотношении компонентов $He:Ne = 10:1$ и общем давлении 1,2 и 3,5 мм рт.ст. и в неон-аргоновой смеси при давлении 1 мм рт.ст. и соотношении компонентов $Ne:Ar = 2:1$. Результаты измерений представлены на рис.3. В гелий-неоновой смеси, так же как и в чистом неоне, наблюдалась тенденция к уменьшению зависимости $\Delta H_{1/2}$ от $\Delta/\Delta\nu_{Dop}$ с ростом давления. Обращает на себя внимание тот факт, что если для неона значение полуширины $\Delta H_{1/2}$ с ростом $\Delta/\Delta\nu_{Dop}$ увеличивалось, то для неон-гелиевой и неон-аргоновой смесей оно уменьшалось. Это свидетельствует о различии типов взаимодействия при столкновениях неона с неоном и неона с гелием и аргонном.

Извлечение из полученных экспериментальных кривых (рис. 2 и 3) информации о зависимости Γ_a и Γ_{av} от $\Delta/\Delta\nu_{Dop}$, т.е. от скорости сталкивающихся частиц, представляет самостоя-

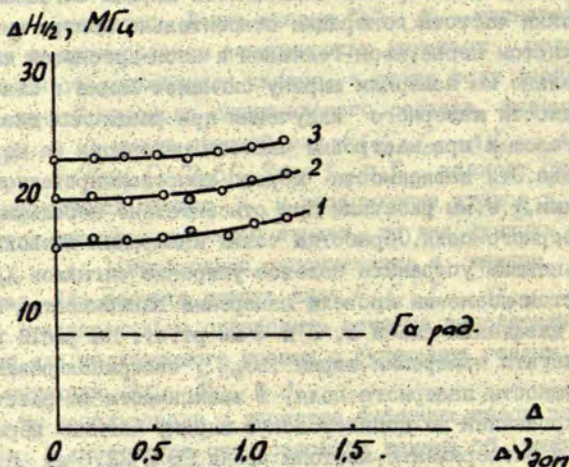


Рис.2. Экспериментальные зависимости ширин сигналов Ханле в неоне от частоты расстройки генерации при разных давлениях неона. 1 - $p=2$ мм рт.ст., 2 - $p=3$ мм рт.ст., 3 - $p=4$ мм рт.ст.

тельную и не всегда однозначную задачу.

Нам был проделан расчет формы сигналов Ханле монохроматическом возбуждении с учетом зависимости констант релаксации выстраивания и однородной ширины линии перехода от скорости сталкивающихся атомов. Расчет проводили в формализме неприводимых тензорных операторов [5] методом теории возмущений по лазерному полю. Лазерное поле считалось слабым. В этом случае форма сигналов Ханле полностью описывается поляризационными моментами $\rho_{\pm 2}^2$ во втором по лазерному полю порядке теории возмущений:

$$\rho_{+2}^2 + \rho_{-2}^2 \sim \text{Re} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-\frac{v^2}{u^2}} dv_x dv_y dv_z}{[\Gamma_{00} + i(\Delta \pm K v_z \pm \Omega)][\Gamma_0 + 2i\Omega]}, \quad (2)$$

где $Ku = \Delta \nu_{\text{дон}}$; $V^2 = V_x^2 + V_y^2 + V_z^2$.

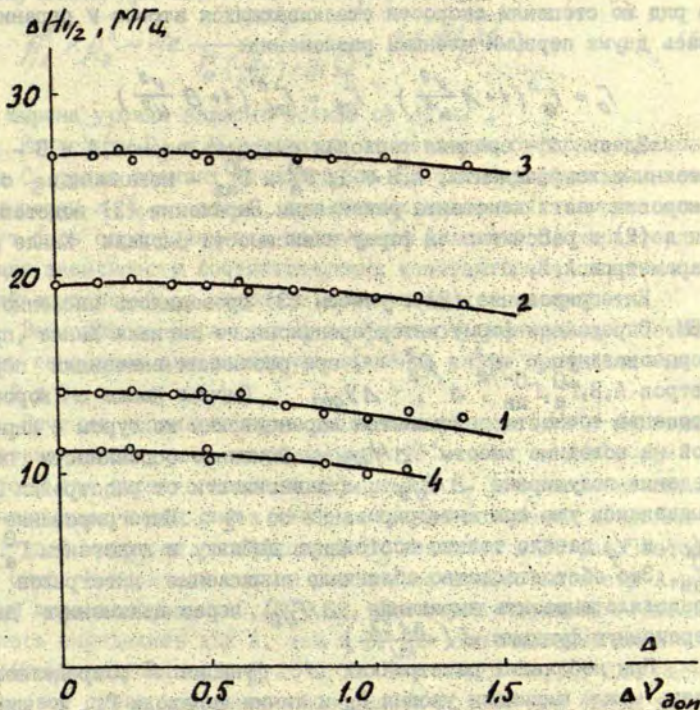


Рис.3. Зависимость ширин сигналов Ханле от частоты расстройки генерации относительно центра линии перехода для различных давлений неон-гелиевой (1,2,3) и неон-аргоновой (4) смесей.

1 - $p=1$ ммрт.ст., 2 - $p=2$ мм рт.ст., 3 - $p=3,5$ мм рт.ст., 4 - $p=1$ мм рт.ст.

Зависимость Γ_a и $\Gamma_{ав}$ от скорости сталкивающихся атомов мы вводили феноменологически, а не рассчитывали для определенного потенциала взаимодействия. Такой подход позволяет вычислить ρ_{r2}^2 , а затем привязать зависимость Γ_a и $\Gamma_{ав}$ от V

к произвольным потенциалам взаимодействия.

При вычислении $\rho_{\pm 2}^2$ мы считали, что константы релаксации выстраивания и ширина линии перехода слабо зависят от скорости сталкивающихся атомов, и поэтому при разложении их в ряд по степеням скорости сталкивающихся атомов V ограничились двумя первыми членами разложения:

$$\Gamma_a = \Gamma_a^0 (1 + A \frac{V^2}{u^2}), \quad \Gamma_{ab} = \Gamma_{ab}^0 (1 + B \frac{V^2}{u^2}). \quad (3)$$

Здесь u - средняя тепловая скорость атомов, A и B - постоянные коэффициенты, $A, B \ll 1$; Γ_a^0 и Γ_{ab}^0 - независимые от скорости части константы релаксации. Выражения (3) подставляли в (2) и рассчитывали форму зависимости сигнала Ханле от параметров A, B, Δ .

Интегрирование (2) с учетом (3) проводилось численно на ЭВМ. Определяли форму интерференционного сигнала Ханле, пропорциональную $\rho_{+2}^2 + \rho_{-2}^2$, при различных значениях параметров $A, B, \Gamma_a^0, \Gamma_{ab}^0, \Delta, \Delta y_{gan}$. Сигнал Ханле с хорошей степенью точности описывается лоренцевским ко-туром с шириной на половине высоты $\Delta H_{1/2}$. Основные особенности поведения полуширины $\Delta H_{1/2}$ в зависимости от расстройки Δ выявлялись уже при интегрировании по V_z . Интегрирование по V_x и V_y давало только постоянную добавку в константы Γ_a^0 и Γ_{ab}^0 . Это обстоятельство облегчало вычисление интегралов и позволяло выразить выражение $\Delta H_{1/2}$ через плазменную дисперсионную функцию $Z(\frac{\Delta \pm \Omega}{ku})$.

При небольших расстройках Δ функция F , определяющая связь между ширинами уровня Γ_a и линии перехода Γ_{ab} с шириной сигнала Ханле $\Delta H_{1/2}$ имеет вид, определяемый соотношением

$$\begin{aligned} \frac{\Delta H_{1/2}(\Delta) - \Delta H_{1/2}(\Delta=0)}{\Delta H_{1/2}(\Delta=0)} &= \frac{F(\Delta) - F(\Delta=0)}{F(\Delta=0)} = \\ &= A(C_1 + C_2 B) \left(\frac{\Delta}{ku} \right)^2, \end{aligned} \quad (4)$$

где C_1 и C_2 - численные коэффициенты, зависящие от $\Gamma_a^0, \Gamma_{ab}^0$ и

KU . Если $A=B=0$, то $F = \Gamma_a$. В предельном случае, когда доплеровская ширина линии много больше однородной ширины линии перехода, т.е. $\Gamma_{av} \ll \Delta \nu_{Dop}$, $C_1=1$, $C_2=0$, можно получить и аналитическое выражение для величины $\rho_{+2}^2 + \rho_{-2}^2$, совпадающее с получаемым при численном интегрировании:

$$\rho_{+2}^2 + \rho_{-2}^2 \sim Re \frac{1}{\Gamma_a \left(\frac{\Delta}{KU} \right) + 2i\Omega} Z \left(\frac{\Delta \pm \Omega}{KU} \right), \quad (5)$$

где ширина уровня зависит только от Δ/KU .

Константы Γ_a и Γ_{av} зависят от давления буферных газов, C_1 и C_2 также зависят от давления. По экспериментальным зависимостям $\Delta H_{1/2}$ от Δ при разных давлениях в принципе могут быть определены как постоянные A , так и B , характерные зависимости соответствующих констант релаксаций и сечений соударений от скорости сталкивающихся частиц.

Зависимость ширин сигналов Ханле от расстройки частоты линии генерации для различных давлений газов приведена на рис. 2 и 3.

Сечение деполаризующих столкновений типа $Ne^* - Ne$ значительно меньше, чем столкновений $Ne^* - He$ и $Ne^* - Ar$, поэтому для чистого неона коэффициенты C_1 и C_2 мало меняются с давлением, а для смеси $Ne^* - He$ при изменении давления от 1 до 3 мм рт.ст. коэффициент C_2 меняется в 20 раз. Поэтому для чистого неона мы смогли рассчитать только параметр A , который оказался равным $0,10 \pm 0,02$. Для гелий-неоновой смеси удалось определить как A , так и B . Для столкновений типа $Ne^* - He$ мы получили: $A = -0,25 \pm 0,05$, $B = -0,25 \pm 0,15$. Для неон-аргоновой смеси измерения проводились только при одном давлении и был оценен параметр $A = -0,08$.

Полученное значение параметра A для чистого неона согласуется с предположением о ван-дерваальсовом типе взаимодействия. Отрицательные значения параметров A и B при столкновениях $Ne^* - He$ и $Ne^* - Ar$ указывают на другой тип взаимодействия. Для расчета значений параметров A и B , полученных в эксперименте, можно использовать обменный потенциал.

Таким образом установлено, что по сигналам Ханле при возбуждении монохроматическим излучением можно получить ин-

формацию о зависимости как ширины уровня, так и ширины линий перехода от скорости сталкивающихся частиц. Зависимость $\Gamma_{\text{ав}}$ от V может быть получена из измерений при фиксированном давлении смеси буферных газов. Для получения информации о зависимости $\Gamma_{\text{ав}}$ от V необходимо проводить измерения при различных давлениях смеси буферных газов.

1. Список литературы

1. Летохов В.С., Чеботаев В.П. Принципы нелинейной лазерной спектроскопии. - М.: Наука. - 1975. - 279 с.
2. Котликов Е.Н., Токарев В.И. // Опт. и спектр. - 1982. - Т. 53. - Вып. 4. - С. 606.
3. Котликов Е.Н., Дмитриева И.В., Николаев А.Ю., Токарев В.И. Процессы переноса энергии в парах металлов. - Рига: ЛГУ им. П. Стучки, 1983. - С. 70.
4. Котликов Е.Н. // Вестник ЛГУ. - 1976. - Т. 10. - С. 159.
5. Калитеевский Н.И., Котликов Е.Н., Чайка М.П. // Квантовая электроника. - 1977. - Т. 9. - С. 1949.
6. Перчук О.В. Исследования уширения линии I, 15 мкм неона столкновениями с различными скоростями по сигналам Ханле. Автореф. дис. ... канд. физ.-мат. наук. - 1985. - 16 с.
7. Бетеров И.М., Матюгин Ю.А., Чеботаев В.П. // Опт. и спектр. - 1970. - Т. 28. - Вып. 2. - С. 357.
8. Войтович А.П., Шкадаревич А.П. // Опт. и спектр. - 1976. - Т. 41. - Вып. 4. - С. 627.

М.П.Аузиньш
ЛГУ им.П.Стучки
(Рига)

К ВОПРОСУ О СТРУКТУРЕ НЕЛИНЕЙНОГО СИГНАЛА ХАНЛЕ ОСНОВНОГО СОСТОЯНИЯ

Известно [1], что наложение на ансамбль атомов или молекул магнитного поля $\vec{H}$ в направлении, перпендикулярном $\vec{E}$ -вектору света, индуцирующего в ансамбль флуоресценцию (см. рис. 1) приводит к уменьшению степени поляризации этой флуоресценции (эффект Ханле). Такое явление наблюдалось для линейного по световому полю отклика системы при возбуждении слабым светом. Однако, если индуцирующее флуоресценцию световое поле не является слабым, то в результате оптической накачки нижнего уровня перехода во флуоресценции проявляется наряду с эффектом Ханле возбужденного уровня также эффект Ханле нижнего уровня [2]. Он проявляется следующим образом. Оптическая накачка в отсутствие магнитного поля приводит к уменьшению степени линейной поляризации флуоресценции. При включении магнитного поля, как правило, сначала наблюдается увеличение степени поляризации флуоресценции - эффект Ханле нижнего уровня, а при дальнейшем увеличении напряженности поля в силу вступает эффект Ханле верхнего уровня и степень поляризации уменьшается.

При достаточно сильной оптической накачке нижнего уровня перехода, которая имеет место в случае использования лазеров, в нелинейном сигнале Ханле нижнего уровня в нуле магнитного поля начинают проявляться дополнительные структуры. Впервые ее наблюдали при исследовании флуоресценции с уровня $3s_2$ неона при оптической накачке на переходе $2p_4 - 3s_2$ лазером, работающим на линии 632,8 нм [3]. При анализе эксперимента в аппарате поляризационных моментов (ПМ) было доказано,

что эта структура обусловлена проявлением гексадекапольного момента $\varphi^{(4)}$, созданного на уровне $2p_4/4$.

В работе /5/ на основании анализа оптической накачки частиц с большим угловым моментом J в аппарате плотности вероятности была предсказана аналогичная структура в сигнале Ханле и для классических частиц. В последнем случае анализ в аппарате ПМ не проводился, но по аналогии с ранее рассмотренным случаем структура была связана с проявлением гексадекапольного момента. Экспериментально для состояния с $J=73$ такая структура была обнаружена на молекулах K_2 в работах /6,7/. На основании анализа результатов численного моделирования оптической накачки молекул, проведенного в аппарате ПМ, было сделано заключение /8/, что наличие структуры в сигнале Ханле основного состояния молекул указывает на создание на нижнем уровне перехода ПМ шестого ранга $\varphi^{(6)}$. Однако известно, что ПМ ранга выше 4 непосредственно во флуоресценции проявляться не могут /9/. В связи с этим возникают вопросы: во-первых, как и через какие ПМ во флуоресценции проявляется ПМ $\varphi^{(6)}$, и, во-вторых, при каких угловых моментах происходит переход от определяющей роли ПМ ранга $\kappa=4/3$ к определяющей роли ПМ ранга $\kappa=6/8$ в дополнительной структуре сигнала Ханле нижнего уровня.

Для выяснения этих вопросов использовалось численное моделирование сигналов Ханле в аппарате ПМ. Геометрия расчета показана на рис.1. Она соответствует применявшейся в рассмотренных выше экспериментах /3,7/. Ограничим рассмотрение следующей моделью. Имеет место полностью незамкнутый процесс для ситуации, когда можно пренебречь вынужденными переходами и эффект Ханле верхнего уровня много шире эффекта Ханле нижнего уровня. Тогда уравнения, связывающие компоненты ПМ нижнего φ_q^α и верхнего f_q^κ уровня удобно записать в следующем виде /10/:

$$\sqrt{p} \sum_{\lambda \alpha} F_{\lambda \alpha}^{\kappa} \left\{ \Phi^{(\kappa)} \otimes \varphi^{(\alpha)} \right\}_q^{\kappa} - \Gamma_{\kappa} f_q^{\kappa} = 0 ; \quad (I, a)$$

$$-\sqrt{p} \sum_{\lambda \alpha} A_{\lambda \alpha}^{\kappa} \left\{ \Phi^{(\kappa)} \otimes \varphi^{(\alpha)} \right\}_q^{\alpha} - (\gamma_{\kappa} - i q \omega) \varphi_q^{\alpha} + \lambda_{\kappa} \delta_{\alpha 0} \delta_{q 0} = 0 , \quad (I б)$$

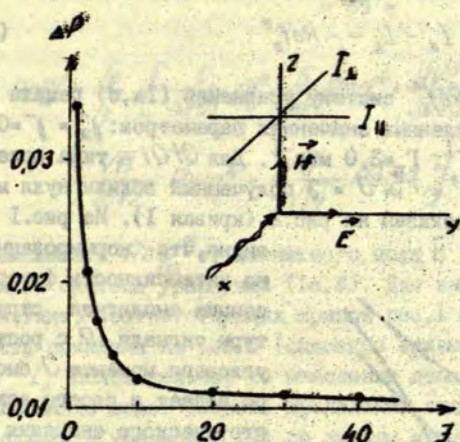


Рис.1. Зависимость амплитуды сигнала Ханле от углового момента состояния. На врезке показана геометрия расчета.

где $\bar{\rho}$ - скорость поглощения света; $\bar{\kappa}$, $\bar{\gamma}_\alpha$ - скорости релаксации соответствующих ПМ. Частота $\omega = g\mu_B H/\hbar$ характеризует зеемановское расщепление нижнего уровня в магнитном поле H. Член $\lambda_q^\alpha \delta_{q0} \delta_{q0}$ описывает изотропное восстановление заселенности нижнего уровня в результате столкновительной релаксации. Коэффициенты

$$A_{\alpha\chi\alpha'} = \frac{[1+(-1)^{\alpha+\chi+\alpha'}]}{2} \frac{\Pi_{J'\chi\alpha'}}{\Pi_\alpha} (-1)^{J'-J''+\alpha'} \left\{ \begin{matrix} \alpha & \chi & \alpha' \\ J'' & J'' & J'' \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} 1 & 1 & \chi \\ J'' & J'' & J' \end{matrix} \right\} \quad (2a)$$

и

$$\kappa_{F\chi\alpha} = \frac{\Pi_{J'}^3 \Pi_{\chi\alpha}^2}{\Pi_{J''\kappa}} (-1)^{\chi+1} \left\{ \begin{matrix} \kappa & J' & J' \\ \chi & 1 & 1 \\ \alpha & J'' & J'' \end{matrix} \right\} \quad (26)$$

характеризуют поглощение света и зависят от угловых моментов нижнего J'' и верхнего J' уровней. Тензор $\Phi^{(\chi)}$ характеризует возбуждающий свет $/I_1/$. Наблюдаемым сигналом будем считать разность двух компонент интенсивности флуоресценции (см. рис. 1). Исходя из выражений, связывающих интенсивность флуоресценции с ПМ возбужденного уровня $f^{(\alpha)}/I_1/$, запишем

$$I_{\parallel} - I_{\perp} \sim - \text{Ref}_2^2 \quad (3)$$

Для нахождения Ref_2^2 систему уравнений (1а,б) решали на ЭВМ при следующих численных значениях параметров: $\delta_{\alpha} = \delta = 0,3$ мкс⁻¹; $\Gamma_K = \Gamma = 10^4$ мкс⁻¹; $\Gamma = 3,0$ мкс⁻¹. Для Q/Q1 - типа молекулярного перехода $J'' = J' = J = 3$ полученный вблизи нуля магнитного поля сигнал показан на рис.2 (кривая 1). Из рис.1

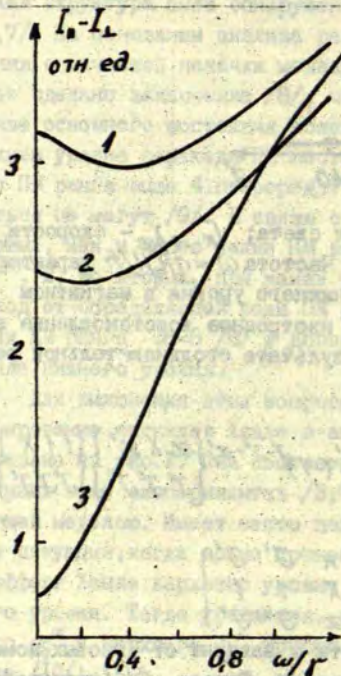


Рис.2. Проявление компонент φ_4^4 и φ_2^4 ПМ ранга $\alpha=4$ в наблюдаемом сигнале: 1 - $(I_{\parallel} - I_{\perp})$; 2 - $(I_{\parallel} - I_{\perp}) - \sqrt{11}/28\sqrt{2} \text{Re} \varphi_2^4$; 3 - $(I_{\parallel} - I_{\perp}) - \sqrt{11}/4\sqrt{14} \text{Re} \varphi_4^4$;

видно, что нормированная на интенсивность флуоресценции амплитуда структуры сигнала $\Delta \rho$ с ростом углового момента J быстро падает и своего асимптотического значения достигает при $J \sim 20$.

Далее численную модель решали, полагая $\delta_6 = 300$ мкс⁻¹ и не изменяя остальные параметры. Оказалось, что в этом случае уже при $J=3$, т.е. для состояния с наименьшим угловым моментом, в котором может создаваться ПМ ранга $\alpha=6$ ($\alpha_{\text{max}} \leq 2J$), быстрая релаксация $\varphi^{(6)}$ является достаточным условием для исчезновения структуры в сигнале Ханле.

Выясним, каким образом ПМ ранга $\alpha=6$ влияет на f_2^2 и через него на наблюдаемый сигнал. Из уравнения (1а) найдем связь f_2^2 с ПМ основного состояния. Для $J=3$

$$Re\varphi_2^2 = \frac{\sqrt{p}}{I_2} \left[-\frac{1}{4\sqrt{10}} \varphi_0^0 + \frac{5}{14} Re\varphi_2^2 + \frac{9\sqrt{2}}{56\sqrt{3}} \varphi_0^2 - \frac{\sqrt{11}}{56\sqrt{5}} \varphi_0^4 - \right. \\ \left. - \frac{\sqrt{11}}{28\sqrt{2}} Re\varphi_2^4 - \frac{\sqrt{11}}{4\sqrt{14}} Re\varphi_4^4 \right]. \quad (4)$$

Зависимость $Re\varphi_2^2$ от магнитного поля $\bar{H}$ находили численным решением системы уравнений (1а,б). Для значений динамических констант, соответствующих кривой рис.1 и $J=3$, эта зависимость показана на рис.3 (сплошные кривые). Так как разность $I_{II} - I_I$ положительна, то появление дополнительного пика сигнала Ханле может вызвать проявление лишь ПМ нижнего уровня, входящих в уравнение (4) со знаком минус - см. выражение (3), (4) и рис.3. Исходя из ширины зависимости $\varphi_2^2(\omega/\gamma)$ можно утверждать, что пик вызван проявлением либо φ_4^4 , либо φ_2^4 , либо их совместным действием. Для выяснения парциального вклада в наблюдаемый сигнал φ_4^4 и φ_2^4 при расчете сигнала по формулам (3) и (4) в уравнение (4) не учтен сначала член пропорциональный φ_4^4 (см. рис.2, кривая 2), а затем член пропорциональный φ_2^4 (кривая 3). Можно заключить, что при дискриминации φ_2^4 структура сигнала уменьшается, но все-таки остается. В то же время дискриминация φ_4^4 полностью сглаживает структуру. Отсюда следует, что основной вклад в дополнительную структуру сигнала Ханле нижнего уровня вносит проявление компоненты φ_4^4 ПМ ранга $\kappa=4$. Именно через влияние на нее проявляется в сигнале Ханле ПМ $\varphi^{(6)}$. На рис.3 штриховыми линиями показано, как изменяются компоненты φ_4^4 и φ_2^4 при рассмотренной выше быстрой релаксации ПМ φ_2^6 . Аналогичные результаты получены при анализе структуры сигнала при больших значениях углового момента перехода. Для $J \rightarrow \infty$ аналогичным способом было рассмотрено влияние на структуру сигнала быстрой релаксации ПМ $\varphi^{(8)}$. Оказывается, в результате быстрой релаксации $\varphi^{(8)}$ амплитуда структуры уменьшается, однако полностью не исчезает.

Суммируя результаты проведенного анализа, можно сделать следующие выводы. Во всех случаях, когда переходы типа Q/Q' реализуются между уровнями с угловым моментом $J \geq 3$, появле-

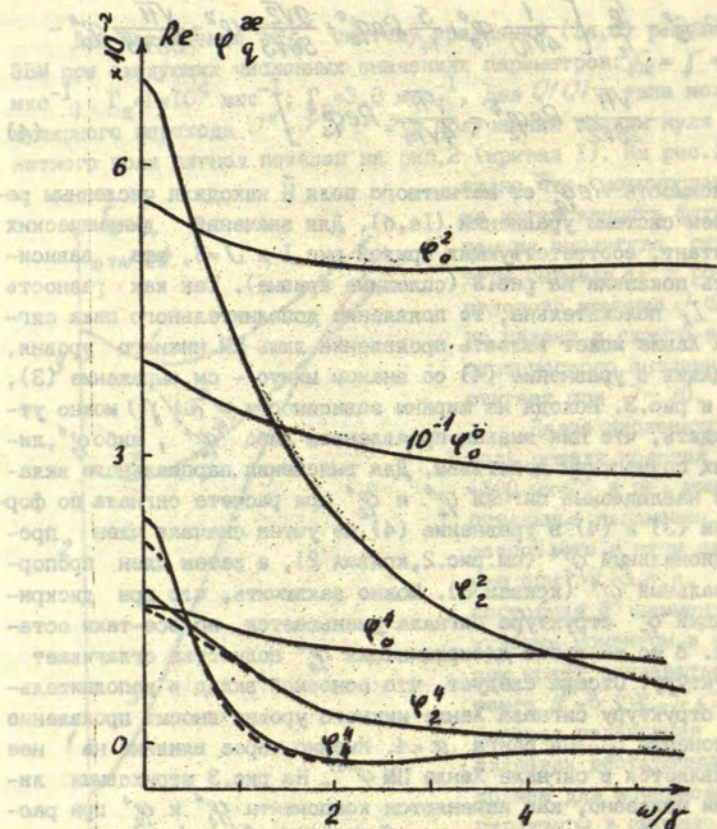


Рис.3. Зависимость компоненты ПМ основного состояния ранга $\alpha \leq 4$ от параметра ω/γ для случая $J' = J = 3$.

