

его наклон при различных ϵ в соответствии с методом обработки спектров, использованном в [3, 4]. Считая, что этот наклон определяет τ , построим график зависимости τ от ϵ . Для $\tau_1 = [2 \cdot 10^{10} + 3 \cdot 10^{11} \epsilon^{0.8}]^{-1}$, $\tau_2 = [3 \cdot 10^{10} + 10^{12} \epsilon^{0.8}]^{-1}$, $\tau_3 = [5 \cdot 10^{11} + 5 \cdot 10^{12} \epsilon^{0.8}]^{-1}$, $A_2 = 10A_1 \tau_2^2 / \tau_1^2$, $A_3 = 100A_1 \tau_3^2 / \tau_1^2$ такой график изображен на рис. 1. Прямолинейные участки, по которым рассчитывалось τ , показаны «жирными» линиями на рис. 2. Цифры возле линий на этом рисунке указывают значения $\ln \tau$ от $-\ln \epsilon$ немонотонная. Эта немонотонность того же типа, что и наблюдавшаяся в [3, 4] в растворах нитробензол-н-гексан и н-додекан- $\beta\beta'$ -дихлордиэтиловый эфир: в областях наиболее быстрого роста угол наклона в 1.5—2.5 раза больше среднего в области до насыщения.

Следует обратить внимание на то, что при трех временах релаксации рассмотренного типа критический индекс μ может быть измерен лишь как некоторый средний наклон кривой зависимости $\ln \tau$ от $-\ln \epsilon$ в области до насыщения; его нельзя измерять как наклон кривой в областях быстрого роста (в ступеньках). Наилучшим образом этот критический индекс может быть измерен в растворах со слабо выраженными ступеньками и, следовательно, близкими временами релаксации всех тензоров анизотропии.

Поскольку тензоры анизотропии в различных комбинациях определяют ширину крыла и ширину деполаризованных линий комбинационного рассеяния, то графики зависимости $\ln \tau$ от $-\ln \epsilon$, найденные по крылу и по линиям комбинационного рассеяния, вообще говоря, должны быть различны, что и наблюдалось экспериментально в [4] в растворе нитробензол-н-гексан.

В заключение пользуюсь случаем выразить благодарность И. Л. Фабелинскому и В. С. Старунову за обсуждение работы.

Литература

- [1] И. А. Чабан, ЖЭТФ, 69, 1550, 1975.
- [2] А. К. Атаходжаев, Л. М. Кашаева, Л. М. Сабиров, В. С. Старунов, Т. М. Утарова, И. Л. Фабелинский. Письма ЖЭТФ, 17, 95, 1973.
- [3] I. L. Fabelinskii, V. S. Starunov, A. K. Atakhodzhev, L. M. Sabirov, T. M. Utarova. Opt. Commun., 15, 432, 1975.
- [4] Г. И. Колесников, В. С. Старунов, И. Л. Фабелинский. Письма ЖЭТФ, 24, 73, 1976.
- [5] И. И. Соболевман. Изв. АН СССР, сер. физ., 17, 554, 1953.
- [6] К. А. Валева. ЖЭТФ, 40, 1832, 1961.
- [7] А. В. Раков. Тр. ФИАН, 27, 111, 1964.
- [8] А. И. Соколовская. Тр. ФИАН, 27, 63, 1964.
- [9] M. Leontovitch. J. Phys., 4, 499, 1941.
- [10] С. М. Рытов. ЖЭТФ, 58, 2154, 1970.

Поступило в Редакцию 22 апреля 1977 г.

УДК 539.184.01 : 546.292

ЭНЕРГИИ К—LL ОЖЕ-ПЕРЕХОДОВ В НЕОНЕ

З. И. Купляускис

Широкое использование Оже-переходов для изучения столкновений атомов с ионами, электронами и фотонами явилось мощным стимулом для теоретических расчетов энергий этих переходов. Появилось большое количество работ, посвященных полумпирическому и чисто теоретическому изучению Оже-переходов. Значительная часть расчетов проведена методом самосогласованного поля Хартри—Фока. Однако использование теоремы Купманса [1] приводит к значительной погрешности, обусловленной эффектом релаксации остова. Определение волновой функции атома или иона с вакансией во внутренней оболочке связано с необходимостью обеспечить условия ортогональности с функциями нижележащих состояний, что невозможно непосредственно сделать по методу Хартри—Фока. В настоящее время для определения волновых функций атомов возбужденных состояний используются три метода: теорема Хиллераса—Ундгейма—Макдональда [2], метод оператора перехода [3] и неортогональные радиальные орбитали [4].

В работах [5] предложено определять волновые функции атомов с вакансиями с использованием неортогональных радиальных орбиталей. В [6] этот метод использован для определения энергий К—LL Оже-переходов в Ne^+ и Ne^{2+} . Энергии Оже-пере-

¹ Зависимость $A_i \sim \tau_i^2$ выбрана в соответствии со сделанным в [2] предположением о слабой зависимости от температуры коэффициента в диссипативной функции.

