

## КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

УДК 539.194.01

РАСЧЕТЫ ФАКТОРОВ ФРАНКА—КОНДОНА  
С ВОЛНОВЫМИ ФУНКЦИЯМИ ПОТЕНЦИАЛА РКР

О. П. Шадрин

В настоящее время для исследования распределения относительных интенсивностей в спектрах двухатомных молекул все шире используются потенциальные кривые, полученные методом Ридберга—Клейна—Риса РКР. Расчеты эти связаны с численным интегрированием уравнения Шредингера, процедура счета довольно громоздка и требует большого машинного времени.

Затруднений этих можно избежать, если использовать потенциал РКР [1] для построения приближенных волновых функций с помощью обобщенного метода ВКБ [2]. Метод этот оправдал себя при счете факторов Франка—Кондона и  $r$ -центroids для не слишком больших колебательных квантовых чисел с кривыми Морзе [3] и Пешля—Теллера [4]. Поэтому можно ожидать достаточно точных результатов и при счете с кривыми РКР.

Будем измерять все энергетические величины в обратных сантиметрах, а расстояния в ангстремах, тогда уравнение Шредингера запишется так:

$$\frac{d^2\psi_v}{dr^2} + k [E_v - U(r)] \psi_v = 0, \quad (1)$$

где  $U(r)$  — РКР потенциал,  $k = 8\pi^2 \mu c \text{Å}^2 / h$ ,  $c$  — скорость света,  $h$  — постоянная Планка,  $\mu$  — приведенная масса.

Разобьем кривую РКР на сегменты, содержащие по четыре поворотные точки, каждый сегмент будем интерполировать степенным полиномом вида

$$U_i(r) = A_i + B_i r + C_i r^2 + D_i r^3. \quad (2)$$

коэффициенты которого будем находить как коэффициенты полинома Лагранжа, проходящего через четыре точки. Слева и справа кривую РКР можно продлить, как это предложено в работе [5]. Однако, как показали расчеты, для  $v'$ ,  $v'' \leq 9$  эти участки с успехом можно заменить кривыми Пешля—Теллера или Морзе.

Отрезок кривой РКР между поворотными точками нулевого энергетического уровня следует интерпретировать наиболее аккуратно. Для этой цели используем кривую Данхема

$$U(x) = a_0 x^2 (1 + a_1 x + a_2 x^2 + \dots), \quad (3)$$

где  $x = (r - r_e) / r_e$ ,  $a_0 = \omega_e^2 / 4B_e$ ,  $a_1 = -1 - a_e \omega_e / 6B_e^2$ ,  $a_2 = (5/4) a_1^2 - 2(\omega_e x_e) / 3B_e$ ,  $a_e$  — вращательная постоянная.

В качестве базиса, используемого для построения приближенных решений уравнения (1) с помощью нулевого приближения обобщенного метода ВКБ, выберем точные решения волнового уравнения

$$\frac{d^2\varphi_v}{ds^2} + (\lambda_v - s^2) \varphi_v = 0, \quad (4)$$

здесь  $s = \sqrt{k\omega_e} (r - r_e)$ ,  $\omega_e$  — собственная частота колебаний двухатомной молекулы,  $r_e$  — равновесное расстояние.

Собственные значения и нормированные собственные функции уравнения (4) имеют вид

$$\lambda_v = 2v + 1; \quad \varphi_v(s) = N_v^* \exp\left(-\frac{1}{2}s^2\right) H_v(s); \quad v = 0, 1, 2 \dots \quad (5)$$

где  $N_v^* = (\sqrt{2^v v!} \sqrt{\pi})^{-1}$ ;  $H_v(s)$  — полиномы Эрмита.

Приближенные решения уравнения (1) запишутся

$$\psi_v(r) = N_v (s'(r))^{-1/2} \exp\left(-\frac{1}{2} s^2(r)\right) H_v(s(r)). \quad (6)$$

Нормирующий множитель  $N_v$  определяется условием

$$N_v^2 \int_{r_1}^{r_2} \frac{dr}{\sqrt{k[E_v - U(r)]}} = (N_v^*)^2 \int_{s_1}^{s_2} \frac{ds}{\sqrt{2v+1-s^2}}, \quad (7)$$

здесь  $r_{1,2}$  — поворотные точки РКР,  $s_{1,2}$  — поворотные точки моделирующего потенциала

$$s_{1,2} = \mp \sqrt{2v+1}. \quad (8)$$

Производная  $s'(r)$  равна

$$s'(r) = \left[ \frac{k(E_v - A_i - B_i r - C_i r^2 - D_i r^3)}{2v+1-s^2} \right]. \quad (9)$$

Функция преобразования  $s(r)$  определяется уравнением

$$\int_{r_1}^r \sqrt{k[E_v - U(r)]} dr = \int_{s_1}^s \sqrt{2v+1-s^2} ds, \quad (10)$$

где  $E_v$  — уровни энергии РКР.

