

САНКТ - ПЕТЕРБУРГСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ
УНИВЕРСИТЕТ

На правах рукописи

Бичуцкая Елена Николаевна

**ОПТИЧЕСКИЕ И НЕАДИАБАТИЧЕСКИЕ
ПЕРЕХОДЫ В КВАЗИМОЛЕКУЛАХ**

Ca - He, Mg - He

Специальность 01.04.05 - оптика

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико - математических наук

Санкт - Петербург
2000

Работа выполнена в Научно-исследовательском институте физики
Санкт-Петербургского государственного университета

Научный руководитель: доктор физико-математических наук,
профессор Девдариани А.З.

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук,
профессор Трифонов Е.Д.
кандидат физико-математических наук,
доцент Леднев М.Г.

Ведущая организация: Всероссийский Научный Центр
“Государственный оптический институт
им. С.И. Вавилова.”

Защита состоится "9" марта 2000 г. в 15³⁰ час. на
заседании диссертационного совета К.063.57.10 по защите
диссертаций на соискание ученой степени кандидата физико-
математических наук в Санкт-Петербургском государственном
университете по адресу: 199034, Санкт-Петербург, Университетская
набережная, д.7/9.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке СПбГУ.

Автореферат разослан "3" "февраля 2000 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета,
кандидат физ.-мат. наук

Тимофеев Н.А.



ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы диссертации. Исследование столкновительно - индуцированного излучения и поглощения вблизи запрещенных атомных и молекулярных линий представляет собой обширный и развивающийся раздел спектроскопии. В связи с поиском новых эксимерных систем в последнее время возрос интерес к изучению столкновительно - индуцированного излучения и поглощения вблизи запрещенных атомных линий. Наиболее полно в литературе исследованы столкновительно - индуцированные полосы вблизи запрещенных атомных S - S переходов в системах типа щелочной металл - инертный газ, которым посвящено большинство работ.

Лишь в последние годы в связи с разработкой лазеров с относительно высоким давлением активной газовой смеси начали активно изучаться столкновительно - индуцированные переходы в атомах второй группы в атмосфере инертного газа. Главной особенностью таких переходов является столкновительно - индуцированный сателлит, который расположен в окрестности положения запрещенной атомной линии. При этом в большинстве работ по исследованию сателлитов запрещенных линий не приводится сравнений рассчитанного контура с экспериментальным по абсолютной интенсивности. Авторы теоретических работ, как правило, предлагают лишь качественную интерпретацию полученных экспериментальных результатов, а если и проводят сравнение с экспериментом, то лишь по форме исследуемого сателлита спектральной линии (СЛ) с использованием различных нормировочных множителей. В то же время, для моделирования процессов в лазерах необходимы абсолютные значения спектральной интенсивности.

Поэтому актуальным представляется рассмотрение метода, который позволяет единым образом описывать полные контуры (включая центральную лоренцевскую часть и примыкающие к ней крылья) СЛ излучения и поглощения как для асимптотически (в пределе свободных атомов) разрешенных, так и для асимптотически запрещенных квазимолекулярных оптических переходов, а также проводить

сравнения полученных спектров с экспериментом без использования подгоночных параметров.

Дополнительная проблема в теории формы СЛ состоит в том, что физические механизмы формирования сателлитов СЛ в окрестности положения запрещенного атомного перехода весьма разнообразны, и даже для отдельных переходов среди авторов часто нет единого мнения относительно природы образования таких сателлитов. В предлагаемой работе подробно исследованы причины возникновения сателлита в спектрах, порожденных оптическими переходами 1D , $^3P_{1,2}$ (первой возбужденной конфигурации) \rightarrow 1S_0 в квазимолекулах щелочноземельный металл - инертный газ.

Актуальной задачей теории также является вопрос о том, как отражается взаимодействие состояний в ходе столкновения и неадиабатические переходы между ними на формирование СЛ, поскольку разнообразие поведения квазимолекулярных характеристик состояний, которое следует из анализа экспериментальных данных, часто не может быть описано в рамках уже существующих моделей.

Цель и основные задачи работы. Целью настоящей работы является исследование оптических и неадиабатических переходов между квазимолекулярными состояниями, которые формируются при столкновениях атомов. Основное внимание уделяется при этом вычислению и аналитическому описанию полных контуров СЛ излучения и поглощения для асимптотически запрещенных квазимолекулярных оптических переходов, а также исследованию влияния взаимодействия состояний и неадиабатических переходов на форму СЛ. Более конкретно, в диссертационной работе были поставлены и решены следующие задачи:

1. Для запрещенного $Ca(4s^2, ^1S_0 \leftrightarrow 4s3d, ^1D_2)$ - Не и разрешенного $Ca(4s^2, ^1S_0 \leftrightarrow 4s4p, ^1P)$ - Не оптических переходов вычисление формы СЛ излучения и поглощения в рамках полуклассического приближения, когда движение сталкивающихся атомов рассматривается классически (полуклассический Фурье - подход). Сравнение с существующими экспериментальными данными.

