КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

УДК 539.184

СИЛЫ ОСЦИЛЛЯТОРОВ ДЛЯ ВОЗБУЖДЕННЫХ СОСТОЯНИЙ ГЕЛИОПОДОБНЫХ СИСТЕМ

У. И. Сафронова, А. Н. Иванова и *В. Н. Харитонова*

В работах [1, 2] проведен расчет первых двух порядков ряда теории возмущений по межэлектронному взаимодействию для энергии двухэлектронных атомных систем. В настоящей работе рассмотрен расчет нулевого и первого порядков ряда теории возмущений для матричного элемента дипольного момента для двухэлектронных систем. Используя далее результаты работы [2], рассчитываются первые два порядка ряда теории возмущений для сил осцилляторов.

Как известно, для дипольного матричного элемента имеем

$$P\,(LSMM_S;\ L'S'M'M'_S) = \left\langle \Psi^*_{LSMM_S}\hat{r}\,\Psi_{L'S'M'M'_S} \right\rangle. \tag{1}$$

Используя методы полевой формы теории возмущений, представим P в виде ряда по $\frac{1}{Z}$

$$P\,(LSMM_S;\ L'S'M'M'_S) = \frac{1}{Z}\,P^{(0)} + \frac{1}{Z^2}\,P^{(1)} + \ldots, \tag{2}$$

где $P^{(0)}$ — дипольный матричный элемент, рассчитанный на функциях, не учитывающих взаимодействия электронов. Каждый из следующих членов ряда (2) равен сумме вкладов диаграмм. Для $P^{(1)}$ диаграммы представлены на рисунке, причем

точке с входящей и выходящей электронной линией соответствует дипольный матричный элемент, рассчитанный на нулевых (без взаимодействия) функциях, а четверному вертексу соответствует матричный элемент электростатического взаимодействия электронов.

В настоящей работе рассматриваются переходы между конфигурациями $1s^2-1snp$ и $1sn_1s-1sn_2p$. Для таких переходов ввиду отсутствия вклада от суммирования по заполненным оболочкам вклад дает только диаграмма E.

Проводя суммирование по проекциям моментов, имеем для $P^{(1)}$ соответственно для конфигураций $1s^2-1snp$ и $1sn_1s-1sn_2p$

$$P_i^{(1)}\,(0000;\ 10M'0) = -\sqrt{\frac{2}{3}}\,\delta_{M',\,i}\left\{\sum_{n'}\frac{1}{E_{n'}-E_1}\,R\,(n'0;\ n1)\,R_0\,(n'010;\ 1010) + \right.$$

$$+\sum_{n'}\frac{1}{E_{n'}-E_n}\,R\,(n'1;\ 10)\left[R_0\,(n'110;\ 10n1) + \frac{1}{3}\,R_1\,(n'110;\ n110)\right] +$$

$$\left. + \frac{1}{3}\sum_{n'}\frac{1}{E_n+E_{n'}-2E_1}\,R\,(n'1;\ 10)\,R_1\,(n'1n1;\ 1010)\right\},$$

$$P_i^{(1)}\,(0S0M_S;\ 1SM'M'_S) = \frac{1}{\sqrt{3}}\,\delta_{M',\,i}\,\times$$

$$\times\left\{\sum_n \frac{1}{E_n - E_{n_2}} R\,(n1;\ n_10)\left[R_0\,(n110;\ 10n_21) + \frac{(-1)^S}{3} R_1\,(n110;\ n_2110)\right] + \right.$$

$$+\sum_n \frac{1}{E_n - E_{n_1}} R\,(n0;\ n_21)\,[R_0\,(n010;\ 10n_10) + (-1)^S R_0\,(n010;\ n_2010)] +$$

$$+\sum_n \frac{1}{E_n + E_{n_1} - E_{n_2} - E_1} R\,(n1;\ 10)\left[\frac{1}{3} R_1\,(n1n_10;\ n_2110) + (-1)^S R_0\,(n1n_10;\ 10n_21)\right] +$$

$$+\frac{1}{3}\sum_n \frac{1}{E_n + E_{n_2} - E_{n_1} - E_1} R\,(n1;\ 10)\ \times$$

$$\left.\times\,[R_1\,(n1n_21;\ n_1010) + (-1)^S R_1\,(n1n_21;\ 10n_10)]\right\} \qquad (3)$$

где

$$R\,(n_1l_1;\ n_2l_2) = \int_0^\infty drr^3 R_{n_1l_1}(r)\,R_{n_2l_2}(r).$$

Для радиального интеграла $R_l\,(n_1l_1n_2l_2;\ n_4l_4n_3l_3)$ выражение приведено в [1]. Суммирование в (3) проводится по всему спектру H_0. Расчет выражений, входящих в (3), проводился на ЭВМ. В табл. 1 приведены результаты расчета, причем $\tau = \frac{P^{(1)}}{P^{(0)}}$. Значения для $P^{(0)}$ легко вычисляются и для экономии места мы их не приводим. Как видно из приведенной таблицы, для переходов $1s^2 - 1snp$, значения τ_n меньше единицы и при больших n, как можно показать $\tau_n \underset{n\to\infty}{\simeq} \mathrm{const}$. Для конфигураций $1s2s - 1s2p$ и $1s3s - 1s3p$ $\tau \sim 1$. Особенно велико τ для конфигураций $1s2p - 1s3s$. Для этих переходов для получения хороших значений для дипольного матричного элемента необходимо рассчитать следующие члены ряда теории возмущений: $P^{(2)}$, $P^{(3)}$. . .

