

затворами) напряженность магнитного поля. Так, в нашем случае необходимые поля достигались применением простого однослойного соленоида.

Известно [2], что для монохроматического излучения угол поворота плоскости поляризации пропорционален коэффициенту усиления активной среды. Используя линейность зависимости φ от K , можно измерять φ на коротких участках длиной

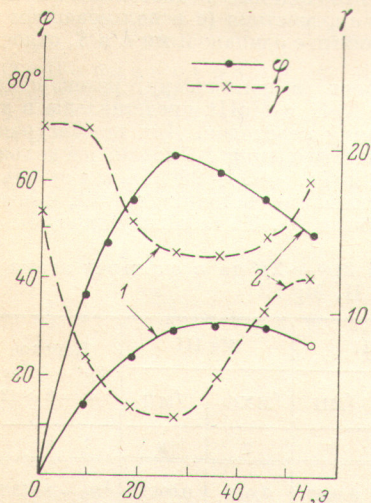


Рис. 1. Зависимость поворота плоскости поляризации φ и параметра контрастности γ (I) от напряженности магнитного поля. $\lambda = 3.51$ мкм (1), $\lambda = 5.57$ мкм (2).

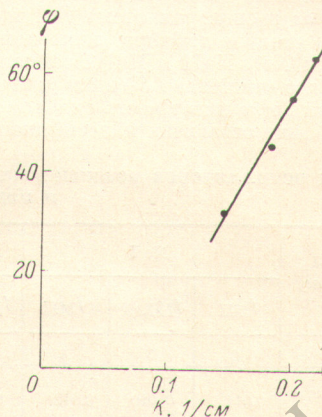


Рис. 2. Зависимость угла поворота плоскости поляризации от коэффициента усиления ($\lambda = 5.57$ мкм).

трубки, составить представление о распределении инверсии населенностей уровней по длине трубки. Для корректной диагностики инверсий населенностей уровней необходим монохроматический источник с высокой стабильностью по частоте. Однако в ограниченном диапазоне линейная связь усиления и вращения выполняется и при использовании источника с доплеровской шириной спектра. Пример такой зависимости представлен на рис. 2.

Литература

- [1] Е. Б. Александров, В. Н. Кулясов, А. Б. Мамырин. Опт. и спектр., *31*, 315, 1971.
 [2] R. L. Fork, L. C. Bradley. Appl. Opt., *3*, 137, 1964.

Поступило в Редакцию
14 марта 1972 г.

УДК 539.184

СИЛЫ ОСЦИЛЛЯТОРОВ РЕЗОНАНСНЫХ СЕРИЙ $2p^6 \rightarrow 2p^5 ns$ В СПЕКТРАХ АТОМА NeI И ИОНОВ NaII, MgIII

П. Ф. Груздев и А. В. Логинов

В работе приводится результат вычисления сил осцилляторов резонансных серий $2p^6 \rightarrow 2p^5 ns$ в спектрах атома NeI и ионов NaII, MgIII. Расчет осуществляется при промежуточной связи тремя различными методами: в кулоновском приближении (КП), по методу Хартри—Фока (МХФ) и в многоконфигурационном приближении (МП). В одноконфигурационных приближениях (КП и МХФ) для конфигураций $2p^5 ns$ были получены матрицы энергии (включающие электростатическую и спин-орбитальную энергии) в численном виде. При нахождении соответствующих интегралов, входящих в матрицы энергии, в случае КП использовались экспериментальные значения уровней энергии, а в случае МХФ — радиальные волновые функции (за исключением энергии, независимой от типа связи, которая находилась из эксперимента). Радиальные волновые функции МХФ вычислялись по программе Богдановича и Каразия [1]. В случае

КП интегралы переходов определены по методу Берджесса и Ситона [2, 3], а в МХФ — при помощи радиальных волновых функций. Интересно отметить, что интегралы переходов $2p^6 \rightarrow 2p^5ns$ ($n=3 \div 6$), вычисленные двумя различными методами, почти совпадают между собой. В многоконфигурационном приближении строилась единая матрица энергии семнадцатого порядка для состояний с $J=1$ конфигураций $2p^5ns$ ($n=3 \div 6$) и $2p^5nd$ ($n=3 \div 5$). Были вычислены все необходимые недиагональные матричные элементы оператора электростатического взаимодействия (с использованием радиальных волновых функций МХФ) между состояниями с одинаковыми L и S , относящимися к взаимодействующим конфигурациям.

