

- [8] Г. А. Хачкурузов, И. Н. Пржевальский. *Опт. и спектр.*, 33, 237, 1972.
- [9] Л. В. Гурвич, Г. А. Хачкурузов, В. А. Медведев, И. В. Вейц. *Термодинамические свойства индивидуальных веществ*, т. 1. Изд. АН СССР, М., 1962.
- [10] В. Н. Taylor, W. H. Parker, D. N. Landenberg. *Rev. Modern Phys.*, 41, 375, 1969.

Поступило в Редакцию 13 марта 1972 г.

УДК 539.184.01

## ФУНКЦИЯ ГРИНА И ДИНАМИЧЕСКАЯ ПОЛЯРИЗУЕМОСТЬ $H_2^+$

В. А. Давыдкин и Л. П. Рапопорт

Для расчета по теории возмущений многофотонных процессов на атомах (когерентное и комбинационное рассеяние, многофотонная ионизация и т. д.) с успехом была использована функция Грина, позволяющая провести суммирование по дискретному и интегрирование по непрерывному спектру промежуточных состояний, построенная в приближении метода квантового дефекта (МКД) [1]. Цель настоящей заметки — распространить этот метод на нецентральное поле: электрон в поле двух фиксированных центров (модель молекулярного иона  $H_2^+$ ). Функция Грина в вытянутой сфероидальной системе координат, учитывающей симметрию рассматриваемой задачи, удовлетворяет уравнению (1).

$$\left\{ \frac{\partial}{\partial \xi} \left[ (\xi^2 - 1) \frac{\partial}{\partial \xi} \right] + \frac{\partial}{\partial \eta} \left[ (1 - \eta^2) \frac{\partial}{\partial \eta} \right] + \frac{\xi^2 - \eta^2}{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{ER^2(\xi^2 - \eta^2)}{2} + 2R\xi \right\} \mathcal{S}_E(\xi, \eta, \varphi; \xi', \eta', \varphi') = \frac{4}{R} \delta(\xi - \xi') \delta(\eta - \eta') \delta(\varphi - \varphi'), \quad (1)$$

где  $\xi = (r_1 + r_2)/R$ ,  $\eta = (r_1 - r_2)/R$ ,  $\varphi = \arctg(y/x)$ ,  $R$  — межъядерное расстояние;  $r_1, r_2$  — расстояния электрона от кулоновских центров.<sup>1</sup> Так как азимутальное квантовое число  $l$  в нецентральном поле не является хорошим квантовым числом, то решение уравнения (1) ищем в виде разложения по нормированным угловым

сфероидальным функциям  $S_{ml}(\eta) = \frac{1}{\sqrt{N_{ml}}} \sum_{r=0,1}^1 d_r^{ml} P_{m+r}^m$ , где  $N_{ml} = \int_{-1}^1 d\eta S_{ml}^2(\eta)$ ,  $P_{m+r}^m(\eta)$  — присоединенные полиномы Лежандра; коэффициенты  $d_r^{ml}$  табулированы в [2].

$$\mathcal{S}_E(\xi, \eta, \varphi; \xi', \eta', \varphi') = \sum_{l,m} G_{lm}(E; \xi, \xi') S_{ml}^*(\eta') S_{ml}(\eta) \Phi_m^*(\varphi') \Phi_m(\varphi). \quad (2)$$

После отделения угловых частей получаем уравнение для радиальной функции Грина  $G_{lm}$

$$\left\{ \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} \left[ (\xi^2 - 1) \frac{\partial}{\partial \xi} \right] + \left[ -\frac{m^2}{\xi^2 - 1} - p^2 \xi^2 + 2R\xi - A_{ml} \right] \right\} G_{lm}(p; \xi, \xi') = \frac{4}{R} \delta(\xi - \xi'), \quad (3)$$

где  $p^2 = -R^2 E/2$ ;  $A_{ml}$  — константа разделения.

Разложением в ряд по  $1/\xi$  и заменой переменной  $\xi = \rho/2\rho$  приведем уравнение (3) к виду

$$\left\{ \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \left[ -\frac{1}{4} + \frac{\nu}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} + V(\rho) \right] \right\} g_{lm}(p; \rho, \rho') = \delta(\rho - \rho'), \quad (4)$$

где

$$G_{lm}(E; \xi, \xi') = \frac{g_{lm}(p; \rho, \rho')}{\sqrt{(\xi^2 - 1)(\xi'^2 - 1)}} \frac{2}{R\rho}, \quad (5)$$

$\nu$  — эффективное главное квантовое число;  $V(\rho)$  — часть потенциала, учитывающая отличие поля от кулоновского за счет нецентральности, с асимптотикой  $\rho^2 V(\rho) \rightarrow 0$ .

<sup>1</sup> В работе используется атомная система единиц.

