

решении приемника 40 лин./мм позволяют получить разрешение $\sim 0.22 \text{ \AA}$, при ширине щели 20 мкм и разрешении приемника 20 лин./мм — $0.44 \text{ \AA}$ соответственно при апертурах решеток 40×30 и 60×50 мм.

Результаты исследований показывают, что возможно изготовление асферических решеток с одной плоскостью симметрии, применение которых в спектральных приборах позволит получить практически безабберационное изображение в достаточно широкой области спектра и тем самым увеличить как светосилу, так и разрешающую способность приборов. В зависимости от спектральной области и схемы прибора для получения безабберационного изображения необходимо выбирать асферическую поверхность в каждом конкретном случае.

Авторы выражают благодарность Ф. М. Герасимову за обсуждение результатов работы и помощь в подготовке рукописи статьи.

Литература

- [1] H. A. Rowland. Phil. Mag., 8, 469, 1882; 16, 197, 1883.
- [2] F. Zernike. Pieter Zeeman. pp. 323—336, Martinus Nijhoff, Hague, Netherlands, 1935.
- [3] I. E. Mack, I. R. Stehn, B. Edlen. J. Opt. Soc. Am., 22, 245, 1932.
- [4] H. G. Beutler. J. Opt. Soc. Am., 35, 311, 1945.
- [5] T. Namioka. J. Opt. Soc. Am., 49, 446, 460, 951, 1959.
- [6] H. Greiner, E. Schaffer. Optik, 16, 288, 350, 1959.
- [7] И. В. Пейсахон, И. Н. Тарнакин. Ж. прикл. спектр., 1, 289, 1964; 2, 218, 1965.
- [8] H. Haber. J. Opt. Soc. Am., 40, 153, 1950.
- [9] T. Namioka. J. Opt. Soc. Am., 51, 4, 13, 1961.
- [10] T. Namioka. J. Quant. Spectr. Rad. Trans., 2, 697, 1962.
- [11] Ю. П. Щепеткин. Опт. и спектр., 4, 383, 513, 1958.
- [12] E. Schönheit. Optik, 23, 305, 1966.
- [13] А. З. Хабиров. Бюлл. изобр., 21, 154, 1968.
- [14] С. А. Стрежнев, А. И. Андреева. Опт. и спектр., 4, 796, 1970.
- [15] С. А. Стрежнев, А. И. Андреева, А. З. Хибаров. Опт. и спектр., 23, 369, 1972.
- [16] С. А. Стрежнев, Н. М. Балясников, Ю. А. Шуба. Опт.-механич. промышл., 4, 76, 1971.
- [17] Ф. М. Герасимов, В. П. Сергеев, И. А. Тельтевский, В. В. Сергеев, Б. В. Маричев. Опт. и спектр., 19, 270, 1965.
- [18] В. В. Кунджиги, С. А. Стрежнев, Н. А. Фетисова. Опт.-механич. промышл., 6, 43, 1970.
- [19] И. В. Пейсахон. Оптика спектральных приборов. Изд. «Машиностроение», Л., 1970.

Поступило в Редакцию 17 марта 1973 г.

УДК 539.184.01

ПОЛЯРИЗАЦИЯ ДЕЙТОНА И ЕЕ ВЛИЯНИЕ НА ИЗОТОПИЧЕСКИЙ СДВИГ УРОВНЕЙ ВОДОРОДА И ДЕЙТЕРИЯ

Л. Н. Лабзовский

Поляризация ядер и ее влияние на атомные спектры рассматривались в работах [1, 2], а в последнее время — для мезоатомов — в [3–5]. Мы произвели точный расчет этого эффекта в аналитическом виде для атома дейтерия, используя модель ямы нулевого радиуса для дейтона. Оказывается, что эффект поляризации в этом случае значительно превосходит обычный эффект объема, что объясняется высокой поляризуемостью дейтона.

