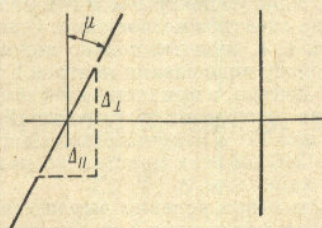


где h — толщина пластин, j — угол падения луча на первую пластину, ε — угол между пластинами, n — показатель преломления, откуда

$$\operatorname{tg} \mu = \operatorname{tg} j \frac{\sin^4 j - (3n^2 - 1) \sin^2 j + n^2}{\sin^4 j - 2n^2 \sin^2 j + n^2}. \quad (2)$$

При $n \approx 1.55$ $\mu = 0$ для $j \approx 41^\circ$ и $\mu = \pi/2$ для $j \approx 49^\circ$. Таким образом, используя интерферометр Жамена, можно изучать как поперечную, так и продольную пространственную когерентность [1] поля излучения.



Эквивалентная схема двухлучевого интерферометра.

Насколько известно, такая возможность использования интерферометра Жамена ранее не рассматривалась, поскольку при описании механизма образования интерференционной картины в интерферометре Жамена авторы [1, 3, 4] обычно ограничивались рассмотрением ахроматического режима наблюдения ($\mu = 0$).

Литература

- [1] М. Борн, Э. Вольф. Основы оптики. Изд. «Наука», М., 1970.
- [2] А. Н. Захарьевский. Интерферометры. Оборонгиз, Л., 1952.
- [3] А. А. Шиловский. Прикладная физическая оптика. Физматгиз, Л., 1961.
- [4] А. М. Борбат. Оптические измерения. Изд. «Техника», М., 1967.

Поступило в Редакцию 10 сентября 1970 г.

УДК 539.184.01

СУММИРОВАНИЕ АТОМНЫХ ФЕЙНМАНОВСКИХ ДИАГРАММ С ПРОСТЫМИ ЗНАМЕНАТЕЛЯМИ. I

Л. Н. Иванов

Расчеты энергетических сдвигов и матричных элементов операторов для основных и первых возбужденных состояний атомов с заполняющей оболочкой $n=2$ [1, 2] указывают на особую роль в ряду теории возмущений по полному кулоновскому межэлектронному взаимодействию так называемых членов с простыми знаменателями, т. е. знаменателями вида: $E_i - E_j$, где E_i, E_j — одноэлектронные энергии. Этими членами учитывается взаимодействие близко расположенных уровней конфигураций, отличающихся от рассматриваемой конфигурации изменением главного квантового числа только одного электрона.

Разлагая волновую функцию в приближении Хартри—Фока в ряд по Z^{-1} , можно убедиться, что это приближение включает только часть членов с простыми знаменателями из всех порядков теории возмущений и в случае состояний с открытыми оболочками «недиаграммные» члены, не имеющие аналога в ряду теории возмущений. Как показало сравнение результатов расчетов по теории возмущений [1, 2] и по уравнению Хартри—Фока [1, 3, 4], корреляционная поправка от неучтенных в приближении Хартри—Фока членов с простыми знаменателями дает значительный вклад в энергию и составляет до 40% полного вклада от первого порядка при вычислении вероятности перехода типа $1s^2 2s n_1 2p n_2 - 1s^2 2s n_1 - 12p n_2 + 1$.

В [1] предложено выделять члены с простыми знаменателями и рассчитывать их до более высоких порядков, поскольку их расчет относительно прост. Учет таких членов наряду с полным вторым порядком улучшит результаты в тех случаях, когда уровни возбужденных конфигураций еще не слишком близки к искомому. Однако, как следует из эксперимента, например, уровень $1s^2 2s 2p^2 S$ атома В даже погружен в уровни конфигурации $1s^2 2s^2 ns^2 S$. Это обстоятельство делает бессмысленным расчет всей поправки по теории возмущений, поскольку, как нетрудно показать, ряд в этом случае в прин-

днее расходится. Этот же недостаток присущ известному варианту теории возмущений Хартри-Фоковским нулевым гамильтонианом.

В связи с этим в настоящей работе предлагается просуммировать в ряду теории возмущений подпоследовательности, которые в силу указанных причин могут плохо сходиться или даже расходиться; для этого нужно объединить во всех порядках члены, имеющие одинаковое число сложных знаменателей (не представимых в виде $E_i - E_j$). Расчет теперь сведется к последовательному учету членов без сложных знаменателей одним сложным знаменателем, с двумя и т. д. Отметим, что выполнение этой программы не требует существенного изменения сформулированной в [5, 6] процедуры расчета с применением диаграммной техники. Проиллюстрируем это на примере вычисления первых двух членов нового, перестроенного ряда для энергии основного состояния He.