2. Аналитическое описание спектров запрещенных оптических переходов с учетом быстрого изменения радиационной ширины квазимолекулярного состояния.

3. Анализ влияния взаимодействия состояний и неадиабатических переходов в рамках модели Демкова на форму СЛ на примере квазимолекул $\text{Ca}(4s4p, ^1P, ^3P_{1,2})$, $\text{Ca}(4s3d, ^1D)$, $\text{Mg}(3s3p, ^3P_{1,2})$ - $\text{He}(1s^2, ^1S_0)$.

Научная новизна и практическая ценность работы состоят в следующем:

1. В настоящей работе вычисления полных контуров СЛ излучения и поглощения для разрешенных и запрещенных переходов проводятся в рамках Фурье - приближения. Такой подход позволяет рассматривать влияние на спектр и экстремумов в разностной потенциальной функции, и быстрое (экспоненциальное) изменение радиационной ширины состояния, т.е. учитывать одновременно две основные причины возникновения сателлита СЛ запрещенного перехода. В отличие от расчетов, проводимых в рамках приближений, которые учитывают только одну из указанных причин и, следовательно, могут применяться лишь в качестве первичных оценочных вычислений, предлагаемый подход позволяет проводить сравнения с экспериментом не только по форме, но и по абсолютной интенсивности сателлита СЛ.

2. Впервые для запрещенного $\text{Ca}(4s^2, ^1S_0 \rightarrow 4s3d, ^1D_2)$ - Не оптического перехода установлен механизм формирования контура СЛ, а также выполнено сравнение с экспериментом как по форме сателлита СЛ, так и по абсолютной интенсивности без использования подгоночных параметров.

3. В процессе выполнения работы были разработаны алгоритм и программа для проведения численных расчетов полных контуров СЛ излучения и поглощения как для асимптотически разрешенных, так и для асимптотически запрещенных квазимолекулярных переходов в

рамках Фурье - приближения на прямолинейных траекториях. Разработанная программа устраняет недостатки существующих работ по расчету спектров на классических траекториях, связанные с нормировкой и описанием центральной лоренцевской части. Поэтому для контура разрешенного перехода в рамках предлагаемого подхода может быть корректно вычислена и область спектра, связанная с классически запрещенными переходами, и его центральная лоренцевская часть, на которую приходится основная доля интенсивности. Разработанная программа позволяет также проводить численные усреднения полученных спектров по параметрам удара и максвелловскому распределению скоростей сталкивающихся частиц, что необходимо для сравнения с экспериментами, которые, как правило, проводятся в условиях газовой ячейки.

4. С целью непосредственного приложения к оптическим спектрам квазимолекул выражения, найденные для описания взаимодействия двух состояний в рамках модели Демкова, в настоящей работе были усреднены по параметрам удара и максвелловскому распределению скоростей сталкивающихся атомов. Для квазимолекулярных систем Ca - He, Mg - He в рамках модели Демкова вычислены оптические спектры излучения для различных значений параметра неадиабатичности ξ^* , что позволило исследовать вопрос влияния взаимодействия состояний и неадиабатических переходов на форму СЛ для различных характерных случаев.

Основные положения, выносимые на защиту:

1. Численный расчет полных контуров спектральных линий излучения и поглощения для асимптотически запрещенного $\text{Ca}(4s^2, ^1S_0 \leftrightarrow 4s3d, ^1D_2)$ - He и разрешенного $\text{Ca}(4s^2, ^1S_0 \leftrightarrow 4s4p, ^1P)$ - He квазимолекулярных оптических переходов в рамках полуклассического Фурье - приближения. Усреднение вычисленных контуров СЛ по параметрам удара и максвелловскому распределению скоростей сталкивающихся атомов Ca* и He.

2. Выполненное впервые сравнение рассчитанного усредненного контура спектральной линии поглощения для запрещенного $\text{Ca}(4s^2, ^1S_0 \rightarrow 4s3d, ^1D_2)$ - Не перехода с экспериментальными данными как по форме, так и по абсолютной интенсивности.

3. Разработка аналитического описания спектров запрещенных квазимолекулярных оптических переходов с учетом быстрого (экспоненциального) изменения радиационной ширины состояния.

4. Аналитическое решение задачи о форме оптических спектров излучения двух взаимодействующих в рамках модели Демкова состояний в применении к условиям газовой ячейки. Численный расчет спектров излучения для предельных и промежуточных значений параметров задачи, а также аналитические выражения в асимптотических областях.

5. Расчет в двухуровневом приближении кривых потенциальной энергии и радиационных ширин, связанных с анализируемыми атомными состояниями, для квазимолекул $\text{Ca}(4s4p, ^1P, 4s3d, ^1D)$, $\text{Ca}(4s4p, ^3P_{1,2})$, $\text{Mg}(3s3p, ^3P_{1,2})$ - Не.

