

Использовалась полнота состояний $|b\rangle$ по отношению к переходу $a \rightarrow b \rightarrow c$. Изобразим функцию распределения $\rho(E_b)$ экспонентой, спадающей в сторону валентной зоны: $\rho(E) = C \exp(-E/\beta\hbar\omega)$. E отсчитывается от края полосы собственного поглощения. Нормируем ρ таким образом, чтобы интеграл по энергии равнялся N_{ed}/N_{ep} , где N_{ep} — плотность числа валентных электронов в чистом полупроводнике и N_{ed} — плотность числа валентных электронов, принадлежащих примесям. Тогда $C = N_{ed}/N_{ep}\beta\hbar\omega$ и

$$r = 2\pi \left[\frac{(n-1)!}{(m-1)!(n-m-1)!} \right]^2 \frac{\omega}{\Gamma_b} e^{-\frac{E_a+m\hbar\omega}{\beta n\omega}} \frac{N_{ed}}{\beta N_{ep}}. \quad (7)$$

Можно сделать некоторые качественные выводы о роли дефектов при многофотонной ионизации. Эта роль велика при малых напряженностях светового поля ($\Gamma_b \ll \omega$), для больших чисел квантов ($n \gg 1$) и при большой плотности дефектов (N_{ed}). В свою очередь $\Gamma_b \approx P_{bc}$ зависит от вида материала, от числа квантов $n-m$, необходимых для ионизации состояния $|b\rangle$ и напряженности светового поля. Если хвост зоны спадает достаточно быстро, ионизация примеси происходит с поглощением одного кванта. Проведем грубую оценку величины P_{bc} для такого случая, изображая состояние лорунши водородной функцией с некоторым эффективным зарядом Z и состояние электрона в зоне проводимости — плоской волной с эффективной массой m^* .

Матричный элемент от оператора H^I (1) равен

$$M = \frac{e}{mc} \left(\frac{Z}{a} \right)^{3/2} \frac{\hbar i}{\sqrt{\pi}} \int d^3x e^{-\frac{Zr}{a}} (\nabla \cdot A) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} = \frac{8\sqrt{\pi} \hbar e (A \cdot \mathbf{k}) \left(\frac{a}{Z} \right)^{3/2}}{mc \left(1 + \frac{a^2 k^2}{Z^2} \right)^2}, \quad (8)$$

a — боровский радиус, k — волновой вектор электрона. При $ak/Z \sim 1$, $A = 0.1$ ($F = 3 \cdot 10^6$ в/см) величина P_{bc} оказывается порядка $8 \cdot 10^{12}$ сек.⁻¹. Для $\beta = 1/5$ (убывание в 160 раз при удалении на $\hbar\omega$ от края полосы собственного поглощения) и $N_{ed}/N_{ep} = 1\%$, $n=4$, $E_b = 0.2\hbar\omega$ и $\omega = 2.7 \cdot 10^{15}$ (последние три цифры соответствуют поглощению в рубине или лейкосапфире), оказывается порядка $3 \cdot 10^3$, т. е. в этой ситуации переход через примесные уровни существенно больше перехода в идеальном кристалле.

Литература

- [1] H. R. Reiss. Phys. Rev., **41**, 803, 1970.
[2] И. В. Лебедев. Опт. спектр., **28**, 1026, 1970.

Поступило в Редакцию 20 января 1972 г.

