

расчетов, полученных по методу II, приведена в табл. 1. Обращает на себя внимание тот факт, что коэффициент k для слэтеровских параметров $1s$ -оболочки имеет один и тот же (отрицательный) знак. Как видно, с помощью описанного приема удается получать значения силовых постоянных, во всех изученных случаях неуступающими и временами даже превосходящими по точности значения силовых постоянных, полученных с помощью обычных *ab initio* методов. Трудоемкость же вычислений в нашем случае значительно меньше, что позволило осуществить их на машине среднего класса (БЭСМ-4). В табл. 2 представлены значения некоторых силовых постоянных, вычисленных без вариации слэтеровского параметра по методу III. Сравнение этих данных с данными *ab initio* расчетов показывают, что в этом случае приближенный метод

Т а б л и ц а 2
Значения силовых постоянных (в ат. ед.), полученных по методу III. Значения слэтеровских параметров соответствуют *best-atom* экспонентам

Молекула	Точный расчет	Наш расчет	Эксперимент
H ₂	0.409 [8]	0.411	0.369
LiH	0.77 [10]	0.089	0.066
BH	0.333 [12]	0.259	0.195
FH	0.924 [10]	0.703	0.620

позволяет получить значение силовых констант, не уступающих по точности обычным *ab initio* расчетам. Для молекулы LiH нами дополнительно была проведена по закону квадратов вариация экспоненты $1s$ АО Li, в результате чего первоначальное значение силовой константы снизилось до 0.0725, что приводит к ошибке в 10% по сравнению с экспериментом.

Все полученные на сегодняшний день результаты убеждают нас в том, что квадратичная вариация слэтеровского параметра как функции межатомных расстояний, в особенности $1s$ -оболочки, оказывается эффективным и относительно простым способом увеличения точности квантовых расчетов силовых постоянных и гораздо менее громоздким, чем метод наложения конфигураций.

Литература

- [1] В. И. Перевозчиков, Л. А. Грибов. Опт. и спектр., 38, 510, 1975.
- [2] В. И. Перевозчиков, Л. А. Грибов. Ж. структ. хим., 15, 957, 1974.
- [3] Л. А. Грибов, В. В. Жогина, Б. К. Новосадов, В. Н. Тимонин. Ж. структ. хим., 14, 536, 1973.
- [4] Л. А. Грибов, А. В. Ниукканен, В. И. Перевозчиков. ДАН СССР, 221, 104, 1975.
- [5] А. В. Ниукканен. Ж. структ. хим., 15, 952, 1974.
- [6] А. В. Ниукканен, В. Н. Тимонин, Л. А. Грибов. Ж. структ. хим., 16, 104, 1975.
- [7] B. J. Ransil. Rev. Mod. Phys., 32, 245, 1960.
- [8] S. Fraga, B. J. Ransil. J. Chem. Phys., 35, 669, 1961.
- [9] A. D. McLean. J. Chem. Phys., 40, 2774, 1964.
- [10] S. Fraga, B. J. Ransil. J. Chem. Phys., 36, 1127, 1962.
- [11] M. Allavena, S. Bratoz. J. Chem. Phys., 1199, 1963.
- [12] J. Gerratt, I. M. Mills. J. Chem. Phys., 49, 1719, 1968.
- [13] P. F. Fougere, R. K. Nesbet. J. Chem. Phys., 44, 285, 1966.
- [14] D. Bishop, J. Hoyland. Mol. Phys., 6, 161, 1963.

Поступило в Редакцию 9 июля 1975 г.

УДК 539.184+538.122

СТАЦИОНАРНЫЙ ЭФФЕКТ ХАНЛЕ В He³

Ю. К. Долломанский и В. М. Рыжков

Эффект Ханле, открытый 50 лет назад [1], состоит в деполяризации света резонансной частоты, рассеянного атомами, находящимися в слабом внешнем магнитном поле. Он связан с прецессией магнитных моментов возбужденных состояний атомов. В 1964 г. при изучении оптической накачки был открыт аналог эффекта Ханле для основного состояния атомов [2]. Его также называют эффектом Ханле, но он может наблюдаться не только по изменению поляризации рассеянного света, но также и по поглощению прошедшего через образец резонансного света. Этот эффект и рассматривается в настоящей работе.

Для системы атомов одного сорта эффект Ханле хорошо изучен как для стационарных [2, 3], так и для нестационарных условий [3, 4]. В последнем случае его называют также «резонансом» пересечения уровней в нулевом поле.

