

ОПРЕДЕЛЕНИЕ СЕЧЕНИЙ ДЕПОЛЯРИЗУЮЩИХ СТОЛКНОВЕНИЙ В ГЕЛИИ ИЗ АНАЛИЗА СИГНАЛОВ ИМПУЛЬСНЫХ КВАНТОВЫХ БИЕНИЙ

С. А. Багаев, И. Н. Ештушенко и В. Б. Смирнов

Описаны алгоритм и модель математической обработки сигналов квантовых биений с целью получения, кроме частоты биений, таких атомных констант, как сечения деполаризующих столкновений и степень поляризации излучения. Учтено влияние на точность результатов формы и длительности возбуждающего импульса. Модель и алгоритм применены при изучении деполаризующих столкновений в гелии для уровней 4—6 $1D_2$.

Абсолютное большинство работ по спектроскопии квантовых биений посвящено определению тех атомных констант, которые так или иначе связаны с частотой биений — энергетическим зазором между интерферирующими подуровнями. Соответственно выбираются экспериментальные условия организации наблюдения сигналов квантовых биений (СКБ) (например, луч-фольговые исследования) и методы обработки этих сигналов (например, Фурье-анализ).

Вместе с тем спектроскопии квантовых биений доступно эффективное исследование столкновительных процессов и получение соответствующих констант. Особенность таких исследований состоит в том, что в СКБ должны проявиться дополнительные компоненты, связанные с переносом энергии возбуждения. В такой ситуации необходимо применять иные, чем Фурье-анализ методы обработки СКБ. Для моноэкспоненциального распада СКБ имеет вид

$$J_{\lambda}(t) = [A + B \cos(\omega_{12}(t - t_0) + \varphi_0)] e^{-\gamma_1(t-t_0)}. \quad (1)$$

Здесь t_0 — момент возбуждения ансамбля атомов, φ_0 — начальная фаза биений, ω_{12} — частота биений, γ_1 — вероятность радиационного распада.

В работе [1] нами была решена нелинейная задача получения периода биений из экспериментально полученных сигналов для уровней 4, 5, 6 $1D_2$ в гелии методом наименьших квадратов (МНК) с использованием модели (1). Период биений по однократному измерению удалось получить с точностью 0.1–0.5%. Эти же СКБ были обработаны нами методом Фурье-анализа по интерполяционным формулам, полученным в работе [2]. На рис. 1 приведен Фурье-спектр СКБ для перехода с уровня 4 $1D_2$ ($\lambda = 4922 \text{ \AA}$). Видно, что это достаточно сложный спектр с несколькими экстремумами. Первый из них связан с проявлением немоноэкспоненциальности распада исследуемого уровня и может оказать заметное влияние на точность определения положения второго экстремума, который несет информацию о периоде биений. Прочие максимумы связаны с рядом побочных факторов: ограниченность отрезка синусоиды, нелинейность аппаратной функции, влияние статистики, шумы квантования и прочее. Оказалось, что в подобных условиях Фурье-анализ не увеличил точность определения периода биений по сравнению с МНК. Особо это относится к случаям, когда в распаде присутствует больше двух экспоненциальных компонент.

На рис. 2 точками показана экспериментальная «синусоида» биений, выделенная по модели (1) из СКБ для перехода с уровня 6^1D_2 ($\lambda=4143 \text{ \AA}$) при $H=7.40 \text{ Э}$, и кривая a , рассчитанная МНК для этой «синусоиды». Видно, что период рассчитанной кривой хорошо согласуется с периодом «синусоиды». Вместе с тем кривая a в целом недостаточно хорошо описывает «экспериментальную синусоиду»: экспериментальные точки отклоняются вверх и амплитуда изменяется со временем «синусоиды». Это снижает точность определения из периода и ведет к потере информации, со-

