

ВЕРОЯТНОСТИ ПЕРЕХОДОВ АТОМА ГЕЛИЯ В ПОСТОЯННОМ ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ПОЛЕ

В. П. Дёмкин, А. М. Янчина и И. И. Муравьев

Проведены расчеты вероятностей спонтанных переходов типа $5l-2l'$ атома гелия в постоянном электрическом поле для интервала напряженностей $0-100$ кВ/см. Для описания состояний $5f$ - и $5g$ -конфигураций использовались два типа связи: jK и LS . Состояния $5s$, $5p$ и $5d$ описывались в LS -связи. Установлено, что с ростом напряженности поля вероятности разрешенных переходов существенно уменьшаются, в то время как вероятности запрещенных переходов достигают порядка величины вероятностей разрешенных переходов. Результаты расчета и экспериментальные данные согласуются между собой.

Взаимодействие атомов с электрическим полем приводит не только к расщеплению спектральных линий, но и к перераспределению интенсивности излучения по спектру. Последнее проявляется в том, что с ростом напряженности поля заметно уменьшаются интенсивности разрешенных спектральных линий. Кроме того, появляются запрещенные правилами отбора линии, отсутствующие в спектре изолированного атома. Интенсивность их в ряде случаев уже при малых напряженностях поля сравнима с интенсивностью разрешенных линий. Это обстоятельство представляет интерес при решении многих задач спектроскопии.

Квантовая механика позволяет объяснить изменение интенсивности излучения за счет изменения вероятностей переходов в электрическом поле. В работе [1] исследовано поведение вероятностей переходов типа $4l-2l'$ атома гелия в постоянном электрическом поле. Настоящая работа посвящена расчету вероятностей переходов $5l-2l'$.

Волновые функции возмущенного атома определялись из диагонализации матрицы энергии, в которую включались уровни только с равным главным квантовым числом n . Матричные элементы, связывающие состояния с различными n , не учитывались ввиду их малой величины. Радиальные интегралы вычислялись в кулоновском приближении. Тип связи для описания возбужденных состояний определялся из следующих соображений. Известно, что увеличение энергии возбуждения внешнего электрона уменьшает обменный член электростатического взаимодействия, который может оказаться меньше спин-орбитального взаимодействия, что обуславливает изменение порядка сложения моментов, а значит и тип связи. Это условие, когда нарушается LS -связь, обычно выполняется для $|l'-l| \geq 2$, где l' и l — орбитальные квантовые числа внешнего и основного электрона соответственно [2, 3]. Имеется также ряд экспериментальных и теоретических работ [4-6] по исследованию процессов переноса возбуждения в гелии, где указывается на сильное синглет-триплетное смешивание конфигурации nf для $n \geq 4$. Для конфигураций $5f$ и $5g$, если учесть, что обменный член электростатического взаимодействия меньше спин-орбитального, можно подобрать два типа связи, при которых происходит почти полное смешивание синглетных и триплетных состояний в этих конфигурациях.

Это jK -тип связи, для которого необходимо выполнение неравенств

$$H_{sl}(l_2) \gg F(l_2, l_1) \gg G(l_2, l_1), \quad (1)$$

где $H_{sl}(l_2)$ — спин-орбитальное взаимодействие внешнего электрона; $F(l_2, l_1)$ и $G(l_2, l_1)$ — прямой (без сферически-симметричной части) и обменный члены электростатического взаимодействия. Тогда порядок сложения моментов будет следующим:

$$I_2 + s_2 = J_0, \quad J_0 + I_1 = K, \quad K + s_1 = J, \quad (2)$$

и LK -тип связи, для которого

$$F(l_2, l_1) \gg H_{sl}(l_2) \gg G(l_2, l_1), \quad (3)$$

а следовательно,

$$I_2 + I_1 = L, \quad L + s_2 = K', \quad K' + s_1 = J. \quad (4)$$

Так как для гелия $l_1=0$, поэтому $K=K'$ и эти два типа связи оказываются эквивалентными. Используя формулы преобразования между

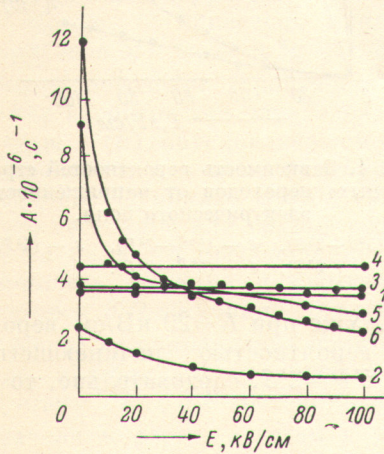


Рис. 1. Зависимость вероятностей разрешенных переходов от напряженности электрического поля.

