

ВЕРОЯТНОСТИ ПЕРЕХОДОВ АТОМА ГЕЛИЯ
В ПОСТОЯННОМ ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ПОЛЕ

В. П. Демжин и И. И. Муравьев

Проведены расчеты вероятностей синглетных и триплетных переходов для атома гелия под действием сильного постоянного электрического поля. Получена резкая зависимость вероятности запрещенных переходов от напряженности электрического поля. Результаты расчетов сравнены с экспериментальными данными.

В постоянном электрическом поле исследовано поведение вероятностей разрешенных и запрещенных переходов атома гелия. Рассмотрены переходы между уровнями с главными квантовыми числами $n=4$ и $n=2$. Обнаружено, что с ростом напряженности электрического поля вероятности разрешенных переходов незначительно уменьшаются. Вероятности запрещенных переходов в том же интервале напряженностей резко возрастают, причем вероятность синглетных переходов на порядок больше вероятности триплетных переходов. Полученные результаты позволяют объяснить поведение интенсивностей спектральных линий в электрическом поле. Сопоставление расчетных данных с имеющимися экспериментальными данными по интенсивностям спектральных линий показывает, что изменение интенсивностей линий определяется изменением вероятностей соответствующих переходов.

Внешнее электрическое поле приводит не только к расщеплению энергетических уровней атомов, но и к изменению вероятностей переходов между ними. Следствием последнего является появление запрещенных правилами отбора спектральных линий, изменение их интенсивностей с ростом напряженности поля, а также перераспределение интенсивности излучения атомов по спектру $[4-3]$.

Запрещенные линии играют важную роль и в астрофизике, и в физике плазмы. Появление интенсивных запрещенных переходов увеличивает поглощательную способность плазмы в определенном интервале длин волн. Они уменьшают время жизни уровня и, следовательно, приводят к дополнительному уширению спектральных линий. По изменению вероятностей запрещенных переходов можно судить о напряжении микрополя плазмы и о концентрации заряженных частиц.

Экспериментальные методы определения вероятностей переходов атомов во внешнем электрическом поле осложняются слабой интенсивностью излучения, что не позволяет вести исследования в широкой области спектра, и тем, что электрическое поле не только влияет на вероятности переходов, но и изменяет в какой-то мере условия возбуждения атомов. В связи с этим особенно актуальными при исследовании закономерностей влияния электрического поля на вероятности переходов атомов в широком интервале напряженностей поля и спектра являются расчетные методы на основе квантовой механики.

Первые теоретические работы появились после создания аппарата квантовой механики $[4-8]$. В работах $[4, 5]$ проведен расчет интенсивностей спектральных линий водорода при предположении конкретного механизма заселения и напряженности поля, равной нулю. Влияние напря-

женности электрического поля на интенсивности компонент второй линии бальмеровской серии исследовано в работе [6]. На основе теории возмущений с использованием в качестве базиса водородных волновых функций исследовано поведение относительных интенсивностей некоторых линий атома гелия в постоянном электрическом поле и объяснено появление запрещенных правилами отбора спектральных линий [7, 8]. Однако приближенные методы расчета и использование водородных волновых функций для сложных атомов не может дать удовлетворительных результатов при определении вероятностей переходов.

В данной работе ставилась задача рассчитать вероятности переходов типа $1s4s-1s2x$, $1s4p-1s2x$, $1s4d-1s2x$ и $1s4f-1s2x$, где $x=s, p$, в синглетной и триплетной системах атома гелия в постоянном электрическом поле. Выбор для исследования атома гелия и указанных выше переходов обусловлен возможностью сопоставления результатов расчета и эксперимента [9].