6. Расчет спектров излучения в рамках модели Демкова для квазимолекулярных систем, которые иллюстрируют 3 возможных характерных случая:

$\text{Mg}(3s3p, ^3P_1, ^3P_2 \rightarrow 3s^2, ^1S_0)$ - Не - неадиабатический предел ($\xi^* < 1$),
 $\text{Ca}(4s4p, ^1P, 4s3d, ^1D \rightarrow 4s^2, ^1S_0)$ - Не - случай глубокой адиабатики ($\xi^* > 1$),
 $\text{Ca}(4s4p, ^3P_1, ^3P_2 \rightarrow 4s^2, ^1S_0)$ - Не - промежуточный случай ($\xi^* \sim 1$).

Апробация работы и публикации. Основные результаты диссертационной работы докладывались на двух международных конференциях, на научных семинарах отдела экспериментальной физики Санкт-Петербургского технического университета (1996), отдела теоретической и вычислительной физики Королевского университета

г.Белфаст, Северная Ирландия (1998), отдела теоретической и вычислительной химии университета г. Манчестер, Англия (1998), а также на научных семинарах кафедры оптики НИИФ СПбГУ и опубликованы в 3 статьях и 4 тезисах докладов конференций.

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из введения, трех глав, заключения и списка литературы, содержащего 84 наименования. Объем диссертации составляет 112 страниц, включая 28 рисунков.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обоснован выбор темы диссертации и показана ее актуальность, сформулирована цель исследования, приведено краткое содержание глав диссертации, а также изложены защищаемые положения, подчеркнута научная новизна работы и ее практическая ценность.

В первой главе единым образом в рамках полуклассического приближения описываются оптические переходы между квазимолекулярными состояниями, которые формируются при столкновениях атомов или ионов. Выполнены численные расчеты формы СЛ излучения и поглощения для асимптотически запрещенных и разрешенных квазимолекулярных оптических переходов, усредненных по параметрам удара и максвелловскому распределению скоростей сталкивающихся атомных частиц.

Обсуждаемые квазимолекулярные оптические переходы описываются в первом порядке теории возмущений для состояний сплошного спектра. В рамках такого подхода, если волновая функция, например, начального возбужденного состояния задается в виде

$$\Psi(t) = a(t) \exp(-i \int U^*(t') dt'),$$

то амплитуда перехода в состояние, которое отвечает энергии излученного фотона ω , равна (в атомных единицах)

$$b(\omega) = -i \int \sqrt{\frac{\Gamma(t)}{2\pi}} \exp[-i \int (\Delta U - \Delta\omega) dt'] dt \quad (1)$$

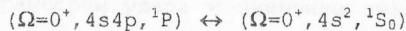
и может рассматриваться как преобразование Фурье дипольного момента перехода в квазимолекуле, который вычислен на зависящих от времени квазимолекулярных волновых функциях. В дальнейшем подход, описываемый формулой (1), будет для удобства называться Фурье - подходом. Численный расчет интеграла (1) основан на использовании быстрого преобразования Фурье.

Для сравнения с результатами в условиях газовой ячейки исследуемый спектр $|b(\omega)|^2$ необходимо усреднить по параметрам удара и максвелловскому распределению сталкивающихся частиц:

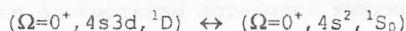
$$\langle |b(\omega)|^2 \rangle = \int_0^\infty \rho d\rho \int_0^\infty E e^{-E/kT} dE |b(\omega)|^2. \quad (2)$$

Традиционно усредненные квазимолекулярные спектры исследуются для асимптотически разрешенных переходов и представляют собой далекие крылья уширенных столкновениями атомных СЛ. Однако, рассматриваемый подход также справедлив и для асимптотически запрещенных переходов, для которых отсутствуют соответствующие атомные линии. Главная особенность такого рода переходов состоит в том, что взаимодействие атомов в ходе столкновения приводит к снятию запрета и сильной зависимости дипольного момента от межатомного расстояния.

В работе рассмотрены оба этих случая и в полуклассическом Фурье - подходе вычислены спектры квазимолекулярного излучения, которые формируются при тепловых столкновениях возбужденных атомов Ca* с атомами He в основном состоянии и порождаются следующими квазимолекулярными оптическими переходами:



и



в квазимолекуле Ca - He.

Отметим, что формула (1) предполагает следующий закон сохранения нормировки:

$$\int_{\omega_0}^{\omega} |b(\omega)|^2 d\omega = 1 - \exp(- \int_{t_0}^t \Gamma(t) dt). \quad (3)$$

Формула (3) удобна для дополнительного контроля проводимых численных расчетов спектра, поскольку при численных вычислениях $\omega_0(t_0)$ и $\omega(t)$ конечны, тогда как в соответствии с физическим смыслом задачи пределы интегрирования бесконечны.

Существенно, что в рамках Фурье - подхода описывается полный контур СЛ разрешенного перехода, включая классически запрещенную часть спектра, а также и центральную лоренцевскую часть. Именно этот факт и позволяет вычислить нормировочный интеграл (3) по спектру, полученному в полуклассическом Фурье - приближении. Достоинство предлагаемого подхода состоит также и в том, что он позволяет единым образом описывать как разрешенные, так и запрещенные в пределе больших межатомных расстояний переходы, несмотря на то, что полная вероятность излучения для таких переходов в рассматриваемом случае отличается на 6 порядков по величине.