Выполнив в (10) интегрирование, справа получим для  $s(r)$

а) при  $r_1 \leq r \leq r_2$  и  $s_1 \leq s \leq s_2$

$$\begin{aligned} & s \sqrt{2v+1-s^2} + (2v+1) \arcsin s / \sqrt{2v+1} = \\ & = \int_{r_1}^r \sqrt{k(E_v - A_i - B_i r - C_i r^2 - D_i r^3)} dr - (2v+1) \pi/2; \end{aligned} \quad (11a)$$

б) при  $r_1 \geq r \geq r_2$  и  $s_1 \geq s \geq s_2$

$$\begin{aligned} & s \sqrt{s^2 - 2v - 1} - (2v+1) \ln |s + \sqrt{s^2 - 2v - 1}| = \\ & = \int_{r_1}^r \sqrt{k(E_v - A_i - B_i r - C_i r^2 - D_i r^3)} dr - (2v+1) \ln \sqrt{2v+1}. \end{aligned} \quad (11b)$$

Полученные таким образом волновые функции можно использовать для расчета факторов Франка—Кондона

$$q(v', v'') = \left[ \int_0^\infty \psi_{v'}(r) \psi_{v''}(r) dr \right]^2, \quad (12)$$

и  $r$ -центрорид

$$\bar{r}_{v'v''} = \left[ \int_0^\infty \psi_{v'}(r) r \psi_{v''}(r) dr \right] \left[ \int_0^\infty \psi_{v'}(r) \psi_{v''}(r) dr \right]^{-1}. \quad (13)$$

При численном интегрировании выражений (12), (13) с волновыми функциями (6) для каждого шага интегрирования требуется находить решения трансцендентного уравнения (11a) или (11b). Чтобы избежать этого, функцию преобразования  $s(r)$  можно аппроксимировать простыми полиномами, как это сделано в [3, 4]. Кроме того, чтобы обойти особые точки при счете производных, точное выражение (9) можно заменить аналогичными полиномами, учитывая, что при  $r = r_{1,2}$  и  $s = s_{1,2}$

$$s'(r) = \left[ \frac{dU}{dr} \frac{dW}{ds} \right]^{1/2}, \quad (14)$$

где  $W$  — моделирующий потенциал. Так что для поворотных точек  $r_{1,2}$  в явном виде будем иметь

$$s'(r) = \left[ \frac{B_i + 2C_i r + 3D_i r^2}{\mp 2 \sqrt{2v+1}} \right]_{r=r_{1,2}}^{1/2} \quad (15)$$

Факторы Франка-Кондона и  $R$ -центroids полосы  $A^2\Pi_u - X^2\Pi_g$  молекулы  $O_2^+$

(6) (7) (8)

$v'$	0	1	2	3	4	5	6	7
0	{ 1.278-3 1.307	{ 1.743-4 1.277	{ 8.229-4 4.286	{ 3.561-3 1.300	{ 1.200-2 1.316	{ 3.066-2 1.332	{ 6.559-2 1.350	{ 1.416-1 1.368
1	{ 5.130-3 1.294	{ 1.066-3 1.286	{ 4.499-3 1.276	{ 4.607-2 1.290	{ 4.223-2 1.305	{ 7.939-2 1.321	{ 1.416-1 1.338	{ 4.072-1 1.356
2	{ 4.069-2 1.279	{ 3.342-3 1.257	{ 4.252-2* 1.267	{ 3.651-2 1.280	{ 7.283-2 1.295	{ 9.453-2 1.311	{ 7.347-2 1.327	{ 2.162-2 1.342
3	{ 1.598-2 1.265	{ 7.236-3 1.248	{ 2.390-2 1.258	{ 5.634-2 1.272	{ 8.256-2 1.286	{ 6.635-2 1.301	{ 1.702-2 1.314	{ 2.938-3 1.349
4	{ 2.095-2 1.250	{ 4.362-2 1.239	{ 3.854-2 1.250	{ 6.997-2 1.263	{ 6.766-2 1.277	{ 2.326-2 1.290	{ 4.030-3 1.330	{ 3.734-2 1.329
5	{ 2.420-2 1.236	{ 2.111-2 1.231	{ 5.071-2 1.242	{ 6.888-2 1.255	{ 3.827-2 1.268	{ 9.858-4 1.266	{ 2.261-2 1.305	{ 4.845-2 1.318
6	{ 2.636-2 1.224	{ 2.880-2 1.224	{ 5.786-2 1.234	{ 5.608-2 1.247	{ 4.288-2 1.258	{ 5.370-3 1.286	{ 4.063-2 1.294	{ 2.555-2 1.307
7	{ 2.810-2 1.213	{ 3.623 1.216	{ 5.923-2 1.227	{ 3.720-2 1.239	{ 7.047-4 1.234	{ 2.483-2 1.273	{ 3.669-2 1.285	{ 3.114-3 1.290

Примечание. Звездочка — факторы Франка-Кондона — верхняя строка,  $R$ -центroids — нижняя строка.

