

## ТОНКАЯ СТРУКТУРА ТРИПЛЕТНОГО ТЕРМА 1s3d-КОНФИГУРАЦИИ He I

Г. П. Анисимова, Е. И. Рыжакова и Р. И. Семенов

Постоянные тонкой структуры 1s3d-конфигурации He I вычислены из экспериментальных значений полей пересечений. Расчет выполнен по схеме, основанной на использовании волновых функций разорванных связей. С полученными значениями постоянных вычислены квантовый дефект, интервалы тонкой структуры в нулевом поле и величина синглет-триплетного взаимодействия. Проводится сравнение полученных результатов с имеющимися экспериментальными и теоретическими данными.

Известно, что структура <sup>3</sup>D-термов гелия достаточно узкая, так что прямые измерения дают очень невысокую точность определения интервалов энергии [1, 2]. В появившихся в последнее время работах [3-5] эти интервалы определяются из экспериментов по интерференции состояний в магнитном поле. При этом в эксперименте определяется только величина поля пересечения, из которой по той или иной схеме вычисляются экспериментальные интервалы тонкой структуры (т. с.). Отсюда видна важная роль самой схемы вычисления при таком определении структуры термов.

В настоящей статье интервалы т. с. триплетного терма и величина синглет-триплетного взаимодействия для 1s3d-конфигурации вычислены из экспериментальных значений полей пересечения, измеренных Тэмом [5]. Расчет выполнен по схеме, предложенной в [6], в основу которой положены двухэлектронный гамильтониан Брейта и волновые функции разорванных связей. В данной работе в радиальных постоянных учтены радиус орбиты первого электрона r<sub>1</sub> и обменные члены во взаимодействиях спин-чужая орбита и спин-спин. Это приводит к появлению в матричных элементах оператора энергии уже не двух [6], а четырех радиальных постоянных: обменного электростатического взаимодействия K, взаимодействия спин-своя орбита A<sub>1</sub>, взаимодействия спин-чужая орбита A<sub>2</sub> и постоянной спин-спинового магнитного взаимодействия A<sub>3</sub>.

При расчетах использовано значение постоянной K, вычисленное Мартином [7] путем обработки различных экспериментальных результатов. Наши расчеты показали, что при изменении K на ±5% изменение энергий магнитных подуровней в полях пересечений не превышает 0.03 МГц.

Постоянные A<sub>i</sub> определяются формулами

$$A_1 = Z\mu_B^2 \left\langle \frac{1}{r_2^3} \right\rangle, \quad (1)$$

$$A_2 = 2\mu_B^2 \left\langle \frac{1}{r_2^3} \right\rangle (1 + \delta r + \delta_{SO}), \quad (2)$$

$$A_3 = 2\mu_B^2 \left\langle \frac{1}{r_2^3} \right\rangle (1 + \delta r + \delta_{SS}), \quad (3)$$

где Z — заряд ядра; δr — член, учитывающий различие между r<sub>2</sub> и r<sub>12</sub>, одинаковый для обеих постоянных и имеющий только положительное зна-

чение;  $\delta_{SO}$  и  $\delta_{SS}$  — обменные члены для спин—чужая орбита и спин—спин взаимодействий. Эти постоянные вычисляются из условия  $\sum_k \Delta_k^2 = \min$ , а  $\Delta_k$  определяется выражением

$$\Delta_k = E_{mm}^{вмч.}(J', M_j', H_k) - E_{mm}^{вмч.}(J'', M_j'', H_k), \quad (4)$$

где  $E_{ii}^{вмч.}$  — рассчитанная энергия магнитного подуровня  $(J, M_j)$  в поле  $H_k$ . Если  $\|a_{ik}\|$  — матрица, диагонализующая матрицу энергии  $\|e_{ik}\|$  в поле  $H_k$  для данного значения  $M_j$ , т. е.

