

## К ОПРЕДЕЛЕНИЮ АТОМНЫХ И ЯДЕРНЫХ ПАРАМЕТРОВ ПО СИГНАЛАМ ПЕРЕСЕЧЕНИЯ УРОВНЕЙ

А. Е. Бульшеев, Н. Г. Преображенский и А. Е. Суворов

Многочисленные варианты методов интерференции атомных состояний в последние годы прекрасно зарекомендовали себя как прецизионный инструмент для определения атомных и ядерных констант, а также изучения тонких процессов в газовых лазерах, низкотемпературной плазме, кристаллах, полупроводниках [1-3]. Особенно широкое развитие получил метод пересечения уровней. Однако в тех случаях, когда этот метод применяется к исследованию систем, характеризуемых большими значениями моментов ядра и электронной оболочки атома, а также испытывающих одновременное воздействие магнитного и электрического полей, вопрос об однозначности и точности определения атомных и ядерных параметров становится далеко не тривиальным.

Нами был осуществлен следующий численный эксперимент. Была разработана программа расчета матрицы плотности атома, вероятностей переходов и сигнала пересечения при произвольных значениях моментов ядра, а также нижнего и верхнего состояний электронной оболочки атома для параллельной ориентации векторов электрического  $E$  и магнитного  $H$  полей. Решалось секулярное уравнение для гамильтониана

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}} + A(\hat{I}\hat{J}) + B \frac{[3(\hat{I}\hat{J})^2 + \frac{3}{2}(\hat{I}\hat{J}) - I^2J^2]}{2I(2I-1)J(2J-1)} + g_I \mu_B (\hat{J}H) + \\ = g_I \mu_B (IH) + \beta_J E^2 \left( \hat{J}_z^2 - \frac{\hat{J}^2}{3} \right). \end{aligned} \quad (1)$$

Здесь  $A$  и  $B$  — константы СТС,  $\hat{I}$  и  $\hat{J}$  — операторы моментов ядра и электронной оболочки ( $I$  и  $J$  — их собственные значения),  $g_I$  и  $g_J$  — множители Ланде,  $\mu_B$  — магнетон Бора,  $\beta_J$  — константа Штарка (точнее — та ее часть, которая характеризует зависимость сдвига подуровня от магнитного квантового числа). С помощью секулярных коэффициентов находились значения матричных элементов оператора дипольного момента  $\hat{z}$ . В условиях оптической накачки системы широкополосным излучением уравнение для матрицы плотности атома  $\rho_{mm'}$  имеет вид [4]

$$\dot{\rho}_{mm'} = i\omega_{mm'} \rho_{mm'} - \Gamma \rho_{mm'} + K \sum_{\mu} d_{m\mu} d_{m'\mu}, \quad (2)$$

где  $\omega_{mm'}$  — частота перехода между состояниями  $|m\rangle$  и  $|m'\rangle$ ,  $m$  нумерует подуровни верхнего, а  $\mu$  — нижнего состояний,  $\Gamma$  — обратное радиационное время жизни верхнего состояния,  $K$  — константа, зависящая от интенсивности накачки. Форма сигнала пересечения  $Y$  определяется выражением

$$Y = K' \sum_{m, m', \mu} \rho_{mm'} d_{m\mu} d_{m'\mu}, \quad (3)$$

причем в условиях стационарной накачки ( $\dot{\rho}_{mm'} = 0$ ), согласно (2),

$$\rho_{mm'} = K (i\omega_{mm'} - \Gamma)^{-1} \sum_{\mu} d_{m\mu} d_{m'\mu}, \quad (4)$$

$K'$  — постоянная установки.

Для определенности в расчетах на ЭВМ рассматривался резонансный переход  $P_{3/2} - S_{1/2}$  в атоме  $Rb^{85}$ , хорошо изученный экспериментально [3-5].

Если множители Ланде  $g_I$ ,  $g_J$  считать известными, то, вообще говоря, остается пять параметров, подлежащих определению по экспериментальному сигналу пересечения:  $A$ ,  $B$ ,  $\Gamma$ ,  $\beta_J$  и  $\gamma$ . При этом параметр  $\gamma$ , входящий в  $K$ , характеризует реальное отношение интенсивностей сверхтонких компонентов в спектре лампы, возбуждающей флуоресценцию; хотя самостоятельного интереса он обычно не представляет, нахождение остальных величин без него неосуществимо.