ние в сигнале Ханле дополнительной структуры следует считать достаточным условием, чтобы утверждать, что на нижнем уровне перехода создан ПМ ранга $\alpha=3$. Появление и исчезновение при быстрой релаксации ПМ $\varphi^{(6)}$ дополнительной структуры сигнала в основном связано с влиянием ПМ ранга $\alpha=6$ на компоненту φ_4^4 ПМ ранга $\alpha=4$.

В заключение хочется сказать несколько слов о самих ПМ. Возникает вопрос о существовании в реальном мире референта, которому соответствует данный объект теории, т.е. касается ли проведенное в данной статье рассмотрение только математической стороны проблемы или затрагивает и физические аспекты явления. Наиболее типичными ситуациями, в которых возникает проблема реальности, являются те случаи, когда некая цельность разлагается на части. Вопрос при этом стоит о реальности этих частей. Наше рассмотрение выдвигает вопрос о реальности ПМ, возникающих при разложении матрицы плотности на неприводимые компоненты.

В физике неоднократно возникали подобные вопросы. Один из наиболее известных - спор о реальности фурье-компонент модулированного радиосигнала, впервые возникший в 30-х годах нашего века в связи с развитием техники радиосвязи и являвшийся не только предметом методологического обсуждения, но и международного спора, связанного с правовыми аспектами. В радиотехнике этот спор решился в пользу реальности фурье-компонент. При этом Л.И.Мандельштамом были сформулированы критерии реальности. В качестве основного критерия реальности выдвигалось то, что существует спектральный прибор, способный выделить эти компоненты.

Применим аналогичные критерии реальности и в случае ПМ. Известно, что сигнал линейного эффекта Ханле однозначно определяется эволюцией в магнитном поле компоненты f_2^2 ПМ ранга $\alpha=2$ /12/. Если рассматривать ПМ более высокого ранга, то в работе /13/ показано, что при наблюдении квантовых биений основного состояния димеров в кинетике переходного процесса можно выбрать такую геометрию регистрации сигнала, при которой будет проявляться лишь компонента φ_4^4 ПМ ранга $\alpha=4$. Та-

ким образом, исходя из критерия существования реальной процедуры наблюдения, можно заключить, что ПМ являются реальными объектами и проведенное в настоящей статье рассмотрение носит не только математический характер, но имеет и физическую основу.

Список литературы

1. Hanle W. // Zeit. f. Physik. - 1924. - Bd. 30. - S. 93.
2. Фербер Р.С. Процессы переноса энергии в парах металлов. - Рига: ЛГУ им. П. Стучки, 1983. - С. 3.
3. Duclou M., Gorza M.P., Descoms B. // Opt. commun. - 1973. - Vol. 8. - P. 21.
4. Деком Б., Дюмон М., Дюклой М. Лазерная спектроскопия атомов и молекул. - М.: Мир, 1979. - С. 325.
5. Duclou M. // J. Phys. B: At. Mol. Phys. - 1976. - Vol. 9. - P. 357.
6. Таманис М.Я., Фербер Р.С., Шмит О.А. Сенсibilизированная флуоресценция смесей паров металлов. - Рига: ЛГУ им. П. Стучки, 1979. - Вып. 7. - С. 53.
7. Аузиньш М.П., Таманис М.Я., Фербер Р.С. // Опт. спектр. - 1985. - Т. 59. - Вып. 6. - С. 1328.
8. Аузиньш М.П., Фербер Р.С. // Опт. спектр. - 1983. - Т. 55. - Вып. 6. - С. 1105.
9. Аузиньш М.П., Фербер Р.С. // Изв. АН ЛССР, Сер. физ. техн. наук. - 1984. - № 1. - С. 9.
10. Ferber R.S., Okunevich A.I., Shmit O.A., Tamanis M.Ya. // Chem. Phys. Lett. - 1982. - Vol. 90. - P. 476.
11. Дьяконов М.И. // ЖЭТФ. - 1964. - Т. 47. - Вып. 6. - С. 2213.
12. Чайка М.П. Интерференция вырожденных атомных состояний. - Л.: ЛГУ им. А.А. Жданова, 1975. - 192 с.
13. Аузиньш М.П., Таманис М.Я., Фербер Р.С. // ЖЭТФ. - 1986. - Т. 90. - Вып. 4. - С. 1182.

В.А.Круглевский
ЛГУ им.П.Стучки
(Рига)

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МАТРИЧНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ ТЕНЗОРНЫХ ОПЕРАТОРОВ В РАСЧЕТАХ МЕЖАТОМНОГО ОБМЕННОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

Расчет обменной энергии между слабо взаимодействующими атомами, а также вычисление обменного взаимодействия между электронными оболочками ионов в твердом теле удобно проводить на основе обобщенного метода Гайтлера-Лондона. Нарушис и Батарунас /1,2/ исследовали, пользуясь этим методом, мультиплетность основного терма молекулы кислорода. Гарифуллина с соавт. /3/ приводят выражения коэффициентов при произведениях одно- и двухэлектронных интегралов, содержащие субматричные элементы единичных тензорных операторов U^K и V^K , которые были введены в теорию атомных спектров Рэчахом. В статьях /4,5/ приводится схема полного расчета энергии двухатомной системы в базисе антисимметризованных произведений атомных волновых функций, представленных в виде генеалогического разложения по функциям связанных моментов.

За исключением /2/, во всех упомянутых работах в многоэлектронном матричном элементе обменного взаимодействия оставлены только произведения одно- и двухэлектронных интегралов, соответствующих однократным перестановкам электронов между атомами. На каждом центре в явном виде учитывалась лишь одна оболочка с эквивалентными электронами.

Однако, как указывается в /6/, во многих случаях при расчете обменного взаимодействия следует учитывать на каждом атоме две или три подоболочки с одинаковыми главными квантовыми числами. При вычислении матричных элементов, недиагональных по конфигурации, также необходимо использовать выражения многооболочечных матричных элементов.

Следует учесть, что даже в наиболее простом случае при учете одной оболочки на каждом центре и рассмотрении матричных элементов, соответствующих однократным перестановкам электронов между атомами, непосредственное использование многоэлектронных коэффициентов в виде суммы произведений генеалогических коэффициентов и коэффициентов Клебша-Гордана связано с громоздкими вычислениями.

В настоящей работе показано, что выражения многоэлектронных коэффициентов при одно- и двухэлектронных интегралах при учете однократных и двукратных перестановок электронов между атомами в случае одной или нескольких оболочек на каждом центре можно получить в удобном для программирования виде, используя специально введенные субматричные элементы тензорных операторов.

Обменная часть матричного элемента двухатомного электронного гамильтониана имеет вид

$$\langle S M_S; S_A L_A M_A S_B L_B M_B | \hat{H} | (- \sum_{i,j} \hat{P}_{ij} + \sum_{j_1 j_2} \hat{P}_{1j_1} \hat{P}_{1j_2} - \dots) / S M_S; S_A L_A M_A S_B L_B M_B \rangle, \quad (1)$$

причем в качестве базисных функций используются

$$\psi_{S M_S} = \sum_{M_A M_B} \begin{bmatrix} S_A & S_B & S \\ M_A & M_B & M_S \end{bmatrix} \psi_{S_A L_A M_A M_{SA}} \psi_{S_B L_B M_B M_{SB}}. \quad (2)$$

где $\psi_{S_A L_A M_A M_{SA}} =$

$$= \sum_{M_A} \sum_{M_{SA}} G_{S_A L_A}^{(1)} \int_{\Lambda}^{(1)} \begin{bmatrix} S_A & L_A \\ M_A & M_{SA} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} L_A & L_A \\ M_A & M_A \end{bmatrix} \begin{bmatrix} S_A & \frac{1}{2} & S_A \\ M_{SA} & \mu & M_{SA} \end{bmatrix} x$$

$$\times \psi_{S_A^{(1)} L_A^{(1)} M_A^{(1)} M_{SA}^{(1)}} \varphi_{L_A M_A}(\vec{r}) \mathcal{G}_{\frac{1}{2} \mu}(S_A) \quad (3)$$

и $\psi_{S_B L_B M_B M_{SB}}$ записывается аналогичным образом; $\hat{P}_{ij}$ - оператор перестановки электрона i , принадлежащего атому A , и электрона j , принадлежащего атому B . Термы с верхними цифровыми индексами в скобках относятся к ионам указанной в скобках кратности. Первое слагаемое в (1) соответствует однократ-

ным, а второе - двукратным межатомным перестановкам электронов.

Если обмен происходит между несколькими оболочками одного и другого атома, целесообразно использовать формализм обобщенных генеалогических коэффициентов. Многооболочечная волновая функция атома в этом случае представляется в виде разложения (например, для двух оболочек на каждом центре):

$$\begin{aligned} \Psi_{SLM_S M} (l_1^{N_1} l_2^{N_2}) = \\ = \sum_{\tau=1}^2 \sum_{f^{(1)} S^{(1)} L^{(1)}} (l_1^{N_1 - \delta_{\tau 1}} l_2^{N_2 - \delta_{\tau 2}}) (f^{(1)} L^{(1)} S^{(1)}) l_2, f^{SL} l_1^{N_1} l_2^{N_2} f^{SL} \times \\ \times \sum_{M^{(1)} m_2} \sum_{M_S^{(1)} m} \left[\begin{matrix} L^{(1)} & l_2 & L \\ M^{(1)} & m_2 & M \end{matrix} \right] \left[\begin{matrix} S^{(1)} & \frac{1}{2} & S \\ M_S^{(1)} & m & M_S \end{matrix} \right] \Psi_{S^{(1)} L^{(1)} M_S^{(1)} M} f_{L m_2 \frac{1}{2} m}^{G_{\frac{1}{2} N}} (4) \end{aligned}$$

Символ в скобках обозначает обобщенный генеалогический коэффициент, индекс τ при квантовых числах указывает на их принадлежность к оболочке под соответствующим номером.

Выражения многоэлектронных коэффициентов при произведениях одно- и двухэлектронных интегралов в матричных элементах межатомного обменного взаимодействия упрощаются, и объем необходимых вычислений уменьшается, если эти коэффициенты выразить через специально введенные субматричные элементы тензорных операторов

$$\begin{aligned} (\Gamma \| Q^{\tau} (m, \bar{m}) \| \bar{\Gamma}) = N \sum_{f^{(1)} S^{(1)} L^{(1)}} (-1)^{S^{(1)} + S + \tau + \frac{1}{2}} (S \| S^{\tau} \| S) \times \\ \times \sqrt{(2S+1)(2\bar{S}+1)} \left\{ \begin{matrix} \frac{1}{2} & S & S^{(1)} \\ S & \frac{1}{2} & \tau \end{matrix} \right\} G_{f^{(1)} S^{(1)} L^{(1)}}^{f^{SL}} G_{f^{(1)} S^{(1)} L^{(1)}}^{\bar{f}^{SL}} \left[\begin{matrix} L^{(1)} & l & L \\ M^{(1)} & m & M \end{matrix} \right] \left[\begin{matrix} L^{(1)} & l & L \\ M^{(1)} & \bar{m} & \bar{M} \end{matrix} \right] (5) \end{aligned}$$

где Γ и $\bar{\Gamma}$ означают соответственно наборы квантовых чисел f^{SLM} и $\bar{f}^{\bar{S}\bar{L}\bar{M}}$.

В многооболочечном случае субматричный элемент (5) зависит от номеров оболочек и содержит обобщенные генеалогические коэффициенты:

$$\begin{aligned} (\Gamma \| Q^{\tau} (m, \bar{m}) \| \bar{\Gamma}) = N \sum_{f^{(1)} S^{(1)} L^{(1)}} (-1)^{S^{(1)} + S + \tau + \frac{1}{2}} \times \\ \times (S \| S^{\tau} \| S) \sqrt{(2S+1)(2\bar{S}+1)} \left\{ \begin{matrix} \frac{1}{2} & S & S^{(1)} \\ S & \frac{1}{2} & \tau \end{matrix} \right\} \times \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & \times (l_1^{N_1-\delta_{11}} l_2^{N_2-\delta_{12}} (\hat{f}^{(1)} \hat{S}^{(1)} \hat{L}^{(1)}) l_2; \hat{f} \hat{S} \hat{L} \| l_1^{N_1} l_2^{N_2} \hat{f} \hat{S} \hat{L}) \times \\
 & \times (l_1^{N_1-\delta_{11}} l_2^{N_2-\delta_{12}} (\hat{f}^{(1)} \hat{S}^{(1)} \hat{L}^{(1)}) l_2; \hat{f} \hat{S} \hat{L} \| l_1^{N_1} l_2^{N_2} \hat{f} \hat{S} \hat{L}) \times \\
 & \times \begin{bmatrix} \hat{L}^{(1)} & l_1 & \hat{L} \\ m_1 & m_1 & m_1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{L}^{(1)} & l_2 & \hat{L} \\ m_2 & m_2 & m_2 \end{bmatrix} \delta(m_1, m_2). \quad (6)
 \end{aligned}$$

Наиболее существенный вклад в матричный элемент межтомного обменного взаимодействия вносит первое слагаемое из уравнения (1), которое, в свою очередь, состоит из шести типов сумм одно- или двухэлектронных интегралов либо их произведений

$$\begin{aligned}
 & - \langle \hat{S} \hat{S}_A \hat{S}_B | \hat{H} \sum_{i=1}^{N_A} \sum_{j=1}^{N_B} \hat{P}_{ij} | \hat{S} \hat{S}_A \hat{S}_B \rangle = \\
 & = J_H^{(1)} + J_{21}^{(1)} + J_{12}^{(1)} + J_{22}^{(1)} + J_{31}^{(1)} + J_{13}^{(1)}. \quad (7)
 \end{aligned}$$

Принимая во внимание, что операторы $\sum_{ij} \hat{P}_{ij}$ являются суммой двух-, трех- и четырехэлектронных операторов, получаем

$$\begin{aligned}
 J_H &= \sum_{\text{бсз}, m} A_{11}^{(1)} (r_A, r_B, \bar{r}_A, \bar{r}_B) \times \\
 & \times [\langle m_A r_A, m_B r_B | q^{AB} | \bar{m}_B \bar{r}_B, \bar{m}_A \bar{r}_A \rangle + \langle m_A r_A | \bar{m}_B \bar{r}_B \rangle \times \\
 & \times \langle m_B r_B | \bar{r}_A \bar{r}_A \rangle + \langle m_A r_A | \bar{r}_A \bar{r}_B \rangle + \langle m_B r_B | \bar{m}_A \bar{r}_A \rangle + \\
 & + \frac{z_A^{\text{eff}} z_B^{\text{eff}}}{R} \langle m_A r_A | \bar{m}_B \bar{r}_B \rangle + \langle m_B r_B | \bar{m}_A \bar{r}_A \rangle \delta(m_A m_B; \bar{m}_B \bar{m}_A)]. \quad (8)
 \end{aligned}$$

Опуская в последующих формулах номера оболочек, записываем

$$\begin{aligned}
 J_{21}^{(1)} &= \sum_{\text{бсз}, m} A_{21}^{(1)} (\langle m_A^{(1)} m_A | q^{AB} | \bar{m}_A^{(1)} \bar{m}_B \rangle + \langle m_B | \bar{m}_A \rangle + \\
 & + \langle m_A^{(1)} m_B | q^{AB} | \bar{m}_A \bar{m}_A^{(1)} \rangle + \langle m_A | \bar{m}_B \rangle + \langle m_A^{(1)} | \bar{r}_A | \bar{m}_A^{(1)} \rangle \times \\
 & \times \langle m_A | \bar{m}_B \rangle + \langle m_B | \bar{m}_A \rangle); \quad (9)
 \end{aligned}$$

$$J_{12}^{(1)} = \sum_{\alpha \neq \beta, m} A_{12}^{(1)} \langle m_B^{(1)} m_B / q^{AB} / \bar{m}_B^{(1)} \bar{m}_A \rangle \langle m_A / \bar{m}_B \rangle + \\ + \langle m_B^{(1)} m_A / q^{AB} / \bar{m}_B \bar{m}_B^{(1)} \rangle \langle m_B / \bar{m}_A \rangle + \langle m_B^{(1)} / r^B / \bar{m}_B^{(1)} \rangle \times \\ \times \langle m_B / \bar{m}_A \rangle \langle m_A / \bar{m}_B \rangle ; \quad (10)$$

$$J_{22}^{(1)} = \sum_{\alpha \neq \beta, m} A_{22}^{(1)} \langle m_A^{(1)} m_B^{(1)} / q^{AB} / \bar{m}_A^{(1)} \bar{m}_B^{(1)} \rangle \langle m_A / \bar{m}_B \rangle \langle m_B / \bar{m}_A \rangle ; \quad (11)$$

$$J_{31}^{(1)} = \sum_{\alpha \neq \beta, m} A_{31}^{(1)} \langle m_A^{(2)} m_A^{(1)} / q^A / \bar{m}_A^{(2)} \bar{m}_A^{(1)} \rangle \langle m_A / \bar{m}_B \rangle \langle m_B / \bar{m}_A \rangle ; \quad (12)$$

$$J_{13}^{(1)} = \sum_{\alpha \neq \beta, m} A_{13}^{(1)} \langle m_B^{(2)} m_B^{(1)} / q^B / \bar{m}_B^{(2)} \bar{m}_B^{(1)} \rangle \langle m_B / \bar{m}_A \rangle \langle m_A / \bar{m}_B \rangle ; \quad (13)$$

Для того чтобы выразить коэффициенты $A_{ij}^{(1)}$ через субматричные элементы тензорных операторов $V^{(K)}$ и Q^τ , следует использовать соотношения

$$\hat{P}_{ij} = \hat{P}_{ij}^{(K)} \hat{P}_{ij}^{(s)},$$

где $\hat{P}_{ij}^{(K)}$ - оператор перестановки координат электрона i , принадлежащему атому A, и электрона j из атома B, а $\hat{P}_{ij}^{(s)}$ - оператор перестановки спинов электронов, который определяется равенством

$$\hat{P}_{ij}^{(s)} = \sum_{\tau=0}^2 C_\tau s_i^\tau s_j^\tau,$$

причем $C_0 = 1/2$; $C_1 = 2$; s^τ - тензорный оператор ранга τ , действующий в спиновом пространстве.

Непосредственная подстановка базисных функций в левую часть уравнения (7) приводит к следующему выражению многоэлектронного коэффициента при собственно обменном двухэлектронном интеграле

$$A_{11}^{(1)}(r_A, r_A, r_B, r_B) = (-1)^{\bar{S}_A + S_B + S} \sum_{\tau=0}^2 \left\{ \begin{matrix} S_A & S_B & S \\ \bar{S}_B & \bar{S}_A & \tau \end{matrix} \right\} C_\tau \times \\ \times N_A \sum_{\substack{\tilde{r}_A^{(1)} \tilde{r}_A^{(2)} \tilde{r}_A^{(3)} \\ \tilde{r}_B^{(1)} \tilde{r}_B^{(2)} \tilde{r}_B^{(3)}}} G \begin{matrix} \tilde{r}_A^{(1)} & S_A^{(1)} & L_A^{(1)} \\ \tilde{r}_A^{(2)} & S_A^{(2)} & L_A^{(2)} \end{matrix} (r_A) G \begin{matrix} \tilde{r}_B^{(1)} & S_B^{(1)} & L_B^{(1)} \\ \tilde{r}_B^{(2)} & S_B^{(2)} & L_B^{(2)} \end{matrix} (r_B) \times$$

$$\begin{aligned}
 & \times \begin{bmatrix} L_A^{(1)} & l_{rA} & L_A \\ M_A^{(1)} & m_{rA} & M_A \end{bmatrix} \begin{bmatrix} L_A^{(1)} & l_{rA} & \bar{L}_A \\ \bar{M}_A^{(1)} & \bar{m}_{rA} & \bar{M}_A \end{bmatrix} (S_A^{(1)} \parallel s_{S_A} \parallel s^{\tau} \parallel S_A^{(1)} \parallel s_{\bar{S}_A}) \times \\
 & \times \begin{bmatrix} L_B^{(1)} & l_{rB} & L_B \\ M_B^{(1)} & m_{rB} & M_B \end{bmatrix} \begin{bmatrix} L_B^{(1)} & l_{rB} & \bar{L}_B \\ \bar{M}_B^{(1)} & \bar{m}_{rB} & \bar{M}_B \end{bmatrix} (S_B^{(1)} \parallel s_{S_B} \parallel s^{\tau} \parallel S_B^{(1)} \parallel s_{\bar{S}_B}) \times \\
 & \times N_B \quad G \quad \begin{bmatrix} \gamma_B & S_B & L_B \\ \gamma_B^{(1)} & S_B^{(1)} & L_B^{(1)} \end{bmatrix} (r_B) \quad G \quad \begin{bmatrix} \gamma_B & \bar{S}_B & \bar{L}_B \\ \gamma_B^{(1)} & \bar{S}_B^{(1)} & \bar{L}_B^{(1)} \end{bmatrix} (\bar{r}_B) \times \\
 & \times \sigma(M_A^{(1)} M_B^{(1)}; \bar{M}_A^{(1)} \bar{M}_B^{(1)}), \quad (16)
 \end{aligned}$$

в котором $G_{\gamma_A^{(1)} \gamma_B^{(1)}}^{SL}(\tau)$ является сокращенным обозначением обобщенного генеалогического коэффициента из уравнения (4).

Разлагая произведение двух коэффициентов Клебша-Гордана по формуле (21.29) из [7], получаем

$$\begin{aligned}
 A_{11}^{(1)}(r_A, \bar{r}_A, r_B, \bar{r}_B) &= (-1)^{\bar{S}_A + S_B + S} \sum_{\tau=0}^1 G_{\tau} \left\{ \begin{matrix} S_A & S_B & S \\ \bar{S}_B & \bar{S}_A & \tau \end{matrix} \right\} \times \\
 & \times (-1)^{\bar{L}_A - \bar{M}_A + L_A - \bar{M}_A} \sum_{K_A} (\ell_{1A}^{N_{1A}} \ell_{2A}^{N_{2A}} r_A \gamma_A^{S_A L_A} \parallel v^{K_A \tau} \parallel \ell_{1A}^{N_{1A}} \ell_{2A}^{N_{2A}} \bar{r}_A \bar{\gamma}_A^{\bar{S}_A \bar{L}_A}) \\
 & \times \begin{bmatrix} L_A & \bar{L}_A & K_A \\ M_A & -\bar{M}_A & m_{rA} - \bar{m}_{rA} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} L_A & L_A & K_A \\ m_{rA} & -\bar{m}_{rA} & q_A \end{bmatrix} (-1)^{\bar{L}_B - \bar{M}_B + L_B - \bar{M}_B} \times \\
 & \times \sum_{K_B} (\ell_{1B}^{N_{1B}} \ell_{2B}^{N_{2B}} r_B \gamma_B^{S_B L_B} \parallel v^{K_B \tau} \parallel \ell_{1B}^{N_{1B}} \ell_{2B}^{N_{2B}} \bar{r}_B \bar{\gamma}_B^{\bar{S}_B \bar{L}_B}) \times \\
 & \times \begin{bmatrix} L_B & \bar{L}_B & K_B \\ M_B & -\bar{M}_B & m_{rB} - \bar{m}_{rB} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} L_B & L_B & K_B \\ m_{rB} & -\bar{m}_{rB} & q_B \end{bmatrix} \quad (17)
 \end{aligned}$$

Переходя от субматричных элементов тензорных операторов $V_{K_A \tau}^{K_A}$ и $V_{K_B \tau}^{K_B}$ ($\gamma_A^{z_A} \parallel Q^{\tau}(m_{z_A}, \bar{m}_{z_A}) \parallel \bar{\gamma}_A^{\bar{z}_A}$) и

($\gamma_B^{z_B} \parallel Q^{\tau}(m_{z_B}, \bar{m}_{z_B}) \parallel \bar{\gamma}_B^{\bar{z}_B}$), получаем простое выражение для $A_{11}^{(1)}$:

$$A_{11}^{(1)}(r_A, \bar{r}_A, r_B, \bar{r}_B) = (-1)^{\bar{S}_A + S_B + S} \sum_{\tau=0}^1 Q_{\tau} \left\{ \begin{matrix} S_A & S_B & S \\ \bar{S}_B & \bar{S}_A & \tau \end{matrix} \right\} \times$$

$$\times (\bar{r}_A r_A \| Q^{\tau}(m_{rA}, \bar{m}_{rA}) \| \bar{r}_A \bar{r}_A) (\bar{r}_B r_B \| Q^{\tau}(m_{rB}, \bar{m}_{rB}) \| \bar{r}_B \bar{r}_B). \quad (18)$$

Выражения коэффициентов $A_{12}^{(1)}$ можно найти, представив соответствующий трехэлектронный оператор $\sum_{j_1, j_2} e^2 / r_{ij} \rho_{ij}$ в виде разности полных сумм с последующим введением тензорных операторов:

$$A_{12}^{(1)}(r_A, \bar{r}_A, r_B, \bar{r}_B, r_B^{(1)}, \bar{r}_B^{(1)}) = (-1)^{\bar{S}_A + S_B - S} \times$$

$$\times \sum_{\tau=0}^1 Q_{\tau} \left\{ \begin{matrix} S_A & S_B & S \\ \bar{S}_B & \bar{S}_A & \tau \end{matrix} \right\} (\bar{r}_A r_A \| Q^{\tau}(m_A, \bar{m}_A) \| \bar{r}_A \bar{r}_A) \times$$

$$\times \left[\sum_{\tau'} (\bar{r}_B r_B \| Q^{\tau'}(m_B, \bar{m}_B) \| \bar{r}_B' \bar{r}_B') \times \right.$$

$$\times (\bar{r}_B' \bar{r}_B^{(1)} \| Q^{\tau}(m_B^{(1)}, \bar{m}_B^{(1)}) \| \bar{r}_B' \bar{r}_B^{(1)}) \delta(S_B, S_B') / \sqrt{2S_B + 1} -$$

$$\left. - (\bar{r}_B r_B \| Q^{\tau}(m_B, \bar{m}_B^{(1)}) \| \bar{r}_B' \bar{r}_B^{(1)}) \delta((m_X)_B^{(1)}, (\bar{m}_X)_B) \right]. \quad (19)$$

В матричных элементах индексы оболочек z при магнитных квантовых числах опущены, в символах Кронекера черта, верхний цифровой индекс и индекс атома относится как к магнитным квантовым числам, так и к номерам оболочек.

