

$$\tilde{f}(r) = \begin{cases} (r - r_0) e^{-\left(\frac{r-r_0}{s}\right)^3} & \text{при } r \geq r_0, \\ 0 & \text{при } r < r_0 \end{cases} \quad (7)$$

($r_0 = 0.25$ и $s = 3.25$),

Очевидно, что зависимость $\bar{N}(t)$ для приведенной модельной функции будет получена при подстановке (7) в (3), при этом для упрощения полагалось, что $D = 1/r^3$. (Для реальных коллоидных частиц зависимость $D(r)$ отличается от выбранной только постоянным множителем). Моделирование погрешности эксперимента было осуществлено сложением зависимости $\bar{N}(t)$ со случайной функцией.

На рис. 1 приведены результаты, полученные при решении уравнения (3) методом регуляризации. Расчеты были выполнены для значений $\bar{N}(t)$, квадратный корень дисперсии которой составлял 5 и 10% от ее величины. Как видно из рис. 1, полученные решения уравнений (3) вполне удовлетворительно согласуются с выбранной модельной функцией (7). Обратимся теперь к экспериментальным результатам, полученным при исследовании субмикронных кристаллических частиц аницилиденбензидина в воде, а также водной суспензии графита. Для исследованных коллоидов были измерены значения интенсивностей света $I_{\parallel}(t)$ и $I_{\perp}(t)$, построены зависимости $N(t)$ и определены, таким образом, функции $f(r)$. Полученные результаты представлены на рис. 2.

Литература

- [1] Н. А. Толстой, П. П. Феофилов. ДАН СССР, 66, 617, 1949.
- [2] Н. А. Толстой, А. А. Спартаков, А. А. Трусов. Опт. и спектр., 19, 826, 1965.
- [3] А. А. Спартаков, Н. А. Толстой, А. А. Трусов. Опт. и спектр., 20, 535, 1966.
- [4] Н. А. Толстой, А. А. Спартаков, А. А. Трусов. Опт. и спектр., 21, 771, 1966.
- [5] Н. А. Толстой, А. А. Спартаков, Г. И. Хилько. Коллоид. ж., 22, 705, 1960.
- [6] Н. А. Толстой, Э. Л. Китаница, А. А. Трусов, Е. В. Рудакова, А. А. Спартаков. Коллоид. ж., 35, 497, 1973.
- [7] Н. А. Толстой, В. В. Войтылов, Е. В. Рудакова, А. А. Спартаков, А. А. Трусов. Коллоид. ж., 37, 306, 1975.
- [8] В. В. Войтылов, А. А. Трусов. Коллоид. ж., 39, 258, 1977.
- [9] Н. А. Толстой, А. А. Спартаков, А. А. Трусов. Коллоид. ж., 29, 584, 1967.
- [10] М. А. Леонтьевич. Статистическая физика, 242. ОГИЗ, М., 1944.
- [11] А. Н. Тихонов, В. Я. Арсенин. Методы решения некорректных задач. «Наука», М., 1974.

Поступило в Редакцию 6 июля 1977 г.

УДК 539.184 : 546.46-128

ВЕРОЯТНОСТИ ПЕРЕХОДОВ $2p^5 np - 2p^5 ms$ ($n=3, 4$; $m=3, 4, 5$) В СПЕКТРЕ ДВУКРАТНО ИОНИЗОВАННОГО МАГНИЯ

П. Ф. Груздев и А. В. Логинов

Ранее [1] нами были рассчитаны радиационные времена жизни τ 92 уровней спектра Mg III. Значения $\tau_{\text{расч.}}$ работы [1] были получены на основе метода промежуточной схемы связи как в одно, так и многоконфигурационном приближениях с использованием функций Харти-Фока. Расчет показал, что влияние наложения конфигураций в случае иона Mg III незначительно — величины τ , полученные в одно и многоконфигурационном приближениях близки друг к другу. В недавней работе Андерсена с сотрудниками [2] методом луч-вольговой спектроскопии получены $\tau_{\text{эксп.}}$ для уровней $2p^5 3p$ Mg III. Эксперимент очень хорошо подтверждает $\tau_{\text{расч.}}$ [1] для этих уровней. Мы считаем, что и для большинства остальных уровней спектра Mg III $\tau_{\text{расч.}}$ [1] будут хорошо соответствовать надежным значениям $\tau_{\text{эксп.}}$.

Получить достоверные теоретические значения вероятностей переходов с такой же точностью значительно сложнее. Это обусловлено тем, что радиационное время жизни уровня, определяемое через обратную величину суммарной вероятности переходов с этого уровня, мало чувствительно к погрешности вычисления вероятностей слабых переходов. Чтобы получить надежные значения вероятностей для всей совокупности переходов между двумя конфигурациями необходимо знать волновые функции для этих конфигураций с высокой точностью. Как показал опыт работы по определению

вероятностей переходов в спектре неона [4] хорошие результаты при нахождении этих констант дает полуэмпирический метод эффективных операторов.