Таблица 1

Численные значения $\tau = \frac{P^{(1)}}{P^{(0)}}$ для дипольного матричного элемента

$$P = \frac{1}{Z} P^{(0)}\left(1 + \frac{\tau}{Z}\right)$$

Конфигурация	Терм	τ	Конфигурация	Терм	τ	Конфигурация	Терм	τ
$1s^2$—$1s2p$	^1S—^1P	−0.156	$1s2s$—$1s2p$	^1S—^1P	1.070	$1s2s$—$1s2p$	^3S—^3P	0.813
$1s^2$—$1s3p$		0.365	$1s2s$—$1s3p$		0.234	$1s2s$—$1s3p$		−0.165
$1s^2$—$1s4p$		0.508	$1s2p$—$1s3s$		2.530	$1s2p$—$1s3s$		2.430
$1s^2$—$1s5p$		0.568	$1s3s$—$1s3p$		1.017	$1s3s$—$1s3p$		0.860

Для расчета сил осцилляторов воспользуемся известной формулой [3] (использованы атомные единицы, как и выше)

$$f_{LS}^{L'S'} = \frac{2}{(2L+1)(2S+1)}(E_{L'S'} - E_{LS}) \sum_{MM_SM'M_{S'}} P_i^2(LSMM_S;\ L'S'M'M_{S'}). \qquad (4)$$

Чтобы представить $f_{LS}^{L'S'}$ в виде ряда по Z^{-1} необходимо также разность энергий представить в виде ряда по Z^{-1}. Следует заметить, что при переходах между разными конфигурациями (например, $1s^2$—$1snp$) первый член разложения для $E_{L'S'} - E_{LS}$ начинается с Z^2, так как в этом случае различны нулевые энергии состояний, для переходов типа $1sns$—$1snp$ нулевые энергии одинаковы и первый член разложен для разности энергий начинается с Z. Таким образом, при представлении сил осцилляторов в виде ряда по Z^{-1} (при нашей точности расчета P) в первом случае достаточно для разности энергий взять нулевой и первый член ряда по Z^{-1}, во втором случае нужен и второй член ряда по Z^{-1}, расчет которого довольно сложен [2]. В связи с разной зависимостью от Z нулевых членов для $f_{LS}^{L'S'}$ мы привели две таблицы для сил осцилляторов. В табл. 2, *а* приведены численные значения для α, β для $f_{LS}^{L'S'}=\alpha\left(1+\frac{\beta}{Z}\right)$ для переходов между разными оболочками, в табл. 2, *б* — значения α, β для $f_{LS}^{L'S'}=\frac{\alpha}{Z}\left(1+\frac{\beta}{Z}\right)$ для переходов в оболочке.

Таблица 2

Силы осцилляторов для переходов (ат. ед.)

а $1s^2—1snp$, $1sn_1s—1sn_2p$ $(n_1\neq n_2)$,

$$f_{LS}^{L'S'}=\alpha\left(1+\frac{\beta}{Z}\right),$$

Конфигурация	Термы	α	β
$1s^2—1s2p$	$^1S—^1P$	0.8324	—1.285
$1s^2—1s3p$	$^1S—^1P$	0.1582	—0.421
$1s^2—1s4p$	$^1S—^1P$	0.0580	—0.207
$1s^2—1s5p$	$^1S—^1P$	0.0348	—0.082
$1s2s—1s3p$	$^1S—^1P$	0.4348	—1.238
	$^3S—^3P$	0.4348	—1.534
$1s2p—1s3s$	$^1S—^1P$	0.0136	2.834
	$^3S—^3P$	0.0136	2.958

б $1sns—1snp$,

$$f_{LS}^{L'S'}=\frac{\alpha}{Z}\left(1+\frac{\beta}{Z}\right)$$

Конфигурация	Термы	α	β
$1s2s—1s2p$	$^1S—^1P$	0.5048	0.624
	$^3S—^3P$	0.6804	0.976
$1s3s—1s3p$	$^1S—^1P$	0.8751	0.213
	$^3S—^3P$	1.1421	0.534

Используя табл. 2, можно рассчитать силы осцилляторов для рассматриваемых переходов с точностью до второго порядка теории возмущений для гелиоподобных систем. В табл. 3 приводится сравнение настоящих расчетов с результатами из [4].

