УДК 539.186

ЗАВИСИМОСТЬ УШИРЕНИЯ И СДВИГА СПЕКТРАЛЬНОЙ ЛИНИИ ОТ ПОЛЯРИЗАЦИИ ПРИ АНИЗОТРОПНЫХ СТОЛКНОВЕНИЯХ АТОМОВ С ЗАРЯЖЕННЫМИ ЧАСТИЦАМИ

В. Н. Ребане

В ударном приближении, в модели бинарных столкновений, рассмотрены уширение и сдвиг спектральной линии $j=1$ — $j=0$ в зависимости от поляризации света в случае анизотропных столкновений (столкновений в пучках). Расчеты основаны на точном численном решении системы уравнений метода прицельного параметра и численном расчете интегралов, определяющих уширения и сдвиги. Принято во внимание как заряд-квадрупольное, так и штарковское расщепление атомных уровней в поле налетающей заряженной частицы. Вычислены также уширение и сдвиг для случая изотропных (хаотических) столкновений. Приведены графики, позволяющие определить уширение и сдвиг линий в широком интервале значений квадрупольного момента и поляризуемости атома. Результаты проиллюстрированы на примере резонансных линий $^1P_1$—$^1S_0$ атомов Ca, Sr и Ba.

В предыдущей работе [1] рассматривались ударное уширение и сдвиг спектральной линии атома при анизотропных столкновениях с нейтральными частицами, когда векторы относительных скоростей соударений параллельны некоторому выделенному направлению — оси z. Интересной особенностью уширения и сдвига при таких столкновениях является их зависимость от поляризации света (от угла между электрическим вектором световой волны и осью z). В более ранней работе [2] нами исследовались характерные особенности деполяризации флуоресценции при анизотропных столкновениях; основные результаты теории нашли экспериментальное подтверждение в [3]. Из сказанного следует, что изучение анизотропных столкновений (столкновений в пучках) представляет значительный интерес для выявления детальных особенностей ударного уширения, сдвига и деполяризации спектральных линий.

В данной статье исследуются анизотропные столкновения неводородоподобных атомов с заряженными частицами (ионами, электронами). Этот случай представляет особый интерес, так как направленные пучки заряженных частиц можно получить весьма легко.

Уширение и сдвиг линий при столкновениях атомов с заряженными частицами рассматривались целым рядом авторов в связи с задачами физики плазмы и астрофизики. Обзоры современного состояния проблемы можно найти в монографиях [4, 5], а также в работе [6]. Наш подход к задаче отличается от «традиционного» в следующих пунктах: а) изучается случай анизотропных столкновений, б) детально учитывается вырождение атомных уровней, в) производится точное численное интегрирование уравнений метода прицельного параметра на ЭВМ, г) принимается во внимание как квадратичный эффект Штарка так и заряд-квадрупольное взаимодействие, на необходимость учета которого было впервые указано в [7].

Ради определенности рассмотрим линию, испускаемую при электронном переходе $j=1$—$j=0$ в нейтральном атоме A, испытывающем столкновения с частицами C, заряды которых равны Ze. Будем считать выполнен-

РЕПОЗИТОРИЙ ГГУ имени Ф. Скорины

ными условия применимости ударного приближения и модели бинарных столкновений [4]. Обозначим через m' проекцию электронного момента атома А на ось z', направленную от А к С. Главные члены в энергии взаимодействия А. . .С будут иметь следующий вид:

$$W_{1m'}(R) = -\frac{ZQe^2(2-3m'^2)}{2R^3} - \frac{Z^2e^2\alpha_{1m'}}{2R^4} \text{ при } j=1, \tag{1}$$

$$W_{00}(R) = -\frac{Z^2e^2\alpha_{00}}{2R^4} \text{ при } j=0, \tag{2}$$

Q — квадрупольный момент электронной оболочки атома А в состоянии с $j=1$

$$Q = \left\langle j=1,\ m'=0 \left| \frac{1}{2}\sum_{k=1}^{N}(3z_k'^2 - r_k'^2) \right| j=1,\ m'=0 \right\rangle, \tag{3}$$

а $\alpha_{jm'}$ — статическая дипольная поляризуемость атома А в состоянии $|jm'\rangle$ в электрическом поле, параллельном оси z'. Первый член в (1) описывает заряд-квадрупольное взаимодействие, а второй — штарк-эффект. Чтобы избежать нагромождения большого числа параметров теории, будем пользоваться приближением изотропной поляризуемости, считая $\alpha_{1m'}$ не зависящей от m' и равной $\bar{\alpha}_1 = (\alpha_{10} + \alpha_{1-1} + \alpha_{11})/3$.