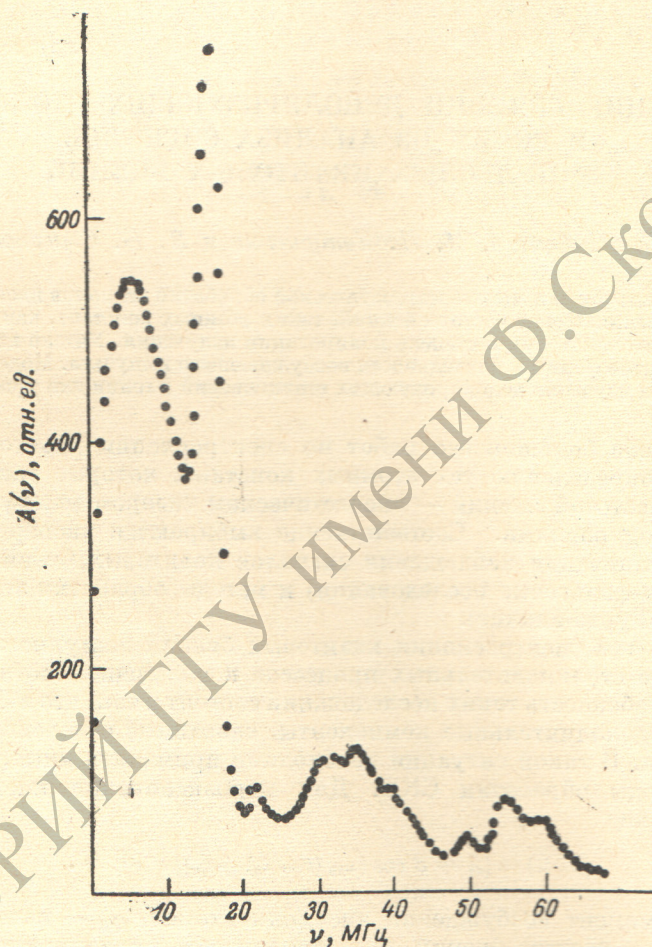


Рис. 1. Фурье-спектр СКБ для перехода с уровня 4^1D_2 гелия ($\lambda=4922 \text{ \AA}$).

державшейся в СКБ. Следовательно, необходимо ввести в модель (1) новые параметры, учитывающие эти факты.

Для случая гелия в данной работе была построена более совершенная модель, исходя из совокупности данных, полученных в наших прежних работах в отсутствие магнитного поля^[3-5]. Для уровней $4-6^1D_2$ наблюдалось до трех значимых экспоненциальных компонент распада при давлениях меньше 30 мтор. Соответственно в уравнение (1) были введены две компоненты с γ_2 и γ_3 , отвечающие за распад заселенности этих уровней. Этого оказалось достаточно, чтобы учесть отклонение экспериментальных точек вверх. Введение долгоживущих компонент с суммарным вкладом $\sim 5\%$ не привело к дальнейшему улучшению поведения кривых. Из анализа столкновительных процессов, в которых участвуют 1^1D_2 уровни, было предположено, что изменение амплитуды «синусоиды» со временем связано с изменением во времени степени поляризации вследствие деполяризации

излучения столкновениями. Этот факт учитывается введением экспоненциального множителя $\exp(-\gamma_d t)$. С учетом сказанного новая модель СКБ принимает следующий вид:

$$f(t) = e^{-\gamma_1 t} [A + B e^{-\gamma_d t} \sin(\omega t + \varphi_0)] + C e^{-\gamma_2 t} + D e^{-\gamma_3 t}. \quad (2)$$

Фон автоматически вычитался из измеряемого сигнала СКБ и поэтому в модель не введено постоянное слагаемое. Модель (2) является нелинейной уже по пяти параметрам $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3, \gamma_d$ и ω (или T). Задача нахождения минимума остаточной суммы квадратов $\Phi = \sum_{i=1}^n \omega_i (y_i - f_i)^2$, где ω_i — весовые функции, y_i — измеренные величины, f_i — функции с искомыми параметрами, решалась полулинейным методом, предложенным в работе [6]. Суть метода состоит в минимизации суммы остаточных квадратов

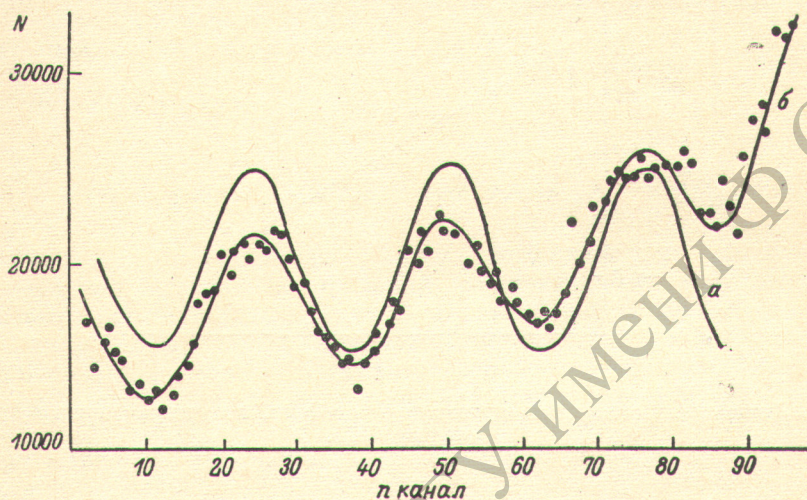


Рис. 2. «Экспериментальная синусоида» биений для перехода с уровня 6^1D_2 гелия ($\lambda=4143 \text{ \AA}$) при $H=7.40 \text{ Э}$ и результаты (кривые а и б) ее обработки по моделям (1) и (2).