1 — (5^1S-2^1P) , 2 — (5^1P-2^1S) , 3 — (5^1D-2^1P) , 4 — (5^3S-2^3P) , 5 — (5^3P-2^3S) , 6 — (5^3D-2^3P) .

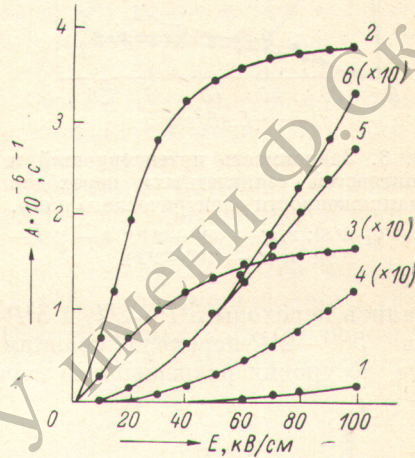


Рис. 2. Зависимость вероятностей запрещенных переходов от напряженности электрического поля.

1 — (5^1S-2^1S) , 2 — (5^1P-2^1P) , 3 — (5^1D-2^1S) , 4 — (5^3S-2^3S) , 5 — (5^3P-2^3P) , 6 — (5^3D-2^3S) .

типами связи из работы [7], для волновой функции в jK -связи получаем следующее выражение:

$$\Psi(jK) = \sum_s (-1)^s \sqrt{(2K+1)(2S+1)} \times \begin{Bmatrix} L & 1/2 & K \\ 1/2 & J & S \end{Bmatrix} \Psi(LS), \quad (5)$$

где $\Psi(LS)$ — волновая функция в представлении LS -типа связи.

Таким образом, при вычислении матричных элементов волновые функции для $5s$ -, $5p$ -, $5d$ -состояний брались в представлении LS -связи, а для $5f$ - и $5g$ -состояний — в jK -связи. Напряженность поля изменялась от 0 до 100 кВ/см с шагом 10 кВ/см.

Результаты расчета представлены на рис. 1—4. На рис. 1 приведены кривые изменения вероятностей разрешенных переходов в зависимости от напряженности электрического поля. С ростом напряженности поля заметно убывает вероятности 5^1P-2^1S ($\lambda=361.4$ нм), 5^1D-2^1P ($\lambda=438.7$ нм) и 5^3D-2^3P ($\lambda=402.6$ нм) переходов; для последнего перехода в интервале 0—100 кВ/см вероятность убывает в шесть раз.

Вероятности переходов 5^1S-2^1P и 5^3S-2^3P практически не изменяются; это говорит о том, что состояния 5^1S и 5^3S мало подвержены влиянию электрического поля.

На рис. 5 кривые 1 и 2 показывают изменение интенсивности линий 438.7 и 402.6 нм с ростом напряженности поля. Из сравнения рис. 1 и 5

видно, что изменение интенсивностей этих линий хорошо согласуется с изменением вероятностей соответствующих переходов.

На рис. 2 изображены зависимости вероятностей запрещенных переходов от напряженности электрического поля. Наиболее интенсивными

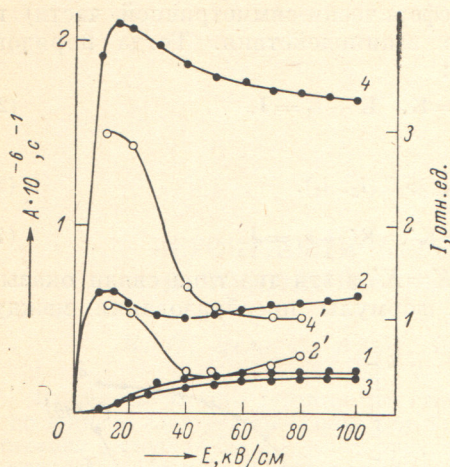


Рис. 3. Зависимость интенсивностей и вероятностей «синглетных» переходов от напряженности электрического поля.