В расчете использовалась общая теория возмущений [10]. Этот метод свободен от ограничения для второго порядка теории возмущений и позволяет применить расчет практически ко всему спектру уровней. Волновая функция возмущенного состояния представлялась в виде суперпозиции волновых функций атома в отсутствие поля

$$\Psi = \sum_k c_k \Psi_k. \quad (1)$$

Коэффициенты c_k и возмущенные значения энергий определялись в результате диагонализации матрицы

$$\begin{pmatrix} E_1^0 - E + V_{11} & V_{12} & V_{13} & \dots \\ V_{21} & E_2^0 - E + V_{22} & V_{23} & \dots \\ V_{31} & V_{32} & E_3^0 - E + V_{33} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}, \quad (2)$$

где $E_1^0, E_2^0, E_3^0, \dots$ — энергии изолированного атома.

$$V_{kl} = -eF \int \Psi_k^* z \Psi_l^0 d\tau, \quad (3)$$

где e — заряд электрона; F — напряженность электрического поля в направлении оси z пространственных координат.

При учете структуры энергетических уровней атома гелия и условия, что матричные элементы оператора возмущения для состояний с различными главными квантовыми числами n много меньше, чем для состояний с одинаковыми n , в матрицу (2) включались состояния с одинаковыми главными квантовыми числами. Заметим также, что оператор возмущения не связывает состояний с различными спиновыми квантовыми числами и средние значения V_{kk} равны нулю. Угловые части матричных элементов рассчитывались в предположении LS -типа связи. Радиальные интегралы вычислялись в кулоновском приближении. Этот метод требует небольших затрат машинного времени и вместе с тем для гелия дает хорошее согласие радиальных интегралов с результатами других методов [11, 12].

Вероятность спонтанного излучения атома при переходе с уровня k на уровень l определяется выражением

$$A_{kl} = \frac{2.04 \cdot 10^{-6}}{(2J_k + 1)} \nu_{kl}^3 |\langle k | \mathbf{r} | l \rangle|^2, \quad (4)$$

где ν_{kl} — частота перехода; \mathbf{r} — радиус-вектор валентного электрона. Вероятность перехода между уровнями в формуле (4) получалась усреднением вероятностей переходов между подуровнями по верхним состояниям и суммированием по нижним состояниям, характеризуемым различными магнитными квантовыми числами M_J .

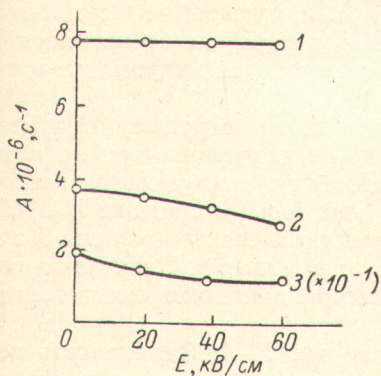


Рис. 1. Зависимость вероятностей разрешенных синглетных переходов от напряженности электрического поля.

1 — $4s^1S_0-2p^1P_1$, $2-4p^1P_1-2s^1S_0$, $3-4d^1D_2-2p^1P_1$.

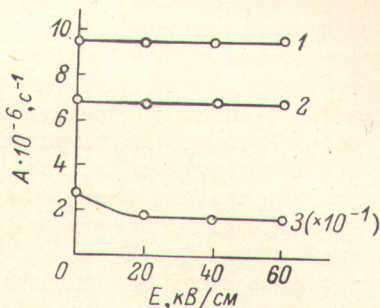


Рис. 2. Зависимость вероятностей разрешенных триплетных переходов от напряженности электрического поля.

1 — $4s^3S-2p^3P$, $2-4p^3P-2s^3S$, $3-4d^3D-2p^3P$.

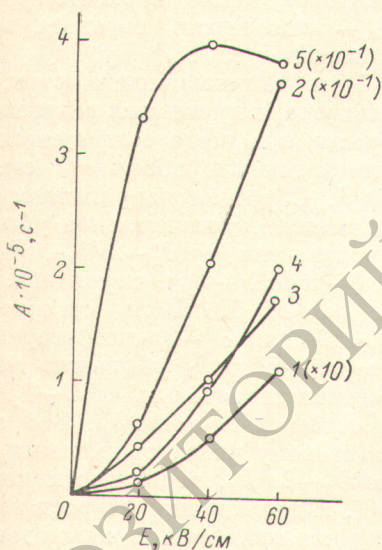


Рис. 3. Зависимость вероятностей запрещенных синглетных переходов от напряженности электрического поля.