В области  $\rho > \rho_c$  ( $\rho_c$  — радиус, вне которого влиянием  $V(\rho)$  можно пренебречь при расчете дипольных матричных элементов) общее решение (4) имеет вид

$$g_{lm}(\rho; \rho, \rho') = W_{\nu, l+1/2}(\rho >) \left\{ \frac{\Gamma(l+1-\nu)}{\Gamma(2l+2)} M_{\nu, l+1/2}(\rho <) + A W_{\nu, l+1/2}(\rho <), \right. \quad (6)$$

где  $M$  и  $W$  — известные функции Уиттекера,  $\rho >$  ( $\rho <$ ) — большая (меньшая) из величин  $\rho$  и  $\rho'$ .

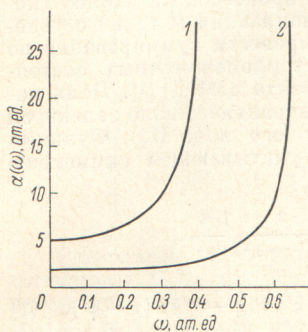
Для определения константы  $A$ , учитывающей отличие поля при  $\rho < \rho_c$  от центрального, воспользуемся МКД, позволяющим найти ее как функцию квантового дефекта  $\mu_{lm}(E)$ . Выполнив преобразования, аналогичные произведенным в [1], получим

$$A = \frac{\Gamma(l+1-\nu)}{\Gamma(l+1+\nu)} \frac{\sin \pi(\mu_{lm}(\nu) + l)}{\sin \pi(\mu_{lm}(\nu) + \nu)}, \quad (7)$$

$\mu_{lm}(E)$  — является медленно меняющейся функцией энергии и определяется из формулы

$$E_{nlm} = \frac{4}{(n - \mu_{lm}(E))^2}, \quad (8)$$

где  $E_{nlm}$  — дискретный спектр энергии электрона в  $H_2^+$ , численно рассчитанный в работах [3, 4]. Формулы (5) — (8) полностью определяют функцию Грина в МКД, имеющую полюса в точках  $E$ , определяемых (8); вычеты в этих полюсах являются произведением нормированных собственных функций  $H_2^+$  в МКД<sup>2</sup>



Динамическая поляризуемость уровня  $1s\sigma_g H_2^+$ .

1 —  $\alpha_{||}(\omega)$ ; 2 —  $\alpha_{\perp}(\omega)$ .

переходов и межъядерных расстояний  $R$ . Сравнение их с точными численными расчетами Бейтса [5] дало при равновесном межъядерном расстоянии  $R = 2$  максимальное различие не более 3—4%.

Используя построенную функцию Грина, можно выражение для динамической поляризуемости  $\alpha(\omega)$  написать в виде

$$\alpha_N^3(\omega) = - \int d\tau d\tau' \Psi_N^*(\xi, \eta, \varphi) f_{\beta}(\xi, \eta, \varphi) \left\{ \mathcal{E}_{E_N+\omega}(\xi, \eta, \varphi; \xi', \eta', \varphi') + \right. \quad (10)$$

$\left. + \mathcal{E}_{E_N-\omega}(\xi, \eta, \varphi; \xi', \eta', \varphi') \right\} f_{\beta}^*(\xi', \eta', \varphi') \Psi_N(\xi', \eta', \varphi')$ ,  
 $\beta = 1, 2$ ;  $f_1(\xi, \eta, \varphi) = (R/2)\xi\eta$  — для параллельной поляризации;  $f_2(\xi, \eta, \varphi) = (R/2) \times$   
 $\times (R/2) \sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)} e^{\pm i\varphi}$  — для перпендикулярной поляризации;  $N$  — набор квантовых чисел состояния.

Нами проведен расчет динамической поляризуемости уровня  $1s\sigma_g H_2^+$  в области частот до первого резонанса. В качестве функций начального и конечного состояний использовались точные функции, построенные и табулированные в работе [3]. Результаты расчетов приведены на рисунке.

Значения статических поляризуемостей  $\alpha_{||} = 5.25$  и  $\alpha_{\perp} = 1.87$ , полученных как предел  $\alpha_{||, \perp}(\omega)$  при  $\omega \rightarrow 0$ , находятся в удовлетворительном согласии с результатами расчетов [6]:  $5.173 \leq \alpha_{||} \leq 5.271$ ,  $1.847 \leq \alpha_{\perp} \leq 1.850$ .

Найденная функция Грина может быть обобщена для расчета многофотонных процессов на более сложных двухатомных гомеоплярных молекулах.

#### Литература

- [1] Б. А. Зон, Н. Л. Мананов, Л. П. Рапопорт. ДАН СССР, 188, 560, 1969; В. А. Давыдкин, Б. А. Зон, Н. Л. Мананов, Л. П. Рапопорт. ЖЭТФ, 60, 124, 1970.