Пусть φ — угол между осями z и z', т. е. между выделенным направлением относительных скоростей соударений и мгновенным направлением оси АС. Тогда расчет изменения волновой функции состояния $j=1$ атома А в ходе столкновения сводится к решению системы дифференциальных уравнений метода прицельного параметра [8], которая в нашем случае имеет вид

$$\left.\begin{aligned} ida/d\varphi &= \frac{B}{2}(\sin\varphi)\,a + b \quad (0 \leqslant \varphi \leqslant \pi), \\ idb/d\varphi &= a - \frac{B}{2}(\sin\varphi)\,b. \end{aligned}\right\} \tag{4}$$

Здесь введен безразмерный параметр Мерси

$$B = -3ZQe^2/2\hbar v\rho^2, \tag{5}$$

ρ — прицельное расстояние, v — относительная скорость.

Пусть система (4) решена при начальных условиях $a(0)=1$, $b(0)=0$. Тогда ударное уширение и сдвиг линии даются формулами [1]

$$2\,\mathrm{Re}\,\Theta_\perp = 4\pi nv\int_0^\infty \rho d\rho\left[1 - \frac{1}{2}(-\mathrm{Re}\,a(\pi)\cos\Delta_{01} + \mathrm{Im}\,a(\pi)\sin\Delta_{01} + \cos\Delta_{02})\right], \tag{6}$$

$$2\,\mathrm{Re}\,\Theta_\parallel = 4\pi nv\int_0^\infty \rho d\rho\,[1 + \mathrm{Re}\,a(\pi)\cos\Delta_{01} + \mathrm{Im}\,a(\pi)\sin\Delta_{01}], \tag{7}$$

$$\mathrm{Im}\,\Theta_\perp = -\pi nv\int_0^\infty \rho d\rho\,[-\mathrm{Re}\,a(\pi)\sin\Delta_{01} - \mathrm{Im}\,a(\pi)\cos\Delta_{01} + \sin\Delta_{02}], \tag{8}$$

$$\mathrm{Im}\,\Theta_\parallel = -2\pi nv\int_0^\infty \rho d\rho\,[-\mathrm{Re}\,a(\pi)\sin\Delta_{01} + \mathrm{Im}\,a(\pi)\cos\Delta_{01}]. \tag{9}$$

Индексы «$\parallel$» и «$\perp$» обозначают ориентацию электрического вектора световой волны (параллельно или перпендикулярно к оси z), n — плотность заряженных частиц С. Входящие в формулы (6)—(9) разности фаз равны

$$\Delta_{01} = -\left(q\,|B|^{1/2} + \frac{1}{3}\right)B; \quad \Delta_{02} = -\left(q\,|B|^{1/2} - \frac{2}{3}\right)B, \tag{10}$$

РЕПОЗИТОРИЙ ГГУ имени Ф. Скорины

где q — второй безразмерный параметр

$$q = -\frac{\pi Z\beta}{6eQ}\left|\frac{2\hbar v}{3ZQ}\right|^{1/2}. \tag{11}$$

Величина β есть разность поляризуемостей состояний $j=0$ и $j=1$ атома А: $\beta = \alpha_{00} - \bar{\alpha}_1$. Переходя в (6)—(9) к интегрированию по параметру Мессии, получаем следующие выражения для уширения и сдвига:

$$2\,\mathrm{Re}\,\Theta_\perp = 2k\int\limits_0^{\pm\infty}\frac{dB}{B^2}\left[1-\frac{1}{2}\left(-\mathrm{Re}\,a(\pi)\cos\Delta_{01}+\mathrm{Im}\,a(\pi)\sin\Delta_{01}+\cos\Delta_{02}\right)\right], \tag{12}$$

$$2\,\mathrm{Re}\,\Theta_\parallel = 2k\int\limits_0^{\pm\infty}\frac{dB}{B^2}\left[1+\mathrm{Re}\,a(\pi)\cos\Delta_{01}+\mathrm{Im}\,a(\pi)\sin\Delta_{01}\right], \tag{13}$$

$$\mathrm{Im}\,\Theta_\perp = -\frac{k}{2}\int\limits_0^{\pm\infty}\frac{dB}{B^2}\left[-\mathrm{Re}\,a(\pi)\sin\Delta_{01}-\mathrm{Im}\,a(\pi)\cos\Delta_{01}+\sin\Delta_{02}\right], \tag{14}$$

$$\mathrm{Im}\,\Theta_\parallel = -k\int\limits_0^{\pm\infty}\frac{dB}{B^2}\left[-\mathrm{Re}\,a(\pi)\sin\Delta_{01}+\mathrm{Im}\,a(\pi)\cos\Delta_{01}\right]. \tag{15}$$