Второе слагаемое в уравнении (I)

$$- \langle S M_S \bar{r}_A \bar{r}_B | \hat{H} \sum_{i_1 < i_2} \sum_{j_1 < j_2} \hat{P}_{i_1 j_1} P_{i_2 j_2} | S M_S \bar{r}_A \bar{r}_B \rangle \quad (20)$$

состоит из матричных элементов операторов типа

$$\sum_{i_1 < i_2} \hat{P}_{i_1 j_1} P_{i_1 j_2} P_{i_2 j_2}, \quad \sum_{i_1 < i_2} Q_{i_1 j_3} P_{i_1 j_1} P_{i_2 j_2}, \quad \sum_{i_1 < i_2} Q_{i_1 j_4} P_{i_1 j_1} P_{i_2 j_2},$$

в которых i_3 , i_4 и j_3 могут совпадать с i_1 , или i_2 или от-

личаться от них.

Выбор необходимых тензорных операторов определяется видом оператора двухкратной перестановки спинов:

$$\sum_{j_1, j_2} \hat{P}_{i_1 j_1}^{(s)} \hat{P}_{i_2 j_2}^{(s)} =$$

$$= \frac{1}{4} \sum_{\tau_1, \tau_2} C_{\tau_1} C_{\tau_2} \sum_{j_1, j_2} s_{i_1}^{\tau_1} s_{j_1}^{\tau_1} s_{i_2}^{\tau_2} s_{j_2}^{\tau_2} (1 - \delta_{i_1 j_1}) (1 - \delta_{i_2 j_2}). \quad (21)$$

Для разделения операторов, действующих на различные атомы, необходимо изменить схему связывания рангов оператора спина. Окончательно получаем:

$$\sum_{j_1, j_2} \hat{P}_{i_1 j_1}^{(s)} \hat{P}_{i_2 j_2}^{(s)} =$$

$$= \frac{1}{4} \sum_{\tau_1, \tau_2} C_{\tau_1} C_{\tau_2} \sqrt{(2\tau_1+1)(2\tau_2+1)} \sum_{\bar{\tau}} B_2(\tau_1, \tau_2, \bar{\tau}) \left[\sum_{j_1, j_2} [s_{i_1}^{\tau_1} \times s_{i_2}^{\tau_2}]^{\bar{\tau}} \right] \cdot$$

$$- \sum_{j_1, j_2} [s_{i_1}^{\tau_1} \times s_{i_2}^{\tau_2}]^{\bar{\tau}} \left[\sum_{j_1, j_2} [s_{j_1}^{\tau_1} \times s_{j_2}^{\tau_2}]^{\bar{\tau}} \right] - \sum_{j_1, j_2} [s_{j_1}^{\tau_1} \times s_{j_2}^{\tau_2}]^{\bar{\tau}} \left[\sum_{j_1, j_2} [s_{i_1}^{\tau_1} \times s_{i_2}^{\tau_2}]^{\bar{\tau}} \right]. \quad (22)$$

Коэффициенты $B_2(\tau_1, \tau_2, \bar{\tau})$ являются коэффициентами разложения функции связанных моментов $[\tau_1, \tau_1, 0, \tau_2, \tau_2, 0; 00]$ по функциям $[\tau_1, \tau_2, \bar{\tau}, \tau_1, \tau_2, \bar{\tau}; 00]$ в обозначениях [7]. В рассматриваемом случае 9_j -символ, который входит в матрицу преобразования схемы четырех связанных моментов, можно выразить через 6_j -символ. При этом

$$B_2(\tau_1, \tau_2, \bar{\tau}) = \sqrt{\frac{2\bar{\tau}+1}{(2\tau_1+1)(2\tau_2+1)}}. \quad (23)$$

Многоэлектронный коэффициент при произведении четырех интегралов перекрытия определяется формулой:

$$A_{22}^{(2)} = \frac{1}{4} \sum_{\tau_1, \tau_2} C_{\tau_1} C_{\tau_2} \sqrt{(2\tau_1+1)(2\tau_2+1)} \sum_{\bar{\tau}} B_2(\tau_1, \tau_2, \bar{\tau}) \times$$

$$\times (-1)^{\bar{S}_A + \bar{S}_B + \bar{S}} \begin{Bmatrix} S_A & S_B & S \\ \bar{S}_B & \bar{S}_A & \bar{\tau} \end{Bmatrix} [(-1)^{\bar{S}_A + \bar{S}_A + \bar{\tau}} \times$$

Аналогичные формулы могут быть получены для остальных коэффициентов $A_{\mu\nu}^{(2)}$ при других произведениях интегралов, которые содержит матричный элемент (20).

Таким образом, предложенные субматричные элементы

$$(\Gamma \parallel Q_{m\bar{m}}^{\epsilon} \parallel \bar{\Gamma}) \quad \text{и} \quad (\Gamma \parallel Q_{m\bar{m}}^{\epsilon_1 \epsilon_2 [\epsilon_{12}]} \parallel \bar{\Gamma})$$

позволяют найти не сложные, удобные для программирования аналитические выражения матричных элементов межатомного обменного взаимодействия при учете однократных и двухкратных перестановок электронов между атомами.

Список литературы

1. Нарушис Д.П., Батарунас И.В. - Доклады Международного симпозиума по теории электронных оболочек атомов и молекул. - Вильнюс: Минтис, 1969. - С.197.
2. Нарушис Д.П., Батарунас И.В. // Опт.и спект.-1972.- Т.33. - Вып.3.-С.450.
3. Гарифуллина Р.Л., Еремин М.В., Леушин Г.М. // ФТТ.-1972.- Т.14.- Вып.2.-С.382.
4. Круглевский В.А. Процессы переноса энергии в парах металлов.-Рига: ЛГУ им.П.Стучки.-1981.- С.71.
5. Круглевский В.А. // Изв. АН ЛатвССР. Сер.физ.-техн.-1984. - № 1.- С.21.
6. Mario Z., Popovic-Božic M., Nikolovski Z. // Int.J. Quant. Chem.- 1981.- Vol.20.- P.763.
7. Юцис А.П., Бандзайтис А.А. - Теория момента количества движения в квантовой механике.-Вильнюс: Минтис, 1965.- 464 с.

Н.Е. Кузьменко, В.В. Еремин
МГУ им. М.В. Ломоносова
(Москва)

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ОТТАЛКИВАТЕЛЬНЫХ ПОТЕНЦИАЛЬНЫХ КРИВЫХ ИЗ НЕПРЕРЫВНЫХ СПЕКТРОВ ДВУХАТОМНЫХ МОЛЕКУЛ

В спектроскопии связанно-несвязанных переходов двух - атомных молекул можно выделить две основные задачи: прямую - расчет спектра по заданным потенциальным функциям комбинирующих состояний и обратную - расчет отталкивательной потенциальной кривой по распределению интенсивностей в непрерывном спектре.

Для решения прямой задачи необходимо найти волновые функции комбинирующих состояний по соответствующим уравнениям Шредингера и рассчитать матричный элемент оператора электронного момента перехода

$$\mu_{VE} = \langle V | \mu | E \rangle = \int_0^{\infty} \psi_V(r) \mu(r) \psi_E(r) dr \quad (I)$$

как функцию энергии E несвязанного состояния. В формуле (I) $\psi_V(r)$ - волновая функция связанного состояния (СВФ), $\psi_E(r)$ - волновая функция несвязанного состояния (НВФ), $\mu(r)$ - электронный момент перехода.

Принципиальных трудностей в решении прямой задачи на сегодняшний день не существует, поскольку разработаны эффективные алгоритмы численного расчета СВФ [1,2] и НВФ [3,4], которые позволяют рассчитывать выражение (I) для любых потенциалов несвязанного состояния. Подход к решению обратной задачи, напротив, зависит от типа спектра, который определяется крутизной отталкивательного потенциала (ОП). При этом существует два предельных случая [5].

1) ОП крутой. В этом случае НВФ имеет относительно широкий максимум вблизи поворотной точки, а затем очень быстро осциллирует, поскольку ядра уже при небольшом удалении от поворотной точки приобретают большой импульс. При этом вклад в интеграл (I) вносит лишь небольшая область изменения r вблизи главного максимума НВФ, а в спектре максимумы прояв-

ляются лишь при тех значениях E , при которых главный максимум НВФ совпадает с главным или побочными максимумами СВФ. В этом случае спектр "отражает" вид СВФ, поскольку для перехода с V -уровня связанного состояния в спектре наблюдается ровно V минимумов и $V+1$ максимум.

2) Если ОП пологий, то импульс ядер при удалении от поворотной точки несвязанного состояния увеличивается медленно, поэтому НВФ осциллирует слабо и вклад в интеграл (I) вносит не только главный максимум, но и побочные. В соответствии с этим в спектре наблюдается большое число максимумов и минимумов - своеобразная "интерференционная структура" /6/.

В случае "отражения" для каждого значения энергии E несвязанного состояния существует только одна точка z_x , которая вносит основной вклад в интеграл (I), а именно точка, в которой импульс ядер при переходе сохраняется /7/:

$$E - V_1(z_x) = E_V - V_2(z_x), \quad (2)$$

где $V_1(z)$ и $V_2(z)$ - потенциалы несвязанного и связанного состояний соответственно. Используя обобщенное квазиклассическое приближение, можно получить следующее выражение для матричного элемента (I), подчеркивающее связь между СВФ и распределением интенсивностей /8/:

$$\langle V | \mu | E \rangle = c \mu(z_x) (2V+1 - \xi^2(E))^{1/4} \Phi_V(\xi(E)), \quad (3)$$

где $\Phi_V(\xi)$ - волновая функция V -го состояния гармонического осциллятора, а функция $\xi(E)$ неявно определяется уравнением

$$\begin{aligned} \Delta(E) &= \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{1/2} \left\{ \int_{z_x(E)}^{z_1(E)} (E - V_1(z))^{1/2} dz + \int_{z_x(E)}^{z_2} (E_V - V_2(z))^{1/2} dz \right\} = \\ &= -\frac{1}{2} \xi (2V+1 - \xi^2)^{1/2} + \left(V + \frac{1}{2} \right) \arccos \left[\frac{\xi}{(2V+1)^{1/2}} \right]. \end{aligned} \quad (4)$$

С помощью формул (3) и (4) Чайлду и др. /8/ удалось для случая "отражения" создать метод определения ОП по положениям

максимумов интенсивности в спектре, названный ими "квази-РКР"; важно, что этот метод также позволяет по значению максимумов интенсивности определять зависимость $\xi(E)$. Его суть в следующем /8/. Положения максимумов и минимумов в спектре приводятся в соответствие с положениями максимумов и нулей волновых функций $\Phi_\nu(\xi)$; в результате получаем зависимость $\xi(E)$. Экстраполируя эту зависимость до значений $\xi = (2\nu+1)^{1/2}$ и $\xi = -(2\nu+1)^{1/2}$, находим величины $E_a = V_1(a_2)$ и $E_b = V_1(b_2)$ соответственно, где a_2 и b_2 - поворотные точки связочного состояния. Поворотные точки ОП $V_1(z)$ можно определить для интервала энергий от E_b до E_a по формуле

$$z_1(E) = \frac{1}{2} [b_2 + z_x(E)] + \frac{2}{\pi} \left(\frac{\hbar^2}{2m} \right)^{1/2} \int_{E_b}^E \frac{(2\nu+1-\xi)^{1/2} \frac{d\xi}{dE'} dE'}{(E-E')^{1/2}} - \quad (5)$$

$$- \frac{1}{\pi} \int_{z_1(E)}^{b_2} \arcsin \left\{ 1 - \frac{2(E - V_2(z))}{E - V_1(z)} \right\} dz.$$

Здесь z_x - единственный корень уравнения (2). Для расчета второго интеграла в правой части формулы (5) надо знать ОП $V_1(z)$, который, собственно, и отыскивается, в связи с чем приходится применять итерационную процедуру.

Метод /8/ был реализован нами в программном варианте. Мы рассчитали интегралы перекрытия СВФ и НВФ (полагая $\mu(z) = 1$ в уравнении (1)) для $\sum_g^+ \quad (\nu = 4-8)$ перехода молекулы Br_2 , используя потенциалы /8/, и приняв, что результаты расчета являются "экспериментальными данными", попробовали восстановить известную нам с самого начала функцию $V_1(z)$. При этом для интерполяции функций $V_1(z)$ и $\xi(E)$ и экстраполяции $\xi(E)$ мы использовали сплайны и полиномы различных степеней. Наилучшие результаты, полученные при использовании именно сплайнов третьего порядка /9/, представлены в табл. I. Надо отметить, что выбор шага для расчета интегралов в формуле (5) очень мало влияет на значения поворотных точек $z_1(E)$. Гораздо большую роль играет выбор интервала между энергиями, для которых рассчитывались поворотные точки. Оптимальным с точки зрения соотношения точности и затрат времени следует для данного случая признать шаг 100 см^{-1} , т.е. поворотные точки были

Таблица I

Результаты расчета ОП $V_r(z)$ по формуле (5) (h - шаг по энергии, см⁻¹)

$E, \text{ см}^{-1}$	$z_r(E), \text{ \AA}$							
	истин.	$v=4; h=300$	$v=4; h=150$	$v=4; h=100$	$v=5; h=100$	$v=6; h=100$	$v=7; h=100$	$v=8; h=100$
4509	2,4117	2,4158	2,4117	2,4111	2,4118	2,4120	2,4111	2,4115
5109	2,3857	2,3881	2,3862	2,3860	2,3857	2,3852	2,3859	2,3861
5709	2,3625	2,3636	2,3626	2,3624	2,3619	2,3629	2,3623	2,3621
6309	2,3413	2,3419	2,3410	2,3408	2,3417	2,3411	2,3410	2,3416
6909	2,3219	2,3231	2,3224	2,3222	2,3217	2,3217	2,3221	2,3216
7509	2,3041	2,3049	2,3042	2,3041	2,3036	2,3045	2,3037	2,3045
8109	2,2875	2,2876	2,2870	2,2869	2,2879	2,2871	2,2877	2,2870
8709	2,2720	2,2728	2,2721	2,2721	2,2717	2,2720	2,2716	2,2722
9309	2,2574	2,2583	2,2578	2,2577	2,2569	2,2576	2,2572	2,2573
9909	2,2437	2,2439	2,2433	2,2433	2,2440	2,2432	2,2439	2,2433
10509	2,2307	2,2308	2,2303	2,2302	2,2308	2,2306	2,2303	2,2311
11109	2,2184	2,2189	2,2184	2,2183	2,2177	2,2187	2,2181	2,2181
11709	2,2067	2,2074	2,2069	2,2068	2,2064	2,2063	2,2069	2,2064
12309	2,1955	2,1963	2,1958	2,1957	2,1956	2,1949	2,1953	2,1957
12909	2,1847	2,1854	2,1848	2,1847	2,1849	2,1848	2,1841	2,1848
13509	2,1745	2,1744	2,1738	2,1737	2,1746	2,1748	2,1743	2,1740
14109	2,1646	2,1634	2,1628	2,1627	2,1642	2,1647	2,1649	2,1643

получены для $E = E_b, E_b + 100, E_b + 200, \dots, E_a$.

Если, однако, внимательно проанализировать "оптимальные" результаты табл. I, то станет ясно, что эта процедура не совсем удовлетворительна. В самом деле, для одного и того же значения V расчетные значения $z_i(E)$ отличаются от истинных, как правило, лишь в четвертом знаке после запятой, но положительные и отрицательные отклонения чередуются, т.е. наблюдаются осцилляции расчетной кривой $V_i(z)$ (рис. I), причем появление этих осцилляций не зависит от ошибок экстраполяции E_a и E_b . Далее, аналогичные осцилляции возникают, если рассматривать фиксированное значение E , но варьировать значения V , хотя для разных значений V должно получаться одно и то же значение $z_i(E)$. Поскольку никакой модификацией численных методов как для фиксированного V , так и для фиксированного E , избежать осцилляций не удастся можно предположить, что они ха-

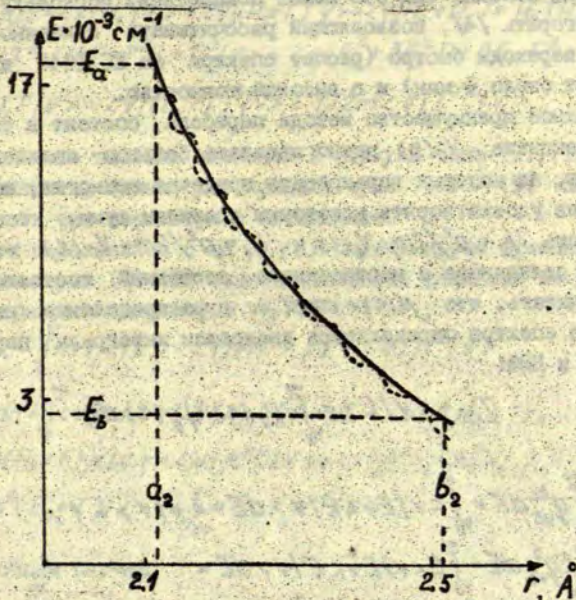


Рис. I. Определение ОП "квази-РКР" методом. — истинный потенциал; ---- расчетный потенциал.

рактёры для "квази-РКР" метода.

Таким образом, основные недостатки и ограничения метода /8/ следующие:

- 1) он применим только для случая "отражения";
- 2) метод позволяет рассчитать поворотные точки ОП лишь для значений энергии в интервале между E_B и E_A ;
- 3) ОП, рассчитанный по формуле (5), проявляет осцилляции как при разных E , так и при разных V .

Альтернативным подходом к решению обратной задачи является метод перебора, в котором потенциал $V_e(z)$ задается в некотором функциональном виде и его параметры варьируются до тех пор, пока расчетный спектр не совпадает с экспериментальным. Этот метод во многих отношениях предпочтительнее, чем "квази-РКР". Во-первых, его применимость не зависит от крутизны ОП, т.е. он одинаково пригоден как для случая "отражения", так и для случая "интерференции". Далее, машинные затраты не так велики, как это может показаться, поскольку существует алгоритм /4/, позволяющий рассчитывать связанно-несвязанные переходы быстро (расчет спектра на ЕС-1045 в среднем занимает около 1 мин) и с высокой точностью.

Важное преимущество метода перебора состоит в том, что для потенциала $V_e(z)$ можно задавать большое количество параметров, из которых варьировать придется немногие, поскольку ОП должен удовлетворять некоторым правилам сумм.

Пусть $H_2 = p^2/2m + V_2(z)$ и $H_1 = p^2/2m + V_1(z)$ - гамильтонианы связанного и несвязанного состояний соответственно. Будем считать, что $\mu(z) = \text{const}$ и распределение интенсивностей в спектре определяется квадратом интеграла перекрытия СВФ и НВФ:

$$q_{VE} = \langle V|E \rangle = \int_0^\infty \psi_V(z) \psi_E(z) dz \quad (6)$$

Тогда

$$\int_0^\infty q_{VE}^2 dE = \int_0^\infty \langle V|E \rangle \langle E|V \rangle dE = \langle V|V \rangle = 1; \quad (7)$$

$$\begin{aligned} \int_0^\infty E q_{VE}^2 dE &= \int_0^\infty E \langle V|E \rangle \langle E|V \rangle dE = \\ &= \int_0^\infty \langle V|H_1|E \rangle \langle E|V \rangle dE = \langle V|H_1|V \rangle = \end{aligned} \quad (8)$$

$$= \langle V | H_2 + V_1 - V_2 | V \rangle = E_V + \langle V | V_1 - V_2 | V \rangle.$$

Аналогично (8),

$$\begin{aligned} \int_0^\infty E^2 q_{VE}^2 dE &= \langle V | H_1^2 | V \rangle = \langle V | (H_2 + V_1 - V_2)^2 | V \rangle = \\ &= \langle V | (E_V + V_1 - V_2)^2 | V \rangle. \end{aligned} \quad (9)$$

Если интегрировать q_{VE}^2 с E^3 и более высокими степенями E , то в правилах сумм появятся дополнительные члены, связанные с некоммутативностью операторов H_2 и $V_1 - V_2$ (обозначим $V_1 - V_2$ через T), например:

$$\begin{aligned} \int_0^\infty E^3 q_{VE}^2 dE &= \langle V | H_1^3 | V \rangle = \langle V | (H_2 + T)^3 | V \rangle = \langle V | H_2^3 + H_2^2 T + H_2 T H_2 + \\ &+ T H_2 + H_2 T^2 + T H_2 T + T^2 H_2 + T^3 | V \rangle = \langle V | E_V^3 + 3 E_V^2 T + 2 E_V T^2 + \\ &+ T^3 + T H_2 T | V \rangle = \langle V | (E_V + T)^3 | V \rangle + 1/2 m \langle V | T'^2 | V \rangle. \end{aligned} \quad (10)$$

Для более высоких степеней E формулы типа (9), (10) сильно усложняются, однако уже правила сумм (7) - (9) позволяют фиксировать три параметра в потенциале.

Если параллельно с ОП $V_1(z)$ мы варьируем функцию $\mu(z)$, то правила сумм (6)-(9) становятся более сложными из-за некоммутативности операторов H_2 и μ :

$$\int_0^\infty \mu_{VE}^2 dE = \int_0^\infty \langle V | \mu | E \rangle \langle E | \mu | V \rangle dE = \langle V | \mu^2 | V \rangle; \quad (11)$$

$$\begin{aligned} \int_0^\infty E \mu_{VE}^2 dE &= \int_0^\infty \langle V | \mu | E \rangle \langle E | H_1 \mu | V \rangle dE = \langle V | \mu H_1 \mu | V \rangle = \\ &= \langle V | \mu (H_2 + T) \mu | V \rangle = \langle V | \mu^2 T | V \rangle + \langle V | \mu^2 H_2 + \mu [H_2, \mu] | V \rangle = \\ &= \langle V | \mu^2 (E_V + T) | V \rangle + \frac{1}{2m} \langle V | \mu'^2 | V \rangle. \end{aligned} \quad (12)$$

В общем случае,

$$\int_0^\infty E^n \mu_{VE}^2 dE = \langle V | \mu H^n \mu | V \rangle. \quad (13)$$

Таким образом, и в этих условиях правила сумм позволяют

исключить из варьирования несколько параметров.

Итак, по сравнению с "квази-РКР" методом метод перебора обладает следующими преимуществами:

- 1) независимостью от типа спектра;
- 2) наличием эффективного алгоритма решения прямой задачи;
- 3) возможностью использования различных правил сумм для уменьшения числа варьируемых параметров.

Единственным существенным недостатком метода перебора является то, что он не имеет под собой никакой физической идеи, в отличие от "квази-РКР" метода, который основан на принципе Франка-Кондона и обобщенном квазиклассическом приближении. С вычислительной точки зрения, однако, в самом общем случае перебор является более предпочтительным способом решения обратной задачи.

Список литературы

1. Cooley J.W. // Math. Comput. - 1961. - Vol. 15. - P. 363.
2. Кузьменко Н.Е., Кузнецова Л.А., Кузяков Ю.Я. Факторы Франка-Кондона двухатомных молекул. - М.: Моск. ун-т. - 1984. - 344 с.
3. Еремин В.В., Кузьменко Н.Е. // Вестник МГУ. Химия, 1985. - 25 с. Деп. ВИНТИ 5.07.85, № 5072-85.
4. Еремин В.В., Кузьменко Н.Е. // Оптика и спектр. - 1987. - Т. 62. - № 2. - С. 312.
5. Condon E.U. // Phys. Rev. - 1928. - Vol. 32. - N 9. - P. 858.
6. Tellinghuisen J.B. // Phys. Rev. Lett. - 1975. - Vol. 34, N 56. - P. 1137.
7. Mulliken R.S. // J. Chem. Phys. - 1971. - Vol. 55, N 1. - P. 309.
8. Child M.S., Essen H., Le Roy R. // J. Chem. Phys. - 1983. - Vol. 78, N 11. - P. 6732.
9. Де Бор К. Практическое руководство по сплайнам. М.: Радио и связь, 1985. - 304 с.