<sup>2</sup> Чисто кулоновские полюса точно сокращаются.

- [2] К. Фламмер. Таблицы волновых сфероидальных функций. ВЦ АН СССР, М., 1962.  
 [3] D. R. Bates, K. Lendsham, A. L. Stewart. Phil. Trans. Roy. Soc. London, 246, 215, 1953.  
 [4] T. E. Sharp. Atomic Data, 2, 119, 1971.  
 [5] D. R. Bates, W. H. Fink. J. Phys. (Proc. Roy. Soc.), B2, 65, 1968.  
 [6] М. Н. Адамов, Т. К. Ребане, Р. А. Эварестов. Опт. и спектр., 22, 709, 1967.

Поступило в Редакцию 21 марта 1972 г.

УДК 535.2

## ИССЛЕДОВАНИЕ СВЕРХТОНКИХ И СУПЕРСВЕРХТОНКИХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ МЕТОДОМ СВЕТОВОГО ЭХА

З. М. Кавеева и В. В. Самарцев

### Введение

Световые индукция и эхо [1, 2] становятся эффективным методом исследования веществ. Большие перспективы в получении информации о резонансных средах имеет изучение модуляции этих когерентных откликов и их параметров, обязанной всевозможным причинам [3-7]. Одной из них является наличие сверхтонких (СТВ) и суперсверхтонких (ССТВ) взаимодействий электронов с ядрами. К настоящему времени световое эхо наблюдалось как в твердых телах (в рубине [2]), так и в газах ( $\text{SF}_6$  [9],  $\text{C}^{13}\text{H}_3\text{F}$  и  $\text{NH}_2\text{D}$  [10], парах цезия [11]). Сверхтонкая энергетическая структура сложных молекул, таких как  $\text{SF}_6$  и др., плохо изучена и метод светового эха, как будет показано, позволит определять параметры СТВ. Подобное утверждение справедливо и для твердых образцов, энергетическая структура которых может определяться еще и ССТВ.

Настоящая работа посвящена изучению возможностей метода светового эха в исследовании параметров СТВ и ССТВ. В изучаемой ситуации на ядра образца, находящегося в постоянном магнитном поле  $\mathbf{H}_0$ , воздействует радиочастотный импульс частоты  $\omega_d$ , равной резонансной частоте энергетического расщепления каких-либо двух ядерных уровней в поле  $\mathbf{H}_0$ . Одновременно с радиочастотным импульсом на электронные уровни рабочих частиц воздействует световой импульс частоты  $\Omega$ , равной резонансной частоте расщепления двух электронных уровней. Длительность радиочастотного и светового импульсов должна быть меньше всех времен релаксаций рабочих уровней. В результате после воздействия импульсов начинается свободная процессия как ядерных спинов, так и электрических дипольных моментов. Спустя время  $T_{2a}^*$ ,  $T_{2a}^* < \tau < T_{1a}$ ,  $T_{1a}$ ,  $T_{2a}$ ,  $T_{2a}$  снова подаются как радиочастотный, так и световой импульс, обращающие вращение диполей. Благодаря этому электрические диполи в момент времени  $2\tau$  соберутся и будет наблюдаться максимум когерентного светового отклика — светового эха. Однако в отличие от случая, когда СТВ и ССТВ пренебрежимо мало, должна наблюдаться модуляционная зависимость интенсивности от  $\tau$ , обязанная следующему механизму.

За счет СТВ и ССТВ между ядрами и электронами расщепление рабочих уровней электрона будет модулировано с ядерной частотой. Пусть функция, определяющая изменение расщепления, будет  $\cos[\delta(t)t]$ , где  $\delta(t)$  — изменение расщепления электронных уровней, обязанное влиянию прецессии ядерных спинов. Очевидно, «веер» электрических диполей, расфазированный к началу действия второго импульса, только тогда соберется полностью, если  $\delta(t)t = 2\pi n$ , где  $n$  — целое число. В результате зависимость максимума интенсивности светового эха от времени между импульсами  $\tau$  будет модулированной.