1 — (5^1G-2^1S); 2, 2' — (5^1G-2^1P); 3 — (5^1F-2^1S); 4, 4' — (5^1F-2^1P).

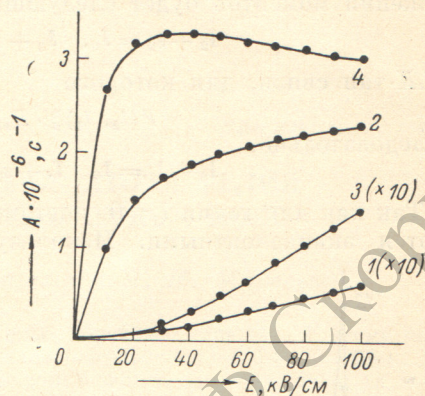


Рис. 4. Зависимость вероятностей «триплетных» переходов от напряженности электрического поля.

1 — (5^3G-2^3S); 2 — (5^3G-2^3P); 3 — (5^3F-2^3S); 4 — (5^3F-2^3P).

оказались переходы 5^1P-2^1P и 5^3P-2^3P . Уже при $E=20$ кВ/см вероятность 5^1P-2^1P -перехода сравнима с вероятностью начинающегося с того же уровня разрешенного перехода 5^1P-2^1S , следовательно, то же

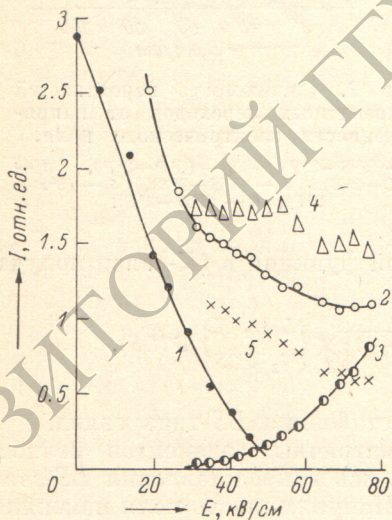


Рис. 5. Зависимость интенсивностей спектральных линий от напряженности электрического поля.

1 — (5^1D-2^1P), 2 — (5^3D-2^3P), 3 — (5^3P-2^3P), 4 — (5^3F-2^3P), 5 — (5^3G-2^3P),

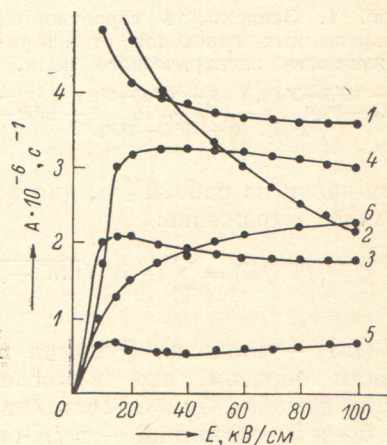


Рис. 6. Вероятности переходов, рассчитанные в предположении LS -связи для возбужденных состояний.

1 — (5^1D-2^1P), 2 — (5^3D-2^3P), 3 — (5^1F-2^1P), 4 — (5^3F-2^3P), 5 — (5^1G-2^1P), 6 — (5^3G-2^3P).

можно сказать и об интенсивностях этих линий. Несколько медленнее растет вероятность триплетного 5^1P-2^1P запрещенного перехода. Порядок вероятностей разрешенных переходов достигается при $E \approx 50$ кВ/см. Ход этой кривой качественно подтверждает поведение интенсивности соответствующей линии в электрическом поле (кривая 3 на рис. 5). Вероят-

ности переходов типа $5s-2s$ и $5d-2s$ на порядок ниже вероятностей $5p-2p$ -переходов.

