

Аналогичные рассуждения могут быть применены и в случае, когда нас интересует не временной, а радикальный ход концентрации. Эти же соображения справедливы и для линии  $H_{\alpha}$  в области концентраций электронов  $10^{17} \div 10^{18} \text{ см}^{-3}$ .

### Литература

- [1] В. С. Бородин, В. Д. Гебеков, Ю. М. Каган. Опт. и спектр., 31, 4, 1971.  
 [2] В. С. Бородин, В. Д. Гебеков, Ю. М. Каган. Опт. и спектр., 31, 5, 1971.  
 [3] В. С. Бородин, В. Д. Гебеков, Ю. М. Каган. Опт. и спектр., 32, 17, 1972.

Поступило в Редакцию 28 мая 1971 г.

УДК 539.186.3.01

## РАСЧЕТ СЕЧЕНИЙ УШИРЕНИЯ И СДВИГА АТОМНЫХ ЛИНИЙ МЕТОДОМ СПИВКИ

Е. И. Дашевская и Е. А. Кобзева

Недавний расчет ширин резонансных линий щелочных металлов [1] указывает на преимущественный вклад обменного взаимодействия (по сравнению с дисперсионным) в случае, когда возмущающим газом является He. Такую же ситуацию следует ожидать и для более тяжелых атомов инертных газов при достаточно высоких температурах. Простейшие методы расчета оптических сечений  $\sigma = \sigma' + i\sigma''$  ( $\sigma'$  и  $\sigma''$  — сечения уширения и сдвига) игнорируют неадиабатические эффекты, проявляющиеся в переходах между молекулярными состояниями вследствие вращения оси квази-молекулы, или используют различные приближения [2, 3] для расчета матрицы рассеяния. Достаточно подробно исследован только случай перехода  $j=0 \rightarrow j=1$ , для которого матрица рассеяния в состоянии  $j=1$  найдена точно в полуклассическом приближении для вандерваальсова взаимодействия и прямолинейной траектории [4]. Учет искажения траектории и обобщение полученных в [4] результатов на другие потенциалы непосредственно выполнен быть не может, поскольку упомянутый расчет включает численное интегрирование.

Здесь предлагается приближенный аналитический метод расчета  $\sigma$ , основанный на идее сшивки, которая изложена в [5, 6] в связи с расчетом сечений деполяризации. В рамках этого приближения  $S$ -матрица атома в состоянии с моментом  $j$  при его рассеянии на сферически-симметричном атоме зависит от набегов фаз  $\delta_{\mu}$  в молекулярной области (при  $R < R_m$ ) для молекулярных термов  $U_{\mu}(R)$  ( $\mu$  — проекция электронного момента на молекулярную ось,  $R_m$  — граница разделения молекулярной и атомной моделей) и от углов поворота молекулярной оси в молекулярной области. Здесь мы рассмотрим случай  $j=1$  с целью сравнить предлагаемое приближение с результатом численного расчета Ребане [4]. Сечение  $\sigma$  равно

$$\sigma_1 = 2\pi \int_0^{\infty} b db \left[ 1 - \frac{1}{3} S^{(0)*} \text{Sp} S^{(1)} \right], \quad (1)$$

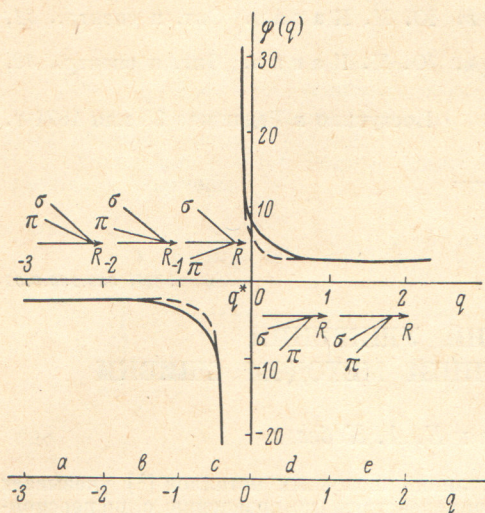
где  $S^{(0)}$  и  $S^{(1)}$  — матрицы рассеяния в состояниях  $j=0$  и  $j=1$ . Считается, что столкновения не индуцируют переходов между этими состояниями. Далее, для простоты фазы  $S^{(1)}$  вычислены по отношению к фазе в  $S^{(0)}$ , так что полагаем  $S^{(0)} = 1$ . Используя общее выражение  $S^{(j)}$  [5, 6] для прямолинейной траектории, имеем

$$\text{Sp} S^{(1)} = \left[ e^{i\delta_{\pi}} - \left( 1 - \frac{2b^2}{R_m^2} \right) e^{i\delta_{\pi}} - \left( 1 - \frac{2b^2}{R_m^2} \right) e^{i\delta_{\sigma}} \right], \quad (2)$$

где  $\delta_{\pi}$  и  $\delta_{\sigma}$  — набег фаз в адиабатических молекулярных потенциалах  $U_{\pi}$  и  $U_{\sigma}$ . Предполагается, что  $b < R_m$ . Если  $b > R_m$  (вся траектория лежит в области применимости атомной модели), то отношение  $b/R_m$  в (2) следует положить равным единице. Тогда (2) дает след матрицы рассеяния для атомной модели.