В настоящей работе этот метод используется при определении вероятностей переходов $2p^5np - 2p^5ms$ ($n=3, 4$; $m=3, 4, 5$) в спектре второго иона магния Mg III. Вычисления проводятся в одноконфигурационном приближении. Это оправдано результатом работы [1], в которой показано, что наложение конфигураций в спектре Mg III составляет доли процента. В качестве параметров для интересующих нас конфигураций $2p^5nl$ рассматриваются электростатические интегралы F_{pl}^k , G_{pl}^k и спин-орбитальные константы ξ_{2p} , ξ_{nl} . При $l \neq 0$ добавляются эффективные параметры F_1 , G_1 [4]. Экспериментальные значения уровней энергии E взяты из работы [3].

Результаты расчета представлены в табл. 1—3. В табл. 1 приводятся значения параметров, а в табл. 2 — волновые функции промежуточной схемы связи, полученные с этими значениями параметров. Для обозначения уровней в промежуточной схеме связи в табл. 2 использованы обозначения, принятые в работе [3].

Таблица 1

Параметры (см^{-1}) для конфигураций $2p^5np'$ ($n=3, 4$), $2p^5ms$ ($m=3-5$)

	$2p^53p'$	$2p^54p'$	$2p^53s$	$2p^54s$	$2p^55s$
F_0^2	482 279.0	565 044.7	433 736.9	548 654.6	590 398.8
$F_{pp'}^2$	182 27.5	5 762.2	—	—	—
$G_{pp'}^0$	4747.1	1 615.7	—	—	—
G_{ps}^1	—	—	7359.0	2 096.2	891.5
$G_{pp'}^2$	5 926.1	1 964.8	—	—	—
ξ_{2p}	1 474.1	1 480.0	1 474.5	1 476.0	1 476.9
$\xi_{np'}$	122.6	40.8	—	—	—
F_1	1 383.8	418.3	—	—	—
G_1	-984.8	-539.0	—	—	—
ΔE	2.8	2.1	0.2	0.0	0.1

Таблица 2

Волновые функции промежуточной связи для конфигураций $2p^5np$ ($n=3, 4$), $2p^5ms$ ($m=3-5$)

	LS-связь					
	1S	1P	1D	3S	3P	3D
Промежуточная связь	$^1\tilde{S}_0$	$3p^1S_0$	0.998			0.157
		$4p' [1/2]_0$	0.984			0.178
	$^3\tilde{P}_0$	$3p^3P_0$	-0.057			0.198
		$4p^1[1/2]_0$	-0.178			0.194
		$3s^1P_1$		0.973		0.230
		$4s' [1/2]_1$		0.807		0.391
	$^1\tilde{P}_1$	$5s^1P_1$	0.731			-0.582
		$3p^1P_1$	0.811			-0.508
		$4p^1[3/2]_1$	0.571			0.781
	$^3\tilde{S}_1$	$3p^3S_1$	0.045			0.107
		$4p^1[1/2]_1$	0.126			0.190
		$3s^3P_1$	-0.230			0.373
		$4s^1[3/2]_1$	-0.591			0.207
	$^3\tilde{P}_1$	$5s^3P_1$	0.682			0.231
		$3p^3P_1$	0.536			-0.029
		$4p' [1/2]_1$	0.516			0.524
	$^3\tilde{D}_1$	$3p^3D_1$	-0.230			0.178
		$4p^3[3/2]_1$	-0.626			0.547
	$^1\tilde{D}_2$	$3p^1D_2$		0.804		0.572
		$4p^3[3/2]_2$		0.646		-0.542
	$^3\tilde{P}_2$	$3p^3P_2$		-0.518		0.808
		$4p^3[3/2]_2$		0.579		0.517
	$^3\tilde{D}_2$	$3p^3D_2$		-0.294		0.141
		$4p^5[5/2]_2$		-0.497		0.235

Таблица 3
Вероятности переходов (10^7с^{-1}) $2p^6 np - 2p^5 ms$ ($n=3,4$; $m=3,4,5$) в спектре MgIII