Рассмотрим гамильтониан атома дейтерия без учета спиновых членов

$$H = -\frac{1}{2M} \Delta_{x_1} - \frac{1}{2M} \Delta_{x_2} - \frac{1}{2} \Delta_{x_3} - \frac{1}{|x_1 - x_3|} + U(|x_1 - x_2|), \quad (1)$$

где координаты x_1 , x_2 и x_3 относятся соответственно к протону, нейтрону и электрону, U — потенциал взаимодействия протона с нейтроном, M — масса протона и нейтрона. В выражении (1) использованы атомные единицы. Вводя координаты Якоби $X = [M(x_1 + x_2) + mx_3]/(2M + m)$, $x = x_1 - x_2$, $r = x_3 - (x_1 + x_2)/2$ и отделяя движение центра тяжести, приходим к уравнению

$$\left\{ -\frac{1}{M} \Delta_x - \frac{1}{2\mu} \Delta_r - \frac{1}{\left| \mathbf{r} - \frac{1}{2} \mathbf{x} \right|} + U(|\mathbf{x}|) \right\} \psi(\mathbf{x}, \mathbf{r}) = E \psi(\mathbf{x}, \mathbf{r}), \quad (2)$$

где $\mu^{-1} = (2M)^{-1} + 1$ — приведенная масса. Добавим и вычтем в левой части (2) точечное кулоновское взаимодействие $1/r$ и будем рассматривать разность $V = -|\mathbf{r} - (1/2)\mathbf{x}|^{-1} + r^{-1}$ как возмущение. Тогда в качестве нулевого приближения служат обычный атом водорода и неполяризованный дейтрон: $\psi_0(\mathbf{x}, \mathbf{r}) = \chi_0(\mathbf{r}) \varphi_0(\mathbf{x})$. В модели ямы нулевого радиуса основное состояние дейтона описывается волновой функцией $\varphi_0(\mathbf{x}) = (\gamma_0/2\pi)^{1/2} \times \exp(-\gamma_0 x)$, где величина γ_0 определяется энергией связи дейтона и в атомных единицах равна $\gamma_0 \approx 1.3 \cdot 10^4$. В качестве χ_0 возьмем волновую функцию основного состояния атома водорода. Тогда поправка первого порядка теории возмущений (с учетом $\gamma_0 \gg 1$) равна $\Delta E_1 = \langle \psi_0 | V | \psi_0 \rangle = (12\gamma_0^2)^{-1}$. Это есть обычный эффект объема.

Перейдем теперь к поправке второго порядка. В адиабатическом приближении [5]

$$\Delta E_2 = \sum_{\nu \neq 0} \frac{\langle 00 | V | 0\nu \rangle^2}{\varepsilon_\nu - \varepsilon_0} + \sum_{\substack{m, \nu \\ (m \neq 0)}} \frac{\langle 00 | V | m\nu \rangle^2}{E_m - E_0}, \quad (3)$$

где значки m, ν нумеруют уровни энергии дейтона и атома водорода. Оценка матричных элементов в (3) показывает, что первый член имеет порядок малости γ_0^{-4} , а второй $\gamma_0^{-2} (M\gamma_0^{-1})$. При этом первый член описывает эффект объема с неполяризованным дейтоном во втором порядке теории возмущений, а второй член — поляризацию дейтона. Параметр $M\gamma_0^{-1}$ имеет смысл отношения средней скорости движения электрона к средней скорости движения нуклонов в ядре и для $1s$ -состояния равен $\sim 10^{-1}$. Очевидно, только при условии малости этого параметра можно говорить о поляризации дейтона электроном. Наша задача, таким образом, состоит в точном вычислении второго члена в (3).

Вводя модифицированную функцию Грина для дейтона $\tilde{G}_{E_0}(\mathbf{x}; \mathbf{x}')$ и производя суммирование по ν в (3), получаем: $\Delta E_2 = \langle \chi_0 | W | \chi_0 \rangle$, где $W(\mathbf{r})$ — поляризационный потенциал

$$W(\mathbf{r}) \equiv \int \varphi_0(\mathbf{x}) V(\mathbf{x}, \mathbf{r}) \tilde{G}_{E_0}(\mathbf{x}; \mathbf{x}') V(\mathbf{x}', \mathbf{r}) \varphi_0(\mathbf{x}') d\mathbf{x} d\mathbf{x}'. \quad (4)$$