### Методика расчета и полученные результаты

Гамильтониан рабочих частиц с учетом их взаимодействия с возбуждающими полями

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_l \beta_{l3}^i g_l^i \mathbf{H}_0 \mathbf{S}_l - \sum_j \beta_{j3}^j g_j^j \mathbf{H}_0 \mathbf{I}_j + \sum_l \sum_j \left\{ \beta_{l3j}^i g_l^i g_j^j \frac{B_{lj}}{r^5} [3(\mathbf{r}_{lj} g_l^i \mathbf{S}_l)(\mathbf{r}_{lj} \mathbf{I}_j) - r_{lj}^2 \mathbf{I}_j g_l^i \mathbf{S}_l] + A_{lj} \mathbf{I}_j g_l^i \mathbf{S}_l \right\} + \mathcal{H}_e + \mathcal{H}_a, \quad (1)$$

- [2] К. Фламмер. Таблицы волновых сфероидальных функций. ВЦ АН СССР, М., 1962.  
 [3] D. R. Bates, K. Lendsham, A. L. Stewart. Phil. Trans. Roy. Soc. London, 246, 215, 1953.  
 [4] T. E. Sharp. Atomic Data, 2, 119, 1971.  
 [5] D. R. Bates, W. H. Fink. J. Phys. (Proc. Roy. Soc.), B2, 65, 1968.  
 [6] М. Н. Адамов, Т. К. Ребане, Р. А. Эварестов. Опт. и спектр., 22, 709, 1967.

Поступило в Редакцию 21 марта 1972 г.

УДК 535.2

## ИССЛЕДОВАНИЕ СВЕРХТОНКИХ И СУПЕРСВЕРХТОНКИХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ МЕТОДОМ СВЕТОВОГО ЭХА

З. М. Кавеева и В. В. Самарцев

### Введение

Световые индукция и эхо [1, 2] становятся эффективным методом исследования веществ. Большие перспективы в получении информации о резонансных средах имеет изучение модуляции этих когерентных откликов и их параметров, обязанной всевозможным причинам [3-7]. Одной из них является наличие сверхтонких (СТВ) и суперсверхтонких (ССТВ) взаимодействий электронов с ядрами. К настоящему времени световое эхо наблюдалось как в твердых телах, в рубине [2], так и в газах ( $SF_6$  [9],  $C^{13}H_3F$  и  $NH_2D$  [10], парах цезия [11]). Сверхтонкая энергетическая структура сложных молекул, таких как  $SF_6$  и др., плохо изучена и метод светового эха, как будет показано, позволит определять параметры СТВ. Подобное утверждение справедливо и для твердых образцов, энергетическая структура которых может определяться еще и ССТВ.

Настоящая работа посвящена изучению возможностей метода светового эха в исследовании параметров СТВ и ССТВ. В изучаемой ситуации на ядра образца, находящегося в постоянном магнитном поле  $H_0$ , воздействует радиочастотный импульс частоты  $\omega_d$ , равной резонансной частоте энергетического расщепления каких-либо двух ядерных уровней в поле  $H_0$ . Одновременно с радиочастотным импульсом на электронные уровни рабочих частиц воздействует световой импульс частоты  $\Omega_2$ , равной резонансной частоте расщепления двух электронных уровней. Длительность радиочастотного и светового импульсов должна быть меньше всех времен релаксаций рабочих уровней. В результате после воздействия импульсов начинается свободная процессия как ядерных спинов, так и электрических дипольных моментов. Спустя время  $T_{2a}^*$ ,  $T_{2a}^* < \tau < T_{1a}$ ,  $T_{1a}$ ,  $T_{2a}$ ,  $T_{2a}$  снова подаются как радиочастотный, так и световой импульс, обращающие вращение диполей. Благодаря этому электрические диполи в момент времени  $2\tau$  соберутся и будет наблюдаться максимум когерентного светового отклика — светового эха. Однако в отличие от случая, когда СТВ и ССТВ пренебрежимо мало, должна наблюдаться модуляционная зависимость интенсивности от  $\tau$ , обязанная следующему механизму.

За счет СТВ и ССТВ между ядрами и электронами расщепление рабочих уровней электрона будет модулировано с ядерной частотой. Пусть функция, определяющая изменение расщепления, будет  $\cos[\delta(t)t]$ , где  $\delta(t)$  — изменение расщепления электронных уровней, обязанное влиянию прецессии ядерных спинов. Очевидно, «ввер» электрических диполей, расфазированный к началу действия второго импульса, только тогда соберется полностью, если  $\delta(t) t = 2\pi n$ , где  $n$  — целое число. В результате зависимость максимума интенсивности светового эха от времени между импульсами  $\tau$  будет модулированной.

### Методика расчета и полученные результаты

Гамильтониан рабочих частиц с учетом их взаимодействия с возбуждающими полями

$$\mathcal{H} = \sum_l \beta_a^l g_a^l H_0 S_l - \sum_j \beta_a^j g_a^j H_0 I_j + \sum_l \sum_j \left\{ \beta_a^l \beta_a^j g_a^l g_a^j \frac{B_{lj}}{r_{lj}^5} [3(r_{lj} g_a^l S_l)(r_{lj} I_j) - r_{lj}^2 I_j g_a^l S_l] + A_{lj} I_j g_a^l S_l \right\} + \mathcal{H}_a + \mathcal{H}_n, \quad (1)$$