герентности рассеянного света [формула (3) и (4)] определяются функцией когерентности первого порядка падающего света. Эта функция в случае когерентности этого же порядка факторизуется [5] вне зависимости от того, каким был свет: лазерным или нет. Поэтому вообще говоря, неудивительно, что в эксперименте никакого существенного различия в характере рассеяния не было обнаружено [3, 4].

Литература

[1] Б. А. Сотский. Опт. и спектр., *24*, 979, 1968.
[2] M. J. Beran, G. B. Parrent. Theory of Partial Coherence. Prentice Hall, inc. Englewood, 1964.
[3] R. F. Hopfield. Appl. Opt., *6*, 170, 1967.
[4] Т. Л. Торопова, Л. Л. Слободкина Тр. астрофиз. инст. АН КазССР, *13*, 82, 1969.
[5] Дж. Клаудер, Э. Сударшан. Основы квантовой оптики. М., 1970.

Поступило в Редакцию 23 сентября 1972.

УДК 539.143.

О ВОЗМОЖНОСТИ СОПОСТАВЛЕНИЯ ЭКСПЕРИМЕНТОВ ЯМР С ДАННЫМИ ОПТИЧЕСКОЙ И НЕЙТРОННОЙ СПЕКТРОСКОПИИ

Р. М. Юльметьев

Вопрос о сопоставимости результатов экспериментов ЯМР в конденсированных средах с информацией, предоставляемой оптическими и нейтронными спектрами, обсуждался в последние годы (см., например, дискуссию на Международной конференции по неупругому рассеянию нейтронов [1]). Хотя определенная связь между этими видами спектроскопии интуитивно угадывалась довольно давно, до сих пор не было ясно, как это может конкретно проявиться. В данном сообщении показано, что релаксационные параметры ЯМР — скорости релаксации ядер T_1^{-1} и T_2^{-1} — в жидкости связаны с законом некогерентного рассеяния $S_s(k, \omega)$, непосредственно измеряемой величиной в оптической [2] и нейтронной [3] спектроскопии.

Рассматриваются только межмолекулярные механизмы ядерной магнитной релаксации спинов, когда возмущение описывается двухчастичными взаимодействиями

$$\hat{H} = \sum\nolimits_\beta \hat{H}'_\beta = \sum_\beta \sum_{i \neq j} J_\beta (\hat{\mathbf{I}}_i, \hat{\mathbf{I}}_j) P_\beta (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j), \tag{1}$$

где β — компонента возмущения $\hat{H}'_\beta$ включает оператор спинов $J_\beta (\hat{\mathbf{I}}_i, \hat{\mathbf{I}}_j)$, осциллирующий с частотой $\beta\omega_0$ ($\hbar\omega_0$ — радиочастотный квант), P_β — решеточный оператор, $\hat{\mathbf{I}}_i$ и $\mathbf{r}_i$ — оператор спина и радиус-вектор i-й частицы. Ранее [4] автором на основе теории Кубо и Томиты [5] были найдены выражения для T_1^{-1} и T_2^{-1} в следующей форме:

$$T_{\alpha+1}^{-1} = \sum_\beta \sigma_{\alpha\beta}^2 \tau'_{\alpha\beta}, \quad \tau'_{\alpha\beta} = \operatorname{Re} \int_0^\infty dt e^{i\beta\omega_0 t} f_{\alpha\beta}(t), \quad \alpha = 0,1, \tag{2}$$

$$\sigma_{\alpha\beta}^2 = \frac{3}{1+\alpha} \frac{S_\beta(q)}{I(I+1)(2I+1)} \langle | [J_\beta(\hat{\mathbf{I}}), \hat{\mathbf{I}}_\alpha] |^2 \rangle, \tag{3}$$

$$S_\beta(q) = n \int d\mathbf{r} g(\mathbf{r}) | P_\beta(\mathbf{r}) |^2 + n^2 \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' g_3(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \mathbf{r}-\mathbf{r}') \times P_\beta(\mathbf{r}) P_\beta^*(\mathbf{r}'), \tag{4}$$

$$f_{\alpha\beta}(t) = \frac{1}{N S_\beta(q)} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} R_{\mathbf{k}}^\beta R_{\mathbf{k}'}^{\beta *} \left\langle \sum_{i \neq j} \sum_{i \neq j'} \exp \{ i [\mathbf{k} \mathbf{r}_{ijt} - \mathbf{k}' \mathbf{r}_{ij'0}] \} \right\rangle. \tag{5}$$

В (2)—(5) $S_\beta(q)$ — решеточная часть статических моментов $\sigma_{\alpha\beta}^2$, $n = N/V$ — число частиц в единице объема, $g(\mathbf{r})$ — радиальная функция распределения (РФР) частиц. g_3 — равновесная трехчастичная коррелятивная функция, а величины

$$R_k^\beta = \frac{1}{V} \int d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} P_\beta(\mathbf{r}) \tag{6}$$