Корректный расчет формирующихся спектров включает решение квантовохимической части задачи - вычисление потенциальных кривых и дипольных моментов в зависимости от межатомного расстояния. Расчет указанных квазимолекулярных характеристик состояния был выполнен в работе в двухуровневом приближении, когда учитывается взаимодействие только между двумя диабатическими состояниями, коррелиирующими с состояниями 1P и 1D атома Ca конфигураций $4s4p$ и $4s3d$, в виде:

$$V(R) = \frac{V_0}{2} e^{-\beta R}.$$

Параметры V_0 , β выбирались из аппроксимации результатов расчета недиагональных матричных элементов межатомного взаимодействия.

В работе впервые проводится непосредственное сравнение вычисленного в Фурье - подходе усредненного контура СЛ поглощения для запрещенного $\text{Ca}(4s^2, ^1S_0 \rightarrow 4s3d, ^1D_2) - \text{He}$ перехода с экспериментальным спектром (Рис.1).

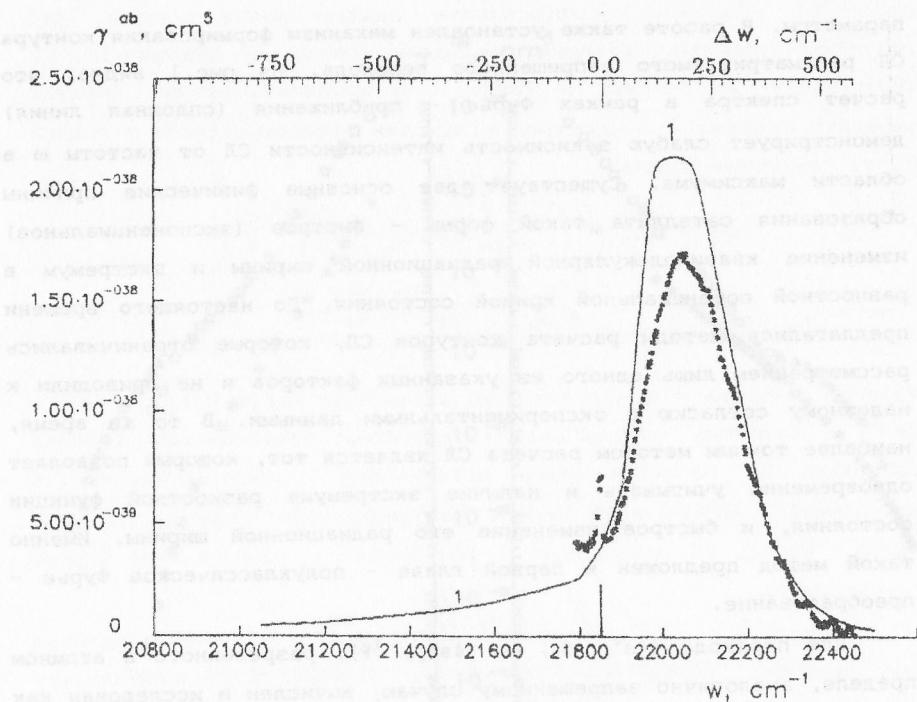


Рис. 1 Спектр поглощения асимптотически запрещенного квазимолекулярного перехода CaHe ($\Omega = 0^+$, $4s^2$, ${}^1S_0 \rightarrow \Omega = 0^+$, $4s3d$, 1D): сплошная кривая 1 – расчет в полуклассическом Фурье – подходе, усредненный по параметрам удара и энергиям сталкивающихся атомов, * – данные эксперимента. Вертикальной чертой отмечено положение атомной линии.

Рассчитанный спектр хорошо согласуется с экспериментальным не только по форме, но и по абсолютной интенсивности. Подчеркнем, что при численных расчетах не использовались какие – либо подгоночные

параметры. В работе также установлен механизм формирования контура СЛ рассматриваемого запрещенного перехода. Из рис.1 видно, что расчет спектра в рамках Фурье - приближения (сплошная линия) демонстрирует слабую зависимость интенсивности СЛ от частоты ω в области максимума. Существует две основные физические причины образования сателлита такой формы - быстрое (экспоненциальное) изменение квазимолекулярной радиационной ширины и экстремум в разностной потенциальной кривой состояния. До настоящего времени предлагались методы расчета контуров СЛ, которые ограничивались рассмотрением лишь одного из указанных факторов и не приводили к надежному согласию с экспериментальными данными. В то же время, наиболее точным методом расчета СЛ является тот, который позволяет одновременно учитывать и наличие экстремума разностной функции состояния, и быстрое изменение его радиационной ширины. Именно такой метод предложен в первой главе - полуклассическое Фурье - преобразование.

Для перехода $(4s^2, ^1S_0) \leftrightarrow (4s4p, ^1P)$, разрешенного в атомном пределе, аналогично запрещенному случаю, вычислен и исследован как контур СЛ излучения, так и поглощения. Результаты расчета для профиля СЛ поглощения, выполненного в полуклассическом Фурье - подходе и усредненного по параметрам удара сталкивающихся атомов и их энергиям, приводятся на рис.2. В отличие от запрещенного перехода, где главная особенность в спектре - максимум - связана с перестройкой всеновых функций, для разрешенного перехода положение глаeной особенности - лоренцевской части спектра - совпадает с положением атомного перехода.