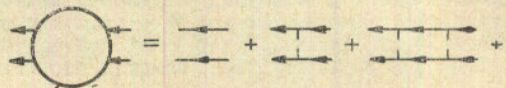


Рис. 1. Диаграмма для двухчастичной функции $\theta(\tau\tau')$.

Полный гамильтониан как обычно представим в виде

$$H = H^{(0)} + V, \quad H^{(0)} = \sum_i h_i, \quad h_i = -\left(\frac{1}{2} \Delta_i + \frac{1}{r_i}\right), \quad V = \sum_{i < j} \frac{1}{r_{ij}}. \quad (1)$$

Функция нулевого приближения $\varphi_{11}^{(0)}(\tau\tau') = \varphi_1(\tau)\varphi_1(\tau')$, где $\varphi_1(\tau)$ удовлетворяет уравнению

$$h\varphi_1(\tau) = E_1\varphi_1(\tau), \quad E_n = -\frac{1}{2n^2}. \quad (2)$$

Поскольку рассматриваемое состояние не вырождено, поправка к энергии равна диагональному матричному элементу секулярного оператора, и первые два члена для нее представляются в виде

$$\Delta E^{(1)} = \langle \varphi_1\varphi_1 | V | \theta_{11} \rangle, \quad \Delta E^{(2)} = \sum_{n_1 n_2} \langle \theta_{11} | V | \varphi_{n_1}\varphi_{n_2} \rangle \langle \varphi_{n_2}\varphi_{n_1} | V | \theta_{11} \rangle \frac{1}{E_{n_1} + E_{n_2} - 2E_1}, \quad (3)$$

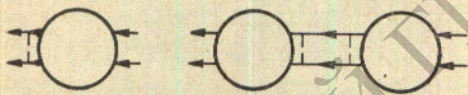


Рис. 2. Диаграммы для поправок $\Delta E^{(1)}$ и $\Delta E^{(2)}$.

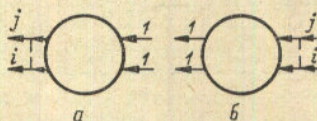


Рис. 3. Фрагменты диаграмм, соответствующие множителям $\langle \varphi_i\varphi_j | V | \theta_{11} \rangle$ и $\langle \theta_{11} | V | \varphi_i\varphi_j \rangle$.

де $\theta_{11}(\tau\tau')$ рассчитывается как сумма вкладов от обычных фейнмановских диаграмм для функции состояния (рис. 1), в которых, однако, суммирование по индексам виртуальных состояний в каждом из разрезов ограничивается лишь членами простыми знаменателями. Таким образом, можно получить ряд теории возмущений для двухэлектронной функции $\theta_{11}(\tau\tau')$ и, подставив его в (4), убедиться, что она удовлетворяет интегральному уравнению

$$\theta_{11}(\tau\tau') = \varphi_1(\tau)\varphi_1(\tau') - \iint d\tau'' d\tau''' \theta_{11}(\tau''\tau''') V(\tau''\tau''') \times \{ \tilde{G}_{E^{(1)}}(\tau''\tau') \varphi_1^*(\tau'') \varphi_1(\tau) + \tilde{G}_{E^{(1)}}(\tau''\tau) \varphi_1^*(\tau''') \varphi_1(\tau') \}, \quad (4)$$

$$\tilde{G}_E(\tau'\tau) = \sum_{n \neq 1} \varphi_n^*(\tau') \varphi_n(\tau) \frac{1}{E_n - E^{(1)}}, \quad E^{(1)} = E_1 + \Delta E^{(1)}.$$

Несложные преобразования позволяют представить $\theta_{11}(\tau\tau')$ в более удобном для расчетов виде

$$\theta_{11}(\tau\tau') = \varphi_1(\tau)\varphi_1(\tau') + \varphi_1(\tau)\psi_1(\tau') + \psi_1(\tau)\varphi_1(\tau'), \quad (5)$$

где $\psi_1(\tau)$ удовлетворяет линейному интегро-дифференциальному уравнению

$$(h - E^{(1)})\psi_1(\tau) = - \int d\tau'\theta(\tau\tau') V(\tau\tau') \varphi_1^*(\tau') + \varphi_1(\tau) \Delta E^{(1)}. \quad (6)$$

Отметим, что учет дополнительных по сравнению с приближением Хартри—Фока членов из ряда теории возмущений приводит к тому, что $\theta_{11}(\tau')$ является уже не произведением одноэлектронных функций, а суммой таких произведений, однако это не влечет за собой дополнительных вычислительных трудностей. Поправки $\Delta E^{(1)}$ и $\Delta E^{(2)}$ представляются как вклады изображенных на рис. 2 диаграмм.