Результаты вычислений сил осцилляторов (в поглощении) резонансных серий $2p^6 \rightarrow 2p^5ns$ в спектрах атома NeI и ионов NaII и MgIII представлены в таблице. В первом столбце таблицы даны наименования переходов. Для конфигурации $2p^53s$ в спектрах NeI, NaII и MgIII сохранена классификация LS -связи, поскольку расчет показал, что «чистота» LS -связи уровней $3P_1^0$ и $1P_1^0$, $\sim 93 \div 95\%$, а для остальных конфигураций $2p^5ns$ имеет место сильное перемешивание состояний с $J=1$, и поэтому для них в таблице оставлена классификация jl -связи [4]. Из таблицы видно, что силы ос-

Силы осцилляторов резонансных серий $2p^6 \rightarrow 2p^5ns$ в спектрах атома Ne I и ионов Na II, Mg III

Переход $2p^6 \rightarrow 2p^5ns$, $n = 3 \div 7$	Ne I			Na II		Mg III		Переход $2p^6 \rightarrow 2p^5ns$, $n = 8 \div 12$	Ne I $f_{\text{КП}}$
	$f_{\text{КП}}$	$f_{\text{МХФ}}$	$f_{\text{МП}}$	$f_{\text{МХФ}}$	$f_{\text{МП}}$	$f_{\text{МХФ}}$	$f_{\text{МП}}$		
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
$1S_0 \rightarrow 3s^3P_1^0$	0.011	0.010	0.012	0.0086	0.0087	0.011	0.0080	$1S_0 \rightarrow 8s [3/2]_1^0$	0.0011
$1S_0 \rightarrow 3s^1P_1^0$	0.14	0.13	0.196	0.18	0.23	0.19	0.21	$1S_0 \rightarrow 8s [1/2]_1^0$	0.00057
$1S_0 \rightarrow 4s [3/2]_1^0$	0.012	0.012	0.012	0.013	0.16	0.014	0.022	$1S_0 \rightarrow 9s [3/2]_1^0$	0.00072
$1S_0 \rightarrow 4s [1/2]_1^0$	0.016	0.015	0.022	0.024	0.0078	0.026	0.044	$1S_0 \rightarrow 9s [1/2]_1^0$	0.00037
$1S_0 \rightarrow 5s [3/2]_1^0$	0.0060	0.0056	0.0040	0.0063	0.0002	0.0070	0.0062	$1S_0 \rightarrow 10s [3/2]_1^0$	0.00050
$1S_0 \rightarrow 5s [1/2]_1^0$	0.0043	0.0040	0.0021	0.0073	$2 \cdot 10^{-6}$	0.0080	0.016	$1S_0 \rightarrow 10s [1/2]_1^0$	0.00026
$1S_0 \rightarrow 6s [3/2]_1^0$	0.0031	0.0029	0.0031	0.0026	0.0033	0.0030	0.0020	$1S_0 \rightarrow 11s [3/2]_1^0$	0.00036
$1S_0 \rightarrow 6s [1/2]_1^0$	0.0018	0.0017	0.0018	0.0040	0.0010	0.0044	0.0077	$1S_0 \rightarrow 11s [1/2]_1^0$	0.00018
$1S_0 \rightarrow 7s [3/2]_1^0$	0.0017	—	—	—	—	—	—	$1S_0 \rightarrow 12s [3/2]_1^0$	0.00019
$1S_0 \rightarrow 7s [1/2]_1^0$	0.00096	—	—	—	—	—	—	$1S_0 \rightarrow 12s [1/2]_1^0$	0.00010

