

РАСЧЕТ ПОЛЕЙ ПЕРЕСЕЧЕНИЙ ЗЕЕМАНОВСКИХ ПОДУРОВНЕЙ КОНФИГУРАЦИЙ $3p^5p \text{ Ar I}$, $4p^5p$, $6p \text{ Kr I}$

Г. П. Анисимова и Р. И. Семенов

В основу расчета зависимости энергий зеемановских подуровней от магнитного поля положена полная энергетическая матрица в промежуточной связи, включающая линейный член по полю. Матричные элементы этой матрицы получены с учетом прямых и обменных электростатических и магнитных взаимодействий (спин—спин, спин—своя орбита и спин—чужая орбита, орбита—орбита), что позволило в нулевом магнитном поле (т. е. в отсутствие поля) получить энер-

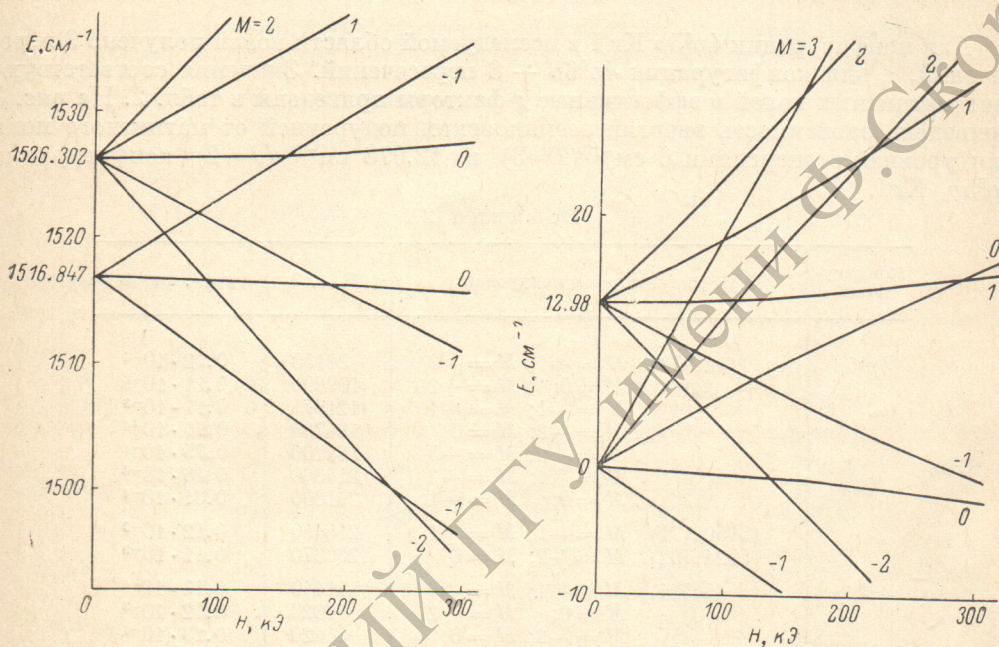


Рис. 1. Зависимость энергий зеемановских подуровней от магнитного поля конфигурации $3p^5p \text{ Ar I}$.

Рис. 2. Зависимость энергий зеемановских подуровней от магнитного поля конфигурации $4p^5p \text{ Kr I}$.

гии тонкой структуры, совпадающие с экспериментальными [1] с точностью до тысячной см^{-1} . Поля пересечений указанных конфигураций получены в результате численной диагонализации полной энергетической матрицы, разбитой на субматрицы по M — магнитному квантовому числу — при различных значениях магнитного поля (от 0 до 300 кЭ) на ЭВМ БЭСМ-6. В исследуемой нами области полей для конфигурации $3p^5p \text{ Ar I}$ получено 7 пересечений, значения полей которых вместе с эффективными гиромагнитными отношениями (угол раскрытия кривых) приведены в табл. 1. Эффективные гиромагнитные отношения вычислялись по следующей формуле:

$$g_{\text{эфф}} = \frac{\Delta E (\text{см}^{-1})}{\Delta H (\text{Э})},$$

где ΔE — разность энергий зеемановских подуровней при значении поля H_1 , близком к полю пересечения; $\Delta H = (H_1 - H_{\text{пер}})$. В качестве иллюстрации на рис. 1 приведена зависимость энергий зеемановских подуровней от магнитного поля для уровней с энергиями 1526.302 см^{-1} ($J=2$) и 1516.847 см^{-1} ($J=1$) конфигурации $3p^5p \text{ Ar I}$.