В этих диаграммах элементам рис. 3, а, б сопоставляются соответственно множители $\varphi_i \varphi_j V | \theta_{11}$ и $\langle \theta_{11} | V | \varphi_i \varphi_j \rangle$. Диаграммы для следующих членов ряда состоят из элементов рис. 3 и четверных вертексов, которым, как обычно, сопоставляются двухчастичные матричные элементы. В остальном правила составления вкладов не меняются. Обобщение техники на случай многоэлектронного атома не представляет трудностей. Переходя к расчету $\Delta E^{(2)}$, заметим, что одна из сумм по n в (3) снимается

$$\Delta E^{(2)} = \sum_{n=2} \langle \theta_{11} | V | \varphi_n \Phi_n \rangle, \quad (7)$$

где

$$\Phi_n = \sum_{n_1=2} \varphi_{n_1}(\tau) \langle \varphi_{n_1} \varphi_n | V | \theta_{11} \rangle \frac{1}{E_{n_1} + E_n - 2E_1},$$

причем Φ_n удовлетворяет дифференциальному уравнению

$$(h - 2E_1 + E_n) \Phi_n(\tau) = \int d\tau' \varphi_n^*(\tau) V(\tau\tau') \theta_{11}(\tau\tau') - \varphi_1(\tau) \langle \varphi_1 \varphi_n | V | \theta_{11} \rangle. \quad (8)$$

Таким образом, для вычисления $\Delta E^{(2)}$ нужно решить систему уравнений (6), (8) для ψ_1 и Φ_n , рассчитать с помощью этих функций интеграл $\langle \theta_{11} | V | \varphi_n \Phi_n \rangle$ и провести численно однократное суммирование по n .

Литература

- [1] Л. Н. Иванов, Е. П. Иванова, У. И. Сафронова. *Опт. и спектр.*, 30, 385, 1971; 31, в. 4, 1971.
- [2] Л. Н. Иванов, Е. П. Иванова, В. В. Толмачев. *Изв. вузов, физика*, 12, 84, 1969.
- [3] A. Dalgarno. *Proc. Roy. Soc.*, 280, 258, 1964.
- [4] C. S. Sharma, C. A. Coulson. *Proc. Phys. Soc.*, 80, 81, 1962; C. S. Sharma, R. G. Wilson. *J. Phys. B*, 1, 1, 1968.
- [5] V. V. Tolmachev. *Adv. in chem. Phys.*, 14, 1969.
- [6] Л. Н. Иванов, В. В. Толмачев. *Изв. вузов, физика*, 12, 89, 1968.

Поступило в Редакцию 30 октября 1970 г.

УДК 535.377 : 541.0

МЕХАНИЗМЫ ПОСЛЕСВЕЧЕНИЯ КРИСТАЛЛОВ CsJ(Na) В ОБЛАСТИ 60—90° К

А. Н. Панова и Н. В. Ширан

Механизм термостимулированного в V_k -пике [1-3] послесвечения кристаллов подистого цезия, активированных натрием, до сих пор не рассматривался. С целью изучения этого механизма в настоящей работе были исследованы термолюминесцентные характеристики [кривые термовывесчивания (ТВ) и спектральный состав послесвечения] кристаллов подистого цезия, содержащих примесь натрия в пределах от $1.2 \cdot 10^{-4}$ до $1 \cdot 10^{-2}$ вес. %.

Предварительное облучение образцов осуществлялось рентгеновскими лучами при 60 и 80° К. При измерении кривых ТВ скорость нагрева образцов была постоянной и составляла 0.08 град./сек. Используемые в процессе работы оптические установки и методики эксперимента подробно описаны в работах [3, 4].

Из полученных кривых ТВ следует, что увеличение концентрации натрия в кристаллах CsJ в исследуемых пределах приводит к росту светосуммы, запасенной в V_k -пике (рис. 1, кривая 1), и сдвигу его максимума от 99 до 87° К (рис. 1, кривая 2). Одновременно с этим растет интенсивность пика ТВ с максимумом (T_m) 134° К, связанного, согласно [3], с делокализацией электронов с Na^0 -центров. В кристаллах, возбужденных при 60 и 80° К, сразу после прекращения возбуждения наблюдается после-