в 2 этапа — сначала в пространстве линейных параметров при фиксации нелинейных, а затем в пространстве нелинейных, используя при этом зависимость одних параметров от других. Чтобы устранить расходимость метода, которая может возникнуть либо при неудачном выборе начальных приближений нелинейных параметров, либо вследствие каких-то других причин, была применена процедура Левенберга—Марквардта [7].

В качестве критерия окончания итерационного процесса выбиралось относительное уменьшение остаточной суммы квадратов менее 1%. Это означает, что оцениваемые параметры определяются примерно со статистической точностью. Минимальная остаточная сумма квадратов (ОСК) в нашей задаче составляла ~ 100 , а погрешности оценок параметров определяются отклонением ОСК от минимума на единицу.

Весовые коэффициенты обычно выбираются обратно пропорциональными дисперсиям наблюдаемых величин. Так как счет в канале нашего накопителя информации имеет приблизительно пуассоновское распределение, то в качестве весов выбирались $\omega_i = 1/y_i$.

Основной трудностью, возникающей при решении нелинейных задач, является то, что процедура минимизации ОСК может сходиться не к абсолютному, а к локальному минимуму; либо при некоторых начальных приближениях локальный минимум может быть не найден. Это связано с тем, что остаточная сумма квадратов обладает сложным рельефом в многопараметрическом пространстве. Сходимость к абсолютному минимуму можно обнаружить, задавая различные начальные приближения параметров.

При решении задачи минимизации ОСК с использованием модели (2) начальные приближения выбирались следующим образом. Значения γ_1 , γ_2 , γ_3 были известны из ранее проведенных экспериментов по наблюдению кинетики распада населенностей исследуемых уровней $3-5^1D_2$. Начальное приближение для периода находилось сканированием, как это описано в работе [1]. Начальное приближение для γ_d выбиралось, исходя из графического анализа кривых биений. Определялась степень поляризации на каждом периоде биений, и величина $\gamma_d^{\text{граф.}}$ находилась из наклона прямой, аппроксимирующей зависимость $\ln P(t)$. Одна из таких прямых, полученная для уровня 5^1D_2 ($H=16.20$ Э), показана на рис. 3. В процессе расчетов выяснилось, что сходимость алгоритма и даже скорость сходимости практически не зависит от начального приближения γ_d и его можно задавать близким к нулю.

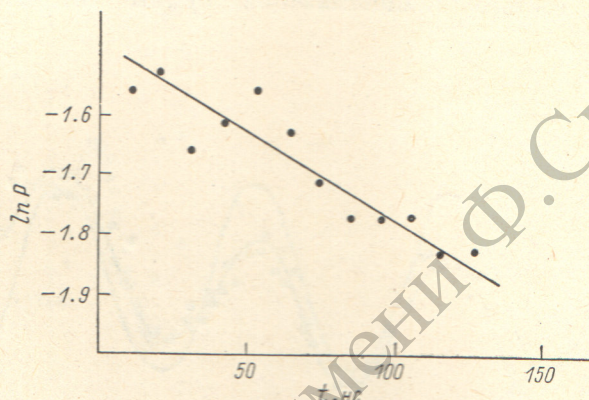


Рис. 3. Зависимость степени поляризации от времени, полученная при графическом анализе СКБ.

Расчеты проводились на ЭВМ; для обработки одной кривой требовалось 5—6 мин времени счета. Кривые обрабатывались несколько раз при задании различных начальных приближений параметров. γ_1 , γ_2 и γ_3 менялись в пределах 10—15%, так как эти значения были с достаточно высокой точностью получены нами из обработки кривых биений в отсутствие магнитного поля. γ_d менялось от 0 до $10 \gamma_d^{\text{граф.}}$. При такой многократной обработке значительно уменьшалась вероятность попадания в локальный минимум остаточной суммы квадратов. В большинстве случаев минимум ОСК удовлетворял критерию $\Phi/(n-k) \sim 1$ [6], где n — число экспериментальных точек на кривой СКБ, k — число оцениваемых параметров.