ходов в неоне методом Хартри—Фока определены в [7]. Представляет интерес рассмотреть пригодность метода неортогональных радиальных орбиталей для изучения Оже-переходов в многократных ионах, а также, какую погрешность дает использование в этом случае метода Хартри—Фока. В настоящей работе рассчитаны энергии $K-LL$ Оже-переходов в Ne^{3+} , Ne^{4+} , Ne^{5+} , Ne^{6+} и Ne^{7+} .

Таблица 1
Энергии $K-LL$ Оже-переходов в Ne^{7+} (эВ)

Начальное состояние	Теоретические результаты			Экспериментальные значения	
	a	[7]	[*]	[9]	[8]
$1s2s^2 \quad {}^2S$	656.2	656.3	652.7	657.2 ± 0.3	652 ± 1
$1s2s2p \quad ({}^1S) \quad {}^2P$	670.9	668.6	668.9	666.1 ± 0.3	669 ± 1
$({}^3S) \quad {}^2P$	672.0	672.3	673.1	676.6 ± 0.3	674 ± 1
$1s2p^2 \quad {}^2D$	680.9	681.0	681.8	680.5 ± 0.3	682 ± 1
2S	688.3	688.5	693.3	689.7 ± 0.3	693 ± 1

В табл. 1 включены значения энергии Оже-переходов в литиеподобном неоне. Там же приведены результаты расчетов методом Хартри—Фока [7] и многоконфигурационным методом Дирака—Фока [8]. Для сравнения в эту таблицу включены экспериментальные значения, полученные в столкновениях $O^{++}-Ne$ в [9], а также пучковым методом [8]. Из табл. 1 видно, что значения, полученные с использованием неортогональных радиальных орбиталей «а», хорошо согласуются с определенными при помощи решений уравнений Хартри—Фока [7]. Исключение составляет состояние $1s2s2p \quad ({}^1S) \quad {}^2P$. Этого и следовало ожидать, так как без соблюдения условия ортогональности с волновой функцией состояния $1s^22p^2P$ методом Хартри—Фока получаем заниженное значение энергии.

Таблица 2
Энергии $K-LL$ Оже-переходов в $Ne^{3+}-Ne^{7+}$ (эВ)

Ne^{3+}			Ne^{3+}			Ne^{4+}			Ne^{4+}		
n	LSL'S'	E	n	LSL'S'	E	n	LSL'S'	E	E	LSL'S'	E
0	${}^2S \quad {}^1S$	767.8	0	${}^2D \quad {}^3P$	771.7	2	${}^1P \quad {}^2D$	710.0	0	${}^2S \quad {}^1S$	730.8
	1D	773.7		1D	767.8	0	${}^3P \quad {}^1P$	748.4	1	1P	705.9
1	1P	738.6	1	1P	732.6	1	1S	721.3		3P	720.1
	3P	751.5		3P	745.6		3P	718.0	2	1S	687.0
2	1S	717.2		1D	736.3		4P	738.8		1D	693.7
	1D	723.0		3D	749.3		2D	727.6	1	${}^2P \quad {}^1P$	700.1
0	${}^2P \quad {}^3P$	772.3	2	1S	711.2	2	2P	700.7		3P	714.3
	1D	768.3		3P	720.9		1D	704.9	2	3P	692.3
1	3S	736.0		1D	717.1	0	${}^1D \quad {}^4P$	749.2		1D	687.9
	1P	733.2				1	2P	718.8	1	${}^4P \quad {}^3P$	705.9
	3P	746.1		Ne^{4+}			2D	728.4	2	3P	685.9
	1D	736.9	1	${}^3S \quad {}^2P$	715.0	2	2P	701.6	0	${}^2D \quad {}^1S$	723.9
	3D	749.8		4P	735.7		2D	705.7	1	1P	699.1
2	3P	721.5	2	4S	708.1	0	${}^3D \quad {}^1P$	744.2		3P	713.3
	1D	717.6		2D	701.9	1	2P	713.8	2	1S	680.2
0	${}^4P \quad {}^3P$	765.5	1	${}^5S \quad {}^4P$	725.6		4P	734.5		3P	691.3
1	3S	729.2	2	4S	698.0		2D	723.4		1D	686.9
	5S	755.1	0	${}^1P \quad {}^2P$	753.5	2	4S	706.9		Ne^{6+}	
	3P	739.3	1	2S	726.4		2P	696.5	1	${}^1P^2S$	691.9
	3D	743.0		2P	723.0		2D	700.7	2	2P	676.1
2	3P	714.7		2D	732.7				1	${}^3P \quad {}^2S$	685.7
0	${}^2D \quad {}^1S$	761.8	2	2P	705.8				2	2P	670.0