Здесь введено обозначение

$$k = -3\pi n ZQe^2/2\hbar. \tag{16}$$

Если $ZQ < 0$, то верхним пределом в интегралах (12)—(15) будет $+\infty$, а если $ZQ > 0$, то $-\infty$. Из формулы (3) следует, что $Q > 0$. Поэтому случай $ZQ < 0$ соответствует столкновениям с электронами или отрицательными ионами, а случай $ZQ > 0$ — столкновениям с положительными ионами. В первом случае интегралы (12)—(15) могут быть вычислены, если решить систему уравнений (4) в достаточно широком интервале положительных значений параметра Мессии. Во втором случае требовалось бы решить ту же систему при отрицательных значениях параметра B. Однако в этом нет необходимости, ибо решения системы (4) при отрицательных B связаны с решениями при положительных B

$$a(\pi)|_{-B} = [a(\pi)|_B]^*, \quad b(\pi)|_{-B} = -[b(\pi)|_B]^*. \tag{17}$$

Обозначим через $F_\perp(q)$ и $F_\parallel(q)$ интегралы в (12) и (13), вычисляемые в пределах от 0 до $+\infty$, а через $G_\perp(q)$ и $G_\parallel(q)$ интегралы в (14) и (15), вычисляемые в тех же пределах. Очевидно, что уширение и сдвиг линии при $ZQ < 0$ непосредственно выражаются через эти интегралы. Однако с учетом (17) через те же интегралы выражаются уширение и сдвиг также при $ZQ > 0$. В результате простого анализа найдем, что уширение и сдвиг линии при анизотропных столкновениях даются формулами

$$2\,\mathrm{Re}\,\Theta_\perp(q) = 2|k|F_\perp(q), \quad 2\,\mathrm{Re}\,\Theta_\parallel(q) = 2|k|F_\parallel(q), \tag{18}$$

$$\mathrm{Im}\,\Theta_\perp(q) = \mp|k|G_\perp(q)/2, \quad \mathrm{Im}\,\Theta_\parallel(q) = \mp|k|G_\parallel(q). \tag{19}$$

В формуле (19) верхние знаки относятся к случаю $ZQ < 0$, а нижние — к случаю $ZQ > 0$. Формула (18) одинакова для обоих знаков величины ZQ. Добавим к этим формулам выражения для уширения и сдвига линии в случае изотропных столкновений (когда все направления соударений равновероятны)

$$2\mathrm{Re}\,\bar{\Theta}(q) = (4\mathrm{Re}\,\Theta_\perp + 2\mathrm{Re}\,\Theta_\parallel)/3, \quad \mathrm{Im}\,\bar{\Theta} = (2\mathrm{Im}\,\Theta_\perp + \mathrm{Im}\,\Theta_\parallel)/3. \tag{20}$$

В изотропном случае уширение и сдвиг не зависят от поляризации. Заметим, что «единица измерения» уширения и сдвига — величина $|k|$ — зависит от квадрупольного момента атома А в состоянии с $j=1$, но не зависит ни от относительной скорости соударения, ни от поляризуемости атома А. Из формул (18)—(20) видно, что вся зависимость уширения и сдвига от скорости v и от разности поляризуемостей атома А в раз-

РЕПОЗИТОРИЙ ГГУ имени Ф. Скорины

личных электронных состояниях β заключается в зависимости функций $F_\perp$, $F_\parallel$, $G_\perp$ и $G_\parallel$ от параметра q (11).

При $q=0$ имеем «чистый» случай заряд-квадрупольного взаимодействия. В соответствии с формулами (18) уширение в этом случае не зависит от знака заряда частицы С, но сдвиг изменяет свой знак при перемене знака заряда. При этом ни уширение, ни сдвиг не зависят от относительной скорости соударения v.