В настоящей работе предлагаемый метод использован для расчета факторов Фраунка—Кондона и  $g$ -центроид полосы  $A^2\Pi_u - X^2\Sigma_g$  молекулярного иона  $O_2^+$ . Данные по кривым РКР взяты из работы [6]. Результаты счета представлены таблицей. Анализ таблицы показывает, что результаты вычислений по кривым РКР существенно отличаются от аналогичных результатов, вычисленных по кривым Морае.

#### Литература

- [1] R. Rydberg, Zs. Phys., 73, 376, 1931; O. Klein, Zs. Phys., 76, 226, 1932; A. L. Rees, Proc. Phys. Soc., A59, 998, 1947.
- [2] М. И. Петрашень, ДАН СССР, 50, 147, 1945; Уч. зап. ЛГУ, сер. физ., вып. 7, 59, 1949.
- [3] О. П. Шадрин, Н. И. Жирнов, Опт. и спектр., 34, 590, 1973.
- [4] О. П. Шадрин, Н. И. Жирнов, Опт. и спектр., 38, 648, 1975.
- [5] R. N. Zare, J. Chem. Phys., 40, 1934, 1964.
- [6] N. L. Singh, D. K. Rai, J. Mol. Spectr., 19, 424, 1966.

Поступило в Редакцию 25 апреля 1975 г.  
В окончательной редакции 11 марта 1977 г.

УДК 533.9

### О ВОССТАНОВЛЕНИИ ФУНКЦИИ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ МИКРОПОЛЯ ПЛАЗМЫ ПО КОНТУРУ ЛИНИИ $H_3$

А. Е. Бульшев и Н. Г. Преображенский

Вычислениям распределения внутриплазменного электрического поля  $W(E)$ , часто называемого также микрополем плазмы, посвящено большое число работ (см., например, [1, 2]).  $W(E)$  практически всегда находят с помощью прямых теоретических расчетов на основе той или иной статистической модели. Естественный интерес вызывает и задача восстановления функции распределения микрополя плазмы (ФРМП) непосредственно из эксперимента, в частности по характеристикам водородного спектра. До недавнего времени, однако, на этом пути вставали серьезные препятствия. Они были обусловлены рядом причин: известной незавершенностью теории контура линии  $H_3$  (особенно перспективной с точки зрения указанной задачи), недостаточно высокой точностью регистрации контура, пространственной неоднородностью плазмы вдоль луча наблюдения, наконец, неустойчивостями алгоритма решения основного уравнения.

В настоящее время достигнут значительный прогресс в теории контура линии  $H_3$  [3, 4], выполнен ряд прецизионных экспериментов, хорошо согласующихся с теорией [5, 8], наконец, найдены эффективные способы регуляризации решения [11, 13]. В результате появилась реальная возможность восстановления ФРМП по линии  $H_3$ .

Будем рассматривать равновесную водородную плазму с температурой  $T=1\div 2$  эВ и концентрацией электронов  $N_e=10^{16}\div 10^{18}$  см<sup>-3</sup>. В этих условиях уширение контура балмеровской линии электронами можно рассчитывать в ударном, а уширение ионами — в квазистатическом приближениях [2]. Требуется решить уравнение Фредгольма 1-го рода

$$\frac{\gamma}{2\pi} \sum_k N_k I_k \int_0^\infty \frac{W(\beta) d\beta}{(\omega - \omega_0 - C_k \beta)^2 + \gamma_e^2/4} = I(\omega) - \Delta I_1(\omega) - \Delta I_2(\omega). \quad (1)$$

Здесь  $\Delta I_1$  и  $\Delta I_2$  — соответственно поправки на нестатичность поля ионов и его неоднородность на размерах атома к «экспериментальному» контуру  $I(\omega)$ , содержащему случайную погрешность измерений.  $N_k$ ,  $I_k$  и  $C_k$  — заселенности верхних подуровней, индивидуальные интенсивности и коэффициенты смещения штарковских компонентов линии,  $\omega_0$  — частота центра линии,  $\gamma_e$  — электронная ударная полуширина,  $\beta = E/E_0$  — безразмерное электрическое поле,  $E_0 = 2.6eN_e^{2/3}$ .  $W(\beta)$  — искомая ФРМП, проинтегрированная по угловым переменным. Величины  $N_k$  находятся в приближении ЛТР,  $I_k$  и  $C_k$  были вычислены еще Шредингером [2],  $\gamma_e$  определяется по формуле

$$\gamma_e = 16N_e \langle v_e \rangle \rho_0^2 \left( 0.33 + \ln \frac{\rho_D}{\rho_0} \right), \quad (2)$$

где

$$\langle v_e \rangle = \left( \frac{8kT}{\pi m} \right)^{1/2}, \quad \rho_0^2 = \frac{2}{9} \frac{\hbar^2}{m^2 \langle v_e \rangle^2} (n^5 + n'^5),$$