Последовательный путь отыскания параметров, из которых можно образовать некоторый вектор  $x$ , состоит в минимизации невязки

$$\Phi(x) = \sum_i \{ Y_{\text{теор.}}(H_i, x) - Y_{\text{эсп.}}(H_i) \},$$



где теоретический и экспериментальный сигналы одинаковым образом нормированы, а значения напряженности магнитного поля взяты в отдельных точках. Если произвести разложение  $\Phi(x)$  в окрестности точного решения  $x^0$

$$\Phi(x) = \Phi(x^0) + \frac{\partial \Phi}{\partial x_i} \Big|_{x=x^0} (x_i - x_i^0) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x_i \partial x_j} \Big|_{x=x^0} (x_i - x_i^0)(x_j - x_j^0) + \dots \quad (5)$$

и учесть, что  $\Phi(x^0) = \text{const}$ , а при  $x = x^0$   $\partial \Phi / \partial x_i = 0$ , то остается исследовать член, содержащий вторую производную невязки. Над переменными  $(x - x^0)$  следует далее проделать невырожденное линейное преобразование к новому вектору  $y$ , приводящее матрицу  $C_{ij} = (1/2) \partial^2 \Phi / \partial x_i \partial x_j$  к диагональному виду, а третье слагаемое в правой части (5) — к сумме  $\sum \lambda_i y_i^2$ , где  $\lambda_i$  — собственные числа матрицы  $C_{ij}$ . Обращение в нуль хотя бы одного  $\lambda_i$  означает принципиальную невозможность однозначного определения всего набора параметров.

Рассмотрим теперь результаты вычислений. В тех случаях, когда вектор  $x$  был пяти- или четырехкомпонентным, т. е. делалась попытка сразу находить из сигнала пересечения  $A, B, \Gamma, \beta_j$  и  $\gamma$  либо любые четыре параметра из этого набора, отношение  $\lambda^{\text{min}} / \lambda^{\text{max}}$  было несколько различным, но всегда имело порядок  $10^{-2}$ . Это означает, что задача не является хорошо обусловленной (коэффициент усиления экспериментальной погрешности  $\sim 10$ ), но тем не менее корректна по Адамару. Переход к трем искомым параметрам резко улучшает обусловленность задачи, причем особенно существенно для комбинации  $(\gamma, \Gamma, A)$ . Другие трехпараметрические наборы, например  $(\gamma, \Gamma, \beta_j)$  или  $(\gamma, B, \beta_j)$ , определяются с несколько большей погрешностью (соответствующий коэффициент усиления  $\sim 3 \div 4$ ), однако во всех этих случаях задачу все же есть основания расценивать как хорошо обусловленную. Этим выводом, в частности, подтверждается обоснованность двух- и трехпараметрических схем подбора, широко применявшихся в цикле работ [5].

В заключение, однако, следует заметить, что решение вопроса о корректности задачи не устраняет практических трудностей, связанных с процедурой прямого машинного поиска оптимальных значений параметров по сигналу пересечения уровней. В расчетах нами использовался безградиентный метод минимизации Пауэлла [7], поскольку прямое аналитическое вычисление производных по параметрам от функционала  $\Phi(x)$  в данном случае вряд ли возможно. При этом затраты машинного времени (ЭВМ БЭСМ-6) даже на поиск тройки параметров, например  $(\Gamma, \gamma, \beta_j)$ , были значительными (десятки минут) особенно если в качестве нулевого приближения выбирать величины, далекие от истинных. Поэтому следует всячески приветствовать разработку и внедрение комплексных экспериментальных методик определения атомных и ядерных параметров (например, сочетающих способы пересечения и «квантовых биений» [1]), а также использование в качестве источника возбуждения перестраиваемого лазера [8, 9].

#### Литература

- [1] Е. Б. Александров. Усп. физ. наук, 107, 595, 1972.
- [2] В. Г. Показаньев, Г. В. Скродцкий. Усп. физ. наук, 107, 623, 1972.
- [3] N. I. Kalitejewski, M. Tshaiika. 4th Intern. Conf. on Atomic Physics, Heidelberg, 1974, p. 19.
- [4] М. П. Чайка. Интерференция вырожденных атомных состояний. Изд. ЛГУ, Л., 1975.
- [5] В. Н. Григорьева, Э. И. Иванов, Н. И. Калитеевский. Усп. физ. наук., 119 149, 1976.
- [6] Д. К. Фадеев, В. Н. Фадеева. Ж. вычисл. матем. и мат. физики, 1, 412, 1961.
- [7] Д. Химмельблау. Прикладное нелинейное программирование. «Мир», М., 1975.
- [8] H. Brand, W. Lange, T. Luther, B. Nottbeck, H. W. Schröder. Opt. Commun., 13, 286, 1975.
- [9] N. G. Preobrazhensky. 5th Intern. Conf. on Atomic Physics, Berkeley, 1976.

Поступило в Редакцию 16 марта 1977 г.

УДК 535.33 : 546.292 + 537.52

## СВЕЧЕНИЕ СПЕКТРАЛЬНЫХ ЛИНИЙ НЕОНА В СМЕСИ Ne—H<sub>2</sub>O В РАЗРЯДЕ С ПОЛЫМ КАТОДОМ

П. А. Погорелый и А. М. Шухтин

В работе [1] было обнаружено усиление некоторых спектральных линий неона в разрядке с полым катодом при добавлении к неону малых порций водорода. В качестве механизма полученного эффекта была предложена реакция ион-ионной комбинации

