

ставленная на рис. 1, может быть использована в качестве ИК спектрометра. Предельное разрешение такого спектрометра будет определяться шириной линии генерации $0.1 \div 0.2 \text{ см}^{-1}$, что соответствовало бы разрешению лучших образцов серийных ИК спектрометров. Поток излучения в импульсе, падающий на образец в указанном спектральном интервале, для лазерного спектрометра на $4 \div 5$ порядков превышает соответствующий поток в стандартном спектрометре. Преимущества такого спектрометра особенно велики при исследовании быстропротекающих процессов и спектров поглощения микрообразцов.

Литература

- [1] В. С. Багаев, Ю. Н. Берозашвили, В. С. Иванов, Б. Д. Копыловский, Ю. Н. Королев. ПТЭ, № 4, 185, 1966.
- [2] Ю. А. Быковский, В. Л. Величанский, И. Г. Гончаров, В. А. Маслов, В. В. Никитин. ФТП, 5, 498, 1971.
- [3] И. И. Засавицкий, А. И. Лихтер, Э. Г. Пель, А. П. Шотов. ФТП, 6, 2206, 1972.
- [4] И. И. Засавицкий, А. И. Лихтер, Э. Г. Пель, А. П. Шотов. ПТЭ, № 2, 114, 1973.
- [5] В. А. Агейкин, В. Г. Колошников. Ж. прикл. спектр., 17, 375, 1972.
- [6] W. Engeler, M. Carfinkel. Solid-State Electron, 8, 585, 1965.
- [7] Ю. И. Равич, Б. А. Ефимова, И. А. Смирнов. Методы исследования полупроводников в применении к халькогенидам свинца (PbTe, PbSe, PbS). Изд. «Наука», М., 1968.
- [8] I. Chambouleyron. Thèse, Faculté de Sciences, Paris, 1970.
- [9] J. N. Zemel, J. D. Jensen, R. B. Schoolar. Phys. Rev., 140, A330, 1965.

Поступило в Редакцию 6 апреля 1973 г.

УДК 539.184.01

СРАВНЕНИЕ НЕРЕЛЯТИВИСТСКОЙ И РЕЛЯТИВИСТСКОЙ ТЕОРИЙ ВОЗМУЩЕНИЙ НА ПРИМЕРЕ РАСЧЕТА ЭНЕРГИИ ДВУХЭЛЕКТРОННЫХ АТОМОВ

А. Д. Гурчумелия и У. И. Сафронова

Работы последних лет по расчету атомных структур [1-5] показывают, что релятивистские эффекты в атомах не являются пренебрежимо малыми, особенно в тяжелых и высокоионизованных атомах. Наиболее естественный путь учета релятивистских эффектов в высокоионизированных атомах состоит в использовании теории возмущений. Параметром малости служит величина αZ , где α — постоянная тонкой структуры, Z — заряд ядра. В частности, для энергии атома без учета радиационных эффектов можно построить ряд

$$E = Z^2 \sum_{nm} |E_{nm}| Z^{-n} \epsilon^m, \quad (1)$$

где $\epsilon = \alpha^2 Z^2$. Если $Z \ll 137$, разложение (1) приводит к удовлетворительному согласию с опытными данными для большого количества изоэлектронных последовательностей.

Целью данной работы является сравнение нерелятивистской теории возмущений (НРТ) с соответствующей релятивистской теорией (РТ) на примере ряда состояний двухэлектронных систем и установление соответствия между ними. В НРТ возмущений исходным приближением является уравнение Шредингера для одного электрона в поле точечного ядра заряда Z , а в качестве операторов возмущения вместе с кулоновским взаимодействием между электронами принимаются оператор Брейта [6], дающий в разложении (1) вклад вида $\alpha^2 (E_{11} Z^3 + E_{11} Z^2 + \dots)$, и оператор энергии, соответствующий релятивистской зависимости массы от скорости, дающий вклад в (1) вида $\alpha^2 (E_{01} Z^4 + E_{11} Z^3 + \dots)$.

В РТ возмущений исходным является уравнение Дирака для одного электрона в поле ядра, а поправки к энергии, возникающие благодаря взаимодействию между электронами, рассматриваются с использованием S -матрицы. В этом случае члены вида $E_{01} \alpha^2 Z^4$ возникают в нулевом приближении, а члены вида $E_{11} \alpha^2 Z^3$ во втором порядке. Заметим, что элементы первого порядка S -матрицы в энергию вклада не дают [7].

При вычислении матричных элементов энергии между разными состояниями атома, которые содержат множитель $\delta_{J' J} \delta_{K' K} \delta_{\pi' \pi}$, где J — полный момент количества движения, K — проекция полного момента на произвольную ось, π — четность состояния,

нужно учесть также, что перед интегралами в выражении для энергии при расчете по теории возмущений появляется коэффициент вида

$$\lim_{\gamma \rightarrow 0} \left(\frac{\gamma}{\gamma + i(E_1 + E_2 - E'_1 - E'_2)} \right) = \begin{cases} 1, & \text{если } E_1 + E_2 = E'_1 + E'_2, \\ 0, & \text{если } E_1 + E_2 \neq E'_1 + E'_2, \end{cases} \quad (2)$$

где γ — адиабатический параметр, $E_1, \dots, E'_2$ — одноэлектронные энергии.