В табл. 2 приведены значения энергии Оже-переходов $1s^22s^22p^N L^N S - 1s^22s^{2-n}2p^{N+n-2} L'S'$ в $Ne \text{ IV}$, $Ne \text{ V}$, $Ne \text{ VI}$ и $Ne \text{ VII}$. Значения энергии в обеих таблицах приведены только для переходов, удовлетворяющих правилам отбора для Оже-переходов [10] $\Delta L = \Delta S = \Delta$ (четность) = 0. Из сравнения результатов табл. 2 с полученными в [7] видно, что для большинства переходов результаты хорошо согласуются. Однако наши значения энергии всех шести переходов в Ne^{4+} из состояния $1s^22s^22p^3 \quad {}^1P$ на 8 эВ, а всех четырех переходов в Ne^{5+} в конечное состояние $1s^22s^22p^3 \quad {}^3P$ на 7 эВ больше полученных

в [7]. Значения энергий Оже-переходов в Ne^{6+} из состояния $1P$ на 24 эВ меньше, а из $3P$ на 7 эВ больше приведенных в [7].

Из полученных результатов следует вывод, что метод неортогональных радиальных орбиталей [5] может быть использован для расчета энергий линий K -Оже спутников, получаемых когда из атома одновременно вырывается не только K -электрон, но и несколько L -электронов. Для целого ряда случаев учет условий ортогональности волновых функций вакантно-возбужденных и нижележащих состояний той же самой симметрии позволяет улучшить значения энергий переходов по сравнению с расчетами без соблюдения этих условий ортогональности.

Литература

- [1] R. S. Mulliken. J. Chem. Phys., 46, 497, 1949.
- [2] E. A. Hylleraas, B. Undheim. Z. Phys., 65, 759, 1930; J. K. M. MacDonald. Phys. Rev., 43, 830, 1933.
- [3] O. Goscinski. Int. J. Quant. Chem., 9, 221, 1975.
- [4] A. P. Jucys, K. V. Sabas, Z. J. Kupliauskis. Int. J. Quant. Chem., 9, 721, 1975.
- [5] З. И. Купляускис, А. В. Купляускене. Опт. и спектр., 39, 993, 1975; Изв. вузов, физика, № 9, 19, 1975.
- [6] А. В. Купляускене, З. И. Купляускис. Лит. физ. сб., 16, 231, 1976.
- [7] D. L. Matthews, B. M. Johnson, C. F. Moore. Atomic Data and Nuclear Data Tables, 15, 41, 1975.
- [8] S. Schumann, K. O. Groeneveld, K. D. Sevier, B. Fricke. Phys. Lett., 60A, 289, 1977.
- [9] D. L. Matthews, B. M. Johnson, J. J. Mackey, C. F. Moore. Phys. Rev. Lett., 31, 1331, 1973; D. L. Matthews, B. M. Johnson, J. J. Mackey, L. E. Smith, W. Hodge, C. F. Moore. Phys. Rev., 110, 1177, 1974.
- [10] J. D. Garcia, R. J. Fortner, T. M. Kavanagh. Rev. Mod. Phys., 45, 111, 1973.

Поступило в Редакцию 6 июня 1977 г.

УДК 539.194.01

КИНЕМАТИЧЕСКАЯ АНГАРМОНИЧНОСТЬ В НОРМАЛЬНЫХ КООРДИНАТАХ

Ю. И. Пономарев и А. И. Павлючко

Решение задачи о колебании многоатомной молекулы в приближенных координатах требует знания коэффициентов нелинейного преобразования от точных колебательных координат к приближенным. Наиболее общие методы расчета этих коэффициентов представлены в работах Цауне и др. [1], а также Хоя и др. [2]. В работе [3] был предложен метод расчета коэффициентов нелинейного преобразования, непосредственно связанный с аппаратом колебательной задачи. Если записать кинетическую энергию многоатомной молекулы в точных координатах [4], а затем перейти к приближенным координатам и учесть, что в последних кинематическая ангармоничность отсутствует, то можно получить системы уравнений для определения коэффициентов нелинейного преобразования координат. В настоящей работе найдено решение этих систем и получены формулы для прямого вычисления коэффициентов нелинейного преобразования. Получено также выражение для потенциальной энергии в нормальных координатах, в котором коэффициенты нелинейных преобразований естественных колебательных координат вообще отсутствуют.

Пусть связь между нелинейными (точными) и линейными (приближенными) колебательными координатами q_i^t и q_i^k задается соотношением

$$q_i^t = q_i^k + \frac{1}{2} \xi_{k1i}^i q_i^k q_i^l + \frac{1}{6} \xi_{kln}^i q_i^k q_i^l q_i^n + \dots \quad (1)$$

где коэффициенты разложения

$$\xi_{k1i}^i = \frac{\partial^2 q_i^t}{\partial q_i^k \partial q_i^l}, \quad \xi_{kln}^i = \frac{\partial^3 q_i^t}{\partial q_i^k \partial q_i^l \partial q_i^n}$$