А.П.Убелис, У.В.Верзины
ЛГУ им.П.Стучки
(Рига)

ВЕРОЯТНОСТИ ПЕРЕХОДОВ В АТОМАХ SeI и TeI

До начала восьмидесятых годов вероятности переходов SeI и TeI экспериментально были определены только в работе /1/ для пяти линий SeI и одиннадцати линий TeI , в работе /2/ для двух линий TeI . Были проведены также измерения относительных вероятностей некоторых переходов SeI /3/ и TeI /4/. Имеется ряд теоретических работ /5-8/, причем наиболее детальные расчеты проделаны в /7,8/. Так как для расчетов атомы SeI и TeI достаточно сложные, эти теоретические работы требуют экспериментального подтверждения.

Цель настоящей работы дать единую оценку наших прежних /9-11/ и последних измерений вероятностей переходов SeI и TeI и сравнить их с данными /7,8/.

Используя метод эмиссии, мы определяли относительные вероятности переходов групп линий атомов SeI и TeI с общими верхними уровнями, и методом поглощения - вероятности переходов групп линий с общими нижними уровнями (рис.1). Сравнивая результаты этих измерений, получили относительную шкалу вероятностей переходов TeI , а используя известные значения времен жизни некоторых уровней /12,13/, получили абсолютные значения вероятностей переходов для ряда линий SeI и TeI .

Методы измерений и аппаратура описаны в работах /9, 10/. Измерения методом эмиссии проводили в условиях, когда отсутствуют реабсорбция и пленение излучения в источниках спектра. В качестве источников использовались высокочастотные безэлектродные лампы (ВЭЛ $Se+Te$). Измеряли зависимости интенсивностей спектральных линий селена и теллура от мощности питания

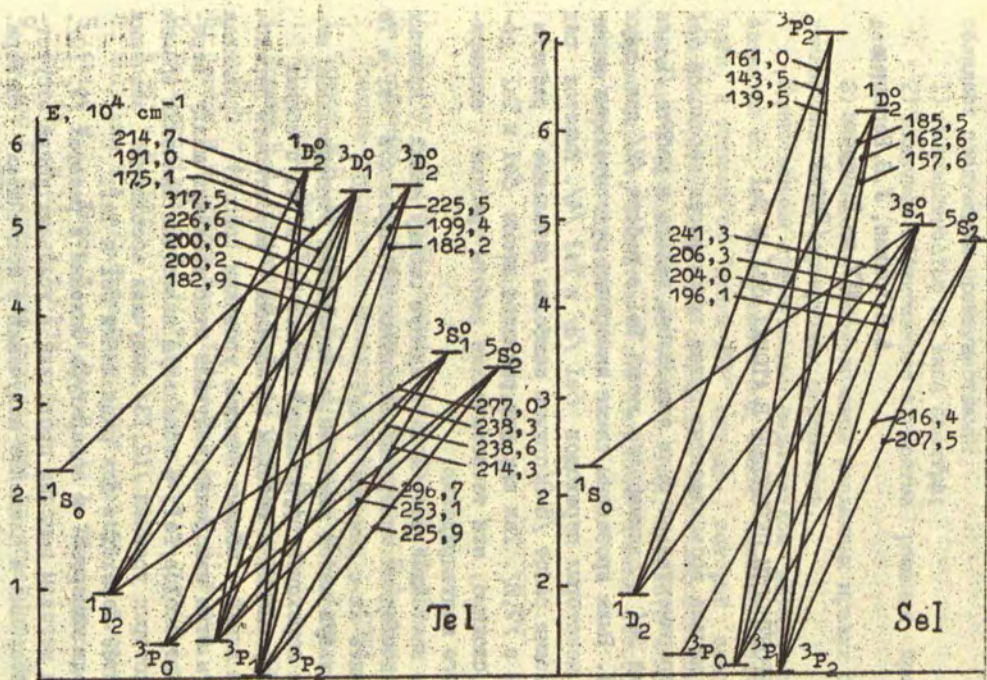


Рис. I. Упрощенная схема термов и спектральных линий SeI и TeI (длина волн дана в нм).

ламп. Изобразив результаты в виде зависимости отношения интенсивностей разных пар спектральных линий с общим верхним уровнем энергии от мощности (рис. 2), видим, что отношения при малых мощностях становятся постоянными. Это означает, что влияние реабсорбции и пленения излучения в ВЕЛ становится несущественным. Для определения вероятностей переходов использовали измерения зависимостей в горизонтальной части. При определении спектральной чувствительности установки в УФ-части спектра с $\lambda > 200$ нм использовали водородную лампу. Спектральную чувствительность установки в ВУФ-области спектра с $\lambda < 200$ нм определили, рассчитав отражающую способность дифракционной решетки (исходя из того, что коэффициент отражения покрытия из слоев $Al + MgF_2$ в исследуемом диапазоне спектра не меняется), а также измерив спектральную чувствительность ФЭУ-106 с окном из MgF_2 с помощью салицилата натрия и пропускание окон ВЕЛ перед экспериментом и после него. В итоге получены следующие значения относительных вероятностей переходов:

SeI

$$\begin{aligned} A_{I96,1} : A_{204,0} : A_{206,3} : A_{241,3} &= \\ &= (100 \pm 1) : (46 \pm 1) : (15,5 \pm 0,5) : (0,54 \pm 0,18) \quad /II/ \\ A_{207,5} : A_{216,4} &= (100 \pm 5) : (19 \pm 1) \quad /наст. работа/ \\ A_{185,5} : A_{162,6} : A_{157,5} &= (100 \pm 10) : (0,75 \pm 0,15) : (4,9 \pm 1,0) \\ &\quad /наст. работа/ \\ A_{139,5} : A_{143,5} : A_{161,1} &= (70 \pm 15) : (100 \pm 10) : (25 \pm 3) \\ &\quad /наст. работа/. \end{aligned}$$

TeI

$$\begin{aligned} A_{132,9} : A_{200,2} : A_{226,6} : A_{317,5} : A_{200,2} &= \\ &= (8 \pm 1) : (100 \pm 0) : (22 \pm 2) : (3 \pm 0,3) : (8 \pm 1) \quad /II/ \\ A_{182,2} : A_{199,4} : A_{225,5} &= (100 \pm 10) : (12 \pm 1) : (8 \pm 1) \quad /II/ \\ A_{175,2} : A_{191,0} : A_{214,7} &= (100 \pm 10) : (2 \pm 0,2) : (100 \pm 10) \quad /II/ \end{aligned}$$

К этим результатам можно добавить полученные в работе

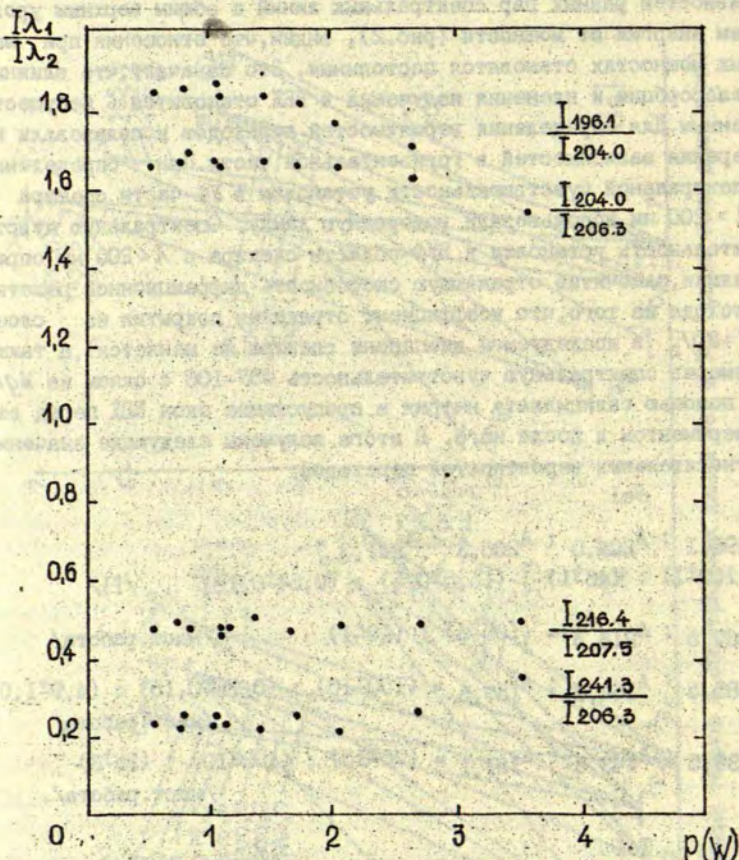


Рис.2. Отношение интенсивностей различных пар спектральных линий селена в зависимости от потребляемой ВЕШ мощности (длина волн в индексах дана в нанометрах).

/9/ данные об относительной вероятности переходов TeI:

$$A_{214,2} : A_{238,6} : A_{238,3} : A_{277,0} = \\ = (100 \pm 7) : (26 \pm 0,2) : (13 \pm 0,2) : (0,39 \pm 0,12)$$

$$A_{225,9} : A_{253,1} : A_{296,7} = (100 \pm 4) : (8,5 \pm 0,5) : (0,065 \pm 0,025)$$

Погрешности измерений относительных вероятностей переходов включают погрешность измерения относительных интенсивностей и погрешность градуировки регистрирующей системы по отношению к спектральной чувствительности.

Применяя метод поглощения, нами в работе /9/ получено отношение вероятностей переходов для спектральных линий 214,3 и 225,9 нм TeI с общим нижним уровнем основного состояния теллура 3P_2 . В эксперименте измерено отношение оптической толщины двух линий в центре соответствующих линий. Для повышения точности результатов оптическую толщину определяли в зависимости от концентрации атомов на основном уровне. Получено следующее отношение вероятностей переходов:

$$A_{214,3} : A_{225,9} = 23,4 \pm 6,3.$$

Метод поглощения в условиях импульсного фотолиза применяли для определения отношения вероятностей переходов с общими нижними уровнями 3P_1 и 1D_2 /9,10/. Измерялись значения оптической толщины в центре спектральной линии в зависимости от населенности указанных метастабильных уровней. Получены следующие отношения вероятностей переходов TeI:

$$A_{238,6} : A_{253,1} = 81 \pm 5 \quad /9/$$

$$A_{214,7} : A_{225,5} : A_{226,5} : A_{226,9} : A_{277,0} = \\ = (100 \pm 5) : (5,4 \pm 0,2) : (6,3 \pm 0,2) : (3,8 \pm 0,15) : (0,31 \pm 0,015) \quad /10/.$$

Сопоставление всех перечисленных относительных вероятностей переходов позволило составить единую относительную шкалу для восемнадцати спектральных линий TeI (табл. I). Для линий с верхним уровнем $^5S_2^0$ получены два значения: первое - с использованием отношения $A_{214,2} : A_{225,9}$, второе - с исполь-

Таблица I.

Вероятности переходов TeI между конфигурациями $5p^3 6s - 5p^4$.

Переход	$\lambda, \text{нм}$	/7/		/8/ DV^*		/8/ DL^*		Наст. работа	
		отн.ед.	абс., c^{-1}	отн.ед.	абс., c^{-1}	отн.ед.	абс., c^{-1}	отн.ед.	абс., c^{-1}
I	2	3	4	5	6	7	8	9	10
$3S_1^0 - 3P_2$	214,2	100	170(6) ^{ЖЖ}	100	275(6)	100	343(6)	100	310 ± 12 (6)
- $3P_1$	238,6	27	482(5)	28	865(6)	31	932(5)	26	810 ± 65 (5)
- $3P_0$	238,3	16	232(5)	13,6	488(5)	18	551(5)	13	405 ± 35 (5)
- $1D_2$	277,0	0,4	131(4)	0,77	191(4)	0,7	125(4)	0,39	122 ± 40 (4)
$5S_2^0 - 3P_2$	225,9	1,8	302(4)	3,4	931(4)	5,2	177(5)	4,1 3,6 ^{ЖЖЖ}	128 ± 4 (5)
- $3P_1$	253,1	0,07	119(3)	0,15	379(3)	0,26	902(3)	0,35 0,31 ^{ЖЖЖ}	109 ± 8 (4)
- $1D_2$	296,7	0,0032	548(1)	0,0023	628(2)	0,0041	142(2)	0,0027 0,0024 ^{ЖЖЖ}	840 ± 340 (1)
$3D_1^0 - 3P_2$	182,9	0,8	140(4)	1,6	436(3)	1,5	505(4)	2,9	890 ± 400 (4)
- $3P_1$	200,2	42	719(5)	42	115(6)	54	186(6)	3,6	110 ± 50 (6)

Таблица I
(продолжение)

I	2	3	4	5	6	7	8	9	10
$3D_1^0 - 3P_0$	200,0	14	234(5)	9,8	270(5)	13	435(5)	2,9	900 ± 400 (5)
- $1D_2$	226,6	3,5	587(4)	5,5	152(5)	6,9	237(5)	7,9	247 ± 80 (80)
- $1S_0$	317,5	0,23	399(3)	0,94	258(4)	0,48	166(4)	1,1	350 ± 150 (4)
$3D_2^0 - 3P_2$	182,2	52	888(5)	40	109(6)	55	188(6)	83	280 ± 140 (6)
- $3P_1$	199,4	15	263(5)	11	293(5)	13	453(5)	10	310 ± 170 (5)
- $1D_2$	225,5	6,2	105(5)	9,2	254(5)	8,3	285(5)	67	210 ± 70 (5)
$1D_2^0 - 3P_2$	175,2	7	120(5)	2,6	740(4)	1,9	642(4)	92	340 ± 170 (6)
- $3P_1$	191,0	12	198(5)	11	302(5)	15	529(5)	1,8	620 ± 300 (4)
- $1D_2$	214,7	94	160(6)	89	246(6)	96	328(6)	92	340 ± 115 (6)

* DV, DL - приближения дипольной скорости и дипольной длины.

** Число в скобках - показатель степени n множителя 10^n .

*** Второе значение получено при использовании отношения $A_{238,6} \cdot A_{253,1}$.

зованием отношения $A_{238,6} : A_{253,1}$. Расхождения значений несущественные, что свидетельствует о точности определения относительных вероятностей переходов с уровней $5s_2^0$ и $3s_1^0$. При сравнении наших результатов с результатами, полученными другими авторами, видно, что в пределах погрешностей имеется очень хорошее согласие с расчетами /7,8/, для переходов с уровней $5s_2^0$, $3s_1^0$ TeI. Погрешности наших измерений всюду приведены в виде стандартных отклонений с доверительной вероятностью 0,67, а погрешности расчетов в /7,8/, по утверждению их авторов, могут достигать 40%. Для остальных переходов согласие хуже. Полученные нами значения несколько выше для переходов $3D_1^0 - 3P_2$ ($\lambda=182,9$ нм) и $3D_2^0 - 3P_2$ ($\lambda=182,2$ нм), существенно выше для перехода $1D_2^0 - 3P_2$ ($\lambda=175,2$ нм) и ниже для переходов $3D_1^0 - 3P_{0,1}$ ($\lambda=200,0$, $200,2$ нм). Нам кажется, что для переходов $3D_1^0 - 3P_{0,1}$ следует предпочесть данные, полученные в эксперименте, поскольку относительные интенсивности близкорасположенных линий 200,0 и 200,2 нм можно измерить с высокой точностью благодаря малой погрешности, вносимой спектральной чувствительностью установки.

Для относительных вероятностей переходов BeI из-за отсутствия измерений методом поглощения из нижних уровней единую шкалу относительных вероятностей переходов составить не удалось. При сравнении полученных нами относительных значений вероятностей переходов для трех групп спектральных линий (табл.2) с расчетными из /7,8/ обнаруживается хорошее согласие для переходов с уровней $3s_1^0$ и $5s_2^0$. Для переходов с уровней $1D_2^0$ и $3P_2$ согласие хуже, причем экспериментальные значения имеют большие погрешности.

Переход к абсолютным значениям вероятностей переходов (табл.1,2) осуществляли, используя известные значения времен жизни некоторых уровней BeI /12/ и TeI /12,13/ (табл.3). Кроме того, использовали коэффициенты умножения "к", приведенные в табл.3. Значения коэффициентов вычислены по формуле:

$$K = \frac{1}{\tau_j \sum_i A_{ji}},$$

где τ_j - время жизни уровня j , A_{ji} - относительные значения

Таблица 2

Вероятности переходов в атоме BeI между конфигурациями $4p^3 5s - 4p^4$.

Переход	$\lambda, \text{нм}$	/7/		/8/ DV^*		/8/ DL^*		Наст. работа.	
		отн.ед.	абс., с^{-1}	отн.ед.	абс., с^{-1}	отн.ед.	абс., с^{-1}	отн.ед.	абс., с^{-1}
$3s^0_1 - 3p_2$	196,1	100	180(6) ^{жж}	100	279(6)	100	317(6)	100	$363^{\pm} 51$ (6)
- $3p_1$	204,0	48	869(5)	51	143(6)	50	157(6)	46	$167^{\pm} 26$ (6)
- $3p_0$	206,3	16	283(5)	17	488(5)	17	534(5)	15,5	$560^{\pm} 100$ (5)
- $1D_2$	241,3	0,31	556(3)	0,40	112(4)	0,26	828(3)	0,54	$200^{\pm} 90$ (4)
$5s^0_2 - 3p_2$	207,5	100	358(3)	100	882(3)	100	190(4)	100	-
- $3p_1$	216,4	17	600(2)	18	156(3)	19	356(3)	19	-
$1D^0_2 - 3p_2$	157,5	3,9	999(4)	2,4	858(4)	2,5	117(5)	4,9	$247^{\pm} 50$ (5)
- $3p_1$	162,6	2,2	547(4)	2,2	779(4)	3,1	145(5)	0,75	$375^{\pm} 75$ (4)
- $1D_2$	185,5	100	253(6)	100	355(6)	100	456(6)	100	$500^{\pm} 100$ (6)
$3p^0_2 - 3p_2$	139,5	100	114(6)	100	845(5)	100	194(6)	70	$140^{\pm} 60$ (6)
- $3p_1$	143,5	69	781(5)	66	653(5)	69	129(6)	100	$200^{\pm} 80$ (6)
- $1D_2$	161,1	17	188(5)	16	212(5)	17	308(5)	25	$500^{\pm} 200$ (5)

* DV, DL - приближения дипольной скорости и дипольной длины.

жж- Число в скобках - показатель степени n множителя 10^n .

Таблица 3

Времена жизни уровней TeI и SeI по /12/.

Элемент	Уровень	τ , нс	K^* , $\text{с}^{-1} \cdot 10^6$
TeI	$^1D_2^0$	$3,1 \pm 0,4$	$1,7 \pm 1,3$
	$^3S_1^0$	$2,35 \pm 0,4$	$3,1 \pm 0,9$
	$^5S_2^0$	$71,8 \pm 2,2^{**}$	$3,6 \pm 0,3$ $3,1 \pm 0,2^{***}$
SeI	$^3P_2^0$	$2,6 \pm 0,6$	$2,0 \pm 0,8$
	$^1D_2^0$	$1,9 \pm 0,2$	$5,0 \pm 1,1$
	$^3S_1^0$	$1,7 \pm 0,2$	$3,6 \pm 0,4$

* K - коэффициент для получения абсолютных значений вероятностей переходов.

** Данные /13/.

*** Значение получено при использовании относительных вероятностей переходов с индексом *** из табл. I.

вероятностей переходов с уровня j на нижележащие уровни i. Поскольку получена единая шкала вероятностей переходов для всех измерявшихся линий TeI, то при расчете абсолютных значений можно использовать любой из четырех приведенных в табл. 3 коэффициентов. Как видно из табл. 3, значения трех коэффициентов в пределах погрешностей совпадают, и в табл. I приведены значения, полученные с помощью коэффициента $K=3,1 \cdot 10^{-6} \text{ с}^{-1}$. Значение коэффициента, полученное при использовании в расчетах времени жизни уровня $^1D_2^0$ ($1,7 \pm 1,3 \text{ с}^{-1}$), значительно ниже остальных значений и имеет большую погрешность. Разница в значениях коэффициентов, по-видимому, вызвана как неточностью определения времени жизни этого уровня, так и неточностью измерения отношений $A_{214,7} : A_{277,0}$ и $A_{214,7} : A_{175,2}$.

Сравнить значения коэффициентов для SeI невозможно, поскольку нет единой шкалы относительных значений вероятностей

переходов измерявшихся спектральных линий.

Подытоживая проделанную работу, можно сделать следующие выводы. Надежность измеренных относительных значений вероятностей переходов SeI и TeI довольно высока. Абсолютные значения имеют разные погрешности. Среди всех следует выделить спектральные линии TeI - 214,2 , 238,6 , 238,3 (общий верхний уровень $^3\text{S}_1^0$) и 225,9 , 253,1 нм (общий верхний уровень $^5\text{S}_2^0$). Высокая надежность значений абсолютных вероятностей переходов этих линий подтверждается хорошим согласием результатов эмиссионных и абсорбционных измерений в работах нашей группы и результатов измерений времен жизни в работах /12/ , /13/.

Применение метода поглощения для определения относительных вероятностей переходов $A_{214,2} : A_{182,9} : A_{182,2} : A_{175,2}$ TeI дадут возможность повысить точность измерения относительных величин, приведенных в табл. I, а измерения $A_{196,1} : A_{207,5} : A_{157,5}$ позволят составить единую шкалу относительных вероятностей переходов SeI .

Список литературы

1. Корлисс Ч., Бозман У. Вероятности переходов и силы осцилляторов 70 элементов / Пер. с английского.- М.: Мир, 1968. - 562 с.
2. Львов Б.В. Проблемы атомизации веществ в атомно-абсорбционном анализе и некоторые применения атомно-абсорбционной спектроскопии: Автореф. дис ... докт. физ.- мат. наук. - 1972. - 32 с.
3. Krempel H., Schmid G. // Spectrochim. Acta B. - 1968. - Vol.23B, N 12. - P.819.
4. Мурадов В.Г., Фомичев В.М. // ЖПС. - 1977. - Т. 27. - Вып. 6. - С.980.

5. Knox R.S., Olechna O.I. // J.Chem. Phys. - 1967. - Vol. 47, N 12. - P.5226.
6. Lawrence G.M. // Astrophys. J. - 1967. - Vol. 148, N 1. - P.261.
7. Груздев П.Ф. // Опт. и спектр. - 1969. - Т. 27. - Вып.6. - С.877.
8. Garpman S., Holmgren L., Rosen A. // Phys. Scr. - 1974. - Vol.10, N 2. - P.221.
9. Obelis A.P., Bërzinsh U.V. // Phys. Scr. - 1983. -1983. Vol. 28, N 2. - P.171.
10. Убелис А.П., Берзиньш У.В. Атомная спектроскопия. Тез. докл. 19-го Всесоюзного съезда по спектроскопии. - Томск, 1983. - С.115.
11. Берзиньш У.В., Убелис А.П. Тез.докл. 6-ой Всесоюзной ко.ф. по физике ВУФ и его взаимодействия с веществом. - Рига, 1986. - С.150.
12. Dynefors B.I. // Phys. Scr. - 1972. - Vol. II, N 3. - P.375.
13. Garpman S., Svanberg S. // Phys. Scr. - 1972. - Vol.5, N 4. - P.213.

А.Е. Вульшев, Н.В. Денисова, Н.Г. Преображенский,
А.Е. Суворов
ИТМ СО АН СССР
(Новосибирск)

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ БЕЗЭЛЕКТРОДНОГО ВЫСОКОЧАСТОТНОГО РАЗРЯДА

Безэлектродный высокочастотный разряд типа лампы Белла-Блюма широко используется в спектроскопическом эксперименте как источник линейчатого излучения атомов и ионов /1,2/. В последнее время появились работы по применению ВЧ-разряда в оптогальваническом эксперименте /3,4/. Создание теории плазмы такого разряда - актуальная задача. Отдельные аспекты описания плазмы в безэлектродном ВЧ-разряде затронуты в работах /5,6/, однако замкнутое описание разряда отсутствует. Авторы работ /5,6/ базируются на модели Шоттки, аналогичной положительному столбу тлеющего разряда низкого давления. Большая серия работ по расчету высокочастотных безэлектродных ламп (ВЕЛ) проделана авторами работы /7/ (см. также ссылки в этой работе). Авторы работы /7/ ориентировались в основном на лампы малой мощности, когда скин-эффект выражен слабо.

В данной работе сделана попытка получить самосогласованное решение, т.е. определить параметры плазмы и распределение электромагнитных полей. При этом модель Шоттки рассматривается лишь как частный случай, численный же метод позволяет решить более общую задачу. Получены условия применимости модели Шоттки.

Разряд горит в цилиндрической трубке радиуса R , помещенной в соленоид. Разряд возбуждается внешним магнитным полем $H_0 \cos(\omega t)$, направленным вдоль оси разряда. Плазма считается однородной вдоль оси цилиндра, параметры зависят лишь от радиальной координаты. Предполагая, что функция распределения электронов по скоростям равновесна с температурой T_e , можно записать систему уравнений, описывающую параметры плазмы.

Уравнение баланса числа электронов - уравнение амбиполярной диффузии /8/:

$$\frac{\partial n_e}{\partial t} = D_a \Delta n_e + S_e n_e \quad (1)$$

Здесь $n_e(\vec{r}, t)$ - концентрация электронов; D_a - коэффициент амбиполярной диффузии; $S_e(\vec{r}, t)$ - скорость рождения электронов за счет ионизации электронным ударом.

$$S_e = \sum_{k=0}^{\infty} N_k \langle \sigma_k v \rangle, \quad (2)$$

где N_k - заселенность k -го уровня атома; σ_k - сечение ионизации с k -го уровня; v - скорость электрона (угловыми скобками обозначено усреднение по максвеллову распределению электронов по скоростям). Уравнение (1) дополняется граничным условием

$$n_e(R, t) = 0, \quad (3)$$

которое означает гибель электронов на стенке. Другие виды рекомбинации не учитываются.