В общем случае, когда $q\neq0$, уширение и сдвиг определяются сочетанием квадрупольного взаимодействия и эффекта Штарка. Ввиду сложной зависимости интегралов в (18) и (19) от q одновременное влияние обоих эффектов отнюдь не обладает свойством аддитивности (т. е. уширение или сдвиг линии не складываются из вкладов, вносимых по отдельности квадрупольным взаимодействием и эффектом Штарка).

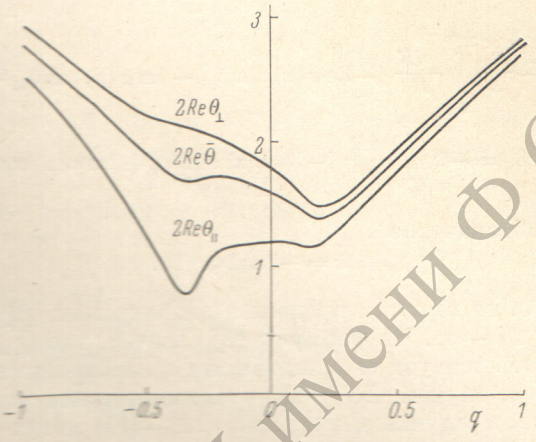

Рис. 1. Уширение различным образом поляризованных компонент спектральной линии при анизотропных столкновениях с заряженными частицами (в единицах $|k|=|3\pi nZQe^2/2\hbar|$).

В рамках описанной выше теоретической схемы мы выполнили детальные расчеты на ЭВМ. Прежде всего решалась система уравнений (4) для 500 положительных значений параметра Месси B. Результаты вносились в память ЭВМ. Затем для 160 значений параметра q из интервала от -4 до $+4$ вычислялись интегралы $F_\perp(q)$, $F_\parallel(q)$, $G_\perp(q)$ и $G_\parallel(q)$, а по формулам (18)—(20) были найдены уширение и сдвиг линии для различных поляризаций в случае анизотропных столкновений, а также не зависящие от поляризации уширение и сдвиг линии в случае изотропных столкновений. Результаты расчетов для наиболее интересного интервала $-1\leqslant q\leqslant+1$ представлены на рис. 1—3. Уширение и сдвиг выражены в единицах $|k|$.

Согласно нашим расчетам, чисто квадрупольный случай ($q=0$) характеризуется следующими отношениями, ясно показывающими зависимость анизотропного столкновительного уширения и сдвига от поляризации света: $\mathrm{Re}\,\Theta_\perp/\mathrm{Re}\Theta_\parallel=1.51$, $\mathrm{Im}\,\Theta_\perp/\mathrm{Im}\,\Theta_\parallel=-1.28$, $2\mathrm{Re}\,\Theta_\perp/\mathrm{Im}\,\Theta_\parallel=\pm8.38$, $2\mathrm{Re}\,\Theta_\perp/\mathrm{Im}\,\Theta_\perp=\mp9.93$. Для изотропных столкновений мы нашли: $2\mathrm{Re}\bar{\Theta}/\mathrm{Im}\,\bar{\Theta}=\mp21.7$. Верхние знаки относятся к случаю $ZQ<0$, а нижние — к случаю $ZQ>0$. Наряду с количественными различиями величин уширения и сдвига в зависимости от поляризации света имеет место и качественное различие: например, при анизотропных столкновениях с положительными ионами линия с параллельной поляризацией сдвигается в красную сторону, а линия с поперечной поляризацией — в синюю сторону.

Перейдем к общему случаю, когда $q\neq0$. Из рис. 1 видно, что поперечно поляризованная линия уширяется всегда больше, чем продольно поляризованная. Сильнее всего это выражено при малых q: так, при $q=-0.34$ уширение поперечно поляризованной линии почти втрое больше, чем

РЕПОЗИТОРИЙ ГГУ имени Ф.Скорины

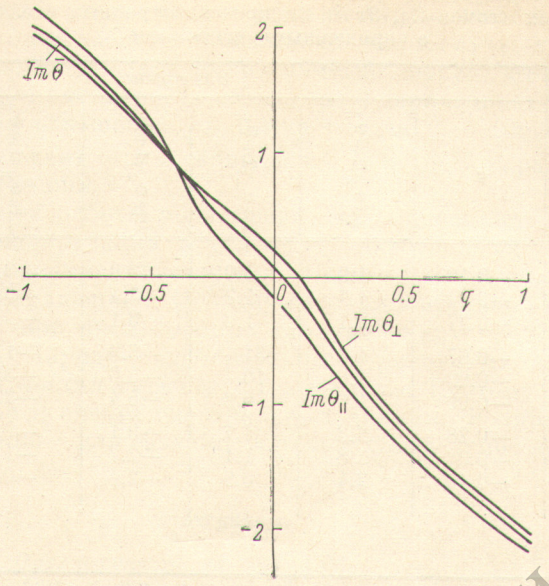

Рис. 2. Сдвиги различным образом поляризованных компонент спектральной линии при анизотропных столкновениях с положительно заряженными частицами (в единицах $|k| = |\ 3\pi nZQe^2/2\hbar|$).