1 — $4s^1S_0-2s^1S_0$, $2-4p^1P_1-2p^1P_1$, $3-4d^1D_2-2s^1S_0$, $4-4f^1F_3-2s^1S_0$, $5-4f^1F_3-2p^1P_1$.

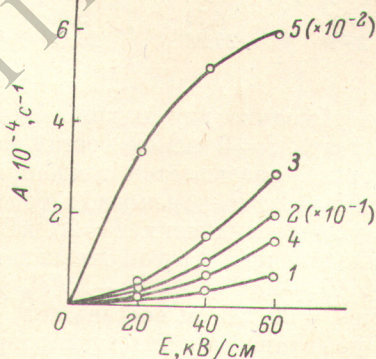


Рис. 4. Зависимость вероятностей запрещенных триплетных переходов от напряженности электрического поля.

1 — $4s^3S-2s^3S$, $2-4p^3P-2p^3P$, $3-4d^3D-2s^3S$, $4-4f^3F-2s^3S$, $5-4f^3F-2p^3P$.

Из формул (1) и (4) следует, что кроме разрешенных переходов появляются и запрещенные переходы, для которых изменение орбитального квантового числа валентного электрона больше единицы или равно нулю. Кроме того, появляются переходы, запрещенные по квантовому числу J . Причем, так как коэффициенты c_k в формуле (1) являются функциями напряженности поля, вероятности переходов могут меняться с изменением напряженности поля.

Следует отметить, что электрическое поле нарушает сферическую симметрию атома, следствием чего является нарушение закона сохранения момента количества движения. Поэтому возмущенное состояние, строго говоря, нельзя характеризовать квантовыми числами l, L, J . Новое состояние содержит в себе характеристики всех состояний без поля, вклады которых зависят от величины напряженности. Квантовые числа l, L и J , приписываемые возмущенному состоянию, показывают только его генеалогию.

Результаты расчета представлены на рис. 1—4. Зависимость вероятностей разрешенных синглетных и триплетных переходов приведена на рис. 1 и 2. Вероятности для триплетов вычислялись по формуле

$$A_{kl}^{LS} = \frac{1}{\bar{\lambda}^3} \sum_k (2J_k + 1) \sum_k \sum_l (2J_k + 1) \lambda_{kl}^3 A_{kl} \quad (5)$$

где $\bar{\lambda}$ — длина волны, соответствующая переходу между термами; λ_{kl} — длина волны, соответствующая переходу между уровнями k и l ; J_k — квантовое число верхнего уровня; A_{kl} — вероятность перехода между уровнями k и l .

Переход	Расчет $A_{kl} \cdot 10^{-6}, \text{с}^{-1}$	$A_{kl}^{[13]} \cdot 10^{-6}, \text{с}^{-1}$
$4s^1S_0 - 2p^1P_1$	7.86	6.55
$4p^1P_1 - 2s^1S_0$	3.54	7.17
$4d^1D_2 - 2p^1P_1$	19.18	20.20
$4s^3S - 2p^3P$	9.53	10.60
$4p^3P - 2s^3S$	6.76	5.05
$4d^3D - 2p^3P$	26.86	25.10

При напряженности поля, равной нулю, вероятности разрешенных переходов хорошо согласуются с результатами из работы [13] (см. таблицу). С ростом напряженности наблюдается незначительное убывание вероятностей $4p^1P_1 - 2s^1S_0$, $4d^1D_2 - 2p^1P_1$ и $4d^3D - 2p^3P$ -переходов. На-

большее убывание для напряженности, равной 60 кВ/см, относительно значения при $F=0$ кВ/см составляет ~ 1.6 для $4d - 2p$ -типа переходов. Характерной оказывается тенденция к дальнейшему убыванию вероятности $4d^1D_2 - 2p^1P_1$ -перехода, в то время как вероятность $4d^3D - 2p^3P$ -перехода уже со значения $F=20$ кВ/см остается постоянной. Это объясняется появлением запрещенных по квантовому числу триплетных переходов $4d^3D_2 - 2p^3P_0$, $4d^3D_3 - 2p^3P_0$ и $4d^3D_3 - 2p^3P_1$, вероятности которых уже при $F=20$ кВ/см составляют $\sim 10^6$, и дальнейший их рост компенсирует убывание вероятностей разрешенных триплетных переходов. Вероятности $4s^1S_0 - 2p^1P_1$, $4s^3S - 2p^3P$ и $4p^3P - 2s^3S$ -переходов практически не изменяются при возрастании напряженности поля.