УДК 535.354 : 546.292

РАДИАЦИОННЫЕ ВРЕМЕНА ЖИЗНИ УРОВНЕЙ АТОМА НЕОНА

П. Ф. Груздев и А. В. Логинов

В настоящем сообщении приводится результат вычисления времен жизни уровней конфигураций $2p^5ns$ ($n=3 \div 6$), $2p^5np$ ($n=3 \div 5$), $2p^5nd$ ($n=3 \div 5$) и $2p^54f$. Времена жизни определялись через расчетные значения вероятностей переходов. Вероятности переходов вычислялись как в одноконфигурационном приближении (ОП), так и в многоконфигурационном приближении (МП) при промежуточной связи. Как в ОП, так и в МП определялись матрицы энергии (включающие электростатическую и спин-орбитальную энергии) в численном виде. Наложение конфигураций учитывалось непосредственно — матрицы энергии вычислялись на состояниях конфигураций $2p^6 + 2p^5np$ ($n=3 \div 5$) + $2p^54f$ и на состояниях конфигураций $2p^5ns$ ($n=3 \div 6$) + $2p^5nd$ ($n=3 \div 5$). Интегралы R_k , входящие в матричные элементы оператора электростатического взаимодействия между состояниями взаимодействующих конфигураций, определялись с помощью радиальных волновых функций Хартри—Фока, вычисленных по программе Богдановича и Каразия [1]. Интегралы F^k , G^k и ξ_{nl} определялись частично с использованием экспериментальных уровней энергии и частично через функции Хартри—Фока. Энергия, не зависящая от типа связи, определялась по экспериментальным уровням энергии.

Результаты вычислений (в нсек.) представлены в таблице. В ней даны расчетные значения радиационных времен жизни (в дипольном приближении) для первых 94 уровней NeI. В первом и пятом столбцах приведены наименования уровней по Пашену [2]

Радиационные времена жизни уровней атома неона (в нсек.)

Уровни по Пашену	$\tau_{\text{ОП}}$		$\tau_{\text{МП}}$	Уровни по Пашену	$\tau_{\text{ОП}}$		$\tau_{\text{МП}}$
	τ_1	τ_2			τ_1	τ_2	
1s ₅	∞	∞	∞	4d ₄	64.2	63.9	67.9
1s ₄	24.5	23.6	20.0	4d ₃	44.9	45.1	45.9
1s ₃	∞	∞	∞	4d ₂	18.2	17.3	8.8
1s ₂	1.80	1.73	1.26	4d ₁ '	56.3	56.4	58.3
2p ₁₀	26.1	22.8	24.0	4d ₁ ''	58.8	58.9	64.1
2p ₉	19.4	16.9	16.9	4s ₁ '''	52.6	52.6	51.1
2p ₈	20.8	18.2	18.2	4s ₁ '''	46.0	46.1	45.7
2p ₇	19.2	16.8	16.7	4s ₁ '	60.0	59.9	59.6
2p ₆	21.2	18.6	18.9	4s ₁	20.2	19.3	12.8
2p ₅	16.2	14.2	14.5	4X ₁	79.0	75.9	73.5
2p ₄	18.6	16.2	16.0	4X ₂	70.0	67.3	68.3
2p ₃	17.3	15.1	15.1	4V ₄	73.8	71.0	72.6
2p ₂	16.9	14.7	14.5	4V ₅	70.4	67.7	66.2
2p ₁	14.8	12.9	13.8	4Y ₂	73.2	70.4	67.7
2s ₅	42.2	38.7	40.0	4Y ₃	79.0	75.9	74.9
2s ₄	10.7	10.3	10.4	4Z ₃	70.3	67.6	66.2
2s ₃	40.0	36.6	35.3	4Z ₄	70.6	67.8	66.7
2s ₂	8.72	8.47	7.01	4W ₃	60.8	58.5	57.3
3d ₆	20.0	18.1	17.1	4W ₄	68.7	66.0	64.7
3d ₅	17.5	16.1	12.5	4U ₂	74.3	71.5	70.5
3d ₄	20.1	18.2	17.3	4U ₃	74.7	71.8	72.1
3d ₃	22.1	19.9	19.5	4p ₁₀	617	632	558
3d ₂	19.6	17.7	15.8	4p ₉	424	425	528
3d ₁ '	8.9	8.6	5.4	4p ₈	317	314	310
3d ₁ ''	23.5	21.3	21.0	4p ₇	315	312	311
3d ₁ '''	23.7	21.5	20.7	4p ₆	442	444	452
3s ₁ '	21.1	19.0	18.6	4p ₅	332	330	364
3s ₁ ''	18.7	16.9	16.8	4p ₄	442	443	487
3s ₁ '''	18.8	17.0	16.8	4p ₃	465	469	537
3s ₁	11.0	10.6	8.7	4p ₂	190	186	181
3p ₁₀	178	169	140	4p ₁	302	289	171
3p ₉	129	123	143	4s ₅	155	149	157
3p ₈	134	127	141	4s ₄	51.0	49.5	37.4
3p ₇	115	109	101	4s ₃	157	151	197
3p ₆	122	116	109	4s ₂	39.4	38.4	92.6
3p ₅	102	97	109	5d ₆	125	123	125
3p ₄	127	120	130	5d ₅	109	106	112
3p ₃	87.9	83.3	89	5d ₄	119	117	153
3p ₂	88.8	84.4	62.4	5d ₃	136	134	143
3p ₁	83.2	76.8	74.9	5d ₂	89.1	86.8	87.2
3s ₄	25.4	24.4	28.7	5d ₁ '	33.9	31.9	7.9
3s ₃	85.7	78.8	72.0	5d ₁ ''	123	121	142
3s ₂	20.8	20.1	29.6	5d ₁ '''	128	126	128
4d ₆	54.9	54.8	56.8	5s ₁ '''	120	118	133
4d ₅	50.0	49.4	33.7	5s ₁ '	104	102	100
4d ₄	53.2	53.2	52.0	5s ₁	138	136	184
				5s ₁ '	36.4	34.3	4.1