цилляторов, вычисленные в кулоновском приближении $^1(f_{\text{КП}}$, второй столбец), и силы осцилляторов, вычисленные по методу самосогласованного поля Хартри—Фока ($f_{\text{МХФ}}$, третий столбец) для переходов $2p^6 \rightarrow 2p^5ns$ ($n = 3 \div 6$) в спектре атома Ne I почти совпадают между собой. В четвертом столбце таблицы приведены значения чисел $f_{\text{МП}}$ для атома NeI, вычисленные в многоконфигурационном приближении. Шесть чисел $f_{\text{МП}}$ (из восьми) близки с соответствующими $f_{\text{КП}}$ и $f_{\text{МХФ}}$. В пятом и шестом — числа $f_{\text{МХФ}}$ и $f_{\text{МП}}$ для спектра иона NaII. Для перехода $2p^6 \rightarrow 2p^53s$ $f_{\text{МХФ}}$ и $f_{\text{МП}}$ близки между собой, а для остальных переходов имеет место значительное расхождение между ними. Это расхождение обусловлено сильным наложением конфигураций $2p^5ns$ ($n = 4 \div 6$) и $2p^5nd$ ($n = 3 \div 5$), особенно $2p^54s$ и $2p^53d$, $2p^55s$ и $2p^54d$, $2p^56s$ и $2p^55d$. Нет уверенности, что числа $f_{\text{МП}}$ для NaII, представленные в таблице (переходы $2p^6 \rightarrow 2p^5ns$, $n = 4 \div 6$), не искажены процедурой диагонализации, поэтому приводим здесь и суммарные значения сил осцилляторов перехода $2p^6 1S_0 \rightarrow 2p^5ns$ ($3P_1^0, 1P_1^0$) + $2p^5nd$ ($3D_1^0, 3P_1^0, 1P_1^0$) в спектре NaII. Для $n = 4$ и $m = 3 \sum f = 0.32$; $n = 5$ и $m = 4 \sum f = 0.16$; $n = 6$ и $m = 5 \sum f = 0.12$. В последующих столбцах таблицы (седьмой и восьмой) даны $f_{\text{МХФ}}$ и $f_{\text{МП}}$ для спектра иона MgIII. Для линий перехода $2p^6 \rightarrow 2p^53s$ расхождения между $f_{\text{МП}}$ и $f_{\text{МХФ}}$ незначительны, а для остальных переходов наблюдаются несоответствия между ними. В последних столбцах таблицы (девятый и десятый) приведены наименования переходов $2p^6 \rightarrow 2p^5ns$ ($n = 8 \div 12$) и значения сил осцилляторов ($f_{\text{КП}}$), вычисленные в кулоновском приближении для спектра NeI. Значения чисел $f_{\text{КП}}$ с ростом n убывают примерно как n^{-3} .

Расчетные значения сил осцилляторов можно сопоставить с экспериментальными только для атома NeI. Для перехода $2p^6 1S_0 \rightarrow 2p^53s^3P_1^0$ известны экспериментальные значения: (0.16 ± 0.014) [6], (0.168 ± 0.002) [7], (0.130 ± 0.013) [8], 0.131 [9], (0.134 ± 0.010) [10], а для $2p^6 1S_0 \rightarrow 2p^53s^1P_1^0$ — (0.012 ± 0.002) [7], (0.0078 ± 0.0004) [8] и

¹ Ранее [5] одним из авторов был выполнен расчет сил осцилляторов переходов $2p^6 1S_0 \rightarrow 2p^53s^3P_1, P_1$ (в кулоновском приближении [2,3]) для NeI и NaII. При вычислении числа f перехода $1S_0 \rightarrow 3P_1$ была допущена ошибка. В настоящей работе получено правильное значение $f_{\text{КП}}$ для этого перехода.

0.009 [9]. Наши расчетные значения (см. таблицу) хорошо согласуются с экспериментом. Для переходов $2p^{61}S_0 \rightarrow 2p^5ns$ ($n=4,5$) известны экспериментальные числа f , полученные в работе [8] из измерений времен жизни состояний $2p^5ns^3P_1^0, 1P_1^0$ ($n=4,5$). Эти значения чисел f для $1S_0 \rightarrow 3P_1^0$ и $1S_0 \rightarrow 1P_1^0$ соответственно следующие: (0.0086 ± 0.0010) и (0.0130 ± 0.0020) для $n=4$, (0.0057 ± 0.0010) и (0.0042 ± 0.0010) для $n=5$.

Наши расчетные значения чисел f , вычисленные в одноконфигурационном приближении, несколько лучше согласуются с экспериментом, чем $f_{МП}$.