Из (2) следует, что при диагонализации матрицы энергии не следует учитывать недиагональных матричных элементов, связывающих состояния, для которых $E_1 + E_2 \neq E'_1 + E'_2$. Примером таких состояний являются $1s_{1/2} 2p_{1/2} 1$ и $1s_{1/2} 2p_{3/2} 1$, энергии которых благодаря тому, что спин-орбитальное взаимодействие включено в исходное приближение, различаются, тогда как в нерелятивистском пределе энергии этих состояний совпадают. Получается кажущийся вывод, что такие недиагональные матричные элементы энергии следует учитывать только в НРТ возмущений. Мы провели сравнение расчетов по обеим теориям возмущений для выяснения указанного вопроса. Релятивистский расчет был проведен в приближении, соответствующем учету двух главных диаграмм второго порядка. Радиационные эффекты не учитывались. Расчет был проведен при помощи дираковских функций центрального поля. Полученные радиальные интегралы, входящие в выражения энергии атома, разлагались по степеням αZ . Вычисления проводили с точностью до $\alpha^2 Z^3$. Полученные результаты совпали с данными работы [1]. Нерелятивистский расчет приводит к следующей формуле для энергии:

$$\Delta E = \Delta E_{NR} + \Delta E_R.$$

В данной работе ΔE_{NR} были рассчитаны в следующем приближении:

$$\Delta E_{NR} = E_{00} Z^2 + E_{10} Z + E_{20}.$$

В табл. 1 приведены выражения для энергии по НРТ и РТ возмущений.

Т а б л и ц а 1

Выражения для энергии по нерелятивистской и релятивистской (в скобках) теорий возмущений

Состояния		E
по схеме LS-связи	по схеме jj-связи	
$1s^2 1S_0$	$(1s_{1/2})^2 0$	$-Z^2 + 0.625Z - 0.15767 - 0.25\alpha^2 Z^4 + 0.4801\alpha^2 Z^3$ ($-Z^2 + 0.625Z - 0.25\alpha^2 Z^4 + 0.48104\alpha^2 Z^3$)
$1s2s 1S_0$	$(1s_{1/2} 2s_{1/2}) 0$	$-0.625Z^2 + 0.231824Z - 0.114504 - 0.1640625\alpha^2 Z^4 +$ $+ 0.16947\alpha^2 Z^3$
$1s2s 3S_1$	$(1s_{1/2} 2s_{1/2}) 0$	$(-0.625Z^2 + 0.231824Z - 0.1640625\alpha^2 Z^4 + 0.169468\alpha^2 Z^3)$ $-0.625Z^2 + 0.187929Z - 0.04741 - 0.1640625\alpha^2 Z^4 +$ $+ 0.07694\alpha^2 Z^3$
$1s2p 3P_0$	$(1s_{1/2} 2p_{1/2}) 1$	$(-0.625Z^2 + 0.187929Z - 0.1640625\alpha^2 Z^4 + 0.076935\alpha^2 Z^3)$ $-0.625Z^2 + 0.225728Z - 0.072994 - 0.1640625\alpha^2 Z^4 +$ $+ 0.2198\alpha^2 Z^3$
$1s2p 1P_1$	$(1s_{1/2} 2p_{1/2}) 0$	$(-0.625Z^2 + 0.225728Z - 0.1640625\alpha^2 Z^4 + 0.219768\alpha^2 Z^3)$ $-0.625Z^2 + 0.259869Z - 0.157028 - 0.143229\alpha^2 Z^4 +$ $+ 0.0554\alpha^2 Z^3$
$1s2p 3P_1$	$(1s_{1/2} 2p_{1/2}) 1$	$(-0.625Z^2 + 0.237108Z - 0.1640625\alpha^2 Z^4 + 0.132621\alpha^2 Z^3)$ $-0.625Z^2 + 0.225728Z - 0.072994 - 0.153646\alpha^2 Z^4 +$ $+ 0.1304\alpha^2 Z^3$
$1s2p 3P_2$	$(1s_{1/2} 2p_{3/2}) 1$	$(-0.625Z^2 + 0.248488Z - 0.1328125\alpha^2 Z^4 + 0.0532108\alpha^2 Z^3)$ $-0.625Z^2 + 0.225728Z - 0.072994 - 0.1328125\alpha^2 Z^4 +$ $+ 0.04064\alpha^2 Z^3$
	$(1s_{1/2} 2p_{3/2}) 2$	$(-0.625Z^2 + 0.225728Z - 0.1328125\alpha^2 Z^4 + 0.0406387\alpha^2 Z^3)$