в порядке возрастания энергии уровней. В столбцах 2, 3, 6, 7 даны времена жизни, вычисленные в ОП ($\tau_{\text{ОП}}$), а в столбцах 4, 8 — в МП ($\tau_{\text{МП}}$). Времена жизни $\tau_{\text{ОП}}$ представленные в таблице, вычислены двумя способами. В столбцах 2, 6 даны τ_1 , когда вероятности переходов вычислялись при помощи интегралов переходов, найденных в кулоновском приближении (КП) [3, 4]; в столбцах 3, 7 — τ_2 , когда вероятности переходов вычислялись с интегралами переходов, полученными с помощью функций Хартри—Фока (ХФ). В обоих случаях интегралы вычислялись по формуле длины диполя. Отметим, что интегралы переходов, вычисленные в КП, и интегралы переходов найденные с помощью функций ХФ, близки по величине.

Времена жизни $\tau_{\text{МП}}$ хорошо согласуются с $\tau_{\text{ОП}}$ для большинства уровней. Для наиболее глубоких состояний $\tau_{\text{МП}}$, как правило, несколько ниже $\tau_{\text{ОП}}$.

Расчетные значения времен жизни уровней атома NeI можно сопоставить с экспериментальными данными только для 27 уровней. В кратком сообщении не представляется возможным провести подробное сопоставление расчета с экспериментом. Ограничимся приведением экспериментальных значений $\tau_{\text{эксп.}}$ (для уровней конфигураций 2p⁵3s и 2p⁵3p, для которых имеется несколько измерений $\tau_{\text{эксп.}}$,

здесь приводятся только крайние значения). Для уровней Ne I получены следующие $\tau_{\text{эксп.}}$: $1s_4 - 20.0 \div 31.7$ [5-8], $1s_2 - 1.45 \div 1.87$ [8, 10]; $2p_{10} - 24.8 \div 43$, $2p_9 - 19.4 \div 30.5$, $2p_8 - 19.8 \div 28.4$, $2p_7 - 19.9 \div 22$, $2p_6 - 19.3 \div 28.9$, $2p_5 - 18.7 \div 40.7$, $2p_4 - 19.0 \div 28.0$, $2p_3 - 17.5 \div 28.2$, $2p_2 - 16.3 \div 45$, $2p_1 - 14.0 \div 15.3$ (значения $\tau_{\text{эксп.}}$ уровней $2p$ получены в работах [11-17]); $2s_4 - 9.67$ [7], $2s_2 - 7.78$ [7]; $3d_5 - 13.2$ [7], $3d_2 - 7.25$ [7]; $3s'_1 - 12.3$ [7]; $3p_{10} - 65$ [11], 80.4 [18], $3p_5 - 150$ [18], $3p_4 - 60$ [19], $3p_2 - 51.4$ [18], $3p_1 - 63.5$ [11]; $4d_5 - 104$ [13], $4d'_1 - 480$ [11]; $3s_4 - 19.5$ [7], $3s_2 - 23.1$ [7]; $4p_{10} - 164$ [18]. Сопоставление этих $\tau_{\text{эксп.}}$ с расчетными показывает, что для 22 из 27 уровней имеет место близкое соответствие.