Уравнение баланса энергии электронов

$$\frac{3}{2} \frac{\partial}{\partial t} n_e T_e = - \operatorname{div} \vec{q}_T + S^+ - S^- + Q_1 - Q_2, \quad (4)$$

где q_T - поток энергии электронов; Q_1 - энерговклад внешнего поля; Q_2 - работа против сил амбиполярного поля; S^+ и S^- - источниковый и стоковый члены, описывающие нагревание и остывание электронного газа за счет упругих и неупругих столкновений с атомами.

$$S^+ - S^- = \sum_{i \neq j} \Delta E_{ij} \langle \sigma_{ij} v \rangle N_i n_e, \quad (5)$$

где ΔE_{ij} - разность энергии уровней i и j ; σ_{ij} - сечение соответствующего перехода (включая ионизацию); N_i - заселенность уровня i . Оценки показывают, что при давлении около 1 мм рт.ст. потерями энергии в упругих столкновениях можно пренебречь. Этот вывод согласуется с данными работы [7]. Из уравнения Больцмана можно получить, что в условиях амбиполярной диффузии

$$\vec{q}_T = -\alpha \vec{\nabla} T + \vec{j} \varphi(T_e), \quad (6)$$

где α - коэффициент электронной теплопроводности; $\vec{j}$ - плотность потока электронов. Функция $\varphi(T_e)$ зависит от вида сечения упругого рассеяния электронов на атомах и по порядку значения равна T_e . Два члена в уравнении (6) характеризуют кондуктивный и конвективный перенос тепла.

Уравнение (4) должно быть дополнено граничным условием на стенке трубки. Электроны рекомбинируют на стенке, поток энергии вблизи стенки в точности равен второму слагаемому в уравнении (6). Следовательно, на стенке выполняется граничное условие

$$\left. \frac{\partial T_e}{\partial r} \right|_{r=R} = 0. \quad (7)$$

Модельные расчеты с таким граничным условием показывают, что благодаря большой теплопроводности электронов T_e практически постоянна по объему. Ввиду этого можно проинтегрировать уравнение (4) по объему:

$$\frac{3}{2} T_e \frac{d}{dt} \int_V n_e dv = \int_V (S^+ - S^-) dv + \int_V (Q_1 - Q_2) dv - J \varphi(T_e), \quad (8)$$

где J - полный поток электронов на стенку. При амбиполярной диффузии этот поток мал и в дальнейшем им пренебрегают.

Заселенности атомов в возбужденных состояниях, необходимые для расчета источниковых и стоковых членов в уравнении (8), вычисляли с помощью балансного уравнения

$$\begin{aligned} \frac{\partial N_j}{\partial t} = & -A_j \theta_j N_j - N_j \sum_K n_e \langle \sigma_{jk} v \rangle + \\ & + \sum_K n_e N_K \langle \sigma_{kj} v \rangle, \end{aligned} \quad (9)$$

где A_j - коэффициент Эйнштейна; θ_j - эффективная вероятность вылета фотона, учитывающая эффект пленения излучения [9].

Энергетический вклад внешнего поля

$$Q_1 = 1/2 \mathcal{G}_R |\vec{E}|^2, \quad (10)$$

где $\mathcal{G}_R$ - реальная часть проводимости плазмы; E - электрическое поле на частоте ω . Проводимость плазмы $\mathcal{G}$ выбрана на виде /5/:

$$\mathcal{G} = \mathcal{G}_R + i\mathcal{G}_I = \frac{n_e e^2 (\gamma - i\omega)}{m_e (\gamma^2 + \omega^2)}, \quad (11)$$

где i - мнимая единица; e , m_e - заряд и масса электрона; γ - частота упругих столкновений. Распределение электрического поля находили по уравнениям скин-слоя /5/:

$$\begin{aligned} \text{rot } \vec{H} &= \frac{4\pi}{c} \mathcal{G} \vec{E} & \text{div } \vec{H} &= 0; \\ \text{rot } \vec{E} &= -\frac{i\omega}{c} \vec{H} & \text{div } \vec{E} &= 0. \end{aligned} \quad (12)$$

где $\vec{H}$ - напряженность магнитного поля на частоте ω ; c - скорость света. В приведенной геометрии от нуля отличны лишь компоненты H_z магнитного поля и E_φ - электрического поля. Основным интерес представляет стационарное состояние плазмы разряда, т.е. решение уравнений (1)-(9) при $\partial/\partial t = 0$. С вычислительной точки зрения удобнее решать нестационарные уравнения с некоторыми начальными условиями - использовать метод установления /10/. Стационарные решения получаются как предел при больших значениях времени.

Для решения уравнения (1) была задана сетка по радиусу трубки с равномерным шагом h . Шаг по времени τ также был равномерным.

Примем, что $n_i^j = n_e(h_i, j, \tau)$.

Уравнение (1) аппроксимировали следующим конечно-разностным аналогом:

$$\begin{aligned} \frac{n_i^{j+1} - n_i^j}{\tau} &= D_i^j \frac{n_i^{j+1} - 2n_i^j + n_{i-1}^{j+1}}{h^2} + \frac{1}{R_i} \frac{n_{i+1}^{j+1} - n_{i-1}^{j+1}}{2} + \\ &+ S_{ei}^j n_i^{j+1}, \quad i=0, \dots, N-1; \\ &\quad j=0, 1, 2, \dots \end{aligned} \quad (13)$$

где D_i^j и S_{ei}^j - коэффициенты, при вычислении которых параметры плазмы взяты с временного слоя под номером j ; N - число узлов по радиусу. Уравнение (13) решали методом прогонки /II/.

В качестве граничных условий использовали

$$\begin{aligned} n_0^j &= n_1^j; \\ n_N^j &= \frac{\lambda}{h} (n_N^j - n_{N-1}^j). \end{aligned} \quad (14)$$

В целом процедура решения выглядела следующим образом. По заданному начальному значению $n_e(z)$ определяли внешние поля, населенности и температуру электронов. По этим данным вычисляли значения D_i^j и S_{ei}^j , после чего определяли значение $n_e(z)$ в следующий момент времени. Такие вычисления многократно повторяли. Процесс прекращали, когда разница между предыдущим и последующим решениями становилась малой - решение выходило на стационар.

Для определения электромагнитного поля из системы уравнений (12) можно получить уравнение только на H_z :

$$\Delta H_z - \frac{i}{l^2} H_z = 0. \quad (15)$$

Здесь $l = \frac{c}{\sqrt{\epsilon \omega}}$ - глубина скин-слоя; E_φ можно определить из уравнений Максвелла. Уравнение (15) аппроксимировали конечно-разностным уравнением на прежней пространственной сетке:

$$\frac{H_{k+1} - 2H_k + H_{k-1}}{h^2} + \frac{1}{R_k} \frac{H_{k+1} - H_{k-1}}{2h} - \frac{i}{l_k^2} H_k = 0; \quad (16)$$

$$k = 0, \dots, N-1;$$

$$H_N = H_0.$$

Систему уравнений (16) решали методом матричной прогонки /II/ (следует помнить, что H_z - комплексная величина).

Для вычисления заселенности возбужденных состояний атома решали стационарный вариант системы (9). Существенным моментом при этом является определение необходимого числа возбужденных состояний. О выборе этого числа речь пойдет ниже.

В последнюю очередь решали уравнение для температуры -

уравнение (8). Решали стационарный вариант этого уравнения. Интегралы, входящие в уравнение (8), приближали формулой Вилсона, уравнение решали методом Ньютона. Конкретные расчеты проводили для разряда в чистом аргоне. Для расчета заселенностей близлежащие уровни объединяли в блоки согласно рекомендации /9/, при этом использовались силы осцилляторов, приведенные в работе /12/. Для вычисления сечений неупругих процессов применяли эмпирические формулы Дравина /9/.

Согласно приведенной выше схеме была выполнена серия расчетов с целью выяснения параметров разряда. В первую очередь исследовался вопрос о механизме ионизации атома. Как указывалось выше, в ранних работах использовалась модель Шоттки, согласно которой ионизация атомов происходит преимущественно из основного состояния. Определенный интерес представляет и так называемая модифицированная теория Шоттки /13, 14/, в которой ионизация с возбужденных состояний учитывается, но предполагается, что $S_e(r) = \text{const}$ не зависит от пространственных координат. В обоих этих случаях стационарное решение уравнения (1) есть функция Бесселя:

$$n_e(r) = n_e(0) J_0(\xi r), \quad (17)$$

где

$$\xi = \sqrt{\frac{S_e}{D_a}}.$$

Решение задачи в условиях применимости этих двух моделей значительно проще - не нужно решать уравнение (1). Температура T_e в этом случае определяется с помощью граничного условия (3). А из уравнения (8) (в стационарном варианте) определяется не T_e , а $n_e(0)$.

Применимость обеих моделей была исследована в численном эксперименте. Существенным моментом решения задачи в полной постановке и по модифицированной теории Шоттки является выбор необходимого числа уровней атома. Решать этот вопрос следует в соответствии с общей теорией заселения возбужденных уровней атома в неравновесной плазме /9/. На основании этой теории следует сделать вывод, что последний принятый во внимание уровень должен быть выше (по шкале энергий) "узкого места". В численном эксперименте число уровней варьировалось с целью определения механизма ионизации.

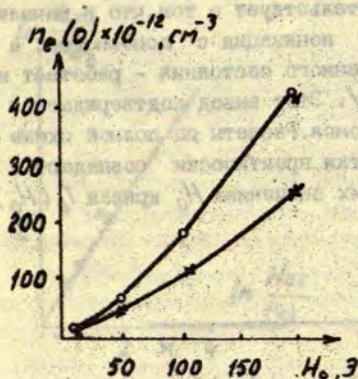


Рис.1. Зависимость плотности электронов в центре трубки от напряженности внешнего поля. Расчет по разным моделям.

- х - расчетные точки в модели Шоттки
- + - расчет по модифицированной модели Шоттки
- о - расчет по полной схеме.

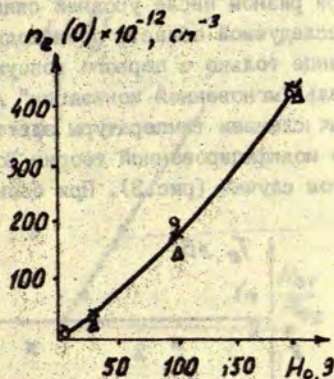


Рис.2. Зависимость плотности электронов в центре трубки от напряженности внешнего поля. Расчет для разного числа уровней атома.

- М - число учитываемых уровней.
- + - расчет по полной схеме, М=5
- Δ - расчет по модифицированной модели Шоттки, М=2
- о - расчет по модифицированной модели Шоттки, М=5, 10.

Из рис.1, где приведен результат расчета зависимости концентрации электронов в центре трубки при $R = 1,5$ см, $N_a = 10^{15} \text{ см}^{-3}$, видно, что отклонения от теории Шоттки значительны при $H_0 > 10$, а расчеты по полной теории и по модифицированной теории Шоттки практически совпадают. Это показывает, что при плавной зависимости параметров плазмы от координат замена $S_e(z)$ на постоянную величину незначительно сказывается на коэффициенте ионизации. В данном расчете учитывалось 10 объединенных уровней. "Узкое место" находилось заведомо внутри этого интервала. Интересным был вопрос об изменении числа рассматриваемых уровней. $n_e(0)$ в зависимости от

магнитного поля H_0 (рис.2). Совпадение результатов расчета при разном числе уровней свидетельствует о том, что в начале исследуемой области происходит ионизация с основного, а в конце только с первого возбужденного состояния - работает модель "мгновенной ионизации" [9]. Этот вывод подтверждается и вычислением температуры электронов. Расчеты по полной схеме и по модифицированной теории Шоттки практически совпадают и в этом случае (рис.3). При больших значениях H_0 кривая $T_e(H_0)$

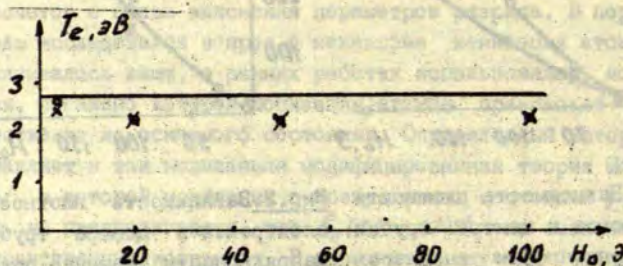


Рис.3. Зависимость электронной температуры T_e от напряженности внешнего поля H_0 .

прямая - расчет по теории Шоттки

x - расчет по модифицированной модели Шоттки

o - расчет по полной схеме.

выходит на константу, совпадающую с константой, получаемой по модели Шоттки при условии, что в качестве потенциала ионизации взята энергия возбуждения первого возбужденного состояния. Это и означает, что в исследуемой области справедливо приближение "мгновенной ионизации".

Вторая серия расчетов была направлена на выяснение зависимости параметров плазмы $n_e(0)$ и P - полной поглощенной энергии от H_0 . Как нетрудно показать [15], в простейшей модели разряда

$$n_e(0) \sim H_0^{4/3} \text{ и } P \sim H_0^{4/3}$$

Эти зависимости были проверены в рамках полной модели. Результаты сравнения (рис.4 и 5) показывают, что отклонения от

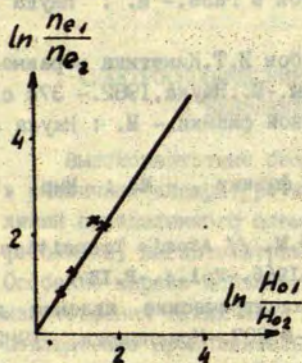


Рис.4. Зависимость плотности электронов от внешнего поля. прямая - зависимость $n_e \sim H_0^{4/3}$ x - расчетные точки.

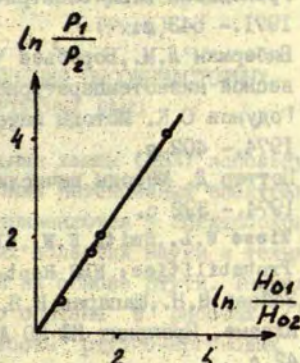


Рис.5. Зависимость полной поглощенной энергии P от внешнего поля. прямая - зависимость $P \sim H_0^{4/3}$ o - расчетные точки.

закона "4/3" в исследуемой области параметров незначительна.

Список литературы

1. Краулина Э.К., Круглевский В.А. Сенсибилизированная флуоресценция смесей паров металлов. - Рига: ЛГУ им. П. Стучки. 1977. - С.3.
2. Kuremochi N. et al. - Jap. // J. Appl. Phys. - 1977. - Vol. 16, N 5. - P. 673.
3. Suzuki T. // Opt. Comm. - 1981, - Vol. 38, N 5. - P. 364.
4. Suzuki T., Kakimoto M. // J. Molecular Spectroscopy. - 1982. - Vol. 93. - P. 423.
5. Henriksen B.B., Keefer D.R., Clarkon M.A. // J. Appl. Phys. - 1971. - Vol. 42, N 13. - P. 5460.
6. Keefer D.R. // AIAA Paper. - 1969. - N 703.
7. Агапов А.С., Матвеев А.А., Хуторщиков В.И. Процессы переноса энергии в парах металлов. - Рига: ЛГУ им. П. Стучки.

1985.-С.89.

8. Грановский В.П. Электрический ток в газе.- М. : Наука , 1971.- 543 с.
9. Биберман Л.М., Воробьев В.С., Якубов И.Т. Кинетика неравновесной низкотемпературной плазмы.-М.:Наука,1982.- 375 с.
10. Годунов С.К. Методы математической физики.- М. : Наука , 1974.- 402 с.
11. Поттер Д. Методы вычислительной физики . - М. : Мир , 1974.- 392 с.
12. Wiese W.L., Smith N.W., Glennon B.M. // Atomic Transition Probabilities: NBS Rept NSRDS.-1966.-Vol.4.-P.187.
13. Зайцев Н.Н., Шапарев Н.Я. Оптоэлектрические явления в плазме. Препринт ИФ СО АН СССР.-№ 207.-Красноярск. -1982 42 с.
14. Valentini H.B.//Opt.Comm.-1985.-Vol.53, N 5.-P.313.
15. Вульмев А.Е., Преображенский Н.Г. // ДАН СССР. - 1984 . - Т.279 , № 6. - С.1357.

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

СПЕКТРОСКОПИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ВЫСОКОЧАСТОТНЫХ БЕЗЭЛЕКТРОДНЫХ РТУТНЫХ ЛАМП

Высокочастотные безэлектродные лампы (ВБЛ) используются в различной аппаратуре как источник интенсивных спектральных линий определенного элемента и применяются в спектроскопии, фотохимии, магнитометрии и других областях науки и техники. Особенно широко используются ВБЛ на основе ртути. Технология изготовления таких ламп подробно описана в работах /1,2/. Исследована продолжительность работы ртутно-аргоновых безэлектродных ламп, применяемых для оптической накачки в ртутном магнитометре /3/. В связи с разработкой стандартов частоты на ионах ртути /4/ появились исследования, посвященные изучению ионных линий ртути, которые также наблюдаются в спектрах излучения ВБЛ на основе ртути /5,6/. Долговечность и интенсивность излучения ВБЛ в значительной степени определяются количеством рабочего элемента в лампе. В поисках оптимального давления ртути авторы работы /7/ определяли зависимость интенсивности интеркомбинационной линии 253,7 нм ($6^3P_1 - 6^1S_0$) от температуры лампы. Максимум наблюдался при температуре 50°C, что соответствует давлению паров ртути в лампе $1,2 \cdot 10^{-2}$ мм рт.ст. При более высокой температуре отмечено снижение интенсивности излучения, которое можно объяснить ре-абсорбцией линии 253,7 нм.

В данной работе мы продолжили исследования, направленные на оптимизацию технологии изготовления ВБЛ для решения различных задач в широком спектральном диапазоне. Нами определены излучение примесей в спектре ламп, абсолютные интенсивности спектральных линий, ионные линии, оптимальное давление ртути в лампах и столкновительное уширение спектральной линии ртути 407,6 нм ($7^3S_1 - 6^3P_0$) с аргоном. Мы изготовили лампы-шариковые баллоны с удлинённым отростком, в котором находилась капля ртути. В качестве буферного газа использовали аргон и криптон. Лампу помещали в индуктор высокочастотного генератора ППБЛ-3М, мощность возбуждения которого не менее

лась. Отросток находился в термостате, температура которого определяла давление паров ртути в лампе. Излучение лампы регистрировали с помощью ФЭУ-106 в режиме счета фотонов.

В спектре излучения ртутных ВБЛ кроме спектральных линий ртути и инертного газа наблюдали слабое свечение линий водорода и кислорода. Присутствие водорода в лампах, по-видимому связано с разложением паров масла в разряде, поскольку в масспектре остаточных газов после обезгаживания остаются примеси, химическая формула которых $C_nH_m/8$. Примесь кислорода отмечена и авторами [9] при изучении работы лазера на парах ртути. Кислород выделяется из кварцевого стекла баллона лампы, так как интенсивность его спектральных линий быстро увеличивается с повышением мощности возбуждающего генератора. Таким образом, по интенсивности спектральных линий водорода и кислорода можно судить о чистоте внутренней поверхности баллона ВБЛ.

Оптимальное давление атомов ртути в лампе определяли по кривой изменения интенсивности излучения атомарной линии 546,1 нм ($7^3S_1 - 6^3P_2$) в зависимости от температуры отростка лампы (рис.1). Эта линия была выбрана для избавления от вли-

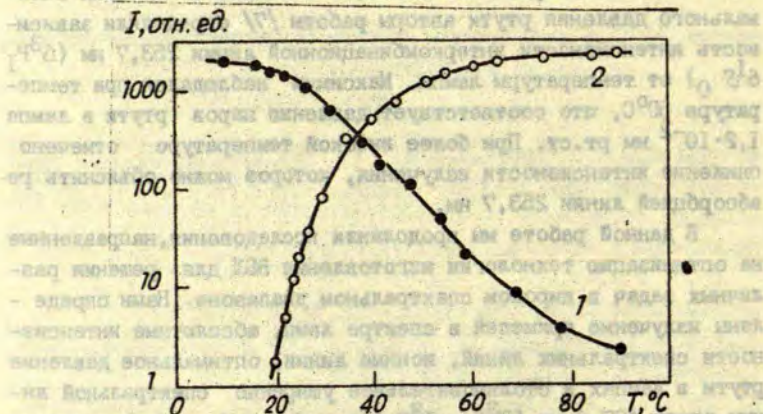


Рис.1. Интенсивности ртутной и криптоновой спектральных линий в зависимости от температуры резервуара лампы с ртутью.
2 — линия криптона 760,2 нм,
1 — линия ртути 546,1 нм.

яния реабсорбции потому, что метастабильный уровень 6^3P_2 ртути очень быстро тушится атомами инертных газов. Как видно из рисунка, быстрый рост интенсивности линии 546,1 нм сменяется гораздо более медленным ростом при температуре 50°C ($P_{\text{Hg}}=1,2$ мм рт.ст.). Одновременно наблюдали резкое уменьшение интенсивности излучения спектральной линии 760,2 нм ($5s[1/2]_2-5p[1/2]_1$) ксенона. Это указывает на то, что переход от разряда буферного газа к разряду ртути в ВВЛ происходит при $P_{\text{Hg}}=1,3 \cdot 10^{-3}$ - $1,2 \cdot 10^{-2}$ мм рт.ст.

Нами измерена и интенсивность излучения ионной линии 194,2 нм ($6^2P_{1/2}-6^2S_{1/2}$) в ртутно-аргоновой лампе в зависимости от температуры отрезка с ртутью при двух различных токах возбуждающего генератора (рис.2). До температуры 40°C ($P_{\text{Hg}}=6 \cdot 10^{-3}$ мм рт.ст.) интенсивность линии 194,2 нм резко увеличивается, что связано с эффективной ионизацией в процес-

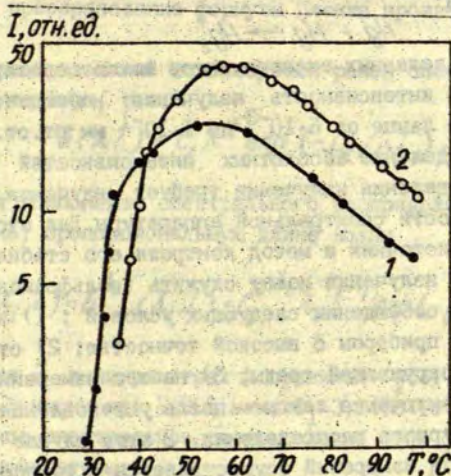
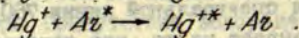


Рис.2. Изменение относительной интенсивности ионной линии ртути 194,2 нм в зависимости от температуры отрезка лампы с ртутью при различных токах возбуждающего генератора
1 - 120 мА
2 - 160 мА

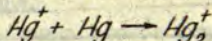
сах



с последующим возбуждением



Дальнейшее повышение температуры оторстка до 60°C ($P_{Hg} = 2,6 \cdot 10^{-2}$ мм рт.ст.) незначительно увеличивает интенсивность излучения, что связано с уменьшением концентрации возбужденных атомов аргона. При температуре оторстка выше 60°C наблюдается монотонное снижение интенсивности излучения линии 194,2 нм. В этих обстоятельствах в основном ионизируются возбужденные атомы ртути и одновременно происходит обратный процесс — рекомбинация ионов с медленными электронами. Концентрация ионов ртути может уменьшаться тоже в процессе образования молекулярного иона:



В результате проделанных экспериментов можно сделать вывод, что максимальная интенсивность излучения наблюдается при давлении ртути в лампе от $6 \cdot 10^{-3}$ до $1 \cdot 10^{-1}$ мм рт.ст.

Точное определение абсолютных интенсивностей и спектрального распределения излучения требует изучения абсолютной чувствительности спектральной аппаратуры. Для этого необходим эталонный источник и метод контроля его стабильности. Таким источником излучения может служить вольфрамовая ленточная лампа при соблюдении следующих условий: 1) контроль тока через лампу прибором с высокой точностью; 2) стабилизация температуры окружающей среды; 3) начало измерений через 1,0–1,5 ч после включения лампы — после установления равновесного температурного распределения. В этом случае повторяемость результатов измерений осуществляется с точностью 1% и выше. Обычно трудности представляет точное определение температуры лампы. В республиканском метрологическом центре осуществлена градуировка вольфрамовой ленточной лампы (СИО-300 № 245) оптическим пирометром ЗОП-80 в зависимости от тока через лампу с точностью $\pm 2,5^\circ\text{C}$. В условиях лаборатории с учетом интерполяции по току это дало возможность определить температуру лампы с точностью $\pm 13^\circ\text{C}$.

В нашей работе предлагается другой метод определения температуры вольфрамовой ленточной лампы. Относительную спектральную чувствительность аппаратуры при двух длинах волн определяли по известному отношению интенсивностей спектральных линий РЭЛ гелия. Проведенные измерения показали высокую стабильность отношения интенсивностей спектральных линий гелия 728,1 нм и 388,9 нм. Связь между абсолютной и относительной спектральной чувствительностью выявили следующим образом. Электромагнитную энергию теплового излучения $b_0(\lambda, T)$ в интервале длин волн от λ до $\lambda + d\lambda$, испускаемого полостью черного тела при температуре T , определяет формула Планка:

$$b_0(\lambda, T) d\lambda = C_1 \lambda^{-5} (\exp C_2 / \lambda T - 1)^{-1} d\lambda, \quad (1)$$

где $C_1 = 2\pi C_0^2 h = 3,7418 \cdot 10^{-16} \text{ Вт} \cdot \text{м}^2;$

$$C_2 = hc_0/k = 1,4388 \cdot 10^4 \text{ мкм} \cdot \text{град}.$$

Нелинейное преобразование формулы Планка производится согласно /10/.