В случае поперечной оптической накачки (луч света по оси z , а статическое магнитное поле \mathbf{H} по оси x) получаются следующие выражения для наблюдаемых компонент намагниченности образца:

$$M_x = 0,$$

$$M_y = M_0 \frac{\tau}{\tau_p} \frac{\gamma H_x \tau}{1 + (\gamma H_x \tau)^2},$$

$$M_z = M_0 \frac{\tau}{\tau_p} \frac{1}{1 + (\gamma H_x \tau)^2},$$

где

$$1/\tau = (1/\tau_p) + (1/\tau_R).$$

В этих выражениях τ_R — время тепловой релаксации, τ_p — время накачки, γ — гиромагнитное отношение атомов образца, M_0 — стационарная намагниченность образца, достигаемая оптической накачкой при отсутствии тепловой релаксации и внешнего магнитного поля.

При измерении интенсивности прошедшего через образец света накачки сигнал на фотодетекторе будет пропорционален M_z и будет иметь вид лорентцевой кривой с центром в нулевом поле $H_x=0$ и с полушириной на половине высоты, равной $\Delta H = 1/\gamma\tau$. Этот эффект имеет простую физическую интерпретацию.

В нулевом поле прецессии нет и M_z сохраняет свое максимальное значение. В сильном поле, для которого период прецессии меньше времени затухания $\gamma H_x \tau \gg 1$, вектор намагниченности успевает совершить много оборотов прецессии до затухания, ее распределение в плоскости $y-z$ становится почти изотропным и компонента M_z стремится к нулю. Более подробно эффект рассмотрен в работе [5].

Образец Ne^3 в условиях оптической накачки (давления около 1 тор при слабом электрическом разряде) представляет собой сложную систему, состоящую из трех сильно связанных обменом метастабильных спин-систем: метастабильное состояние с $F=3/2$ и гиромагнитное отношение $\gamma_{3/2}$, метастабильное состояние с $F=1/2$ и гиромагнитное отношение $\gamma_{1/2}$ и основное состояние с $I=1/2$ и гиромагнитное отношение γ_I .

Уравнения, описывающие движения наблюдаемых векторов $\langle \mathbf{F}_{3/2} \rangle$, $\langle \mathbf{F}_{1/2} \rangle$ и $\langle \mathbf{I} \rangle$ в этой системе с учетом релаксационных процессов, оптической накачки и метастабильного обмена, были получены Дюпон-Роком, Медуком и Лавом [4]. Они имеют вид

$$\begin{aligned} \langle \dot{\mathbf{F}}_{3/2} \rangle &= -\frac{1}{\tau_0} \langle \mathbf{F}_{3/2} \rangle - \frac{4}{9\tau} \langle \mathbf{F}_{1/2} \rangle + \frac{10}{9\tau} \langle \mathbf{F}_{1/2} \rangle + \\ &+ \frac{10}{9\tau} \langle \mathbf{I} \rangle + \frac{1}{\tau_p} \langle \mathbf{F}_{3/2}^0 \rangle + \gamma_{3/2} [\langle \mathbf{F}_{3/2} \rangle \cdot \mathbf{H}], \\ \langle \dot{\mathbf{F}}_{1/2} \rangle &= -\frac{1}{\tau_R} \langle \mathbf{F}_{1/2} \rangle - \frac{7}{9\tau} \langle \mathbf{F}_{1/2} \rangle + \frac{1}{9\tau} \langle \mathbf{F}_{3/2} \rangle - \frac{1}{9\tau} \langle \mathbf{I} \rangle + \gamma_{1/2} [\langle \mathbf{F}_{1/2} \rangle \cdot \mathbf{H}], \\ \langle \dot{\mathbf{I}} \rangle &= -\frac{1}{T_R} \langle \mathbf{I} \rangle - \frac{1}{T} \langle \mathbf{I} \rangle + \frac{1}{3T} \langle \mathbf{F}_{3/2} \rangle + \frac{1}{3T} \langle \mathbf{F}_{1/2} \rangle + \gamma_I [\langle \mathbf{I} \rangle \cdot \mathbf{H}], \end{aligned}$$

где

$$1/\tau_0 = (1/\tau_p) + (1/\tau_R).$$

В этих выражениях τ_R — время тепловой релаксации спин-систем $\langle \mathbf{F}_{3/2} \rangle$ и $\langle \mathbf{F}_{1/2} \rangle$, τ_p — время накачки спин-системы $\langle \mathbf{F}_{3/2} \rangle$, T_R — время тепловой релаксации спин-системы $\langle \mathbf{I} \rangle$, τ — время метастабильного обмена для спин-систем $\langle \mathbf{F}_{3/2} \rangle$ и $\langle \mathbf{F}_{1/2} \rangle$, T — время метастабильного обмена для спин-системы $\langle \mathbf{I} \rangle$, $\langle \mathbf{F}_{3/2}^0 \rangle$ — стационарная ориентация образца, достигаемая оптической накачкой при отсутствии тепловой релаксации, метастабильного обмена и внешнего магнитного поля.