Переходы с конфигурацией $5f$ и $5g$ иллюстрируются рис. 3 и 4. Следует заметить, что переходы $5f-2s$, $2p$ и $5g-2s$, $2p$ разрешаются за счет примеси к состояниям $5f$ и $5g$ состояний $5s$, $5p$ и $5d$. Результаты расчетов показали, что, хотя конфигурации $5f$ и $5g$ описываются jK -типом связи и в общем случае в присутствии поля должны иметь примесь как синглетных, так и триплетных состояний $5s$, $5p$ и $5d$ конфигураций, из четырех состояний каждой конфигурации $5f$ или $5g$ можно выделить одно, которое содержит максимальные примеси синглетных состояний $5s$, $5p$ и $5d$ конфигураций, а в оставшихся трех состояниях преобладают примеси триплетных состояний этих трех конфигураций. В соответствии с этим мы ввели обозначение ${}^1\bar{F}$, ${}^1\bar{G}$ для состояний с максимальной примесью 1S , 1P , 1D , и ${}^3\bar{F}$, ${}^3\bar{G}$ для состояний с максимальной примесью триплетов $5s$, $5p$ и $5d$ конфигураций.

На рис. 3 приведены кривые изменения вероятностей «синглетных» переходов $5f-2s$, $2p$ и $5g-2s$, $2p$. Важной особенностью является немонотонное поведение вероятностей $5{}^1\bar{F}-2{}^1P$ - и $5{}^1\bar{G}-2{}^1P$ -переходов. Изменение вероятностей переходов, в том числе и появление немонотонностей в ходе $A(E)$, обусловлено тем, что возмущенная волновая функция атома в электрическом поле приобретает характеристики всех невозмущенных волновых функций. В этой суперпозиции могут преобладать какое-либо одно состояние или группа состояний, причем при изменении напряженности поля это преобладание может меняться. В данном случае анализ волновых функций показывает, что в области 15 кВ/см коэффициент примеси $5{}^1D$ -состояния для $|M|=0,1$ (M — проекция полного углового момента на направление поля) в $5{}^1\bar{G}$ -состоянии имеет максимальное значение, а затем начинает убывать наряду с возрастанием коэффициентов примеси $5{}^1P$ - и $5{}^1S$ -состояний. При возрастании E до 40 кВ/см это приводит сначала к росту, а затем к убыванию вероятности перехода $5{}^1\bar{G}-2{}^1P$. При больших напряженностях поля коэффициент примеси $5{}^1D$ ($|M|=0,1$) начинает медленно возрастать и это обуславливает дальнейший ход кривой вероятности. Минимум кривой вероятности наблюдается в области 40 кВ/см.

Для перехода $5{}^1\bar{F}-2{}^1P$ максимальный коэффициент примеси состояния $5{}^1D$ ($|M|=0,1$) также наблюдается в области 15 кВ/см, но при дальнейшем возрастании напряженности он монотонно убывает. Кривая 4 на рис. 3 не имеет поэтому минимума. Относительное расположение и ход кривых 2 и 4, соответствующих переходам $5{}^1\bar{G}-2{}^1P$ и $5{}^1\bar{F}-2{}^1P$, согласуются с поведением экспериментальных кривых 2' и 4', хотя наклон последних больше из-за уменьшения заселенности верхних состояний за счет появления других запрещенных переходов на уровни с $n=3,4$.

Переходы $5{}^3\bar{G}-2{}^1S$ и $5{}^1\bar{F}-2{}^1S$ разрешаются только за счет примеси $5{}^1P$ -состояния. При возрастании напряженности поля коэффициент ее растет сначала быстро, а затем практически остается постоянным, что сказывается на поведении вероятностей этих переходов (кривые 1 и 3 на рис. 3).