Таблица 3

Сравнение результатов настоящего расчета сил осцилляторов с результатами из [4] (числа в скобках)

Конфигурация	Термы	He	Li+	Be++	C++++
$1s2s—1s2p$	$^1S—^1P$	0.331 (0.3764)	0.203 (0.213)	0.146 (0.149)	0.093 (0.0931)
	$^3S—^3P$	0.506 (0.5391)	0.301 (0.308)	0.212 (0.213)	0.132 (0.132)
$1s3s—1s3p$	$^1S—^1P$	0.484 (0.629)	0.312 (0.362)	0.230	0.151
	$^3S—^3P$	0.723	0.448	0.324	0.207
$1s2s—1s3p$	$^1S—^1P$	0.166 (0.1514)	0.255 (0.256)	0.300 (0.305)	0.345 (0.351)
	$^3S—^3P$	0.101 (0.06446)	0.213 (0.186)	0.268 (0.252)	0.324 (0.316)
$1s2p—1s3s$	$^1P—^1S$	0.0329 (0.0480)	0.0265 (0.0314)	0.0232	0.0200
	$^3P—^3S$	0.0337 (0.0693)	0.0270 (0.0390)	0.0237	0.0203
$1S^2—1s2p$	$^1S—^1P$	0.298 (0.2762)	0.476 (0.457)	0.565 (0.552)	0.654 (0.647)
$1s—1s3p$	$^1S—^1P$	0.125 (0.0734)	0.136 (0.111)	0.142 (0.127)	0.147 (0.141)

Следует заметить, что результаты, приведенные в [4], получены разными способами и соответственно точность их различна. Так, для $Z=2$ результаты взяты из работы [5], где при расчете были использованы хилераасовские функции с большим числом членов ($\sim$100). Для $Z>2$ была использована кулоновская аппроксимация. В настоящем расчете точность будет повышаться с увеличением Z, так как будет уменьшаться роль неучтенных членов ряда теории.

Литература

[1] У. И. Сафронова, В. В. Толмачев. Лит. физ. сб., 7, 53, 1967.
[2] А. Н. Иванова, У. И. Сафронова, В. Н. Харитонова. Опт. и спектр., *24*, 660, 1968.
[3] Г. Бете, Э. Солпитер. Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами. Физматгиз, М., 1960.
[4] W. L. Wiese. Atomic transition probabilities, NSRDS NBS-4, v. 1, 1966.
[5] B. Schiff, C. L. Pekeris. Phys. Rev., *134*, A638, 1967.

Поступило в Редакцию 3 января 1968 г.

УДК 535.42 + 621.375.9 : 535

ВЛИЯНИЕ ДИФРАКЦИИ НА КРАЯХ ФОКУСИРУЮЩЕЙ ЛИНЗЫ НА УГЛОВОЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ИНТЕНСИВНОСТИ ЛАЗЕРНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

В. В. Малаев

Если фокусирующая линза имеет большие размеры, то поле на краях линзы близко к нулю и дифракцией на линзе можно пренебречь. Однако иногда оказывается выгоднее использовать линзы малых размеров [1]. Если же линза не очень велика, то из-за дифракции на ее краях произойдет перераспределение энергии в пространстве, которое приведет к расплыванию пучка, в частности к увеличению ширины диаграммы направленности.

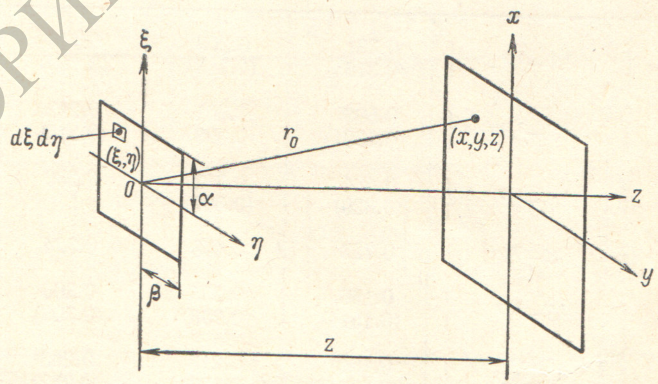

Рис. 1.

Пусть на выходе линзы с линейной апертурой $2\alpha \times 2\beta$ создан плоский фронт (рис. 1). Тогда в точке (x, y, z), находящейся на большом расстоянии z от линзы, напряженность поля mn-моды будет иметь вид (дифракция Фраунгофера)

$$E_{mn}(x, y, z) = \frac{ie^{-ikr_0}}{\lambda r_0} \int\limits_{\sigma} E_{mn}(\xi, \eta)\, e^{ik\frac{x\xi + y\eta}{r_0}}\, d\xi d\eta, \qquad (1)$$

где интегрирование прозводится по апертуре линзы σ.