$$\|E_{ii}\| = \|a_{ik}\|^{-1} \cdot \|e_{ik}\| \cdot \|a_{ik}\|, \quad (5)$$

то, предполагая слабую зависимость матричных элементов  $a_{ik}$  от параметров  $A_i$ , можно показать, что  $E_{ii}^{вмч.}$  есть линейная функция параметров  $A_i$  и отношений матричных элементов диагонализующей матрицы  $\|a_{ik}\|$ . Поэтому, если

$$E_{ii}^{вмч.} = f_n(a_{ik}, A_i) \text{ и } E_{mm}^{вмч.} = f_m(\beta_{ik}, A_i), \quad (6)$$

где  $f_n$  и  $f_m$  — линейные функции параметров  $A_i$ , то и  $\Delta_k$  также линейная функция этих параметров.

Тэмом [5] измерено четыре поля пересечения, и, следовательно, имеется система четырех линейных уравнений

$$\Delta_k = F_k(a_{ii}^k, \beta_{mi}^k, A_i, H_k) \quad k = 1, 2, 3, 4 \quad (7)$$

для определения трех неизвестных параметров  $A_i$ . Решение ищется методом последовательных приближений. Нулевое приближение было найдено графически, а затем расчетом на ЭВМ были найдены четыре уравнения системы (7) с нулевыми приближениями параметров  $A_i^0$ . Далее система решалась методом наименьших квадратов [8], и полученные значения параметров  $A_i^1$  использовались в качестве следующего приближения. Пока просчитано только два приближения. Вычисленные значения параметров приведены в табл. 1. Различие между вычисленными и измеренными значениями полей пересечения  $\Delta H_k$ , равное 0.25 Э, все еще больше экспериментальной ошибки определения поля, равной 0.06 Э. Это может быть объяснено как недостаточным числом взятых приближений, так и неточностью использованного гамильтониана Брейта. С полученными значениями параметров вычислялись различные величины, определяющие тонкую структуру  $^3D$ -терма.

Таблица 1

	Приближение		
	0-е	1-е	2-е
$A_1, \text{см}^{-1}$	0.01452	0.0145203	0.0145238
$A_2, \text{см}^{-1}$	0.01453	0.0145268	0.0145279
$A_3, \text{см}^{-1}$	0.01451	0.0144990	0.0144968
$\sum_k \Delta_k^2 (\text{см}^{-1})^2$	$1.3038 \cdot 10^{-8}$	$0.575 \cdot 10^{-8}$	$0.4165 \cdot 10^{-8}$
$\overline{\Delta_k}$	$38.1 \cdot 10^{-6}$	$25.3 \cdot 10^{-6}$	$21.5 \cdot 10^{-6}$
$\Delta H_k, \text{Э}$	—	—	0.25

Если вычислять постоянную  $A_1$ , пользуясь известной формулой [9]

$$\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle = \frac{1}{a_0^3 n^3 l(l+1/2)(l+1)}, \quad (8)$$

где  $a_0$  — радиус первой боровской орбиты,  $n$  — главное, а  $l$  — орбитальное квантовые числа, то получим значение  $A$ , приведенное в [6]. Разли-

чие между  $A$  и  $A_1$  может быть связано с наличием квантового дефекта (или неполного экранирования). При этом величина квантового дефекта легко определяется из отношения этих постоянных

$$\frac{A_1}{A} = \frac{n^3}{n^{*3}} = \frac{n^3}{(n - \Delta)^3}, \quad (9)$$

где  $n^*$  — эффективное главное квантовое число и  $\Delta$  — квантовый дефект. Вычисленная нами величина квантового дефекта равна 0.0022.