В этих уравнениях учтено, что светом от лампы с Ne^4 ориентируется только состояние с $F=3/2$. Состояние с $F=1/2$ не ориентируется, поскольку не поглощает света Ne^4 , как показано в работах [7, 8]. Первые члены в правой части всех уравнений описывают процессы тепловой релаксации (для спин-системы $\langle \mathbf{F}_{3/2} \rangle$, кроме, того, еще и процессы световой релаксации). Член $\langle \mathbf{F}_{3/2}^0 \rangle / \tau_p$ в первом уравнении описывает процесс оптической накачки. Последние члены этих уравнений описывают движение векторов во внешнем магнитном поле. Остальные члены описывают передачу ориентации между спин-системами, обусловленную метастабильным обменом.

Входящие в эти уравнения численные коэффициенты известны. Для обычно используемых условий при оптической накачке He^3 светом лампы He^4 времена имеют следующие порядки величины [9]: $\tau = 10^{-7}$ с, $\tau_R = 10^{-3}$ с, $\tau_p = 10^{-4}$ с, $T_R = 100$ с, $T = 10^{-1}$ с. Гиромангнитные отношения для рассматриваемых спин-систем равны [9] (в рад/с, Э): $\gamma_I = 2 \cdot 10^4$, $\gamma_{3/2} = 1.15 \cdot 10^7$, $\gamma_{1/2} = 2.3 \cdot 10^7$.

Стационарное решение этой системы уравнений для компонент вектора $\langle \mathbf{F}_{3/2} \rangle$ в условиях поперечной оптической накачки имеют вид (система координат та же, что и в предыдущем случае)

$$\begin{aligned} \langle F_{3/2} \rangle_x &= 0, \\ \langle F_{3/2} \rangle_y + i \langle F_{3/2} \rangle_z &= -i \langle F_{3/2}^0 \rangle \frac{9(1-27bc)}{20-30c-90b-9a+243abc}, \end{aligned}$$

где

$$a = \frac{\tau}{\tau_0} + \frac{4}{9} + i\gamma_{3/2} H_x \tau,$$

$$b = \frac{\tau}{\tau_0} + \frac{7}{9} + i\gamma_{1/2} H_x \tau,$$

$$c = \frac{T}{T_R} + 1 + i\gamma_I H_x T.$$

Для слабого поля $H_x \leq 10^{-5}$ э эти выражения значительно упрощаются, так как в них можно пренебречь всеми членами выше первого порядка по H_x . Члены, содержащие поле в первом порядке, имеют вид

$$k_1 \gamma_I H_x T + k_2 \gamma_{3/2} H_x \tau + \gamma_{1/2} H_x \tau,$$

где k_1 , k_2 и k_3 — коэффициенты порядка единицы. Подставляя численные значения входящих сюда величин, нетрудно убедиться, что два последних слагаемых будут на три порядка меньше первого и ими можно пренебречь. Таким образом, в выражениях для $\langle F_{3/2} \rangle_i$ исчезают гиромангнитные отношения метастабильных состояний.

Для слабого поля $H_x \leq 10^{-5}$ э получаем

$$\begin{aligned} \langle F_{3/2} \rangle_x &= 0, \\ \langle F_{3/2} \rangle_y &= A \frac{\gamma_I H_x T'_R}{1 + (\gamma_I H_x T'_R)^2}, \\ \langle F_{3/2} \rangle_z &= A \frac{1}{1 + (\gamma_I H_x T'_R)^2}, \end{aligned}$$

где

$$A = \frac{10}{3} \langle F_{3/2}^0 \rangle \frac{\tau T'_R}{\tau_p T}, \quad T'_R = T_R \left(1 + \frac{1}{3} \frac{\tau}{\tau_R} \frac{T_R}{T} + \frac{10}{3} \frac{\tau}{\tau_0} \frac{T_R}{T} \right)^{-1}.$$

При измерении интенсивности прошедшего через образец света накачки сигнал на фотодетекторе будет пропорционален компоненте $\langle F_{3/2} \rangle_x$ и будет иметь вид Лорентцевой кривой с центром в нулевом поле $H_x = 0$ и с полушириной на половине высоты, равной $\Delta H^* = 1/\gamma_I T'_R$. Подставляя известные величины γ_I и T'_R , получим $\Delta H^* \approx 2.2 \cdot 10^{-6}$ Э. Таким образом, ширина линии эффекта Ханле, детектируемого по поглощению метастабильным состоянием с $F=3/2$, определяется по существу характеристиками основного состояния (его гиромангнитным отношением и временем тепловой релаксации), что и определяет ее чрезвычайно малую величину. С физической точки зрения этот вывод можно объяснить сильной связью основного состояния с метастабильным. При увеличении магнитного поля раньше всего разрушается ориентация основного состояния $\langle I \rangle$, так как она имеет самое большое время релаксации $T_R = 100$ с. Из-за сильной связи с метастабильным состоянием ориентация поперечного разрушается при той же величине поля.