Переход	$3p \rightarrow 3s$	$4s \rightarrow 3p$	$5s \rightarrow 3p$	$4p \rightarrow 3s$	$4p \rightarrow 4s$	$5s \rightarrow 4p$
$np' [1/2]_0 - ms' [1/2]_1$	99.2	3.99	1.56	6.46	13.2	1.10
— $ms' [3/2]_1$	3.82	1.48	1.34	0.02	4.19	0.45
$np [1/2]_0 - ms' [1/2]_1$	1.26	3.84	2.32	0.02	1.21	1.27
— $ms' [3/2]_1$	53.2	8.29	2.40	6.30	7.54	1.79
$np' [3/2]_1 - ms' [1/2]_0$	12.8	30.6	11.6	3.38	3.91	17.0
— $ms' [1/2]_1$	23.5	15.2	3.78	2.30	2.78	4.40
— $ms' [3/2]_1$	3.35	10.5	5.78	0.27	0.03	0.28
$ms [3/2]_2$	4.33	1.65	0.65	0.05	0.07	0.03
$np [1/2]_1 - ms' [1/2]_0$	1.96	15.2	4.90	0.26	0.13	2.29
— $ms' [1/2]_1$	0.11	4.90	2.57	0.001	0.07	1.07
$ms [3/2]_1$	7.17	12.1	2.98	1.33	0.82	
— $ms' [3/2]_2$	17.4	21.1	7.00	4.25	3.41	5.62
$np' [1/2]_1 - ms' [1/2]_0$	15.0	32.1	12.4	2.21	2.74	10.5
— $ms' [1/2]_1$	16.4	18.9	7.05	2.20	3.50	5.28
— $ms' [3/2]_1$	5.60	0.08	0.09	0.89	0.11	0.01
— $ms' [3/2]_2$	13.1	4.50	1.80	0.81	1.40	0.56
$np [3/2]_1 - ms' [1/2]_0$	15.3	49.2	17.8	0.31	0.27	1.94
— $ms' [1/2]_1$	0.12	2.48	2.10	1.17	0.07	0.02
— $ms' [3/2]_1$	24.2	20.8	6.48	3.57	5.44	8.10
— $ms' [3/2]_2$	3.47	1.78	0.66	0.93	1.17	0.86
$np [3/2]_2 - ms' [1/2]_1$	20.7	22.3	5.02	1.35	0.40	0.63
— $ms' [3/2]_1$	5.18	22.2	11.3	1.12	2.52	6.45
— $ms' [3/2]_2$	17.7	12.4	4.79	3.62	4.72	5.39
$np' [3/2]_2 - ms' [1/2]_1$	17.2	42.2	16.8	3.66	6.17	16.3
— $ms' [3/2]_1$	14.0	2.80	0.09	2.05	0.44	0.01
— $ms' [3/2]_2$	18.0	10.9	4.32	0.26	0.45	0.31
$np [5/2]_2 - ms' [1/2]_1$	0.40	3.31	3.29	0.64	0.01	0.24
— $ms' [3/2]_1$	26.4	43.4	13.7	2.99	3.88	10.8
— $ms' [3/2]_2$	15.9	14.8	5.45	2.39	2.79	3.97
$np [5/2]_3 - ms' [3/2]_2$	43.3	60.1	22.0	6.15	6.79	15.0

Тем самым легко установить соответствие между экспериментальными значениями уровней энергий из работы [8] и волновыми функциями промежуточной связи. При этом только следует помнить, что волновые функции были получены диагонализацией матриц энергии, построенных в схеме LS -связи. Для вычисления абсолютных значений вероятностей переходов используются интегралы переходов из работы [1], рассчитанные по формуле длины диполя на функциях Хартри–Фока.

Результаты расчета вероятностей переходов в спектре Mg III представлены в табл. 3. К настоящему времени пока еще отсутствуют экспериментальные значения для приведенных в табл. 3 вероятностей переходов.

Наконец, приведем вероятности переходов $ms' [1/2]_1 \rightarrow 2p^6$ и $ms [3/2]_1 \rightarrow 2p^6$. При $m=3$ их значения равны соответственно $7.98 \cdot 10^9$ и $0.43 \cdot 10^9 \text{ с}^{-1}$; при $m=4$ — $1.72 \cdot 10^9$ и $0.91 \cdot 10^9 \text{ с}^{-1}$; при $m=5$ — $0.54 \cdot 10^9$ и $0.61 \cdot 10^9 \text{ с}^{-1}$. Практически эти результаты совпадают с вычисленными нами ранее [1, 5].

Литература

- [1] П. Ф. Груздев, А. В. Логинов. Опт. и спектр., 34, 812, 1973.
- [2] T. Andersen, A. Petrákaiev Petkov, G. Sørensen. Phys. Scr., 12, 283, 1975.
- [3] E. Andersson, G. A. Johansson. Phys. Scr., 3, 203, 1971.
- [4] А. В. Логинов, П. Ф. Груздев. Опт. и спектр., 37, 817, 1974.
- [5] П. Ф. Груздев, А. В. Логинов. Опт. и спектр., 33, 1011, 1972.

Поступило в Редакцию 8 июля 1977.