представляют собой Фурье-компоненты оператора решетки. Учитывая перемещение отдельных частиц $\mathbf{r}_{jt}=\mathbf{r}_{j0}+\int\limits_0^t d\tau \mathbf{v}_j(\tau)$, временную корреляционную функцию (ВКФ) $f_{\alpha\beta}(t)$ можно представить в виде

$$f_{\alpha\beta}(t)=S_\beta^{-1}(q)\sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}R_\mathbf{k}^\beta R_{\mathbf{k}'}^{\beta*}\Phi_\mathbf{k}(t)\Big\{(N-1)\,g(\mathbf{k}-\mathbf{k}')+ + (N-1)(N-2)\sum_\mathbf{n} g(\mathbf{n})\,g(\mathbf{k}-\mathbf{n})\,g(\mathbf{n}-\mathbf{k}+\mathbf{k}')\Big\}, \tag{7}$$

где $g(\mathbf{k})$ — компоненты Фурье РФР; принято предположение о статической независимости равновесных и временных корреляций и «суперпозиционное приближение» Кирквуда [6] для g_3

$$g_3(1,\ 2,\ 3)=g(1)\,g(2)\,g(3). \tag{8}$$

Временные корреляции в (7) определяются ВКФ

$$\Phi_\mathbf{k}(t)=\left\langle \exp\left\{i\left[\int\limits_0^t (\mathbf{k}\mathbf{v}_i(\tau)-\mathbf{k}\mathbf{v}_j(\tau))\,d\tau\right]\right\}\right\rangle. \tag{9}$$

Естественно считать корреляцию скоростей различных частиц независимыми. Это дает

$$\left.\begin{aligned}&\Phi_\mathbf{k}(t)=F_{s,i}(\mathbf{k},\ t)\,F_{s,j}(\mathbf{k},\ t),\\ &F_{s,j}(\mathbf{k},\ t)=\frac{1}{N_j}\sum_{j=1}^{N_j}\langle\exp\{-i\mathbf{k}\mathbf{r}_j(0)\}\exp\{i\mathbf{k}\mathbf{r}_j(t)\}\rangle,\end{aligned}\right\} \tag{10}$$

где $F_s(\mathbf{k},\ t)$ — промежуточная функция некогерентного рассеяния, связанная с законом рассеяния $S_s(\mathbf{k},\ \omega)$ известным соотношением

$$S_s(\mathbf{k},\ \omega)=\frac{1}{2\pi}\int\limits_{-\infty}^{\infty} dt e^{-i\omega t}F_s(\mathbf{k},\ t).$$

Учитывая (7)—(10) и выполняя последовательно обратные Фурье-преобразования, находим ВКФ в виде

$$f_{\alpha\beta}(t)=\frac{n}{(2\pi)^3 S_\beta(q)}\int d\mathbf{R}d\mathbf{r}d\mathbf{k}g(r)\,P_\beta(\mathbf{R})\,P_\beta^*(\mathbf{r})\times \times\exp\{i\mathbf{k}(\mathbf{R}-\mathbf{r})\}\,F_{s,i}(\mathbf{k},\ t)\,F_{s,j}(\mathbf{k},\ t)\,\{1+ + n\int d\rho\exp(ik\rho)\,g(\rho)\,g(\mathbf{r}+\rho)\}, \tag{11}$$

где индексами i и j различаются сорта частиц. Для «эффективных» времен корреляции $\tau'_{\alpha\beta}$ (или спектральных плотностей) отсюда имеем окончательно точное выражение

$$\tau'_{\alpha\beta}=\frac{n}{(2\pi)^2 S_\beta(q)}\int d\mathbf{R}d\mathbf{r}d\mathbf{k}g(\mathbf{r})\,P_\beta(\mathbf{R})\,P_\beta^*(\mathbf{r})\exp\{i\mathbf{k}(\mathbf{R}-\mathbf{r})\}\times \times\left[1+n\int d\rho\exp(i\mathbf{k}\rho)\,g(\rho)\,g(\mathbf{r}+\rho)\right]\int\limits_{-\infty}^{\infty} d\Omega S_{s,i}(\mathbf{k},\ \beta\omega_0-\Omega)\times S_{s,j}(\mathbf{k},\ \Omega). \tag{12}$$

Теперь, согласно (2)—(4), легко записать выражения для времен ядерной магнитной релаксации T_1 и T_2 для любых конкретных механизмов релаксации. В случае малых k и ω и одинаковых частиц i и j вместо последнего интеграла в (12) можно записать $S_s(\sqrt{2}\mathbf{k},\ \omega)$ (если принять гауссовое приближение для $F_s(\mathbf{k},\ t)$).

Полученные выражения позволяют сопоставить параметры ЯМР с данными оптических и нейтронных спектров. Из (12) видно, что спектральные плотности (а также и частотная зависимость скоростей релаксации ЯМР) получаются как интегральная характеристика двух соответствующих спектров рассеяния, свернутых на частотах, кратных резонансной частоте ЯМР. Они позволяют также оценить роль трехчастичных корреляций. Развитый здесь подход открывает большие возможности в широком привлечении гидродинамических моделей, успешно применяемых при описании теплового движения сред в оптических явлениях, к задачам ядерного магнитного резонанса.