Литература

- [1] П. О. Богданович, Р. И. Каразия. Всесоюзный фонд алгоритмов и программ. П-000083, 1971.
- [2] M. J. Seaton. Month. Not. Roy. Astron. Soc., 118, 504, 1958.
- [3] A. Burgess, M. J. Seaton. Month. Not. Roy. Astron. Soc., 120, 121, 1960.
- [4] C. E. Moore. Atomic Energy Levels. Nat. Bur. Standards, 467, vol. I, 1949.
- [5] П. Ф. Груздев. Опт. и спектр., 22, 313, 1967.
- [6] Ф. А. Королев, В. И. Одинцов, Е. В. Фурсова. Опт. и спектр., 16, 555, 1964.
- [7] E. L. Lewis. Proc. Phys. Soc., 92, 817, 1967.
- [8] G. M. Lawrence, H. S. Litz. Phys. Rev., 178, 122, 1969.
- [9] J. Geiger. Phys. Lett., 33A, 351, 1970.
- [10] J. P. de Jongh, J. Van Eick. Physica, 51, 104, 1071.

Поступило в Редакцию
5 апреля 1971 г.

УДК 539.194.01

СТРОГИЙ ВЫВОД НЕРАВЕНСТВ, СВЯЗЫВАЮЩИХ ПОСТОЯННЫЕ ЦЕНТРОБЕЖНОГО ИСКАЖЕНИЯ МОЛЕКУЛ

Л. С. Маяц, А. П. Александров, М. Р. Алиев и В. Т. Александян

Вопросам определения порядка величин, граничных значений и знаков постоянных центробежного искажения, знание которых может оказаться полезным для предварительного анализа вращательных и вращательно-колебательных спектров молекул, посвящен ряд работ [1-4]. В настоящем сообщении излагается строгий вывод неравенств, связывающих постоянные $\tau_{\alpha\beta\gamma\delta}$, и рассматриваются некоторые следствия, вытекающие из этих неравенств.

В качестве исходного пункта дальнейших рассуждений выберем следующее определение [5, 6] постоянных $\tau_{\alpha\beta\gamma\delta}$ ¹

$$\tau_{\alpha\beta\gamma\delta} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial \mu_{\alpha\beta}}{\partial Q_i} \right)_0 \lambda_i^{-1} \left(\frac{\partial \mu_{\gamma\delta}}{\partial Q_i} \right)_0, \quad (1)$$

где $\mu_{\alpha\beta}$ и $\mu_{\gamma\delta}$ — соответствующие элементы матрицы, обратной матрице тензора инерции (каждый из индексов $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ может принимать значения x, y, z); Q_i — i -ая нормальная координата; $\lambda_i = \omega_i^2$ квадрат частоты i -го нормального колебания; n — число нормальных колебаний (собственных); индекс нуль указывает, что значения производных относятся к равновесной конфигурации молекулы.

Для удобства записи [7], заменим симметрическую матрицу $\|\mu_{\alpha\beta}\|$ ($\alpha, \beta = x, y, z$) столбцовой матрицей $\rho = (\rho_1, \rho_2, \rho_3, \rho_4, \rho_5, \rho_6)$, установив каким-то образом соответствие между индексами этих матриц.

$$\begin{aligned} l: & 1 \quad 2 \quad 3 \quad 4 \quad 5 \quad 6, \\ \alpha\beta: & xx \quad yy \quad zz \quad xy \quad xz \quad yz. \end{aligned} \quad (2)$$

Введя, далее, столбцовые матрицы ρ_k ($k=1, 2, \dots, 6$) с элементами

$$\rho_k^{(j)} = \frac{\omega_j^{-1}}{\sqrt{2}} \left(\frac{\partial \mu_k}{\partial Q_j} \right)_0 \quad (j=1, 2, \dots, n), \quad (3)$$

перепишем (1) в виде

$$-\tau_{kl} = \check{\rho}_k \rho_l \quad (k, l=1, 2, \dots, 6). \quad (4)$$

Правую часть (4) можно рассматривать как скалярное произведение векторов-столбцов ρ_k и ρ_l в n -мерном евклидовом пространстве. Следовательно, определитель матрицы

¹ В некоторых работах, например в [1], постоянные $\tau_{\alpha\beta\gamma\delta}$ отличаются от таковых в (1) знаком. Это следует иметь в виду во избежание недоразумений.