В случае отрицательно заряженных частиц нужно изменить знаки ординат всех графиков.

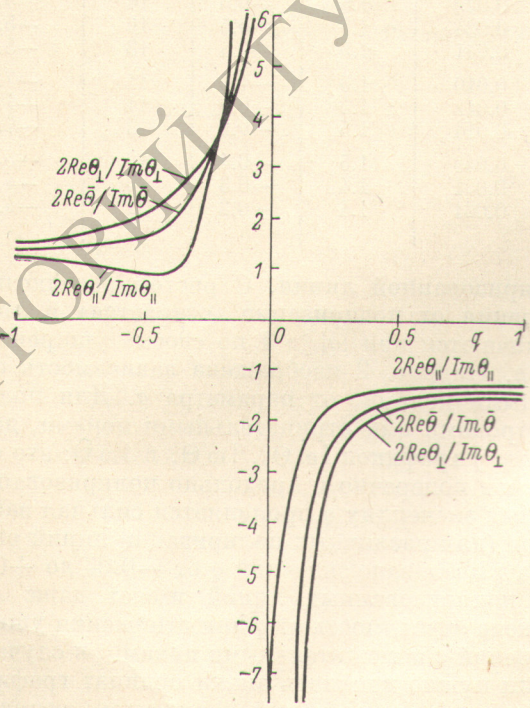

Рис. 3. Отношение уширения к сдвигу для всех различным образом поляризованных компонент спектральной линии при столкновениях с положительно заряженными частицами.

В случае отрицательно заряженных частиц нужно изменить знаки ординат всех графиков.

РЕПОЗИТОРИЙ ГГУ имени Ф.Скорины

Отношения, характеризующие уширения и сдвиги резонансных линий $^1P_1 - {}^1S_0$ нейтральных атомов Ca, Sr и Ba при анизотропных столкновениях с заряженными частицами

Атом	Кинетическая энергия, эВ	Электроны					
		q	$\mathrm{Re}\,\Theta_\perp/\mathrm{Re}\,\Theta_\parallel$	$\mathrm{Im}\,\Theta_\perp/\mathrm{Im}\,\Theta_\parallel$	$2\mathrm{Re}\,\Theta_\perp/\mathrm{Im}\,\Theta_\perp$	$2\mathrm{Re}\,\Theta_\parallel/\mathrm{Im}\,\Theta_\parallel$	$2\mathrm{Re}\,\bar{\Theta}/\mathrm{Im}\,\bar{\Theta}$
Ca	0.5	—0.19	1.9	1.9	—3.8	—3.8	—3.8
	1	—0.22	1.7	1.7	—3.4	—3.4	—3.4
	2	—0.27	2.1	1.8	—3.1	—26	—3.0
Sr	0.5	—0.07	1.6	31	—5.9	—115	—7.7
	1	—0.08	1.6	10	—5.6	—35	—7.0
	2	—0.09	1.6	6.8	—5.4	—22	—6.5
Ba	0.5	—0.28	2.3	1.7	—3.1	—2.3	—2.9
	1	—0.34	2.8	1.1	—2.7	—1.1	—2.2
	2	—0.40	2.4	0.9	—2.4	—0.9	—1.9

Продолжение

Атом	Кинетическая энергия, эВ	Протоны					
		q	$\mathrm{Re}\,\Theta_\perp/\mathrm{Re}\,\Theta_\parallel$	$\mathrm{Im}\,\Theta_\perp/\mathrm{Im}\,\Theta_\parallel$	$2\mathrm{Re}\,\Theta_\perp/\mathrm{Im}\,\Theta_\perp$	$2\mathrm{Re}\,\Theta_\parallel/\mathrm{Im}\,\Theta_\parallel$	$2\mathrm{Re}\,\bar{\Theta}/\mathrm{Im}\,\bar{\Theta}$
Ca	0.5	0.029	1.5	—0.6	14	—5.8	130
	1	0.034	1.5	—0.5	16	—5.5	150
	2	0.041	1.5	—0.4	18	—5.1	—150
Sr	0.5	0.010	1.5	—1.0	11	—7.3	30
	1	0.012	1.5	—0.9	11	—7.5	34
	2	0.014	1.5	—0.9	12	—7.9	38
Ba	0.5	0.043	1.5	—0.4	19	—5.0	—110
	1	0.051	1.4	—0.3	23	—4.7	—47
	2	0.061	1.4	—0.2	31	—4.3	—28