Для поля произвольного направления стационарное решение для $\langle \mathbf{F}_{3/2} \rangle$ имеет вид

$$\langle F_{3/2} \rangle_x = \frac{A}{\Delta} (-\gamma_I H_y T'_R + \gamma_I^2 H_x H_y T_R'^2),$$

$$\langle F_{3/2} \rangle_y = \frac{A}{\Delta} (\gamma_I H_x T'_R + \gamma_I^2 H_y H_z T_R'^2),$$

$$\langle F_{3/2} \rangle_z = \frac{A}{\Delta} (1 + \gamma_I^2 H_z^2 T_R'^2),$$

где

$$A = \frac{10}{3} \langle F_{3/2}^0 \rangle \frac{\tau}{\tau_p} \frac{T_R'}{T}, \quad \Delta = 1 + \gamma_I^2 (H_x^2 + H_y^2 + H_z^2) T_R'^2.$$

Эти выражения по форме тождественны соответствующим выражениям для односпиновых систем [9].

Отмеченная выше особенность стационарного эффекта Ханле в He^3 позволяет по-новому оценить применимость He^3 в качестве рабочего вещества в квантовых магнитометрах по сравнению с He^4 и Rb. Полуширина линии Ханле в He^4 равна $480 \cdot 10^{-6}$ Э, т. е. в 220 раз больше чем в He^3 [10]. Для рубидия эта величина равна $2 \cdot 10^{-6}$ Э [11], т. е. такая же, как для He^3 , но ячейка с Rb требует термостатирования.

Литература

- [1] W. Hanle. Zs. Phys., 30, 93, 1924.
- [2] I. C. Lehman, C. Cohen-Tannoudji. Compt. Rend., 258, 4463, 1964.
- [3] C. Cohen-Tannoudji, I. Dupont-Roc, S. Haroche, F. Laloe. Rev. Phys. Appl., 5, 95, 1970.
- [4] I. Dupont-Roc. Rev. Phys. Appl., 5, 853, 1970.
- [5] Е. Б. Александров, А. М. Бонч-Бруевич, В. А. Ходовой. Опт. и спектр., 23, 282, 1967.
- [6] I. Dupont-Roc. Rev. Phys. Appl., 34, 961, 1973.
- [7] R. C. Timsit, I. M. Daniels. Can. J. Phys., 49, 545, 1971.
- [8] R. C. Greenhow. Phys. Rev., 136, A660, 1964.
- [9] Н. М. Померанцев, В. Н. Рыжков, Г. В. Скродцкий. Физические основы квантовой магнитометрии, 26. «Наука», М., 1972.
- [10] R. E. Slocum. Phys. Rev. Lett., 29, 1642, 1972.
- [11] C. Cohen-Tannoudji, I. Dupont-Roc, S. Haroche, F. Laloe, Rev. Phys. Appl., 5, 102, 1970.

Поступило в Редакцию 15 июля 1975 г.

УДК 535.394 : 548.0

ЯВЛЕНИЕ ДАВЫДОВСКОГО РАСЩЕПЛЕНИЯ В СПЕТРАХ НПВО

Г. В. Сайдов, М. Е. Юдович и М. Л. Петрова

1. Исследованию оптических свойств молекулярных кристаллов посвящено значительное число работ [1]. Теоретической основой для большинства из них служат известные представления Давыдова, а экспериментальной — традиционные методы классической спектроскопии и специальные методики, развитые Прихотько с сотрудниками. Что касается существующих методов и методик, то все они предъявляют весьма жесткие требования к выбору и подготовке объектов исследования. В связи с этим при измерении спектров поглощения приходится, как правило, иметь дело либо сочень тонкими пластинками монокристаллов, либо с поликристаллическими пленками, нанесенными на слабопоглощающие подложки (кварц, стекло и т. п.). Естественно, что эти ограничения не только осложняют постановку эксперимента, но и исключают возможность решения целого ряда актуальных задач. К последним, например, относятся задачи, связанные с изучением влияния собственных свойств подложки на структуру поликристаллических пленок.

Нами была предпринята попытка снять указанные ограничения с помощью метода нарушенного полного внутреннего отражения (НПВО), выгодно отличающегося от других своей простотой и универсальностью [2]. Ранее он уже использовался для аналогичной цели [3], но из-за трудностей, возникающих при создании оптического контакта между твердотельными элементами НПВО и объектами исследования, широкого распространения не получил. В настоящее время достигнуты определенные успехи в области практического использования жидкостных элементов НПВО [4]. Эти элементы обладают рядом существенных преимуществ перед своими твердотельными аналогами, в частности естественным образом обеспечивают необходимый оптический контакт с твердыми образцами. Развитие жидкостной методики НПВО является, на наш взгляд, серьезным основанием для того, чтобы вновь обратиться к этому методу.