Для преобразований используется район спектра, где в силе формула Вина, т.е.

$$b(\lambda T) = C_1 \lambda^{-5} \exp(-C_2 / \lambda T). \quad (2)$$

Каждая компонента спектрального распределения возводится в степень, пропорциональную длине волны

$$W_0(\lambda_i, T) = b^{\lambda_i}(\lambda_i, T) = C_1^{\lambda_i} \lambda_i^{-5\lambda_i} \exp(-\lambda_i C_2 / T). \quad (3)$$

Выражая λ в микрометрах и принимая $\lambda = 1$, получаем максимум этой функции при 1,905 мкм, $C_1 = 3,7418 \cdot 10^{-16} \text{ Вт} \cdot \text{см}^{-2} \cdot \text{мкм}^4$. Относительное спектральное распределение этой функции не зависит от температуры:

$$R_0(\lambda_i, \lambda_j, T) = \frac{W(\lambda_i, T)}{W_0(\lambda_j, T)} = \frac{C_1^{\lambda_i} \lambda_i^{-5\lambda_i}}{C_1^{\lambda_j} \lambda_j^{-5\lambda_j}}. \quad (4)$$

Абсолютную спектральную чувствительность измерительной аппаратуры можно получить, используя эту формулу, если известна относительная чувствительность при двух длинах волн.

Если $b(\lambda_i, T) = N_i K_i$, где N_i - показания измери-

тельной аппаратуры, K_i - коэффициент пропорциональности, и если известна относительная чувствительность спектральной аппаратуры при длинах волн λ_i , λ_0 , т.е. $K_i = K_0 z_i$, то

$$R_i = \frac{\delta^{\lambda_i}(\lambda_i, T)}{\delta^{\lambda_0}(\lambda_0, T)} = \frac{N_i^{\lambda_i} K_0^{\lambda_i} z_i^{\lambda_i}}{N_0^{\lambda_0} K_0^{\lambda_0}} \quad (5)$$

Отсюда

$$K(\lambda_0 - \lambda_i) = \frac{N_i^{\lambda_i} z_i^{\lambda_i}}{N_0^{\lambda_0} R_i} \quad (6)$$

Чувствительность аппаратуры при любой длине волн определяется по формуле

$$K_i^{\lambda_i} = \frac{R_i N_0^{\lambda_0} K_0^{\lambda_0}}{N_i^{\lambda_i}} \quad (7)$$

где N_0 и N_i - показания счетчика фотонов, когда измеряется вольфрамовая ленточная лампа при длинах волн λ_0 и λ_i с учетом излучательной способности вольфрама и спектральной ширины щели.

Исходя из сказанного, температуру лампы можно определить по формуле

$$T = - \left[C_2 / \ln \frac{N_i^{\lambda_i} K_i^{\lambda_i}}{C_i^{\lambda_i} \lambda_i^{\delta \lambda_i}} \right] \quad (8)$$

Мы получили истинную температуру вольфрамовой лампы $T = (2155 \pm 13)$ К, что в пределах погрешностей полностью согласуется с температурой, определенной по пирометрическим измерениям в Метрологическом центре - $T = (2144 \pm 13)$ К.

Измеренные абсолютные интенсивности излучения атомарных спектральных линий ртути приведены в табл. I.

Определение абсолютной интенсивности ионной линии ртути 194,2 нм было затруднено отсутствием эталонного источника излучения в этой области спектра. Вольфрамовая ленточная лампа с кварцевым окошком позволила произвести градуировку до 250

Абсолютные интенсивности спектральных линий ртути
при различных токах возбуждающего генератора,
 $P_{Ar} = 2$ мм рт.ст., $t = 22^{\circ}\text{C}$

$\lambda, \text{нм}$	$I, \text{фотоны/см}^2 \cdot \text{с}$		
	100 мА	160 мА	210 мА
253,7	$6,26 \cdot 10^{16} \pm 20\%$	$1,21 \cdot 10^{17}$	$1,86 \cdot 10^{17}$
404,7	$0,56 \cdot 10^{16} \pm 10\%$	$1,21 \cdot 10^{16}$	$2,30 \cdot 10^{16}$
435,8	$1,31 \cdot 10^{16} \pm 10\%$	$2,86 \cdot 10^{16}$	$5,02 \cdot 10^{16}$
546,1	$1,54 \cdot 10^{16} \pm 10\%$	$3,48 \cdot 10^{16}$	$5,33 \cdot 10^{16}$

нм. При более коротких длинах волн проведена экстраполяция градуировки, поэтому для спектральной линии 194,2 нм сделана только оценка абсолютной интенсивности $I = 1 \cdot 10^{14}$ фотоны/см²с, с точностью в два раза при токе возбуждающего генератора 100 мА.

Для задач, требующих интенсивных ионных линий, лучше использовать ВЕЛ на основе отдельных изотопов ртути. Тогда при возбуждении атомарных уровней перераспределения энергии между различными изотопами не происходят. Нами изготовлены образцы ламп с изотопом ^{204}Hg и аргоном при разном давлении (от 0,5 до 4,0 мм рт.ст.). В данной работе сообщаются первые результаты исследований контура атомарной линии 404,7 нм. Методика эксперимента описана в работе /II/. Для выделения узкого луча света от лампы на установке со сканирующем интерферометром Фабри-Перо использовали световод. Постоянную уширения определяли по наклону прямой зависимости лоренцевской составляющей экспериментального контура от давления аргона в лампе. Она равна $0,0030 \text{ см}^{-1}/\text{мм рт.ст.}$. Эффективное сечение уширения возбужденных атомов ртути при столкновениях с не-возбужденными атомами аргона на переходе $7^3\text{S}_1 - 6^3\text{P}_0$ составляет $1,7 \cdot 10^{-13} \text{ см}^2 \pm 20\%$.

В настоящее время нами продолжается спектроскопические исследования ионных линий.

Список литературы

1. Shernoff D.I. // Rev.Sci.Instr.-1969.-Vol.40, NII.-P.I418.
2. Gleason W.S., Pertel R. // Rev.Sci.Instr.- 1971.- Vol. 42, N II.- P 1636.
3. Лопатин В.М., Терзевон В.Ф. // ЖПС.-1977.-Т.ХХVII.-Вып.5.- С.916.
4. McGuire M.D., Petsch R., Werth G. // Phys.Rev.- 1978.- Vol. 17, N 6.- P.1999.
5. Reader J., Sansonetti C.J. // Phys.Rev.- 1986.- Vol. 33, N 2.- P.1440.
6. Лездинь А.Э., Путиния С.Я., Скудра А.Я. Тез. докл VII Все-союз. конф. по физике вакуумного ультрафиолета и его вза-имодействию с веществом.-Рига.-1986.-С.205.
7. Browner R.F., Petel B.M., Glenn P.H., Rietta M.E., Vineford-ner J.D. // Spectrosc.Lett.-1972.-Vol.5, N 9.-P.311.
8. Геворкян А.Г., Смирнова Г.М., Хуторщиков В.И. // Вопросы ра-диозлектроники. Сер. ОВР.-1984.-Вып.2.-С.79.
9. Skippon S.M., Rabbet M.D., King T.A. // J.Phys.D:Appl.Phys.- 1983.-Vol.16.-P.2435.
10. Свет Д.Я. Оптические приборы измерения истинных темпера-тур.-М.:Наука, 1982.- 380 с.
11. Лездинь А.Э., Путиния С.Я., Скудра А.Я. Процессы переноса энергии в парах металлов.-Рига:ЛГУ им.П.Стучки, 1985. - С.99.

А.Я. Скудра, В.И. Хуторщиков,

Г.Г. Юлина

СПЕКТРАЛЬНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ВЫСОКОЧАСТОТНЫХ БЕЗЭЛЕКТРОДНЫХ РУБИДИЕВЫХ ЛАМП

Исследованию высокочастотных безэлектродных ламп (ВБЛ) с парами металлов посвящено значительное число работ, в которых экспериментально и теоретически изучены основные особенности их спектральных характеристик [1-5]. Однако обычно ВБЛ изучали при давлении буферного газа 1 - 3 мм рт.ст., хотя как вытекает из теории, при повышении давления все процессы старения должны замедляться, что важно для создания высокостабильных источников света. Кроме того, изучение характеристик при давлении буферного газа выше 3-4 мм рт.ст. важно и для уточнения границ применимости существующей теории ВБЛ.

В связи с этим в настоящей работе была поставлена задача экспериментально исследовать спектральные характеристики ВБЛ, наполненных рубидием и криптоном, в зависимости от давления криптона, мощности разряда, температуры термостата в возможно большем диапазоне изменения этих параметров.

Для исследования были изготовлены ВБЛ, представляющие собой стеклянные сферы диаметром 12,5-13,2 мм с резервуаром для избытка металла длиной 3-4 мм, наполненные рубидием и криптоном. С помощью латунного держателя лампы крепили за резервуар к металлической поверхности термостата, температуру которой устанавливали с помощью специального электронного терморегулятора и поддерживали в дальнейшем с точностью до $0,2^{\circ}\text{C}$. Для возбуждения лампы помещали в индуктор, представляющий из себя двухсекционную катушку индуктивности колебательного контура автогенератора, собранного по схеме Клаппа на транзисторе 2Т904 А. Две секции катушки располагали на таком расстоянии друг от друга, чтобы смена ламп в источнике не приводила к деформации катушек, а значит и к расстройке автогенератора. Заданную мощность автогенератора устанавливали с точностью до 5%. Невоспроизводимость интенсивности излучения при повторной установке ламп составила не более 10%. Особенности конструкции ламп и источника света в целом более подробно описаны в работах [6, 7].

Диапазон изменения варьируемых в эксперименте параметров был обусловлен условиями существования Н-разряда, отсутствием заметного самообращения спектральных линий и работоспособностью транзистора автогенератора. Температуру термостата ограничивали диапазоном 110-160°С. Лампы были наполнены криптоном при давлении от 1 до 15 мм рт.ст., так как при давлении меньшем 1 мм рт.ст. наблюдался диффузный светящийся шар без характерного ободка рубидия, а при давлении большем 12 мм рт.ст. разряд начинал контрагировать. Мощность автогенератора меняли от 1,5 до 6 Вт, причем КПД передачи мощности в разряд, определенный калориметрически, составлял $50 \pm 10\%$.

Интенсивность спектральных линий рубидия и криптона измеряли с помощью спектрографа ИСП-51 с фотоэлектрической регистрацией. В качестве фотоприемника использовали кремниевый фотодиод ФД-7к, подключенный ко входу микровольтметра В2-11. Для двух ламп с давлением криптона 1,9 и 3,7 мм рт.ст. с помощью установки Свет-3м, разработанной в Петрозаводском государственном Университете им. О.В. Куусинена и градуированной с помощью банд-лампы, определили абсолютную интенсивность линий рубидия, что позволило на рис.1 привести интенсивность линии Rb 780 нм в милливатах.

В результате проведенных исследований обнаружено изменение характера зависимости интенсивности излучения линий рубидия от давления буферного газа при повышении температуры термостата. Быстрое убывание интенсивности при увеличении давления газа, наблюдавшееся ранее [3], с ростом температуры сменяется весьма слабой зависимостью от давления (Рис.1). Это обусловлено тем, что при любом давлении криптона, начиная с некоторой температуры параметры плазмы определяются легкоионизируемой компонентой - рубидием. Для линии рубидия 794,7 нм зависимости от давления аналогичны. Существенно, что наибольшим интенсивностям соответствует и наибольшая эффективность оптической накачки, что установлено при измерении интенсивности флуоресценции паров рубидия при их облучении исследуемыми источниками света. В связи с этим появляется реальная возможность создания высокостабильных источников света меньших, чем обычно, размеров, поскольку усиление взаимодействия паров металла со стеклом компенсируется повышением давления

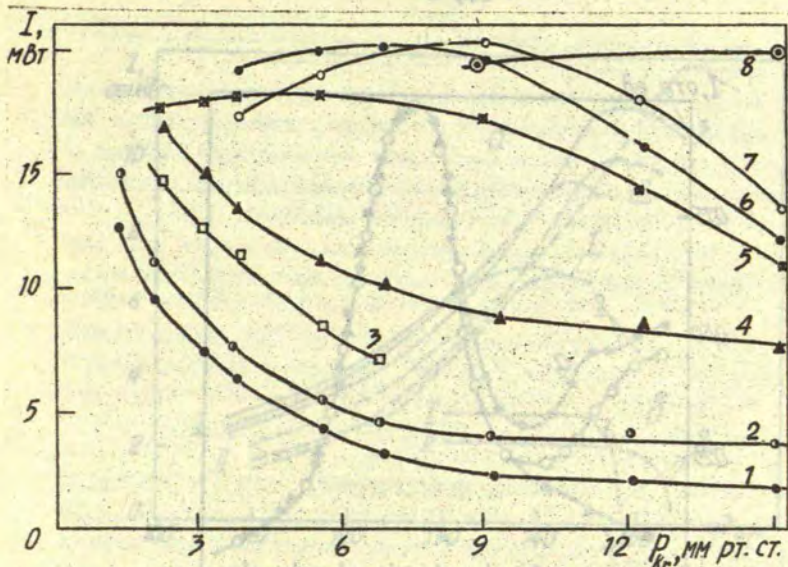


Рис. 1. Зависимость интенсивности линии рубидия-78 с длиной волны 780 нм от давления криптона при температуре термостата 110°C (1), 116°C (2), 128°C (3), 131°C (4), 141°C (5), 144°C (6), 146°C (7), 150°C (8).

газа в лампе.

Из рис. 2, где приведено радиальное распределение атомов рубидия в состоянии $5^2P_{1/2}$ при давлении криптона 2,9 и 9 мм рт.ст. видно, что распределение существенно различаются: при 2,9 мм рт.ст. криптона концентрация атомов рубидия в возбужденном состоянии имеет максимум вблизи стенки лампы, а затем монотонно снижается в направлении вглубь лампы; при давлении 9 мм рт.ст. концентрация, достигнув максимума вблизи стенки, сначала уменьшается, а затем несколько возрастает в центре лампы. Это говорит о том, что при повышении давления газа заметную роль начинает играть ассоциативная рекомбинация, которую необходимо учитывать в расчетах и при анализе физических процессов в ВБЛ.

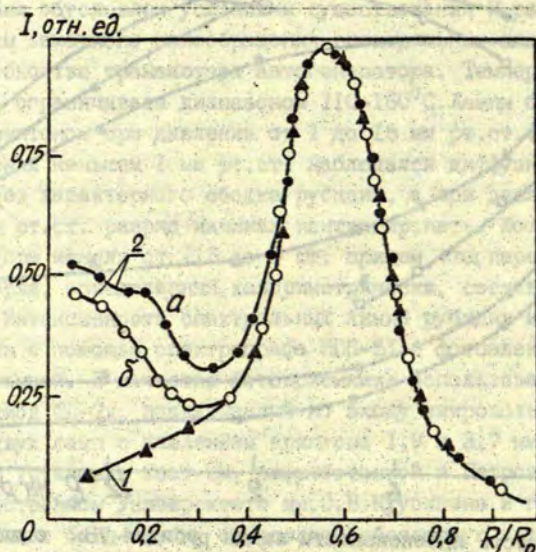


Рис.2. Радиальное распределение атомов рубидия в состоянии $5^2P_{1/2}$ при давлении криптона 2,9 мм рт.ст. (1) и 9 мм рт.ст. (2) при температуре термостата; а - 116°C , б - 141°C .

Из рис.3, где приведены зависимости интенсивности излучения линии рубидия 780 нм для ламп с давлением криптона 3,7 и 9 мм рт.ст. от температуры термостата и от мощности поддерживающего разряд генератора, видно, что интенсивность линий рубидия возрастает при повышении температуры примерно пропорционально упругости пара рубидия [6]. Однако при достижении некой температуры, характерной для данных давлений буферного газа и мощности автогенератора, рост интенсивности с температурой замедляется, а затем уменьшается. Наибольшая достигаемая интенсивность увеличивается с ростом мощности в разряде.

На рис.3 показана также зависимость интенсивности линий криптона от его давления. В режимах, предшествующих уменьшению интенсивности линий рубидия достигается наибольшее отношение интенсивности резонансных линий рубидия к линиям крип-

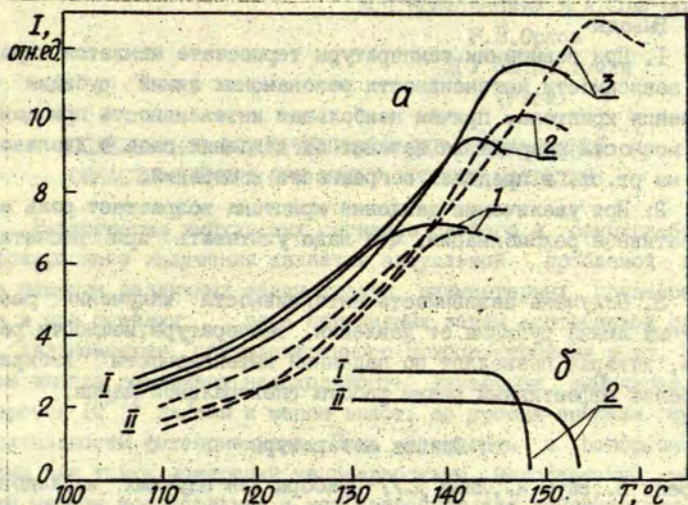


Рис.3. Зависимость интенсивности резонансной линии рубидия с длиной волны 780 нм (А) и линии криптона с длиной волны 811,2 нм (Б) от температуры термостата при давлении криптона 3,7 мм рт.ст. /I/ и 9 мм рт.ст. /II/ и мощностях автогенератора 1,5 Вт (I), 2,7 Вт (2), 7 Вт (3).

тона, и именно эти режимы целесообразно использовать в экспериментах по оптической накачке. Увеличение давления смещает график в область более высоких температур, но наибольшие интенсивности при данной мощности разряда остаются примерно одинаковыми.

Результаты исследований показывают слабую зависимость интенсивности линий рубидия от мощности разряда до тех пор, пока температура не превысит некое определенное для данной мощности и давления криптона значение. Реально это означает, что для создания эффективного источника света надо по требуемой интенсивности, используя график рис.3, выбрать мощность разряда, температуру рубидия и давление криптона.

Выводы

1. При повышении температуры термостата меняется характер зависимости интенсивности резонансных линий рубидия от давления криптона, причем наибольшая интенсивность при данной мощности разряда не зависит от давления газа в диапазоне 1-9 мм рт.ст. в пределах погрешности измерений.

2. При увеличении давления криптона возрастает роль ассоциативной рекомбинации, что надо учитывать при расчетах ВВЛ.

3. Получена зависимость интенсивности излучения резонансных линий рубидия от давления, температуры, мощности разряда, которая позволяет по заданной интенсивности выбирать наиболее эффективный режим работы спектральной лампы.

Список литературы

1. Белл В., Влум А., Линч Д. // Приборы для научных исследований. - 1961. - № 6. - С. 79.
2. Львов Б.В. Атомно-абсорбционный анализ. - М.: Наука, 1966. - 392 с.
3. Volk C.H., Frueholz // J. Appl. Phys. - 1985. - Vol. 57. - № 3. - P. 980.
4. Агапов А.С., Хуторщиков В.И. // Вопросы радиоэлектроники. Сер. ОВР, 1983. - Вып. 9. - С. III.
5. Агапов А.С., Матвеев А.А., Хуторщиков В.И. Процессы переноса энергии в парах металлов. - Рига: ЛГУ им. П. Стучки, 1985. - С. 89.
6. Калачникова А.И., Хуторщиков В.И. Процессы переноса энергии в парах металлов. - Рига: ЛГУ им. П. Стучки, 1981. - С. 164.
7. Жолнеров В.С., Некрылова И.М., Спажева М.Н., Трухачева В.А., Хуторщиков В.И. // Опт. и спектр. - 1984. - Т. 56. - Вып. 2. - С. 240.
8. Семенов С.В., Смирнова Г.М., Хуторщиков В.И. // Вопросы радиоэлектроники. Сер. ОТ. - 1983. - Вып. 2. - С. 95.

А.П.Брюховецкий, Я.А.Спигулис,
Р.В.Орлов
ЛГУ им.П.Стучки
(Рига)

ИССЛЕДОВАНИЕ ФОТОПРИЕМНИКОВ ДЛЯ ИНФРАКРАСНОЙ ОБЛАСТИ СПЕКТРА ПРИ МАЛЫХ УРОВНЯХ ЗАСВЕТКИ

Регистрация импульсных сигналов слабого и сверхслабого инфракрасного излучения является актуальной проблемой как при решении различных задач физики элементарных процессов, так и при решении ряда прикладных задач - оптической связи, дальнометрии, оптоэлектронного приборостроения и др. При этом иногда возникает необходимость измерения импульсов с энергией 10^{-12} Дж/имп и менее вплоть до уровня предела чувствительности фотоприемника. Пока стандарты и поверочные схемы для таких измерений не разработаны, недостаточно развиты методы исследования и нет устройств для изучения припороговых характеристик приемников излучения в ближней ИК-области /1,2/.

В цикле исследований, проведенных в Проблемной лаборатории спектроскопии ЛГУ им.П.Стучки с 1980 по 1985 г. , были разработаны методические основы и макеты для испытания фотоприемников при облучении их импульсами с энергией 10^{-11} - 10^{-16} Дж/имп , длительностью менее $2 \cdot 10^{-8}$ с , в спектральном диапазоне $1,06 \pm 0,02$ мкм /3-6/. В настоящей работе приведены некоторые результаты изучения фотоприемников по разработанной методике с использованием созданной в лаборатории оригинальной аппаратуры.

На установке, схема которой показана на рис. 1, исследовались обнаружительные характеристики ФЭУ-83 и ФЭУ-112 вблизи порога их чувствительности. Основной элемент установки - излучатель калиброванных импульсов (ИКИ), подробно описанный в /5/, - снабжен системами ступенчатого и плавного ослабления, которые позволяют получить импульсы излучения с энергиями 10^{-11} - 10^{-16} Дж/имп . Длительность импульсов $\tau < 2 \cdot 10^{-8}$ с , частота следования 10 кГц. Энергия импульсов на выходе ИКИ была откалибрована при помощи аттестованного во ВНИИ ОФИ фо-

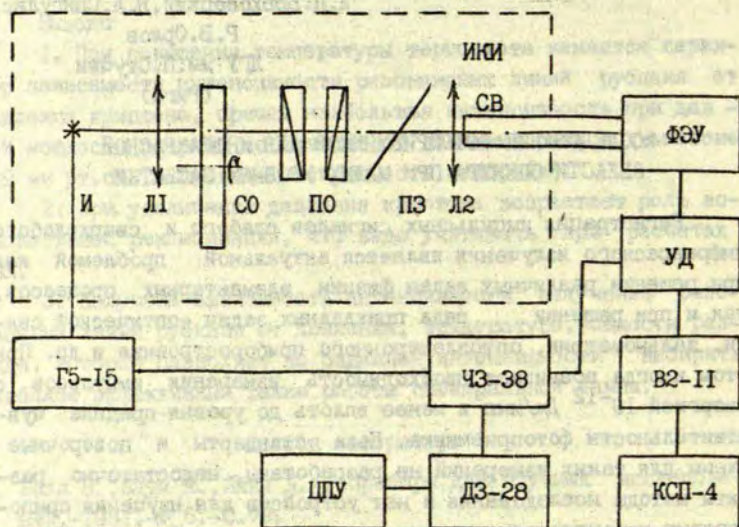


Рис.1. Схема исследования припороговых характеристик ФЭУ:

И - модифицированный излучатель импульсов ПГС-15 ($\lambda = 1,06$ мкм); Л1, Л2 - линзы; СО - ступенчатый ослабитель револьверного типа с калиброванными фильтрами; ПО - плавный ослабитель на двух ИК-поляроидах; СВ - световод; УД - усилитель-дискриминатор; В2-11 - микровольтметр-усилитель; КСП-4 - самопишущий потенциометр; Г5-15 - генератор, задающий частоту следования импульсов излучения; ЧЗ-38 - частотомер для подсчета импульсов отклика; ДЗ-28 - ЭВМ "Электроника ДЗ-28"; ЦПУ - печатающее устройство Consul 260.1.

тодиода ФД-24К с погрешностью 20-30%.

Отклик фотоприемника на импульсную засветку характеризуется двумя вероятностями - правильного обнаружения $W_{по} = n_1/n$ и ложного приема $W_{лп} = n_2/n$, где n - общее количество излученных импульсов; n_1 - количество зарегистрированных сигнальных импульсов; n_2 - количество зарегистрированных шумовых импульсов в отсутствии сигнала. Припороговая область чувствительности определяется спадом $W_{по}$ от 100% до 0, начиная с

некоторого значения энергии импульсов излучения E_0 . Вероятность W_{no} не только зависит от энергии импульсов излучения, она является функцией уровня дискриминации регистрирующей системы, напряжения питания фотоприемника, температуры фотокатода и т.д. Для оптимизации работы фотоприемника вблизи порога чувствительности нами изучалась взаимная связь следующих параметров:

1) энергии импульсов облучения E_1, E_2, E_3 при вероятностях обнаружения W_{no} соответственно 80, 50, 20%;

2) уровня дискриминации U_g анодных импульсов на нагрузке 200 Ом в диапазоне 10,6–22,0 мВ, в этом диапазоне выбраны пять фиксированных значений "0", "1", "3", "6", "9" – соответственно 10,6; 11,4; 12,3; 13,6; 16,0 мВ;

3) напряжениях питания ФЭУ U_n – паспортном, на 5% превышающем паспортное U_+ , и пониженном по сравнению с паспортным на 5% U_- .