Вычисление быстроосциллирующего интеграла (1), а также выполнение соответствующего двойного усреднения (2) спектра, требуют значительных затрат машинного вычислительного времени. Поэтому, желательно получить аналитическую формулу, которая также позволила бы единым образом описать спектр во всех интересующих областях частот ω .

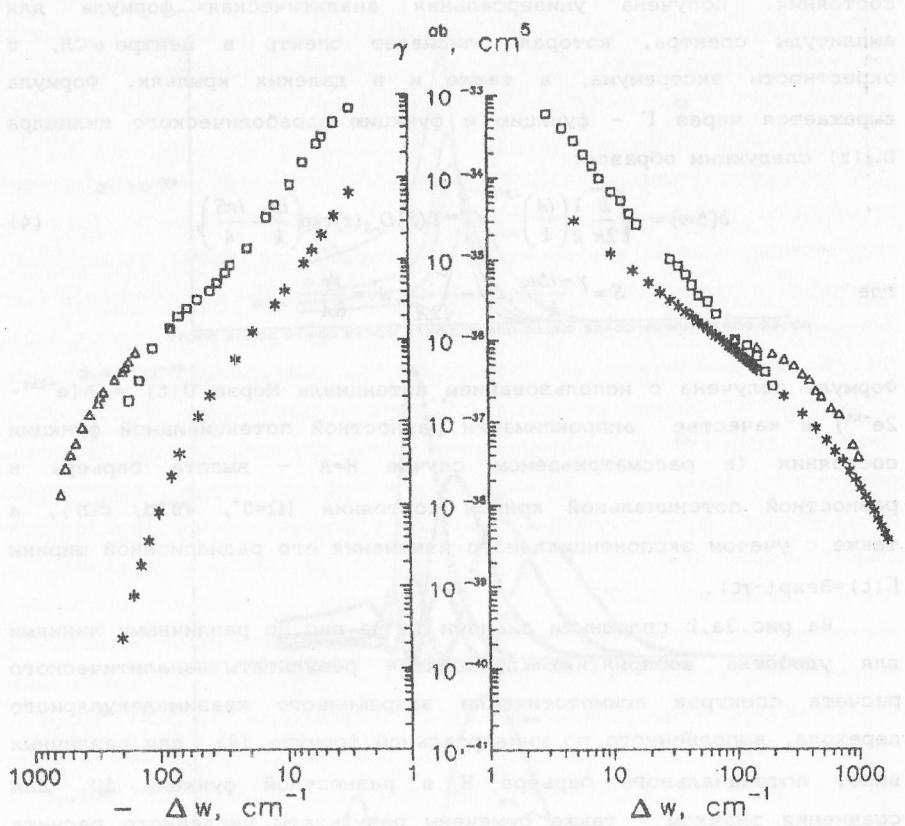


Рис. 2 Спектр поглощения разрешенного перехода CaHe ($\Omega = 0^+$, $4s^2, ^1S_0 \rightarrow \Omega = 0^+, 4s4p, ^1P$):
 * - расчет в полуклассическом Фурье - подходе, усредненный по параметрам удара и энергиям сталкивающихся атомов; \square, Δ - экспериментальные данные.

С этой целью в первой главе также приводится аналитическое описание спектров запрещенных квазимолекулярных оптических переходов с учетом быстрого изменения радиационной ширины

состояния. Получена универсальная аналитическая формула для амплитуды спектра, которая описывает спектр в центре СЛ, в окрестности экстремума, а также и в далеких крыльях. Формула выражается через Г - функцию и функцию параболического цилиндра $D_{-s}(z)$ следующим образом:

$$b(\Delta\omega) = -\sqrt{\frac{B}{2\pi}} \frac{1}{k} \left(\frac{iA}{k} \right)^{-S/2} e^{-\pi_{\max}^*} \Gamma(S) D_{-s}(z) \exp\left(\frac{iA}{k} - \frac{i\pi S}{4} \right), \quad (4)$$

где $S = \frac{\gamma - i\Delta\omega}{k}$, $z = -\frac{i}{\sqrt{2A}}$, $A^* = \frac{ik}{8A}$.

Формула получена с использованием потенциала Морзе $U(t) = A(e^{-2kt} - 2e^{-kt})$ в качестве аппроксимации разностной потенциальной функции состояния (в рассматриваемом случае $H=A$ - высота барьера в разностной потенциальной кривой состояния ($\Omega=0^+$, $4s3d$, 1D)), а также с учетом экспоненциального изменения его радиационной ширины $\Gamma(t)=B\exp(-\gamma t)$.