Функция Грина для уравнения Шредингера с потенциалом нулевого радиуса может быть представлена в виде

$$G_\gamma(\mathbf{x}; \mathbf{x}') = \frac{M}{4\pi} \frac{e^{-\gamma|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|} + M \frac{\varphi_\gamma(\mathbf{x}) \varphi_\gamma(\mathbf{x}')}{\gamma^2 - \gamma_0^2 - i0} + C(\gamma) \varphi_\gamma(\mathbf{x}) \varphi_\gamma(\mathbf{x}'), \quad (5)$$

где $\gamma = \sqrt{ME}$ — энергетический параметр, $C(\gamma)$ — некоторая функция, не имеющая полюсов в комплексной плоскости γ , а φ_γ — решение уравнения Шредингера для дейтона с энергетическим параметром γ . Выражение (5) есть наиболее общее выражение, удовлетворяющее уравнению $[-\Delta_x + \gamma^2] G_\gamma(\mathbf{x}; \mathbf{x}') = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$ и содержащее полюсной член нужного вида.

Чтобы получить модифицированную функцию Грина, необходимо вычислить предел

$$\tilde{G}_{\gamma_0} = \lim_{\gamma \rightarrow \gamma_0} \left[G_\gamma - M \frac{\varphi_0(\mathbf{x}) \varphi_0(\mathbf{x}')}{\gamma^2 - \gamma_0^2 - i0} \right]. \quad (6)$$

При этом коэффициент $C(\gamma)$ следует выбрать так, чтобы выполнялось условие ортогональности $\tilde{G}_{\gamma_0}$ и φ_0 . Это дает

$$\tilde{G}_{\gamma_0}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \frac{M}{4\pi} \frac{e^{-\gamma_0|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|} - \frac{M(\mathbf{x} + \mathbf{x}')}{2\gamma_0} \times \varphi_0(\mathbf{x}) \varphi_0(\mathbf{x}') + \frac{M}{4\gamma_0^2} \varphi_0(\mathbf{x}) \varphi_0(\mathbf{x}'). \quad (7)$$

Нетрудно проверить, что выражение (7) удовлетворяет граничному условию $\left\{ x^{-1} \tilde{G}_{\gamma_0}^{-1}(\mathbf{x}; \mathbf{x}') \frac{\partial}{\partial x} x \tilde{G}_{\gamma_0}(\mathbf{x}; \mathbf{x}') \right\}_{x=0} = -\gamma_0$, которому должна удовлетворять волновая функция дейтона во всех порядках теории возмущений. Отметим, что другое представление для функции Грина (5) было получено в [6].

Используя функцию Грина (7), мы можем, во-первых, получить точное асимптотическое выражение для поляризационного потенциала $W(\mathbf{r})$. При $r \rightarrow \infty$, $W(\mathbf{r}) = \alpha (2r^4)^{-1}$, где $\alpha = (32)^{-1} M \gamma_0^{-4}$ — поляризуемость дейтона в атомных единицах. Этот результат согласуется с расчетами поляризуемости электрона в яме нулевого радиуса в [7]. Далее, можно вычислить поправку ΔE_2 в виде суммы по парциальным волнам $\Delta E_2 = \sum_l \Delta E_2^l$. Каждый член этой суммы вычисляется в аналитическом виде. Основной

вклад вносит дипольный член $\Delta E_2^1 = -M\gamma_0^{-3}[(109/30) + (3/2)\ln 2]$. Мы вычислили также монопольный член $\Delta E_0^2 = -M\gamma_0^{-3}(1/64)[(216/36) - 2\ln 2]$, который оказывается значительно меньше ΔE_2^1 . Согласно оценкам, еще меньше должны быть остальные члены ΔE_2^1 . Вклад в изотопический сдвиг от дипольного члена $\Delta \nu_2^1 = -0.87 \cdot 10^{-3} \text{ см}^{-1}$, от монопольного члена $\Delta \nu_0^2 = -0.016 \cdot 10^{-3} \text{ см}^{-1}$, от обычного эффекта объема $\Delta \nu_1 = 0.11 \times 10^{-3} \text{ см}^{-1}$, суммарный вклад $\Delta \nu = -0.78 \cdot 10^{-3} \text{ см}^{-1}$. Этот результат находится в пределах точности современных спектроскопических измерений.