Область припороговой чувствительности ФЭУ, где вероятность обнаружения имеет значения от 20 до 80%, заключена в объеме, который при фиксированной температуре определяется функциональной зависимостью параметров $E_{имп}, U_{пит}, U_g$. На рис. 2 приведены графические иллюстрации припороговой области чувствительности фотоумножителей в координатах (W_{no}, E) . Измерения проведены при $U_{пит} = U_n$ и пяти уровнях дискриминации. Результаты измерений записывали в память ЭВМ и по программе распечатывали в виде графиков. Пороговые значения чувствительности энергии E_3 (при питании U_+) для обоих типов ФЭУ, работающих при комнатной температуре и уровне дискриминации, обеспечивающем шумовой сигнал ниже 50 имп/с, составили в среднем $(2-4) \cdot 10^{-13}$ Дж/имп. При охлаждении фотокатодов ФЭУ парами жидкого азота до -20°C уровень шумовых импульсов понижается, и значение E_3 ($U_{пит} = U_+$) понижается до $(2-6) \cdot 10^{-14}$ Дж/имп. Особый интерес вызывает изучение режима питания ФЭУ в припороговой области при использовании в регистрирующих системах нескольких ФЭУ одного типа, когда возникает проблема балансировки всех каналов регистрирующей системы. В этом случае необходимо найти границы перекрывания припороговых областей различных ФЭУ. Из рис. 3 видно, что при понижении питания обоих типов ФЭУ растет относительный порог

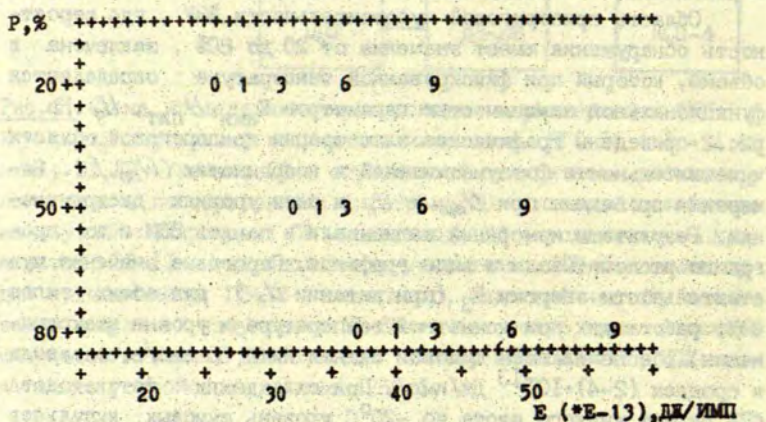
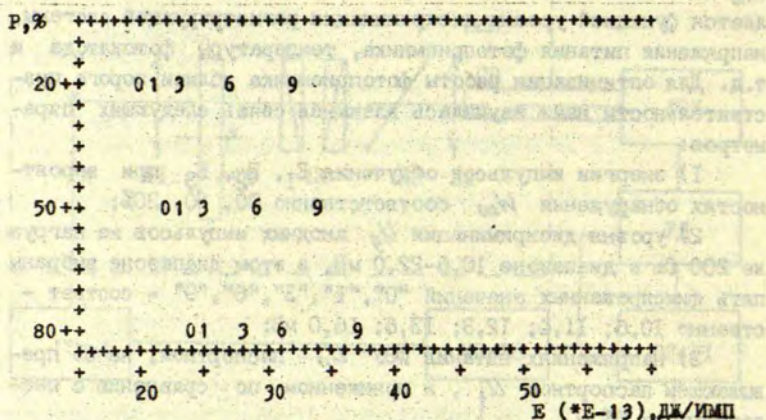


Рис.2. Припороговые области чувствительности для ФЭУ-83 №863 (а) и для ФЭУ-II2 №1237 (б) при паспортном напряжении питания и пяти уровнях дискриминации.

чувствительности, который можно характеризовать величиной $\bar{\sigma}_2$:

$$\bar{\sigma}_2 = E(-) - E(n) / E(n) , \quad (I)$$

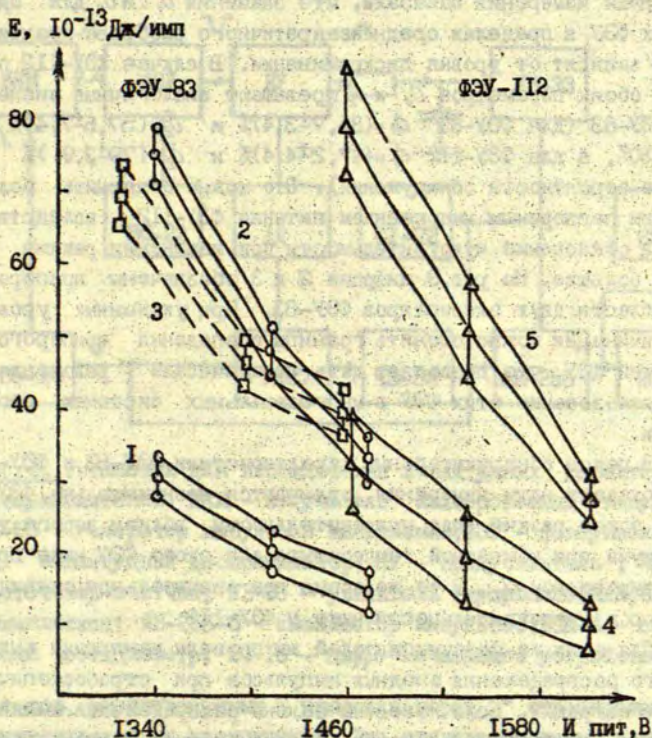


Рис.3. Припороговые области ФЭУ-83 и ФЭУ-112 в координатах $(E, U_{\text{пит}})$: 1, 2 - ФЭУ-83 №63, $U_{\text{д}}=10,9$ и $16,0$ мВ; 3 - ФЭУ-83 № 20077, $U_{\text{д}}=11,4$ мВ; 4, 5 - ФЭУ-112 №1237, $U_{\text{д}}=10,9$ и $16,0$ мВ соответственно.

и, соответственно, при питании $U_{\text{пит}} = U_+$ понижается относительный порог чувствительности δ_1 :

$$\delta_1 = E(n) - E(+)/E(n), \quad (2)$$

где $E(-)$, $E(n)$, $E(+)$ - зарегистрированные с определенной вероятностью энергии импульсов при напряжениях питания U_- , U_n , U_+ соответственно.

Наши измерения показали, что значения σ_1 и σ_2 для однотипных ФЭУ в пределах среднеквадратичного разброса практически не зависят от уровня дискриминации. В случае ФЭУ-112 значения обоих параметров σ_1 и σ_2 превышают аналогичные значения для ФЭУ-83 (для ФЭУ-83 $\sigma_1=(35,7\pm3,4)\%$ и $\sigma_2=(57,5\pm7,4)\%$ при $W_{по}=50\%$, а для ФЭУ-112 $\sigma_1=(47,2\pm4,4)\%$ и $\sigma_2=(79\pm3,9)\%$ при той же вероятности обнаружения). Это можно объяснить более высоким паспортным напряжением питания ФЭУ-112, вследствие чего и отклонение чувствительности при изменении режима питания большее. На рис.3 цифрами 2 и 3 обозначены припороговые области двух экземпляров ФЭУ-83. При указанных уровнях дискриминации можно оценить границы совпадения припороговых областей ФЭУ, что позволяет дать методические рекомендации по использованию этих ФЭУ в многоканальных системах регистрации.

В целом обнаружительные характеристики ФЭУ-83 и ФЭУ-112 как показали наши измерения, отличаются незначительно. ФЭУ-83 имеет более резкий спад чувствительности вблизи порога, уровень шума при комнатной температуре для этого ФЭУ ниже при U_n и фиксированном U_g . В то же время при значительном охлаждении порог чувствительности ниже у ФЭУ-112.

Для этих же фотоумножителей мы провели измерения амплитудного распределения анодных импульсов при стробоскопической регистрации. Если известны законы распределения амплитуд выходных импульсов ФЭУ, можно определить порог чувствительности ФЭУ при заданных вероятностях $W_{по}$ и $W_{лт}$ в режиме счета фотоэлектронов [7,8]. На рис.4 приведена схема установки, созданной в лаборатории для исследования выходных сигналов ФЭУ. Анализатор АИ-256 мы использовали в режиме "Вх.1", при котором входной сигнал дополнительно усиливался калиброванным предусилителем. Поступающие сигналы сортировались по амплитуде и распределялись по соответствующим каналам анализатора. Все измерения проводились при одинаковом времени накопления. Это дало возможность корректно сопоставить результаты разных измерений. Количество импульсов, накопленных в отдельных каналах анализатора в каждом измерении калибровалось, при этом использовался параллельный вывод результатов на ВЗ-15. Текущий контроль за количеством фотоэлектронных им-

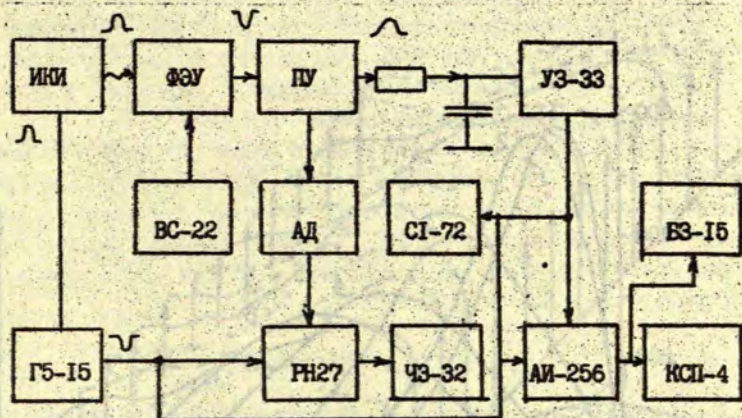


Рис.4. Установка для исследования амплитудных характеристик фотоумножителей: ИКИ - излучатель калиброванных импульсов; Г5-15 - генератор импульсов напряжения; ФЭУ - фотоумножитель; АД - амплитудный дискриминатор; ПУ - предусилитель; ЧЗ-32 - частотомер-счетчик; УЗ-33 - усилитель широкополосный; CI-72 - осциллоскоп; АИ-256-6 - анализатор импульсов; КСП-4 - самопишущий потенциометр; БЗ-15 - цифро-печатающее устройство.

пульсов, регистрируемых в пределах ворот "стробирования", осуществлялся по частотомеру. Это стало возможным благодаря разработанной схеме РН-27 /8/. Ширина одного канала анализатора в режиме максимального предусиления и при оптимальной форме сигнальных импульсов в наших измерениях составляла $0,84 \pm 0,04$ мкВ.

При засветке ФЭУ калиброванными импульсами от ИКИ измерялась зависимость амплитудного распределения сигналов от уровня засветки. Из рис.5 видно, что с ростом энергии импульсов происходит сдвиг вершины амплитудного спектра в сторону больших амплитуд, как и следовало ожидать. Однако при этом зона низких амплитуд, заполненная до засветки импульсами темного фона, резко опустошается. Данное явление можно объяснить малым быстродействием анализатора. При засветке возрас-

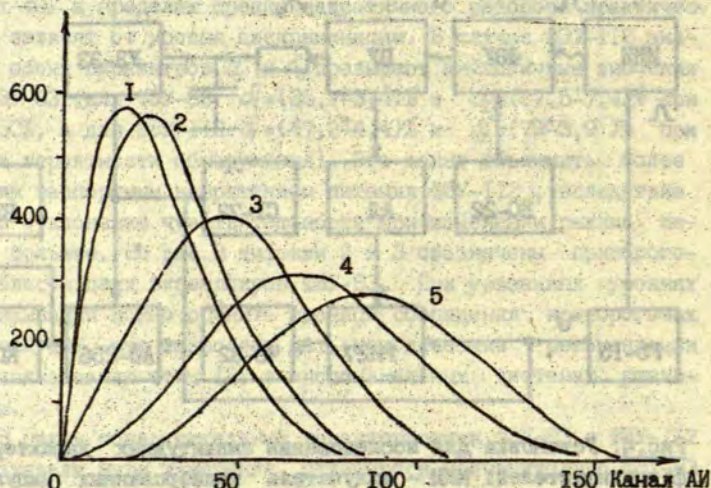


Рис. 5. Амплитудное распределение анодных импульсов ФЭУ-83 при различных уровнях импульсов засветки на длине волны 1,06 мкм (стробоскопическая регистрация, паспортное напряжение питания): 1 - темновой фон; 2 - $1,1 \cdot 10^{-13}$ Дж/имп; 3 - $2,4 \cdot 10^{-13}$ Дж/имп; 4 - $3,9 \cdot 10^{-13}$ Дж/имп; 5 - $4,8 \cdot 10^{-13}$ Дж/имп.

тает количество фотоэлектронных импульсов с большими амплитудами, чем у темновых импульсов, и соответственно понижается вероятность темновому импульсу первым попасть во "временные" ворота Δt и быть зафиксированным в своем канале АИ. В связи с этим несколько искажается истинное распределение, которое можно получить, применяя более быстродействующую систему амплитудного анализа фотоэлектрических сигналов. Качественно сходные результаты получены при измерениях амплитудного распределения ФЭУ-112.

Мы исследовали также распределение чувствительности ФЭУ. По площадке фотокатода изучались зонные характеристики ФЭУ фотокатоды ФЭУ при этом засвечивались с помощью моноволоконного световода диаметром 0,4 мм, торец которого микрометрическими винтами перемещался вдоль площадки фотокатода в двух

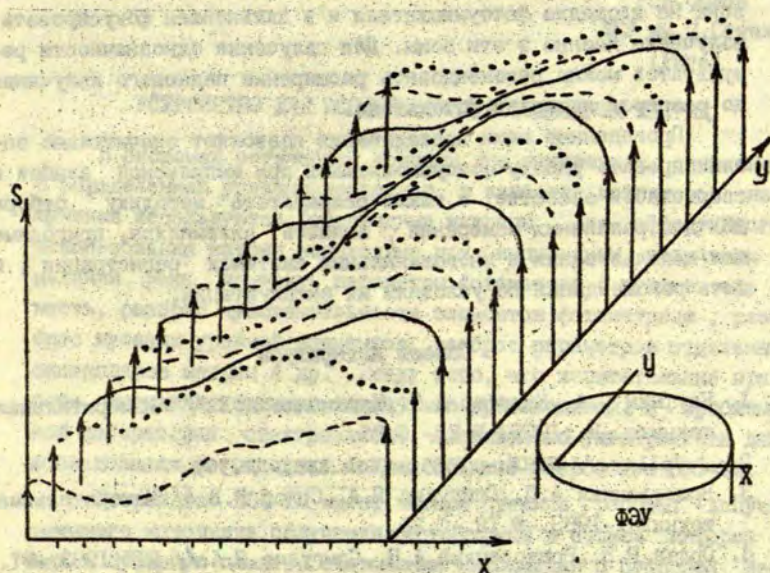


Рис. 6. Распределение зонной чувствительности ФЭУ-83.

взаимно-перпендикулярных направлениях. Были измерены выходные сигналы при облучении 225 точек на фотокатодах ФЭУ-83 и 150 точек на фотокатодах ФЭУ-112. Шаг перемещения световода вдоль площадки фотокатода составлял 0,85 мм. Нестабильность интенсивности излучения, вводимого в световод, и шумы регистрирующей системы внесли погрешность, не превышающую 3%.

Результаты испытания одного из экземпляров ФЭУ-83 отражены на рис. 6, на котором по оси z отложена величина выходного сигнала с ФЭУ- δ в относительных единицах, а две другие координаты x и y соответствуют ортогональным координатам на плоскости фотокатода. У всех исследованных ФЭУ обнаружена неожиданно высокая неоднородность зонной характеристики. Максимальные отклонения значений δ от среднего значения у исследованных ФЭУ 83 составили 33-53%, а у ФЭУ 112-63-119%. Отсюда следует вывод о необходимости на практике при регистра-

ции узконаправленного излучения для повышения чувствительности системы предварительно выявить наиболее чувствительные зоны на площадке фотоумножителя и в дальнейшем фокусировать излучение именно в эти зоны. Для получения однозначности результатов можно рекомендовать расширение падающего излучения до размеров площадки фотокатода.

Проведенные нами исследования позволяют значительно оптимизировать работу фотоумножителей при импульсной слабой и сверхслабой засветке, а также разработать методику отбора ФЭУ для различных измерений, выявить экземпляры, пригодные для использования в многоканальных системах регистрации, и дать рекомендации по условиям их эксплуатации.

Список литературы

1. Кауфман С.А., Кнюпфер А.П., Казаменко М.Л. // Измерительная техника. - М.: 1979. - № 2. - С.26.
2. J.Jelley. // SPIE. - 1985. - Vol.445. - P.569.
3. Брюховецкий А.П., Спигулис Я.А., Орлов Р.В. // Измерительная техника. - 1983. - № 12. - С.26.
4. Орлов Р.В., Брюховецкий А.П., Спигулис Я.А. // ПТЭ, 1983. - №1. С.225.
5. Орлов Р.В., Брюховецкий А.П., Спигулис Я.А. // Латв НИИНТИ, инф. листок. - Рига. - 1983. - № 83. - С.123.
6. Брюховецкий А.П., Орлов Р.В., Спигулис Я.А., Спинга И.Я. // Тезисы Всесоюзного симпозиума "Зрение организмов и роботов". - Вильнюс: ВТУ им.А.Канаускаса, 1985. - Т.2. - С.122.
7. Соболева Н.А., Меламид А.Е. // Фотоэлектронные приборы. - М.: Высшая школа, 1974. - 376 с.
8. Брюховецкий А.П., Орлов Р.В., Спигулис Я.А. Отчет о НИР. - Рига: ЛГУ им.П.Стучки, 1985. - № 80022992. - 112 с.

Р. В. Орлов
ЛГУ им. П. Стучки
(Рига)

УСТРОЙСТВО ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ФОТОДИОДНЫХ МАТРИЦ

В системах оптической локации при измерениях, связанных с определением угловых координат, в качестве детекторов излучения используются фотодиодные матрицы. Для эффективного использования матриц необходимо при импульсном облучении и наличии фона измерить параметры фотоматриц: чувствительность, разброс чувствительности элементов фотоматрицы, разброс нулевых уровней элементов, разброс параметров отдельных экземпляров матриц и др. Ввиду того, что испытательные приборы, выполняющие такую задачу, не производятся, в Проблемной лаборатории спектроскопии Латвийского университета для исследования фотодиодных матриц создано устройство БОС-2М.

Устройство БОС-2М имеет четыре режима работы: запуск внешнего источника облучения фотоматрицы и запись информации в буферную память, считывание информации с буферной памяти и запись в ЭВМ ДЗ-28 по команде от ЭВМ; считывание информации с буферной памяти и запись в накопительную память, считывание информации с накопительной памяти и вывод на индикацию.

На рис. I показана функциональная схема устройства БОС-2М. Устройство включает сдвиговый регистр (СД), схему управления (СУ), амплитудные дискриминаторы (АД), счетчики измерений и ячеек (СИЯ), память (П), блок выбора вероятностей (ВВ), интерфейс (ИФ), индикацию (И). Кроме того, на рис. I показаны импульсный излучатель (ИИ), фотодиодная матрица (ФМ) и ЭВМ ДЗ-28.

Пороги дискриминации устанавливаются для каждого АД отдельно или для всех АД вместе.

Память состоит из буферной части, имеющей побайтный вывод, и накопительной части, имеющей побитный вывод.

При низких уровнях облучения или при большом фоне проводят несколько измерений, результаты которых записывают в

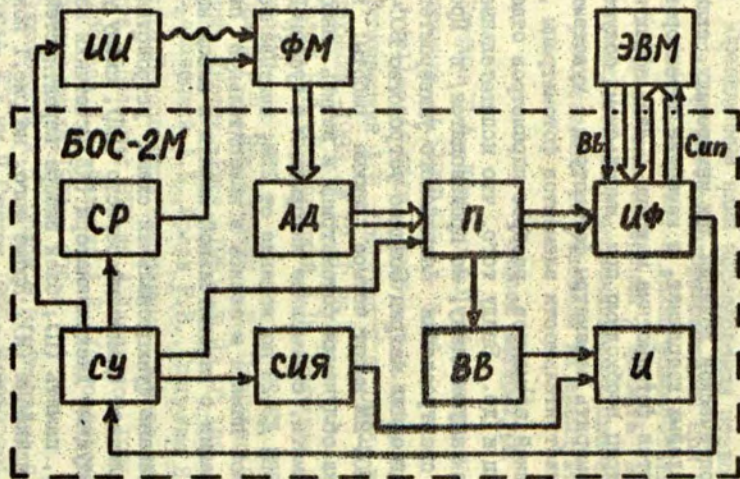


Рис. 1. Функциональная схема устройства БОС-2М.

накопительную часть П. На ВВ подаются уровни логических состояний ячеек, соответствующие определенной колонке и ряду ФМ. На выходе ВВ выставляется уровень логического состояния, соответствующее заданной вероятности регистрации облучения.

В первом режиме СУ запускает ИИ и ФМ облучается. К 32 выходам ФМ подключены АД, к выходам которых подключены входы буферной части П.

Во втором режиме от ЭВМ подается адрес и сигнал "Вв" на ИФ. От ИФ подается запускающий импульс на СУ. С ИФ подается на ЭВМ сигнал "Сип", и информация с буферной части П через ИФ воспринимается ЭВМ.

В третьем режиме происходит перезапись с буферной части П на накопительную часть П. Возможно накопление до четырех измерений.

В четвертом режиме информация с накопительной части П последовательно выводится с заданной скоростью через ВВ на И. В этом режиме также выводится на И результат счета СИЯ.

Устройство БОС-2М использовалось для исследования фотодиодных матриц МФ-14. При небольшой перестройке оно может работать и с другими типами фотодиодных матриц, количество ячеек которых не превышает 32x32.

Для использования другой ЭВМ необходимо заменить ИФ.

БОС-2М удобно в обращении, дает стабильные результаты.

СЧЕТЧИК ФОТОНОВ С МИКРОПРОЦЕССОРНЫМ УПРАВЛЕНИЕМ

Применение микропроцессоров в измерительной технике радикально преобразует свойства многих устройств и открывает новые возможности их применения. С помощью микропроцессора достигаются многофункциональность приборов, упрощение управления процессами измерения, улучшение метрологических характеристик, осуществляются статистическая обработка результатов, линсаризация передаточных функций. Функциональные возможности измерительного прибора с микропроцессорным управлением определяются программой, хранимой в постоянном запоминающем устройстве (ПЗУ).

Изменение программы и наращивание функций осуществляются без изменений в электрической схеме прибора. В работе /1/ приведены общие соображения относительно того, в каких случаях целесообразно применять микропроцессор в измерительных приборах. Анализ принципиальных схем показал, что расширение функциональных возможностей счетчиков фотонов $FS-3$ /2/ и $FS-4$ /3/ или изменение алгоритма требуют больших схемотехнических ресурсов, поэтому целесообразно реализовать функции счетчика фотонов программным путем.

Блок-схема счетчика фотонов представлена на рис.1.

Основой микропроцессорной системы счетчика фотонов является контроллер, созданный на базе микропроцессора КР580ВМ80 /4/. Контроллер содержит микропроцессор, генератор тактовых импульсов, схемы управляющих сигналов, сброса, готовности, буферы шины данных и шины адреса.

Генератор тактовых импульсов построен на микросхеме КР580Г24. Частота генератора стабилизируется кварцевым резонатором. Генератор выдает импульсы, синхронизирующие работу микропроцессорной системы. Схема управляющих сигналов формирует сигналы управления записи в память ЗПЗУ, считывания из памяти ЧПЗУ, записи во внешнее устройство ЗПВВ, чтения из внешнего устройства ЧПВВ, считывания вектора прерывания ПВВ,

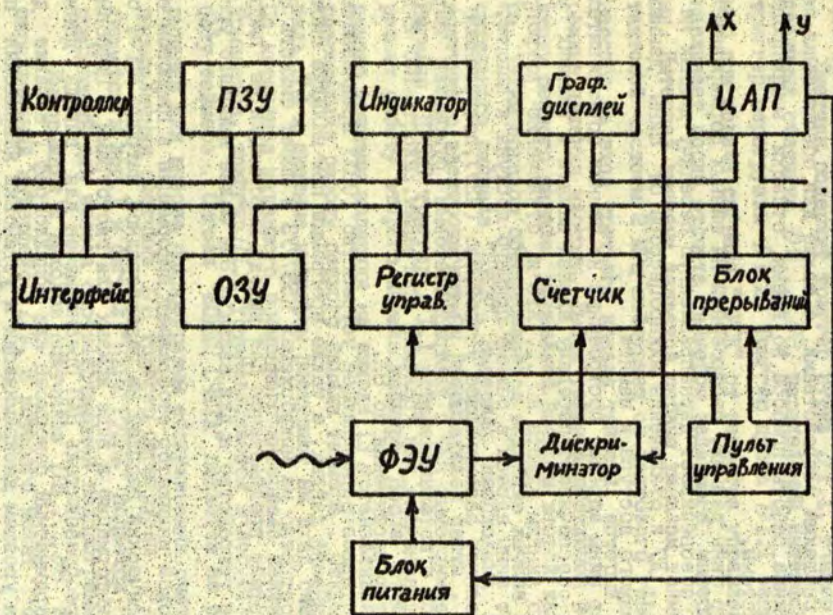


Рис. I. Блок-схема счетчика фотонов.

разрешения прямого доступа к памяти ПЗХ. Схема сброса предназначена для формирования сигнала начальной установки микропроцессора при включении питания и при нажатии кнопки "СБРОС".

Схема готовности служит для синхронизации обмена информацией с внешними устройствами, а также для обеспечения пошагового режима работы прибора во время отладки микропроцессорной системы.