Литература

- [1] П. О. Богданович и Р. И. Каразия. Всесоюзный фонд алгоритмов и программ. П 000083, 1971.
- [2] С. Е. Moore. Atomic Energy Levels. Nat. Bur. Standards, 467, vol. 1, 1949.
- [3] В. Bates, A. Damgaard. Phil. Trans., A242, 401, 1949.
- [4] M. J. Seaton. Month. Not. Roy. Astron. Soc., 118, 504, 1954.
- [5] A. Phelps. Phys. Rev., 100, 1230, 1955.
- [6] E. Lewis. Proc. Phys. Soc., 92, 817, 1967.
- [7] G. Lawrence, H. Liszt. Phys. Rev., 178, 122, 1969.
- [8] J. Geiger. Phys. Lett., A33, 351, 1970.
- [9] Ф. Королев, В. Одинцов, Е. Фурсова. Опт. и спектр., 16, 555, 1964.
- [10] J. Tough, J. Eck. Physica, 51, 104, 1971.
- [11] J. Close. Astroph. J., 141, 814, 1965; Phys. Rev., 141, 181, 1966.
- [12] W. Bennet, P. Kindlmann. Phys. Rev., 149, 38, 1966.
- [13] А. Ошерович, Я. Веролайнен. Опт. и спектр., 22, 329, 1967.
- [14] И. Бакош, И. Сигети. Опт. и спектр., 23, 478, 1967.
- [15] R. Bengtson, M. Miller. J. Opt. Soc. Am., 60, 1093, 1970.
- [16] A. Denis, J. Desesquelles, M. Dufay. Compt. rend., 266, B1016, 1968.
- [17] G. Assousa, L. Brown, W. Ford. J. Opt. Soc. Am., 60, 1314, 1970.
- [18] J. Hesser. Phys. Rev., 174, 68, 1968.
- [19] Е. Котликов, Г. Тодоров, М. Чайка. Опт. и спектр., 30, 185, 1971.

Поступило в Редакцию 5 апреля 1972 г.

УДК 539.194.01

О РАСЩЕПЛЕНИИ ВРАЩАТЕЛЬНЫХ УРОВНЕЙ $J \geq 3$ $|K| = 3$ СИММЕТРИЧНЫХ МОЛЕКУЛ В ОСНОВНОМ КОЛЕБАТЕЛЬНОМ СОСТОЯНИИ

М. Р. Алиев

Известно, что в приближении жесткого волчка энергия вращательных уровней молекул типа симметричного волчка не зависит от знака квантового числа K проекции полного момента количества движения на ось симметрии высшего порядка и поэтому уровни с $K \neq 0$ двукратно вырождены. Однако учет влияния колебательно-вращательного взаимодействия и ангармонизма может привести к снятию этого вырождения, так как полный колебательно-вращательный гамильтониан имеет симметрию точечной группы молекулы. Впервые такое расщепление было обнаружено для уровней с $J \geq 3$, $|K| = 3$ в инверсионном спектре аммиака [1] и интерпретировано Нильсеном и Деннисоном [2] как результат кориолисова взаимодействия. Недавно методом электрического резонанса в молекулярном пучке измерено расщепление ряда уровней фосфина [3] и получены результаты, не согласующиеся с формулой работы [2]. В настоящем сообщении с учетом центробежного искажения, кориолисова взаимодействия и ангармонизма потенциальной энергии получено общее выражение для величины расщепления уровней с $J \geq 3$, $|K| = 3$ произвольной молекулы, принадлежащей к точечной группе C_{3v} , указаны на ошибки работы [2] и проведены численные оценки для аммиака и фосфина.

Вращательные уровни с $|K| = 3n$ ($n=1, 2, 3, \dots$) жесткого волчка в основном или в возбужденных невырожденных колебательных состояниях коррелируют с уровнями типа A_1 и A_2 молекулы, принадлежащей к точечной группе C_{3v} , а уровни с $|K| \neq 3n$ и 0 — с уровнями типа E . Поэтому из-за влияния внутримолекулярного взаимодействия могут расщепиться только уровни с $|K| = 3n$ ($n \neq 0$). Величина расщепления уровня с $|K| = 3n$ в первом приближении равна удвоенному матричному элементу $\langle -3n | +3n \rangle$ колебательно-вращательного гамильтониана. Общий ана-