Отметим, что полученный результат $\Delta E_2 > \Delta E_1$ не означает неприменимости теории возмущений: оценка третьего порядка дает $\Delta E_3 \sim M^2 \gamma_0^{-5} \ll \Delta E_2$.

В заключение автор благодарит Ю. Н. Демкова за обсуждение и полезный совет.

Литература

- [1] F. Low. Phys. Rev., 77, 361, 1950.
- [2] G. Breit, G. B. Arfken, W. W. Clendenin. Phys. Rev., 78, 390, 1950.
- [3] R. K. Cole, Jr. Phys. Rev., 177, 164, 1969.
- [4] T. E. O. Erickson, J. Hüfner. Nucl. Phys., B47, 205, 1972.
- [5] В. А. Петрунькин, С. А. Старцев. Письма в ЖЭТФ, 16, 628, 1972.
- [6] А. И. Базь, Я. Б. Зельдович, А. М. Переломов. Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике, М., 1971.
- [7] М. Н. Адамов, Ю. Н. Демков, В. Д. Обедков, Т. К. Ребане. ТЭХ, 4, 147, 1968.

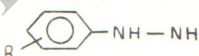
Поступило в Редакцию 19 марта 1973 г.

УДК 539.194

ЭМПИРИЧЕСКИЙ РАСЧЕТ ИНТЕНСИВНОСТЕЙ ПОЛОС ВАЛЕНТНЫХ КОЛЕБАНИЙ NH ФРАГМЕНТА —NH—NH₂

С. И. Чекушин, Е. В. Титов и В. И. Рыбаченко

В [1] нами получено простое соотношение, связывающее интенсивности двух валентных колебаний N—H фрагмента —NH—NH₂ гидразидов карбоновых кислот: $A_{\text{сл.}} = 3.48 A_s$, где $A_{\text{сл.}}$ — интенсивность колебаний ν_s^{NH} и $\nu_{\text{сл.}}^{\text{NH}}$ вторичной аминогруппы, связанных кинематическим взаимодействием [2]. Интересно было проверить, наблюдается ли подобная зависимость в ряду других производных гидразина. С этой целью мы изучили ИК спектры некоторых фенилгидразинов и произвели расчеты, аналогичные [1, 2], внося лишь некоторые коррективы (для лучшего согласия наблюдаемых и рассчитанных частот) в силовое поле: $K_{q_1} = K_{q_2} = 10.67 \text{ см}^{-2}$, $K_{q_3} = 10.77 \text{ см}^{-2}$ (ср. [2]). В итоге получено соотношение между интенсивностями двух наблюдаемых в ИК спектре полос валентных колебаний N—H фенилгидразинов: $A_{\text{сл.}} = 2.06 A_s$; использование его, как видно из таблицы, приводит к удовлетворительному совпадению экспериментальных и рассчитанных значений $A_{\text{сл.}}$.

	$\nu_s^{\text{NH}}, \text{ см}^{-1}$	$\nu_{\text{сл.}}^{\text{NH}}, \text{ см}^{-1}$	$A_s \cdot 10^{-3}, \text{ л/моль} \cdot \text{см}^2$	$A_{\text{сл.}} \cdot 10^{-3}, \text{ л/моль} \cdot \text{см}^2$	
				эксперимент	расчет
m-CH ₃ -	3358	3402	1.80 ± 0.05	3.82 ± 0.12	3.69
H-	3358	3404	1.88 ± 0.04	3.82 ± 0.05	3.85
n-Br-	3359	3408	2.45 ± 0.06	4.27 ± 0.08	5.02
m-Cl-	3361	3412	2.38 ± 0.08	4.50 ± 0.03	4.88
n-NO ₂ -	3366	3417	3.14 ± 0.19	4.42 ± 0.23	6.44
o-NO ₂ -	3376	3423	7.98 ± 0.10	2.98 ± 0.09	16.36

Большое различие между вычисленными и измеренными значениями $A_{\text{сл.}}$ наблюдается только для o-нитрофенилгидразина, что, очевидно, обусловлено влиянием внутримолекулярной водородной связи в этом соединении.

Полученные результаты еще раз свидетельствуют о правомерности допущений, сделанных нами ранее при решении электрооптической задачи [1].