На рис.За,б сплошными линиями (а на рис.Зс различными линиями для удобства восприятия) приводятся результаты аналитического расчета спектров асимптотически запрещенного квазимолекулярного перехода, выполненного по универсальной формуле (4), для различных высот потенциального барьера H в разностной функции ΔU . Для сравнения значком * также отмечены результаты численного расчета спектра в Фурье - приближении с использованием модельного потенциала Морзе. Видно, что результаты численного расчета и аналитическое описание совпадают во всех областях ω и для широкого диапазона высот потенциального барьера H .

Таким образом, зная форму разностного потенциала ΔU для произвольного квазимолекулярного состояния, переход из которого запрещен в атомном пределе, и, оценив высоту потенциального барьера $H=nA$ (или глубину потенциальной ямы $H=-nA$), если таковой имеется, можно легко получить приближенный контур СЛ излучения такого состояния. Проведенное аналитическое исследование спектров запрещенных оптических переходов, а также сравнение

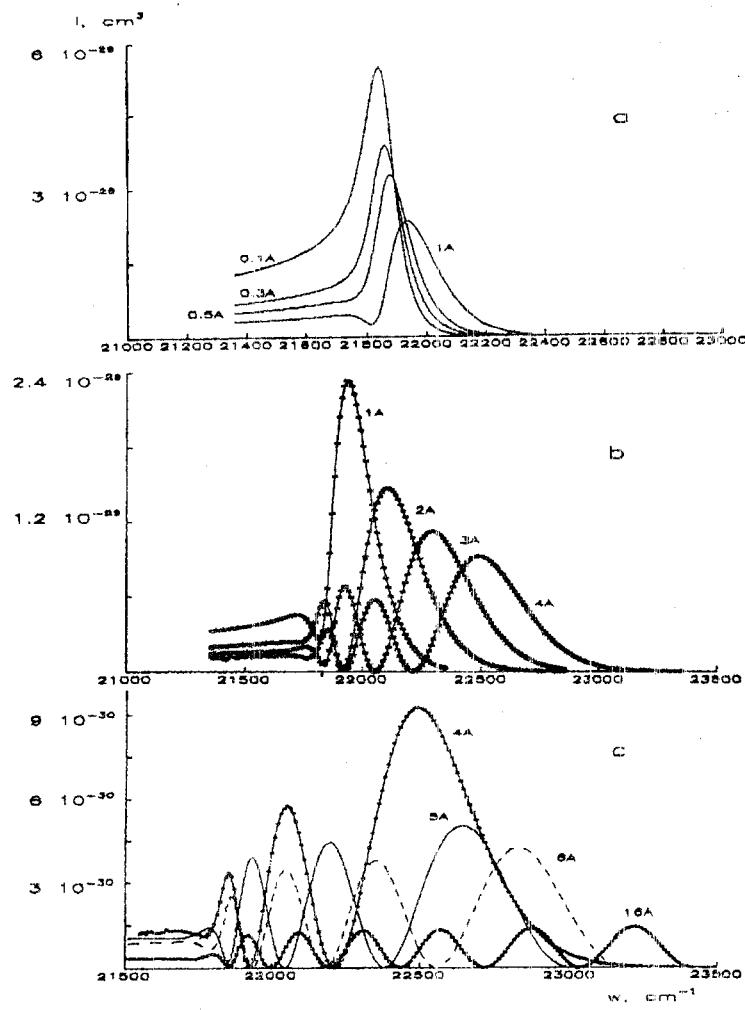


Рис. 3 Спектр излучения асимптотически запрещенного квазимолекулярного перехода с использованием аппроксимационного потенциала Морзе в качестве разностной функции для различных высот потенциального барьера $H = nA$ (указаны цифрами на рисунке). Линиями представлен аналитический расчет по формуле (4), * — численный расчет в полуклассическом Фурье — приближении.

полученных аналитических результатов с численными расчетами показывает, что в настоящей работе предложена надежная единая аналитическая формула для расчета спектров невзаимодействующих состояний с учетом быстрого изменения радиационной ширины исходного состояния.

В первой главе предполагалось, что состояния, между которыми происходят оптические переходы, не взаимодействуют с другими состояниями в ходе столкновения. Следующие две главы диссертации посвящены исследованию влияния взаимодействия состояний и неадиабатических переходов на форму СЛ.

Во второй главе в предположении, что взаимодействие двух энергетически близко расположенных квазимолекулярных состояний в процессе атомного столкновения может быть описано моделью Демкова, решается задача о форме оптических спектров излучения, формирующихся в результате высвечивания этих состояний. Приводятся аналитические формулы, численные модельные расчеты спектра, а также асимптотические выражения, которые позволяют проследить трансформацию рассматриваемого спектра в зависимости от параметров задачи. Полученные формулы включают усреднение по параметрам удара и максвелловскому распределению сталкивающихся атомов (формула (2)). Показано, что неадиабатическое взаимодействие атомов в ряде случаев приводит к появлению в крыле СЛ сателлита, форма и интенсивность которого зависят от величины параметра неадиабатичности (параметра Месси) - ξ^* . Установлено, что природа возникновения такого сателлита связана со взаимодействием состояний, а его форма зависит от динамики столкновений.