Кроме того, из определенных таким образом значений параметров  $A_i$ , могут быть получены соотношения между величинами  $\delta r$ ,  $\delta_{SO}$  и  $\delta_{SS}$

$$\left. \begin{aligned} \delta r + \delta_{SO} &= A_2 - A_1 = 4.1 \cdot 10^{-6} \text{ см}^{-1}, \\ \delta r + \delta_{SS} &= A_3 - A_1 = -27 \cdot 10^{-6} \text{ см}^{-1}. \end{aligned} \right\} \quad (10)$$

К сожалению, разделить эти величины из соотношений (10) невозможно. Можно лишь утверждать, что  $|\delta_{SS}| > |\delta_{SO}|$ ,  $\delta r$  и что  $\delta_{SS} < 0$ .

Наши расчеты можно сравнить с теоретическими расчетами Араки [10] и Пэриша [11]. Сравнивая энергии, полученные этими авторами для уровней с  $J=1$  или  $J=3$  в нулевом поле, с нашими и по-прежнему считая формулу (8) справедливой, получим

$$\left. \begin{aligned} A_1 &= \lambda + 2\lambda', \quad A_2 = 2(\zeta + 2\zeta'), \\ A_3 &= 42(\eta + \eta'), \end{aligned} \right\} \quad (11)$$

где  $\lambda$ ,  $\lambda'$ ,  $\zeta$ ,  $\zeta'$ ,  $\eta$  и  $\eta'$  — радиальные интегралы, описанные в [10]. Результаты такого сравнения иллюстрируются табл. 2. Все величины в этой таблице даны в единицах  $\mu_B^2 \langle 1/r^3 \rangle$  и для рассматриваемой конфигурации  $1s3d$  эта единица равна  $0.00721425 \text{ см}^{-1}$ .

Таблица 2

Константа	Настоящая работа	Араки [10]	Пэриш [11]
$\lambda$	2	2	2
$\lambda'$	0.006605	Не определяется	
$\zeta$	1.000	0.9793	1.00498
$\zeta'$	0.003445	0.00669	0.00959
$\eta$	0.047619	0.04581	0.04816
$\eta'$	0.000222	0.00006	-0.000064

Таблица 3

Метод определения	Интервал тонкой структуры, МГц			Синглет-триплетное взаимодействие $\omega$
	$\Delta_{13}$	$\Delta_{12}$	$\Delta_{23}$	
Косвенный эксперимент				
Настоящая работа	$1400.8 \pm 0.6$	$1330.8 \pm 0.6$	$70.0 \pm 0.6$	0.0155
Тэм [5]	$1400.67 \pm 0.29$	—	$75.97 \pm 0.23$	—
Декуб [3]	—	—	$72.7 \pm 1.0$	—
Гауль [4]	—	$1327.2 \pm 1.1$	—	—
Прямой эксперимент				
Брочард [1]	—	$1358 \pm 30$	$90 \pm 24$	—
Берри [2]	—	$1349 \pm 25$	—	—
Астнер [14] *	—	$1323.6 \pm 2.3$	—	—
Деруар [15] *	—	—	—	—
Теория				$0.0153 \pm 0.0007$
Араки [10]	1353	—	75	—
Пэриш [11]	1473	—	126	0.005
Ван ден Эйнде [12]	1414	—	85.8	0.00937
Чэнг [13] *	1392.6	—	69.6	—

\* Результаты, ставшие известными авторам уже при подготовке рукописи к печати.