Поведение вероятностей разрешенных переходов подтверждается зависимостью интенсивностей соответствующих линий от величины напряженности поля [9]. Кривые изменения интенсивностей линий имеют несколько больший наклон, чем соответствующие кривые изменения вероятностей. Это понятно, если учесть, что запрещенный переход, начинающийся с того же уровня, приводит к дополнительному разрушению его. Следовательно, интенсивность разрешенной линии уменьшается также за счет уменьшения заселенности верхнего уровня и тем сильнее, чем больше вероятность соответствующего запрещенного перехода. Для разрешенной линии $4s^3S - 2p^3P$ вероятность перехода не изменяется, а вероятность запрещенного $4s^3S - 2s^3S$ -перехода при $F=60$ кВ/см составляет $\sim 10^4 \text{с}^{-1}$. Поэтому интенсивность линии для перехода $4s^3S - 2p^3P$ не должна изменяться с ростом напряженности поля. Этот вывод хорошо

подтверждается экспериментом [9]. Аналогичный результат получается и для линии синглетного перехода $4s^1S_0-2p^1P_1$.

Изменение вероятностей запрещенных синглетных и триплетных переходов иллюстрируется рис. 3, 4 соответственно. Наряду с незначительным убыванием вероятностей разрешенных переходов для запрещенных переходов вначале характерно резкое возрастание вероятностей с увеличением напряженности поля. Вероятности синглетных переходов на порядок больше вероятностей триплетных переходов, причем зависимость их от напряженности не обязательно квадратичная. Для переходов $4f^3F-2p^3P$ и $4f^1F_3-2p^1P_1$ кривая изменения вероятности стремится к насыщению, которое для $4f^1F_3-2p^1P_1$ -перехода наступает при $F=40$ кВ/см; далее вероятность начинает убывать. Вместе с этим вероятность $4p^1P_1-2p^1P_1$ -перехода становится сравнимой с вероятностью $4f^1F_3-2p^1P_1$ -перехода. Заметной величины достигают вероятности $4f^1F_3-2s^1S_0$ - и $4d^1D_2-2s^1S_0$ -переходов. Эти особенности поведения вероятностей запрещенных синглетных переходов сказываются на интенсивностях соответствующих линий, что подтверждается экспериментом [9]. Для триплетов аналогичная ситуация произойдет, видимо, при больших значениях напряженности.

Исходя из формулы (1), точки насыщения возможны и для других переходов, кроме $4f-2p$, для которого может произойти и вторичное возрастание вероятности перехода. С возрастанием напряженности поля вероятности переходов, а следовательно, и интенсивность излучения атома перераспределяются по спектру.

Литература

- [1] J. Koch. Ann. Phys., 48, 98, 1915.
- [2] J. Stark. Ann. Phys., 56, 577, 1918.
- [3] А. М. Янчарина, И. И. Муравьев. Опт. и спектр., 39, 223, 1975.
- [4] E. Schrodinger. Ann. Phys., 80, 457, 1926.
- [5] N. Ryde. Z. Phys., 111, 682, 1938.
- [6] T. Gustavson. Z. Phys., 106, 709, 1937.
- [7] J. Foster. Proc. Roy. Soc., A117, 137, 1927.
- [8] J. Dewey. Phys. Rev., 28, 1108, 1926.
- [9] А. М. Янчарина, И. И. Муравьев. № 2655-74 Деп. от 10 октября 1974 г.
- [10] J. Lennard-Jones. Proc. Roy. Soc., A129, 598, 1930.
- [11] П. Ф. Груздев. Опт. и спектр., 22, 169, 1967.
- [12] Г. Грим. Спектроскопия плазмы. «Мир», М., 1967.
- [13] W. Wiese, M. Smith, B. Glennon. Atomic Transition Probabilities. Washington, NSRDS-NBS, 1966.

Поступило в Редакцию 22 января 1976 г.