у продольно поляризованной линии. С ростом абсолютной величины q зависимость уширения от поляризации «стирается» и линии различной поляризации различаются при $|q| > 1$ по своему уширению лишь на несколько процентов. На рис. 2 изображена зависимость сдвига, вызванного положительными ионами, от параметра q. Для получения сдвига, вызываемого электронами или отрицательными ионами, достаточно изменить знаки ординат у графиков $\mathrm{Im}\,\Theta_\perp$, $\mathrm{Im}\,\Theta_\parallel$ и $\mathrm{Im}\,\bar{\Theta}$: это следует из (19). При $q = -0.37$ сдвиги поперечно и продольно поляризованной линий совпадают, но при иных значениях q проявляется сильная зависимость сдвигов от поляризации (для различных поляризаций линий они могут различаться до 30 раз, а в интервале значений q от -0.06 до $+0.08$ сдвиги различным образом поляризованных линий имеют даже разные знаки). На рис. 3 изображена зависимость от q для отношения уширения к сдвигу (в случае столкновений с положительными ионами; в случае отрицательно заряженных частиц нужно изменить знаки ординат графиков на рис. 3).

В качестве численной иллюстрации полученных результатов мы рассчитали уширение и сдвиг резонансных линий $^1P_1 - {}^1S_0$ нейтральных атомов Ca, Sr и Ba под действием анизотропных столкновений с электронами и с протонами. Разности поляризуемостей $\alpha_{00} - \bar{\alpha}_1$ основного и возбужденного состояний щелочно-земельных атомов приведены в [9], а квадрупольные моменты Q возбужденных состояний мы рассчитали с помощью слэтеровских функций. Результаты расчетов для нескольких

РЕПОЗИТОРИЙ ГГУ имени Ф. Скорины

характерных значений кинетических энергий заряженных частиц приведены в таблице. Данные таблицы показывают, что в случае анизотропных столкновений уширение и сдвиг линии заметно зависят от поляризации света, а также от знака и скорости налетающих заряженных частиц. Наиболее чувствительно отношение уширения к сдвигу, обычно измеряемое на опыте. Сильно зависит от q и отношение $2\mathrm{Re}\,\bar{\Theta}/\mathrm{Im}\,\bar{\Theta}$, характеризующее изотропные столкновения.

Результаты данной работы показывают, что зависимость уширения и сдвига линии от поляризации в условиях анизотропных столкновений с заряженными частицами является достаточно сложной и в то же время достаточно сильно выраженной. Поэтому экспериментальное исследование уширения и сдвига при анизотропных столкновениях представляет значительный интерес. Наряду с лабораторными условиями направленные потоки заряженных частиц существуют в космосе. Поэтому изучение зависимости уширения и сдвига спектральных линий от поляризации представляет интерес также для физики верхних слоев атмосферы и астрофизики.

Литература

[1] В. Н. Ребане. Опт. и спектр., *43*, 201, 1977.
[2] В. Н. Ребане. Опт. и спектр., *24*, 309, 1968.
[3] E. Chamoun. These. Grenoble, 1973.
[4] И. И. Собельман. Введение в теорию атомных спектров. М., 1963.
[5] H. Griem. Spectral line broadening by plasmas. N. Y., 1974.
[6] H. Regemorter. In.: Atoms and molecules in astrophysics. Ed. by T. R. Carson, M. J. Roberts. London, N. Y., 1972.
[7] Л. А. Вайнштейн, И. И. Собельман. Опт. и спектр., *6*, 440, 1959.
[8] В. Н. Ребане. Опт. и спектр., *26*, 673, 1969.
[9] A. Kreuzträger, G. Oppen. Zs. Physik, *265*, 421, 1973.

Поступило в Редакцию 19 ноября 1976 г.

РЕПОЗИТОРИЙ ГГУ имени Ф. Скорины