Установлены общие закономерности формирования и особенности столкновительно - индуцированных спектров в модели Демкова:

1. Профили СЛ зависят от параметра неадиабатичности и от того, какое атомное состояние - излучающее или запрещенное - заселено первоначально;

2. В случае, когда первоначально заселено запрещенное состояние (а также для не слишком малых значений параметра $\xi^* \geq 1$), взаимодействие между квазимолекулярными состояниями приводит к

образованию сателлита СЛ в окрестности положения запрещенного атомного перехода вследствие перестройки волновых функций и быстрого изменения радиационных ширин в области неадиабатического перехода;

3. В области разрешенного атомного перехода формируется лоренцевский контур, а интенсивность далеких красного и фиолетового крыльев СЛ пропорциональна $1/(\omega - \omega_0)$, где ω_0 - частота соответствующего атомного перехода.

Предлагаемая модель позволяет выполнять конкретные расчеты спектров оптических квазимолекулярных переходов в широком диапазоне значений параметра неадиабатичности задачи.

В третьей главе проводится анализ процессов квазимолекулярного излучения и неадиабатических переходов, а также описание спектров излучения для конкретных систем. Рассмотрены случаи, связанные со спектрами в окрестности атомных линий, порожденных оптическими переходами:



и



в квазимолекуле Ca - He,



и



в квазимолекуле Mg - He,



и



в квазимолекуле Ca - He,

а также неадиабатическими переходами между соответствующими состояниями.

Расчеты выполнены на основе разработанной во второй главе модели Демкова и в квазистатическом приближении. Иллюстрируется три наиболее важных случая:

$Mg(3s3p, ^3P_1, ^3P_2 \rightarrow 3s_2, ^1S_0)$ - He - неадиабатический предел ($\xi^*=0.22$);
 $Ca(4s4p, ^1P, 4s3d, ^1D \rightarrow 4s^2, ^1S_0)$ -He - случай глубокой адиабатики
($\xi^*=20$); $Ca(4s4p, ^3P_1, ^3P_2 \rightarrow 4s^2, ^1S_0)$ -He - промежуточный случай ($\xi^*=0.8$)
(Рис.4).

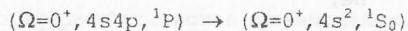
Видно, что даже для одной квазимолекулы возможна реализация различных неадиабатических ситуаций.

Приводимые расчеты демонстрируют справедливость сделанного во второй главе вывода о том, что форма СЛ зависит от параметра неадиабатичности ξ^* и от того, какое атомное состояние было заселено первоначально - излучающее или запрещенное.

В заключении сформулированы основные результаты и выводы работы.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ РАБОТЫ

1. В полуклассическом приближении вычислены спектры квазимолекулярного излучения, которые формируются при тепловых столкновениях возбужденных атомов Ca^+ с атомами He в основном состоянии и порождаются следующими оптическими переходами:



и



в квазимолекуле Ca - He. Полученные спектры усреднены по параметрам удара и максвелловскому распределению скоростей сталкивающихся атомов. Вычислен нормировочный интеграл по спектру, полученному в Фурье - приближении, как для асимптотически разрешенного, так и для асимптотически запрещенного квазимолекулярного перехода.

2. В двухуровневом приближении рассчитаны кривые потенциальной энергии и радиационные ширины, связанные с