Буфер шины данных, построенный на шинных формирователях К589АП16, обеспечивает двунаправленную передачу данных на линиях D0 ... D7 и отключение микропроцессора от шины данных в режиме прямого доступа к памяти.

Буфер шины адреса, построенный на шинных формирователях К155ЛП11, обеспечивает передачу адреса памяти и внешних устройств по линиям адреса A0 ... A15 и отключение микропроцессора от шины адреса в режиме прямого доступа к памяти.

Постоянное запоминающее устройство (ПЗУ), построенное на перепрограммируемых ПЗУ с ультрафиолетовым стиранием серии К573, предназначено для хранения программы. Емкость ПЗУ 2 К с возможностью расширения до 8К.

Оперативное запоминающее устройство (ОЗУ) предназначено для запоминания данных, а также программы при наладке системы. ОЗУ построено на микросхемах К537РУ3 и имеет емкость 8К.

Интерфейс предназначен для вывода информации на цифровое печатающее устройство и для связи с ЭВМ более высокого уровня.

Цифровой индикатор отображает информацию в цифровом виде, а графический дисплей на газоразрядной матрице ИМГ-1 отображает информацию в виде кривых или гистограмм. Цифроаналоговый преобразователь ЦАП предназначен для вывода данных на двухкоординатный самописец или осциллограф, а также для управления уровнем дискриминации и установки напряжения питания ФЭУ. Регистр управления запускает и устанавливает счетчик и считывает положения переключателей и кнопок пульта управления. Он построен на микросхеме параллельного интерфейса КР580ВВ55.

Блок прерывания выдает на процессор запрос на прерывание программы в конце счета, при перегрузке счетчика и при нажатии кнопок общего управления счетчика "СБРОС", "ПУСК",

"СТОП". Блок прерывания реализован на микросхеме КР580ВН59.

В дискриминаторе использована принципиальная схема, предложенная в работе /5/.

Принципиальная схема счетчика представлена на рис.2.

Счетчик содержит триггер пуска $D1.1$, таймер $D2$, четыре двоичных счетчика $D5, \dots, D8$, параллельный интерфейс $D9$ и триггер перегрузки $D1.2$. Триггер пуска $D1.1$ запускает таймер при подаче сигнала "ПУСК" от регистра управления и останавливает после отсчета таймером заданного интервала времени. Интервал времени задается первым каналом таймера. Сигнал тактовой частоты 2 МГц поступает от тактового генератора процессора на вход третьего канала таймера, который работает в режиме деления частоты. Выход таймера подключен к тактовому входу первого канала, управляет которым второй канал таймера. Таким образом обеспечивается задержка начала счета относительного сигнала "ПУСК". Задержка необходима при работе счетчика с электромагнитным прерывателем света. При подаче сигнала "ПУСК" триггер $D1.1$ устанавливается в лог.1 и разрешает работу второго канала таймера. После отсчета необходимого времени задержки на выходе $I3$ устанавливается лог. 1, разрешающая работу первого канала таймера. Открывается вентиль $D4$ и счетные импульсы поступают на вход счетчика $D5$. По истечении заданного временного интервала вентиль $D4$ закрывается, триггер $D1.1$ устанавливается в лог.0, запрещая работу таймера. Сигнал "КОНЕЦ СЧЕТА" подается на регистр прерываний для вызова подпрограммы обслуживания счетчика. При переполнении счетчика $D8$ триггер перегрузки $D1.2$ устанавливается в лог.1 и сигнал "ПЕРЕГРУЗКА" подается на регистр прерываний для вызова соответствующей подпрограммы.

Информация с выходов счетчиков $D5, \dots, D8$ поступает на параллельный интерфейс $D9$, с которого может быть считана по команде от процессора.

При необходимости емкость счетчика может быть увеличена до 24 двоичных разрядов за счет использования третьего канала интерфейса $D9$. Вместо микросхем $KI55IE5$ можно использовать микросхемы $KI55IE2$, и счетчик будет работать в двоично-десятичном представлении числа.

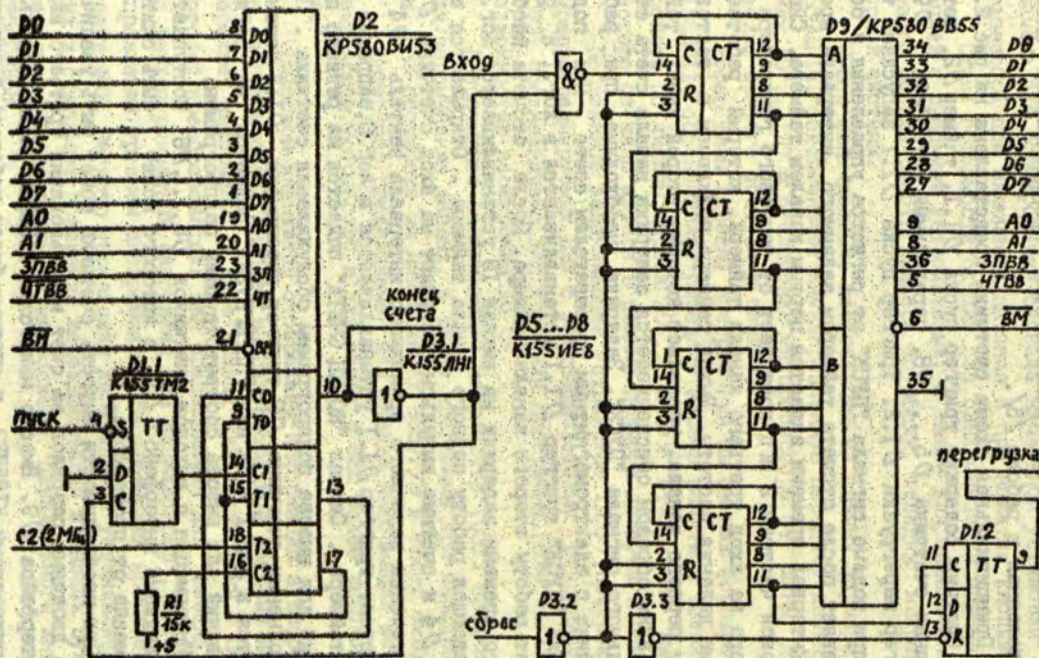


Рис.2. Принципиальная электрическая схема счетчика.

Программирование схемы осуществляется путем записи управляющих слов таймера и интерфейса. Параллельный интерфейс устанавливается в режиме ввода по командам /5/ и /6/ *MVIA, 9BH; OUT, A3H*.

Первый канал таймера устанавливается в режиме программируемого ждущего одновибратора по командам *MVIA, 32H; OUT, B3H*.

Второй канал таймера устанавливается в режиме программируемого ждущего одновибратора по командам *MVIA, 72H; OUT, B3H*.

Третий канал таймера устанавливается в режиме делителя частоты по командам *MVIA, B4H; OUT, B3H*.

Считывание младшего байта содержания счетчика осуществляется по команде *IN, A0H*, а считывание старшего байта по команде *IN, A1H*.

Список литературы

1. Мирский Г.Я. Микропроцессоры в измерительных приборах. - М.: Радио и связь. - 1984. - С. 54.
2. Вилитис О.Е., Круминьш А.П., Янсон У.В. // ПТЭ. - 1982. - № 3. - С. 248.
3. Круминьш А.П., Янсон У.В., Вилитис О.Е. Процессы переноса энергии в парах металлов. Рига: ЛГУ им. П. Стучки. 1985. - С. 116.
4. Алексенко А.Т., Галицин А.А. Проектирование радиоэлектронной аппаратуры на микропроцессорах. - М.: Радио и связь. - 1984. - С. 144.
5. Бусенбергерс Я.К., Вилитис О.Е., Круминьш А.П., Янсон У.В. Процессы переноса энергии в парах металлов. - Рига: ЛГУ им. П. Стучки. 1983. - С. 181.
6. Григорьев В.Л. Программное обеспечение микропроцессорных систем. - М.: Энергоатомиздат. - 1983. - С. 177.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Представленные в сборнике результаты исследований элементарных процессов с участием возбужденных атомов при тепловых энергиях необходимы для решения многих научных и прикладных задач, в частности, задач разработки, создания и оптимизации параметров оптических квантовых генераторов, МГД-преобразователей энергии, газоразрядных источников света и других физико-технических устройств, содержащих плазму или ионизованный газ. Одним из важнейших практических приложений является использование процессов столкновительной ионизации в качестве одного из наиболее эффективных каналов в технологическом цикле лазерного разделения изотопов.

Знание вероятностей протекания этих процессов необходимо для решения ряда задач плазмохимии и физики плазмы, исследования некоторых физических и физико-химических аспектов атмосферных и ионосферных явлений, выяснения физической картины взаимодействий между частицами.

Высокочастотные безэлектродные лампы как источники интенсивных атомарных и ионных спектральных линий, а также описанные в сборнике приборы для регистрации излучения широко используются в различных областях науки и техники: в медицине, биологии, химии, геологии, промышленности и сельском хозяйстве.

Работы выполнены в рамках следующих комплексных программ:

1) Программа ГКНТ и АН СССР "Создание новых и развитие действующих систем автоматизированного проектирования (САПР) и автоматизированных систем научных исследований (АСНИ) в народном хозяйстве", результаты будут использоваться в системе "Автоматизированное обеспечение газовой динамики рекомендациями с оценкой достоверности (АВОГАДРО)";

2) Программа исследований по важнейшим фундаментальным проблемам АН СССР "Разработка и исследование комплексов автоматизированных методов и приборов для определения химического состава веществ и материалов как показателя качества продукции";

3) Республиканская научно-техническая программа "Разра-

ботка физических, технологических и технических основ создания волоконно-оптических линий связи (ВОЛС)".

С о д е р ж а н и е

ВВЕДЕНИЕ	3
✓ Краулина Э.К., Круглевский В.А. Перенос в парах металлов	5
✓ Клявиньш Я.П., Папернов С.М., Швөгжда Ж.Л. Процессы переноса энергии в смеси паров натрия и рубидия, возбужденных на частоте D-линий натрия.	24
✓ Папернов С.М., Янсон М.Л., Грушевский В.Б. Кинетика распада оптически возбужденных резонансных состояний атома натрия.	31
✓ Пирагс И.Я., Таманис М.Я., Фербер Р.С. Столкновительная дезактивация энергии возбуждения в $K_2(B^1\Pi_u)$	39
✓ Загребин С.Б., Самсон А.В. Исследование процессов столкновительной ионизации при селективном оптическом возбуждении пучка атомов металлов.	50
Дашевская Е.И., Никитин Е.Е. Поляризационные явления при атомных столкновениях.	62
Лукомский Н.Г., Полищук В.А., Чайка М.П. Аномальное магнитное вращение в разряде неона, наведенное анизотропными столкновениями.	71
Боярский К.К., Котликов Е.Н., Перчук О.В. Исследование столкновений с различными скоростями в неоне по сигналам Ханле.	76
✓ Аузиньш М.П. К вопросу о структуре нелинейного сигнала Ханле основного состояния.	85
✓ Круглевский В.А. Использование матричных элементов тензорных операторов в расчетах межатомного обменного взаимодействия.	93
Кузьменко Н.Е., Бремин В.В. Определение отталкивательных потенциальных кривых из непрерывных спектров двухатомных молекул.	103

У белис А.П., Берзиньш У.В. Вероятности переходов в атомах SeI и TeI .	III
Бульшев А.Е., Денисова Н.В., Преображенский Н.Г., Суворов А.Е. Математическое моделирование безэлектродного высокочастотного разряда...	123
Лездинь А.Э., Путнина С.Я., Скудра А.Я. Спектроскопические исследования высокочастотных безэлектродных ртутных ламп.	133
Скудра А.Я., Хуторщиков В.И., Юшина Г.Г. Спектральные характеристики высокочастотных безэлектродных рубидиевых ламп.	141
Брюховецкий А.П., Спигулис Я.А., Орлов Р.В. Исследование фотоприемников для инфракрасной области спектра при малых уровнях засветки.	147
Орлов Р.В. Устройство для исследования фотодиодных матриц.	157
Круминьш А.П., Янсон У.В., Гроза А.Я. Счетчик фотонов с микропроцессорным управлением.	160
ЗАКЛЮЧЕНИЕ.	166

СТОЛКНОВИТЕЛЬНЫЕ И РАДИАЦИОННЫЕ ПРОЦЕССЫ
С УЧАСТИЕМ ВОЗБУЖДЕННЫХ ЧАСТИЦ

Сборник научных трудов

Рецензенты: А.Н.Ключарев, ст.науч.сотр. НИИФ ЛГУ им.
А.А.Жданова, доктор физ.-мат.
наук;

Р.Я.Дамбург, зав.лаб. Института физики АН
ЛатвССР, доктор физ.-мат.наук;

Р.К.Петеркоп, вед.науч.сотр. Института фи-
зики АН ЛатвССР, доктор физ.-
мат наук

Редакторы: Э.Крауля, Р.Павлова

Технический редактор С.Линия

Корректор И.Балоде

Подписано к печати 29.01.1987. ЯТ 09028 Ф/б 60х84/16.
Бумага М1.П.3 физ.печ.л.10,4 усл.печ.л. 8,3 уч.-изд.л.
Тираж 500 экз. Зак. № 181 Цена 1 р. 30 к.

Латвийский государственный университет им П.Стучки
226098 Рига, б. Райниса, 19
Отпечатано в типографии, 226050 Рига, ул.Вейденбаума, 5
Латвийский государственный университет им. П.Стучки

УДК 539.186.1

Краулина Э.К., Круглевский В.А. Перенос возбуждения в парах металлов // Столкновительные и радиационные процессы с участием возбужденных частиц. - Рига: ЛГУ им.П.Стучки. - 1987. - С.5.

В статье показано развитие экспериментальных и теоретических исследований сечений ударов второго рода между атомами тепловой энергии в парах металлов в 80-е годы. Табл.6, ил.2, библиогр. 58 назв.

УДК 539.186.1

Клявиньш Я.П., Папернов С.М., Швөгжда Ж.Л. Процессы переноса энергии в смеси паров натрия и рубидия, возбужденных на частоте D -линий натрия // Столкновительные и радиационные процессы с участием возбужденных частиц. - Рига: ЛГУ им.П.Стучки. - 1987. - С. 24.

Экспериментально исследован перенос энергии от возбужденных лазером на красителе 3Р-уровней атомов натрия к атомам рубидия. Получены константы скорости этого процесса для 6S-, 4D- и 5P-уровней рубидия. Ил.3, библиогр. 10 назв.

УДК 539.196.

Папернов С.М., Янсон М.Л., Грушевский В.В. Кинетика распада оптически возбужденных резонансных состояний атома натрия // Столкновительные и радиационные процессы с участием возбужденных частиц. - Рига: ЛГУ им.П.Стучки. - 1987. - С.31.

Определены эффективные скорости радиационного распада резонансных состояний атома натрия в условиях пленения излучения в термической ячейке, имеющей конфигурацию, приближенную к бесконечному цилиндру. Проведено сравнение с результатами теоретических расчетов, основанных на теории Бибермана-Холштейна. Ил.3, библиогр. 8 назв.

УДК 539.196

Пирагс И.Я., Таманис М.Я., Фербер Р.С. Столкновительная дезактивация энергии возбуждения в K_2 ($B^1\Pi_u$) // Столкновительные и радиационные процессы с участием возбужденных частиц. Рига: ЛГУ им. П. Стучки. - 1987. - С. 39.

Экспериментально определены константы скорости и полные эффективные сечения дезактивации энергии возбуждения отдельного электронно-колебательно-вращательного уровня $B^1\Pi_u$ - состояния молекулы K_2 при соударениях с атомами инертных газов и с атомами калия в щелочных парах. Использован метод тушения лазерно-индуцированной флуоресценции в трехкомпонентной смеси K_2+K+R , где R - примесный атом, а также метод эффекта Ханле. Полученные значения сечений сравниваются с рассчитанными сечениями захвата. Табл. I, ил. 4, библиогр. 17 назв.

УДК 539.186

Зегребин С.Б., Самсон А.В. Исследование процессов столкновительной ионизации при селективном оптическом возбуждении пучка атомов металлов // Столкновительные и радиационные процессы с участием возбужденных частиц. - Рига: ЛГУ им. П. Стучки, 1987. - С. 50.

Измерены константы скоростей реакций ионизации при медленных столкновениях оптически возбужденных атомов лития, натрия и бария с собственными атомами в основном состоянии в условиях атомного пучка. Для лития и натрия выполнены расчеты констант скоростей исследованных процессов в рамках существующих теоретических моделей. Рассмотрена роль процессов передачи возбуждения при столкновениях с атомами собственного газа. Табл. I, ил. 4, библиогр. 35 назв.

УДК 539.186.2

Дашевская Е.И., Никитин Е.Е. Поляризационные яв-

ления при атомных столкновениях // Столкновительные и радиационные процессы с участием возбужденных частиц. - Рига: ЛГУ им. П. Стучки, 1987. - С. 62.

Рассмотрена корреляция симметрии ансамбля рассеянных атомов (столкновения в объеме - сферическая симметрия, столкновения в пучке без выделенного направления на детектор - аксиальная симметрия, столкновения в пучке с выделенным направлением на детектор - симметрия отражения в плоскости столкновения) с сечениями, характеризующими изменение поляризационного ансамбля при столкновении (деполяризация и передача поляризационного момента без изменения ранга, передача поляризационного момента с изменением ранга и порождение четных моментов, порождение нечетных моментов соответственно). Обсуждаются правила отбора сечений и ограничения различных динамических подходов в описании поляризационных явлений при рассеянии. Табл. 1, библиогр. 14 назв.

УДК 593.184

Лукомский Н. Г., Полищук В. А., Чайка М. П. Аномальное магнитное вращение в разряде неона, наведенное анизотропными столкновениями // Столкновительные и радиационные процессы с участием возбужденных частиц. - Рига: ЛГУ им. П. Стучки, 1987. - С. 71.

Выявлен эффект перехода выстраивания в ориентацию, наведенную анизотропными столкновениями в присутствии слабого магнитного поля в неоне. Показано, что наблюдаемые сигналы самоориентации позволяют получить информацию о временах жизни и сечениях столкновений возбужденных состояний. Ил. 2, библиогр. 7 назв.

УДК 539.184

Боярский К. К., Котликов Е. Н., Перчук О. В. Исследование столкновений с различными скоростями частиц в неоне по сигналам Ханле // Столкновительные и радиационные процессы с участием возбужденных

частиц. -Рига: ЛГУ им.П.Стучки, 1987. - С. 76.

В настоящей работе описываются результаты исследования зависимости ширины сигналов Ханле от скоростей сталкивающихся частиц. Показано, что эти измерения дают возможность определять уширение уровня и линии перехода столкновениями с частицами, обладающими заданной проекцией скорости. Исследования такого рода представляют интерес, так как позволяют определять тип взаимодействия сталкивающихся частиц. Табл. I, ил. 3, библиогр. 8 назв.

УДК 539.184.28

Лузиньш М.П. К вопросу о структуре нелинейного сигнала Ханле основного состояния // Столкновительные и радиационные процессы с участием возбужденных частиц. -Рига: ЛГУ им.П.Стучки, 1987. -С. 85.

Рассмотрено проявление дополнительной структуры в нуле магнитного поля для сигнала Ханле основного состояния двухатомных молекул в зависимости от углового момента состояния. Показано, что во всех случаях, когда в основном состоянии может быть создан поляризационный момент ранга 6, т.е. когда угловой момент уровня $J \geq 3$, дополнительная структура сигнала связана с проявлением этого момента. Исследован механизм проявления в сигнале поляризационного момента шестого ранга. Ил. 3, библиогр. 13 назв.

УДК 539.192.

Круглевский В.А. Использование матричных элементов тензорных операторов в расчетах межатомного обменного взаимодействия // Столкновительные и радиационные процессы с участием возбужденных частиц. -Рига: ЛГУ им.П.Стучки. -1987. -С. 93.

Предлагается субматричные элементы тензорных операторов, при помощи которых можно получить удобные выражения для многоэлектронных частей матричных элементов межатомного обычного

взаимодействия в приближении однократных и двухкратных перестановок электронов между атомами. Библиогр. 7 назв.

УДК 539.194.

Кузьменко Н.Е., Еремин В.В. Определение отталкивательных потенциальных кривых из непрерывных спектров двухатомных молекул // Столкновительные и радиационные процессы с участием возбужденных частиц. - Рига: ЛГУ им. П. Стучки. - 1987. - С. 103.

По распределению интенсивностей в непрерывных спектрах двухатомных молекул разработаны алгоритмы и программы расчета отталкивательных потенциалов. Проведены тестовые расчеты для системы $^1\Pi_{Lu} - X^1\Sigma_g^+$ молекулы Bz_2 . Выявлены основные недостатки и ограничения метода "квази-РКР". Продемонстрированы преимущества альтернативного подхода (метода перебора) к решению обратной задачи. Табл. 1, ил. 1. библиогр. 9 назв.

УДК 539.184.5

Убелис А.П., Берзиньш У.В. Вероятности переходов в атомах SeI и TeI // Столкновительные и радиационные процессы с участием возбужденных частиц. - Рига: ЛГУ им. П. Стучки. - 1987. - С. III.

На основе измеренных отношений вероятностей переходов получены абсолютные значения вероятностей переходов для двенадцати линий SeI и восемнадцати линий TeI. Получена единая шкала относительных вероятностей переходов всех восемнадцати линий TeI. Сделано сравнение наших результатов с результатами теоретических расчетов других авторов. Табл. 3, ил. 2, библиогр. 13 назв.

УДК 621.32; 535.33

Бульшев А.Е., Денисова Н.В., Преображенский Н.Г., Суворов А.Е. Математическое моделирование базиса электродного высокочастотного разряда // Столкновительные радиационные процессы с участием возбужденных частиц.

- Рига: ЛГУ им.П.Стучки.-1987.-С.123.

Результаты численного эксперимента по глной схеме сравниваются с расчетами по моделям для описания высокочастотного безэлектродного разряда в аргоне.Приводятся соображения относительно механизмов ионизации атомов.Ил.5,библиогр.15 назв.

УДК 621.327.535

Лездинь А.Э.,Путнина С.Я.,Скудра А.Я. Спектроскопические исследования высокочастотных безэлектродных ртутных ламп// Столкновительные и радиационные процессы с участием возбужденных частиц.- Рига: ЛГУ им.П.Стучки.- 1987.- С.133.

Определено оптимальное давление элемента в специально изготовленных ртутных ВЕЛ с отроостком.Исследованы абсолютные интенсивности ионной и атомарных спектральных линий ртути. В качестве эталонного источника для определения относительной чувствительности спектральной аппаратуры использовали гелиевую ВЕЛ.Определена постоянная уширения линии 404,7 нм с аргонном - $0,003 \text{ см}^{-1}/\text{мм рт.ст.}$ Табл.1,ил.2,библиогр.11 назв.

УДК 621.32; 535.33

Скудра А.Я.,Хуторщиков В.И.,Юшина Г.Г.Спектральные характеристики высокочастотных безэлектродных рубидиевых ламп// Столкновительные и радиационные процессы с участием возбужденных частиц. - Рига: ЛГУ им.П.Стучки.- 1987.- С.141.

Экспериментально исследована интенсивность линий рубидия с длиной волны 780 и 794,7 нм при изменении давления криптона от 1 до 15 мм рт.ст.,температуры резервуара с конденсированным рубидием от 110 до 160 °С,мощности автогенератора от 1,5 до 7 Вт.Обнаружено,что при температуре 140-150°С достигается наибольшая интенсивность линий рубидия, которая практически не зависит от давления буферного газа в диапазоне 1-9 мм рт.ст.Обсуждены принципы выбора режима работы ВЕЛ. Ил.3,библиогр. 8 назв.

УДК 535.15.824:621.38

Брюховецкий А.П., Спигулис Я.А., Орлов Р.В. Исследование фотоприемников для инфракрасной области спектра при малых уровнях засветки// Столкновительные и радиационные процессы с участием возбужденных частиц. - Рига: ЛГУ им. П. Стучки. - 1987. - С. 147.

В работе приведены результаты комплексных исследований фотумножителей для инфракрасной области спектра вблизи порога их чувствительности. Для случая импульсной засветки изучены обнаружительные характеристики и получены распределения андных сигналов ФЭУ. Проведено исследование зонных характеристик ФЭУ. Даны некоторые рекомендации по оптимизации работы ФЭУ при регистрации слабых и сверхслабых импульсных сигналов в ближней ИК-области спектра. Ил. 6, библиогр. 8 назв.

УДК 621.375

Орлов Р.В. Устройство для исследования фотодиодных матриц// Столкновительные и радиационные процессы с участием возбужденных частиц. - Рига: ЛГУ им. П. Стучки. - С. 157.

Описано устройство для исследования параметров фотодиодных матриц при импульсном облучении и наличии фона. С помощью этого устройства можно исследовать чувствительность, разброс чувствительности элементов фотоматрицы, разброс нулевых уровней элементов, разброс параметров отдельных экземпляров матриц и др. Устройство может работать в автономном режиме или совместно с ЭВМ ДЗ-28. Ил. 1.

УДК 621.383; 53.082.52

Круминьш А.П., Янсон У.В., Гроза А.Я. Счетчик фотонов с микропроцессорным управлением// Столкновительные и радиационные процессы с участием возбужденных частиц. - Рига: ЛГУ им. П. Стучки. - 1987. - С. 160.

Описана функциональная и принципиальная схема одного варианта счетчика фотонов с микропроцессорным управлением. Ил. 2, библиогр. 6 назв.

80215

(11)

508

0.60

1 p. 30 к.

44 / 1071

LATVIJAS UNIVERSITĀTES BIBLIOTĒKA



0508043374