Кривая б на рис. 2 получена при статистической обработке «синусоиды» биений с использованием модели (2). Как видно из рис. 2, при наилучшем наборе параметров рассчитанная кривая хорошо описывает экспериментальные данные. Это отражается в существенном (более, чем на порядок) уменьшении остаточной суммы квадратов по сравнению с той, которая получалась при использовании модели (1).

Погрешность оценки γ_d определялась по разбросу оценок, полученных из различных кривых биений, измеренных при разных значениях магнитного поля. Усреднение проводилось не менее чем по 10 кривым СКБ. При этом для уровней $4-6^1D_2$ гелия были получены следующие значения вероятностей столкновительной деполяризации:

$$\gamma_d(4^1D_2) = (1.0 \pm 0.1) \cdot 10^6 \text{ с}^{-1}, \quad p = 10 \text{ мтор},$$

$$\gamma_d(5^1D_2) = (1.7 \pm 0.3) \cdot 10^6 \text{ с}^{-1}, \quad p = 10 \text{ мтор},$$

$$\gamma_d(6^1D_2) = (9.0 \pm 0.8) \cdot 10^6 \text{ с}^{-1}, \quad p = 30 \text{ мтор}.$$

По величинам вероятностей деполяризующих столкновений были вычислены сечения деполяризующих столкновений $\bar{\sigma}_{\text{эфф.}}$ (см. таблицу).

Видно, что эффективные сечения деполаризующих столкновений для уровней 4^1D_2 , 5^1D_2 хорошо согласуются с сечениями, полученными в работе [8] методом пересечения уровней.

Точность определения сечений деполаризующих столкновений может быть повышена, если определять вероятность столкновительной деполаризации при нескольких значениях давления и эффективное сечение находить из наклона полученной прямой. Еще одной важной константой, извлекаемой из СКБ, является степень поляризации излучения. Если длительность возбуждающего импульса значительно меньше периода биений, степень поляризации дается отношением коэффициентов B/A . Однако часто это условие не выполняется, и необходимо учесть форму и длительность возбуждающего импульса. В этом случае степень поляризации будет определяться выражением

$$P = \frac{B}{A} = \frac{B'}{A'} \frac{g}{\sqrt{d^2 + c^2}}, \quad (3)$$

где $g = \int_0^\tau e^{\gamma_1 x} f(x) dx$, $d = \int_0^\tau e^{(\gamma_1 + \gamma_d)x} f(x) \cos \omega x dx$, $c = \int_0^\tau e^{(\gamma_1 + \gamma_d)x} f(x) \sin \omega x dx$.

$f(x)$ — функция, описывающая форму возбуждающего импульса, B'/A' — величина степени поляризации, получающаяся, если не учитывать форму и длительность импульса. В данной работе возбуждающий импульс аппроксимировался прямоугольником с расстоянием между задним и передним фронтами 9.1 нс. Вычисленные значения степени поляризации для исследованных переходов оказались равными: $P(4^1D_2) = 33 \pm 3\%$, $P(5^1D_2) = 30 \pm 3\%$, $P(6^1D_2) = 26 \pm 5\%$ при $E_e = 30$ эВ.

Авторы выражают благодарность М. П. Чайке за полезные дискуссии и обсуждение работы.

Литература

- [1] С. А. Багаев, В. Б. Смирнов, И. Н. Евтушенко. Опт. и спектр., 43, 578, 1977.
- [2] В. И. Крылов, Н. С. Скобля. Методы приближенного преобразования Фурье и обращения преобразования Лапласа. «Наука», М., 1974.
- [3] С. А. Багаев, О. В. Огинец, Г. С. Кватер, В. Б. Смирнов, Ю. А. Толмачев. Опт. и спектр., 41, 687, 1976.
- [4] С. А. Багаев, О. В. Огинец, В. Б. Смирнов, Ю. А. Толмачев, Л. П. Николаева. Опт. и спектр., 43, 592, 1978.
- [5] С. А. Багаев, О. В. Огинец, В. Б. Смирнов, Ю. А. Толмачев. Опт. и спектр., 44, 1206, 1978.
- [6] P. Kirkegaard, M. Eldrup. Comp. phys. commun., 3, 240, 1972.
- [7] Д. Химмельблау. Прикладное нелинейное программирование. «Мир», М., 1975.
- [8] С. А. Казанцев, А. Кислинг, М. П. Чайка. Опт. и спектр., 34, 1227, 1973.

Поступило в Редакцию 24 марта 1979 г.