Для «триплетных» переходов типа $5g-2p$ и $5f-2p$ имеется несколько особенностей (рис. 4). Расположение триплета 3P по отношению к уровням других конфигураций иное, чем расположение 1P -уровня; этот синглетный уровень лежит выше уровней всех конфигураций с данным n , тогда как триплет лежит между 3S - и 3D -уровнями. Это сказывается на волновых функциях возмущенного атома и, следовательно, на поведении вероятностей «триплетных» переходов. Для перехода $5{}^3\bar{F}-2{}^3P$ поведение кривой вероятности аналогичное, как и для «синглетного» $5{}^1\bar{F}-2{}^1P$ -перехода, и согласуется с экспериментом (кривая 4 на рис. 5). Вероятность $5{}^3\bar{G}-2{}^3P$ -перехода монотонно увеличивается с ростом напряженности поля, хотя экспериментальная кривая зависимости интенсивности соответ-

ствующей линии от E имеет максимум. По-видимому, здесь сильно скаывается уменьшение заселенности $5^3\tilde{G}$ -уровня за счет появления дополнительных каналов разрушения, т. е. посредством запрещенных переходов типа $5g-4p$, $4d$; $5g-3p$, $3d$, которые, исходя из анализа волновых функций $5g$ -состояний, также должны быть интенсивными. Конечно, для большей уверенности необходимо исследовать поведение вероятностей этих переходов в электрическом поле.

Интересным является факт, который был замечен в работе [8]. Экспериментально было установлено, что картина расщепления триплетных состояний совпадает с картиной расщепления синглетных состояний, т. е. влиянием спина на расщепление уровней можно пренебречь, однако оставался открытым вопрос относительно вероятностей переходов, где точность волновых функций имеет большое значение.

Для синглетов число компонент, на которые расщепляется уровень в электрическом поле, если учесть, что каждый уровень с $M \neq 0$ двукратно вырожден, равно

$$N_S = (L + 1)(2S + 1) = L + 1, \quad (6)$$

если L и S — целые. Соответственно для триплетов

$$N_T = (L + 1)(2S + 1) = 3(L + 1). \quad (7)$$

В общем случае структура расщепления триплетных линий должна быть сложной. Расчет, проведенный нами, показал, что для каждой напряженности поля в совокупности N_T -уровней имеются наборы с одинаковыми значениями энергии, а число этих наборов как раз равно $(L + 1)$, т. е. фактически расщепление уровней, как и в случае синглетных уровней, соответствует квантовому числу L .

Для выяснения влияния учета спина на вероятности переходов мы провели расчет вероятностей переходов с выбором базиса в LS -связи. Некоторые результаты расчета приведены на рис. 6. Сравнение вероятностей переходов, вычисленных в двух типах связи, показало, что они незначительно отличаются при $E = 10$ кВ/см, а при больших напряженностях полностью совпадают. Отличие наблюдается как раз в той области, где возмущение, вносимое полем, сравнимо по величине со спин-орбитальным и нецентральной частью электростатического взаимодействия. В интервале напряженностей поля $10 \div 100$ кВ/см, когда расщепление уровней в поле значительно больше расстояний между ними, выбор типа связи для расчета вероятностей рассмотренных переходов несуществен.

К сожалению, при малых напряженностях поля компоненты линий какой-либо конфигурации лежат очень близко друг к другу и экспериментально их трудно разрешить. Кроме того, в этой области напряженностей интенсивность запрещенных линий еще невелика. Поэтому в гелии экспериментально не удастся выявить эффекты, связанные с конкуренцией внешнего и внутриатомных взаимодействий. Для этой цели нужно выбирать спектры с разделенными уровнями тонкой структуры.

Литература

- [1] В. П. Демкин, И. И. Муравьев. Опт. и спектр., 42, 803, 1977.
- [2] И. Б. Левинсон, А. М. Гутман. Тр. АН ЛитССР, Б1 (24), 85, 1961.
- [3] А. М. Гутман, И. Б. Левинсон. Тр. АН ЛитССР, Б2 (25), 41, 1965.
- [4] R. В. Кау, R. Н. Hughes. Phys. Rev., 154, 61, 1967.
- [5] R. M. S. John, Tsu-Wei Nee. J. Opt. Soc. Am., 55, 426, 1965.
- [6] R. Mel Paris, R. M. Mires. Phys. Rev., 4A, 2145, 1971.
- [7] С. А. Жвиронайте. Тр. АН ЛитССР, Б1 (24), 23, 1961.
- [8] J. S. Foster, W. Rowles. Proc. Roy. Soc. Lond., A123, 80, 1929.

Поступило в Редакцию 1 февраля 1977 г.
В окончательной редакции 17 октября 1978 г.