Интеграл (1) вычисляется в приближении Вайскопфа, когда для  $\sigma'$  вводятся радиусы обрезания  $R_{\sigma}$  и  $R_{\pi}$ , определенные обычным критерием [7] и отнесенные адиабатическим потенциалам  $U_{\sigma}$  и  $U_{\pi}$ . При вычислении  $\sigma''$  в том же приближении учитывается тот факт, что в сдвиг линии вносят вклад пролеты внутри кольца радиуса  $R_{\sigma}$  (или  $R_{\pi}$ ) с шириной, заметно меньше радиуса. В результате появляются

еще два параметра — отношения ширины к сдвигу  $\gamma_\sigma$  и  $\gamma_\pi$  для адиабатических потенциалов  $U_\sigma$  и  $U_\pi$ . Явное выражение для  $\sigma$  имеет различный вид в зависимости от соотношения между  $R_\sigma$ ,  $R_\pi$  и  $R_m$ . Если  $U_\sigma$  и  $U_\pi$  — вандерваальсовы потенциалы,  $U_\sigma = c_\sigma/R^6$ ,  $U_\pi = c_\pi(q/(1+q))/R^6$  ( $c_\sigma$  и  $q$  — свободные параметры), то  $\gamma_\sigma = \gamma_\pi = \gamma = 2.76$  [7] и  $R_\sigma : R_\pi : R_m = 1 : |q/(1+q)|^{2/5} : |1/(1+q)|^{2/5}$ . При этих дополнительных условиях отношение ширины к сдвигу  $\varphi$  линии перехода  $1 \rightarrow 0$  зависит только от одного параметра  $q$ . Функция  $\varphi(q)$ , вычисленная Ребане [4], показана на рисунке штрихом. Сплошная линия — расчет по методу шивки. В каждой из указанных областей



$\varphi(q)$  выражается различными, но простыми функциями. На этом же рисунке для каждой области показан качественный характер адиабатических термов. В областях  $a$  и  $e$  функция  $|\varphi(q)|$  равна обычному значению  $\gamma = 2.76$ . Неприадиабатические эффекты в этих областях не существенны, поскольку разфазировка наступает при больших прицельных параметрах, чем начинаются переходы. В областях  $b$  и  $d$   $|\varphi(q)| > \gamma$ , поскольку переходы между молекулярными состояниями обуславливают добавочное уширение, не давая сдвига. Наконец, в области  $c$  существует точка  $q^*$ , где сдвиг обращается в нуль. В рассматриваемом приближении эта точка определяется корнем уравнения

$$1 \mp 2|q|^{4/5}|1+q|^{2/5} - 2|1+q|^{2/5} = 0. \quad (3)$$

Решение дает  $q^* = -0.265$ . Результат машинного расчета [4]  $q^* \approx 0.25$ . Согласно достаточно хорошее.

Однако на границах области  $c$  машинный расчет и шивка дают заметно различные результаты. Рассмотрим, например, точку  $q=0$ , которой отвечает случай  $U_\pi=0$ . В этих условиях компонента  $\pi$ -функции, нормальная к плоскости столкновения, вообще не вносит вклада ни в уширение, ни в сдвиг. Другая компонента  $\pi$ -функции вносит вклад только в уширение в результате адиабатического следования за вращающейся молекулярной осью в области  $R < R_m$ . Что касается  $\sigma$ -функции, то ее возмущение дает и сдвиг, и уширение. Поскольку для  $q=0$  имеем  $R_\sigma = R_m$ , это качественное рассуждение дает  $\varphi(0) \approx 2\gamma$ , что согласуется с результатом метода шивки. Машинный расчет [4] дает  $\varphi(0) = \gamma$ . Аналогичное расхождение имеется и при  $q = -1$ , когда  $\sigma$ -состояние дает малый вклад в уширение и сдвиг. Эти расхождения могли бы быть объяснены тем, что потенциал  $\sim R^{-6}$  недостаточно крут для того, чтобы область шивки могла бы считаться пренебрежимо малой по сравнению с  $R_m$ . Это, однако, очень удивительно, так как введение радиуса шивки при вычислении полного сечения рассеяния для потенциала  $\sim R^{-6}$ , и при вычислении сечений деполяризации с таким же потенциалом дает ошибку меньше 10% даже в абсолютной величине сечения. Для окончательного выяснения этого вопроса необходимы, по-видимому, дальнейшие расчеты с применением численного интегрирования с последующим сравнением с методом шивки.

### Литература

- [1] E. Roueff. Astron. Astrophys., 7, 4, 1970.
- [2] F. Schuller, B. Oksengorn. J. Physique, 30, 531, 1969.
- [3] F. Schuller, B. Oksengorn. J. Physique, 30, 919, 1970.
- [4] В. Н. Ребане. Опт. и спектр., 24, 675, 1969.
- [5] E. I. Dashaevskaya. Chem. Phys. Lett. (to be published).
- [6] Е. И. Дашевская, Н. А. Мохова. Опт. и спектр., 33, 000, 1972.
- [7] И. И. Собельман. Введение в теорию атомных спектров. Физматгиз, 1963.

Поступило в Редакцию 14 июня 1971 г.