Из полученных результатов могут быть вычислены, наконец, интервалы т. с. в нулевом поле и величина синглет-триплетного взаимодействия  $\omega$  [12]. Значения этих величин, полученные различными методами в работах различных авторов, приведены в табл. 3, где  $\Delta_{13}$  — интервал между уровнями с  $J=1$  и  $J=3$ , не зависящий от величины синглет-триплетного взаимодействия,  $\Delta_{12}$  и  $\Delta_{23}$  — интервалы между уровнями с  $J=1, 2$  и  $J=2, 3$ , зависящие от  $\omega$ . Как видно из табл. 3, по независящему от  $\omega$  интервалу  $\Delta_{13}$  наши данные прекрасно совпадают с данными Тэма [5], эксперимент которого мы и обсчитываем. В то же время для зависящих от синглет-триплетного взаимодействия интервалов  $\Delta_{12}$  и  $\Delta_{23}$  имеется значительное расхождение. Качественно наблюдаемое расхождение может быть объяснено имеющейся разницей в величине синглет-триплетного взаимодействия. Действительно, при возрастании  $\omega$  увеличивается отталкивание уровней с  $J=2$  и, следовательно, интервал  $\Delta_{12}$  увеличивается, а интервал  $\Delta_{23}$  уменьшается. Следует отметить, что величина синглет-триплетного взаимодействия в [5] вносится в схему расчета извне и никак не связана с высокой точностью определения полей пересечения в эксперименте. В нашем же расчете она определяется из коэффициентов разложения реальных волновых функций в нулевом поле по волновым функциям разорванных связей [6]. Для всех пяти различных значений  $M_J$  эта величина была одинаковой.

Таким образом, при определении интервалов т. с. из экспериментальных полей пересечений при использовании различных схем перехода к нулевому полю могут быть получены различные результаты.

В пользу приведенной здесь схемы можно привести совпадение полученного в [15] и в нашей работе значения  $\omega$ , которое существенно отличается от значений, приводимых в имеющихся теоретических расчетах [10-12].

Кроме того, учет квантового дефекта в формуле для расстояния между синглетным и триплетным терминами, приведенной в [16],

$$\Delta E = \frac{a}{n^3} + \frac{b}{n^5} + \frac{c}{n^7}, \quad (12)$$

где  $a$ ,  $b$  и  $c$  — постоянные, значения которых приведены в той же работе [16], по крайней мере для конфигурации  $1s3d$  практически снимает имеющееся расхождение между экспериментальным [15] и теоретическим [16] значениями  $\Delta E$ . Действительно, без учета квантового дефекта теоретическое значение — 101.087 ГГц, а с его учетом — 101.86 ГГц, тогда как  $\Delta E_{\text{эксп.}} = (102.13 \pm 0.2)$  ГГц.

#### Литература

- [1] J. Brochard, R. Chabbal, H. Chantrel, O. Jacquinot. J. Phys. Radium, 18, 596, 1957.
- [2] H. G. Berry, J. L. Subtil, M. Carre. J. Physique, 33, 947, 1972.
- [3] C. Galleron-Julienne, J. P. Descoubes. Comp. Rend., 261, 916, 1965.
- [4] R. D. Kanl. J. Opt. Soc. Am., 58, 429, 1968.
- [5] A. C. Там. Phys. Rev., A12, 539, 1975.
- [6] Г. П. Анисимова, Р. И. Семенов. Опт. и спектр., 41, 169, 1976.
- [7] W. C. Martin. J. Res. Nat. Bur. St., A64, 19, 1960.
- [8] В. М. Шиголов. Математическая обработка наблюдений, гл. 17. «Наука», М., 1969.
- [9] А. С. Давыдов. Квантовая механика. ФМ, М., 1963.
- [10] G. Arai. Proc. Phys.-Math. Soc. Japan, 19, 128, 1937.
- [11] R. M. Parish, R. W. Mires. Phys. Rev., A4, 2145, 1971.
- [12] R. K. Van den Eynde, G. Wiebes, Th. Niemeijer. Physica, 59, 401, 1972.
- [13] T. N. Chang, R. T. Pое. Phys. Rev., A14, 11, (1976).
- [14] G. Astner, L. J. Curtis, L. Libjebu, S. Mannervik, I. Martinson. J. Phys. B., 9, 345, 1976.
- [15] J. Derouard, R. Jost, M. Lombardi, T. A. Miller, R. S. Freund. Phys. Rev., A14, 1025, 1976.
- [16] T. N. Chang, R. T. Pое. Phys. Rev., A10, 1981, 1974.