Литература

[1] J. G. P o w l e s. Neutron Inelastic Scattering, IAEA, Vienna, *1*, 379, 1968.
[2] Л. И. К о м а р о в, И. З. Ф и ш е р. ЖЭТФ, *43*, 1927, 1962; R. P e c o r a. J. Chem. Phys., *40*, 1604, 1964; R. D. M o u n t a i n. Rev. Mod. Phys., *38*, 205, 1966; Р. М. Ю л ь м е т ь е в. Опт. и спектр., *19*, 956, 1965.
[3] L. V a n H o v e. Phys. Rev., *95*, 249, 1954; В. Ф. Т у р ч и н. Медленные нейтроны. Госатомиздат, М., 1963; Рассеяние тепловых нейтронов. Госатомиздат, М., 1970.
[4] Р. М. Ю л ь м е т ь е в. ЖСХ, *9*, 803, 1968.
[5] R. K u b o, K. T o m i t a. J. Phys. Soc. Japan, *9*, 888, 1954.
[6] И. З. Ф и ш е р. Статистическая теория жидкости. Физматгиз, М., 1961.

Поступило в Редакцию 18 ноября 1972 г.

УДК 539.184.2

ОБ ОПТИЧЕСКИХ СЕЧЕНИЯХ ArI И KrI

Г. С. Ростовикова, В. П. Самойлов и *Ю. М. Смирнов*

Теория электронно-атомных столкновений предсказывает (см., например, [1]), что с увеличением главного квантового числа сечения возбуждения уровней водородоподобных атомов должны убывать по степенному закону вида $q_{\max}=An^{-\alpha}$, где A и α — константы, причем $\alpha=3$. Наличие степенной зависимости было подтверждено экспериментально [2] для случая атома гелия, сравнительно близкого к теоретической модели. Однако даже в этом случае величина α оказывается отличающейся от теоретического значения и различной для разных серий. Позднейшими исследованиями было установлено [3], что аналогичная зависимость имеет место не только для сечений возбуждения уровней, но и для оптических сечений гелия.

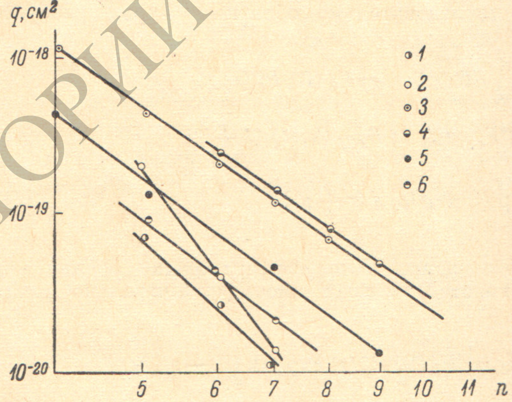

Рис. 1. Зависимость сечения возбуждения уровней ArI от квантового числа n.

$1 - 4s[^1/_2]^0_1 - np[^1/_2]_0$, $\alpha=4.7$; $2 - 4s[^3/_2]^0_1 - np[^1/_2]_0$, $\alpha=7.9$; *3* [6], $4 - 4p[^5/_2]_3 - nd\,[^7/_2]^0_4$, $\alpha=4.65$; $5 - 4p[^1/_2]_1 - nd\,[^3/_2]^0_2$, $\alpha=4.65$; $6 - 4p[^1/_2]_1 - nd'[^3/_2]^0_2$, $\alpha=4.65$.

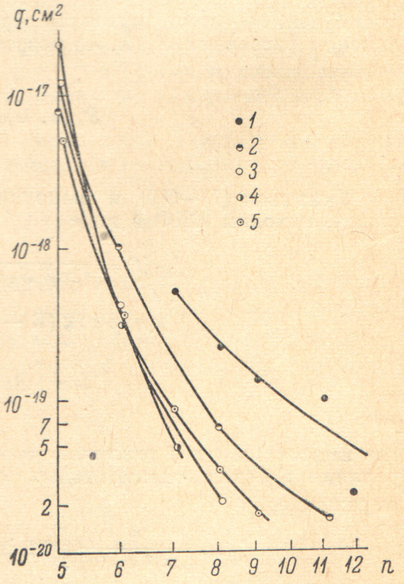

Рис. 2. Зависимость сечения возбуждения уровней KrI от квантового числа n.

$1 - 5p[^5/_2]_3 - nd[^7/_2]^0_4$, $2 - 5s[^3/_2]^0_1 - np[^1/_2]_0$, $3 - 5s[^3/_2]^0_2 - np[^3/_2]_2$, $4 - 5s[^3/_2]^0_1 - np[^5/_2]_2$, $5 - 5s[^3/_2]^0_2 - np[^5/_2]_{2,3}$.

Для более тяжелых инертных газов какие-либо теоретические предсказания отсутствуют, однако в работе [4] было показано, что у оптических сечений атома неона