Сравнение показывает, что расхождение наблюдается только для состояний $3P_1$ и $1P_1$, имеющих в релятивистском описании разные энергии. Нерелятивистский расчет приводит к следующему значению недиагонального элемента матрицы энергии между этими состояниями:

$$-\frac{\alpha^2}{4} \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{Z^4}{12} - 0.1632Z^3 \right),$$

которое содержит члены с Z^4 и Z^3 . Поэтому диагонализация матрицы будет менять в выражении для энергии коэффициенты при Z^4 и Z^3 . Полученное вековое уравнение

решалось методом последовательных приближений. После первой итерации получили $\lambda_1 = (\alpha^4/4) (-0.53125Z^4 + 0.2128Z^3)$, $\lambda_2 = (\alpha^2/4) (0.65625Z^4 + 0.5304Z^3)$. В результате проведенной диагонализации полученные выражения для энергии приведены в табл. 2.

Таблица 2

Выражения для энергии по НРТ и РТ после диагонализации матрицы энергии

Состояния	E
$1s2p\ ^3P_1$	$-0.625Z^2 + 0.225728Z - 0.072994 - 0.1640625\alpha^2Z^4 + 0.1326\alpha^2Z^3$
$1s2p\ ^1P_1$	$-0.625Z^2 + 0.259869Z - 0.157028 - 0.1328125\alpha^2Z^4 + 0.0532\alpha^2Z^3$
$1s_{1/2}2p_{3/2}\ ^1$	$-0.625Z^2 + 0.225728Z - 0.1640625\alpha^2Z^4 + 0.132621\alpha^2Z^3$
$1_{1/2}2p_{1/2}\ ^1$	$-0.625Z^2 + 0.259869Z - 0.1328125\alpha^2Z^4 + 0.0532108\alpha^2Z^3$

Перейдем к релятивистскому расчету. Недиagonalный элемент матрицы энергии между состояниями $1s_{1/2}2p_{1/2}\ ^1$ и $1s_{1/2}2p_{3/2}\ ^1$, согласно [1], равен

$$-0.0160943Z + 0.0257505\alpha^2Z^3. \quad (3)$$

Проведенный ниже расчет показывает, что член с α^2Z^3 в (3) не нужен. Учитывая в (3) только αZ , при диагонализации матрицы энергии влияние этого члена будут сказываться только на коэффициентах при Z в выражении для энергии. Решение полученного векового уравнения дает $\lambda_1 = 0.259869$, $\lambda_2 = 0.225727$.

В табл. 2 приведены полученные в результате этой диагонализации выражения для энергии. Из этой таблицы следует, что НРТ и РТ возмущений приводят к эквивалентным результатам, если, во-первых, при использовании РТ возмущений недиагональные члены при диагонализации матрицы энергии брать в нерелятивистском пределе и, во-вторых, при использовании НРТ возмущений диагонализировать матрицы с членами αZ^4 и bZ^3 и полученное вековое уравнение решить по теории возмущений, ограничиваясь первым приближением.

В заключение считаем своим приятным долгом выразить благодарность Л. Н. Лабзовскому за полезные дискуссии.

Литература

- [1] Н. Т. Doyle. Adv. Atom. Mol. Phys., 5, 337, 1969.
- [2] D. Liberman, J. T. Waber, D. T. Gromer. Phys. Rev., 137A, 27, 1965.
- [3] A. Rosen, I. Lindgren. Phys. Rev., 176, 114, 1968.
- [4] A. M. Desiderio, W. R. Soudan. Phys. Rev., 3A, 1267, 1971.
- [5] Л. Н. Лабзовский. ЖЭТФ, 59, 168, 1970.
- [6] Г. Бете, Э. Солпитер. Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами. Физматгиз, М., 1960.
- [7] Л. И. Ахизер, В. Б. Берестецкий. Квантовая электродинамика. Изд. «Наука», М., 1969.

Поступило в Редакцию 21 мая 1973 г.

УДК 539.184

О МЕХАНИЗМЕ ИНВЕРСИИ НАСЕЛЕННОСТЕЙ В АТОМНОМ ВОДОРОДЕ

В. С. Алейников и А. П. Шелепо

Оптическая генерация в спектре атомного водорода, наблюдавшаяся в [1], интересна с точки зрения механизма создания инверсии населенностей, имеющего место в этой простейшей атомной системе. Но в [1] не приводятся временные характеристики импульса генерации, поэтому факт генерации нельзя однозначно связать с каким-либо явлением, происходящим в плазме. Оценки, выполненные ранее в работах [2, 3], показали, что в распадающейся водородной плазме при определенных условиях инверсия населенностей на ряде переходов атомного водорода может быть реализована за счет процесса ударно-излучательной рекомбинации.

Ниже приводятся типичные временные зависимости населенности верхнего лазерного уровня и мощности когерентного излучения с длиной волны 1.87 мкм H_I,