Таблица 1

Пересекающиеся подуровни	$H_{\text{пер}}^{***}, \text{Э}$	$g_{\text{эфф}}, \text{см}^{-1}/\text{Э}$
(1526.302) * $M^{**} = 0; M = +1$	150575	$0.59 \cdot 10^{-4}$
(1516.847) $M = -1; M = +1$	78115	$1.12 \cdot 10^{-4}$
$M = -2; M = 0$	86640	$1.09 \cdot 10^{-4}$
$M = -1; M = 0$	189850	$0.45 \cdot 10^{-4}$
(240.839) $M = -2; M = -1$	232400	$0.40 \cdot 10^{-4}$
(208.572) $M = -1; M = +1$	297255	$1.07 \cdot 10^{-4}$
$M = -2; M = 0$	252330	$1.25 \cdot 10^{-4}$

Примечание. * Энергии уровней тонкой структуры в отсутствие поля в см^{-1} отсчитаны от энергии уровня с $J=3$ [1]. ** Первое значение магнитного квантового числа относится к уровню с большей энергией. *** Ошибка в вычислениях поля пересечения составляет 1–3% от величины магнитного поля.

Для конфигурации $4p^5 5p$ Кг I в исследуемой области полей получено 9 пересечений, а для конфигурации $4p^5 6p$ — 8 пересечений. Значения соответствующих магнитных полей и эффективные g -факторы приведены в табл. 2. На рис. 2 приведена зависимость энергий зеемановских подуровней от магнитного поля для уровней с энергиями 0 см^{-1} ($J=3$) и 12.978 см^{-1} ($J=2$) конфигурации $4p^5 5p$ Кг I.

Таблица 2

Конфигурация	Пересекающиеся подуровни	$H_{\text{пер}}, \text{Э}$	$g_{\text{эфф}}, \text{см}^{-1}/\text{Э}$
$4p^5 5p$	(12.978) $M = +1; M = +3$	98150	$0.12 \cdot 10^{-4}$
	(0) $M = 0; M = +2$	109600	$0.11 \cdot 10^{-4}$
	$M = -1; M = +1$	121975	$0.11 \cdot 10^{-3}$
	$M = -2; M = 0$	134780	$0.91 \cdot 10^{-4}$
	$M = +2; M = +3$	162200	$0.75 \cdot 10^{-4}$
	$M = +1; M = +2$	214360	$0.46 \cdot 10^{-4}$
	$M = 0; M = +1$	291000	$0.31 \cdot 10^{-4}$
	(5650.771) $M = -1; M = +1$	215450	$0.12 \cdot 10^{-3}$
	(5624.752) $M = -2; M = 0$	239370	$0.11 \cdot 10^{-3}$
	$4p^5 6p$	(5.504) $M = +1; M = +3$	41440
(0) $M = 0; M = +2$		46320	$0.12 \cdot 10^{-3}$
$M = -2; M = 0$		54420	$0.13 \cdot 10^{-4}$
$M = +2; M = +3$		67880	$0.79 \cdot 10^{-4}$
$M = +1; M = +2$		89000	$0.49 \cdot 10^{-4}$
$M = 0; M = +1$		119870	$0.32 \cdot 10^{-4}$
$M = -1; M = 0$		159800	$0.24 \cdot 10^{-4}$
$M = 1; M = -1$		200570	$0.21 \cdot 10^{-4}$

Заметим, что эти расчетные зависимости получены впервые, поскольку существовавшие ранее теоретические модели для описания тонкой структуры конфигурации $np^5 n'p$ не позволяли получить в отсутствие поля совпадение расчетных и экспериментальных значений энергий с необходимой точностью (например, [2–4]), что исключало возможность точного расчета в поле. Возможно, с этим связано отсутствие соответствующего экспериментального материала. Авторы надеются, что полученные нами расчетные значения полей пересечений привлекут внимание экспериментаторов к данной проблеме.

Литература

- [1] Ch. E. Moore. Atomic Energy Levels, 1, NBS, 1949; 2, 1952.
- [2] R. H. Garstang, J. Van Blerkom. J. Opt. Soc. Am., 55, 1054, 1965.
- [3] P. D. Johnston. Proc. Phys. Soc. (London), 92, 896, 1967.
- [4] R. A. Lilly. J. Opt. Soc. Am., 66, 245, 1976

Поступило в Редакцию 8 декабря 1981 г.