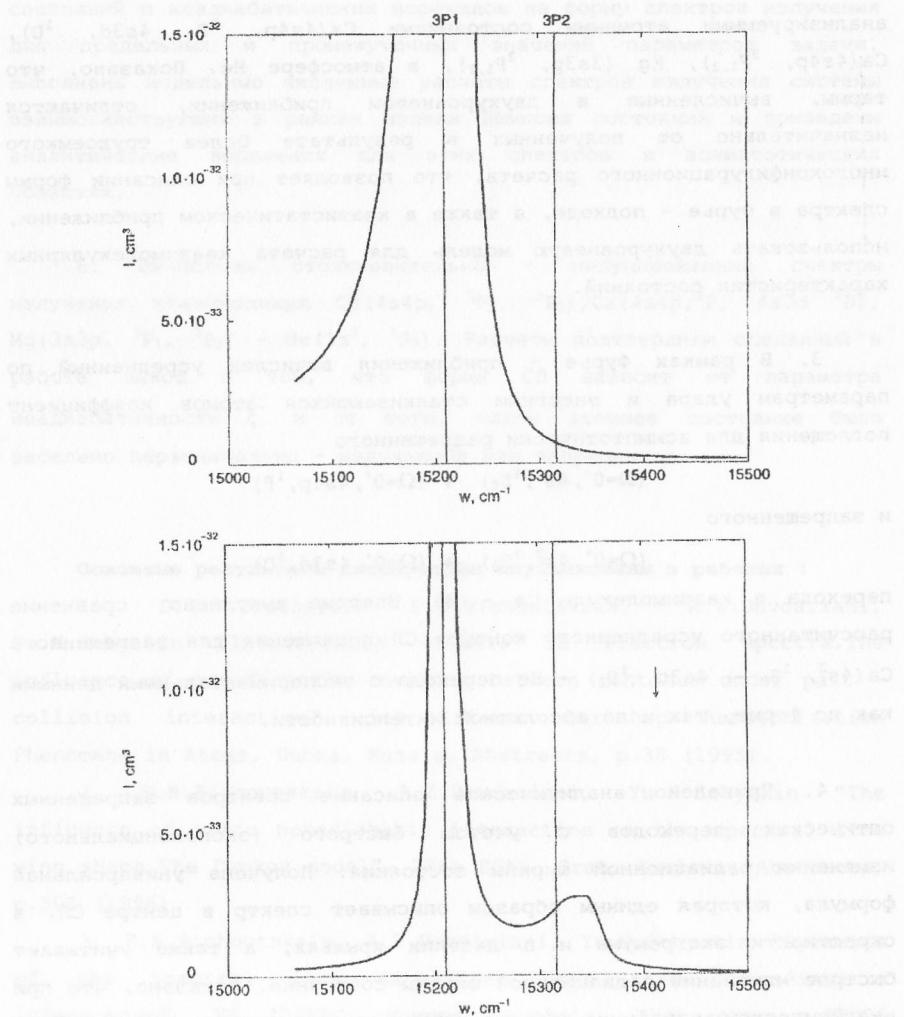


Рис. 4 Зависимость спектральной интенсивности от частоты, квазимолекула $\text{Ca}(4s4p, ^3P_{1,2}) - \text{He}$. Вертикальными линиями отмечены положения атомных уровней $^3P_{1,2}$. Сверху - расчет с использованием модели Демкова при начальном заселении атомного состояния 3P_1 , снизу - расчет с использованием модели Демкова при начальном заселении атомного состояния 3P_2 .

анализируемыми атомными состояниями Ca($4s4p$, 1P , $4s3d$, 1D), Ca($4s4p$, $^3P_{1,2}$), Mg ($3s3p$, $^3P_{1,2}$), в атмосфере He. Показано, что термы, вычисленные в двухуровневом приближении, отличаются незначительно от полученных в результате более трудоемкого многоконфигурационного расчета, что позволяет при описании формы спектра в Фурье - подходе, а также в квазистатическом приближении, использовать двухуровневую модель для расчета квазимолекулярных характеристик состояний.

3. В рамках Фурье - приближения вычислен усредненный по параметрам удара и энергиям сталкивающихся атомов коэффициент поглощения для асимптотически разрешенного

$$(\Omega=0^+, 4s^2, ^1S_0) \rightarrow (\Omega=0^+, 4s4p, ^1P)$$

и запрещенного

$$(\Omega=0^+, 4s^2, ^1S_0) \rightarrow (\Omega=0^+, 4s3d, ^1D)$$

перехода в квазимолекуле Ca - He. Впервые выполнено сравнение рассчитанного усредненного контура СЛ поглощения для запрещенного Ca($4s^2$, $^1S_0 \rightarrow 4s3d$, 1D_2) - He перехода с экспериментальными данными как по форме, так и по абсолютной интенсивности.

4. Приведено аналитическое описание спектров запрещенных оптических переходов с учетом быстрого (экспоненциального) изменения радиационной ширины состояния. Получена универсальная формула, которая единным образом описывает спектр в центре СЛ, в окрестности экстремума и в далеких крыльях, а также учитывает быстрое изменение радиационной ширины состояния. Показано, что при аналитическом описании спектра использование потенциала Морзе в качестве аппроксимации разностной потенциальной функции ΔU приводит к хорошему согласию с численными расчетами.

5. Получено аналитическое решение задачи о форме оптических спектров излучения двух состояний, взаимодействие между которыми может быть описано в рамках модели Демкова, в применении к условиям газовой ячейки. Исследовано влияние взаимодействия

состояний и неадиабатических переходов на форму спектров излучения для предельных и промежуточных значений параметров задачи. Выполнены модельные численные расчеты спектров излучения системы взаимодействующих в рамках модели Демкова состояний и приведены аналитические выражения для этих спектров в асимптотических областях.

6. Вычислены столкновительно - индуцированные спектры излучения квазимолекул $\text{Ca}(4s4p, {}^3P_1, {}^3P_2), \text{Ca}(4s4p, {}^1P, 4s3d {}^1D)$, $\text{Mg}(3s3p, {}^3P_1, {}^3P_2) - \text{He}(1s^2, {}^1S_0)$. Расчеты подтвердили сделанный в работе вывод о том, что форма СЛ зависит от параметра неадиабатичности ξ^* и от того, какое атомное состояние было заселено первоначально - излучающее или запрещенное.

Основные результаты диссертации опубликованы в работах :

1. D.S.F.Crothers, E.N.Bichoutskaia, A.Z.Devdariani, Yu.N.Sebyakin "Interference effects in electron spectra. The influence of nonadiabatic coupling between continua under past - collision interaction". 5th Intern. Workshop Autoionization Phenomena in Atoms, Dubna, Russia, Abstracts, p.38 (1995).

2. E.N.Bichoutskaia, A.Z.Devdariani, Yu.N.Sebyakin "The influence of state nonadiabatic interaction on the spectral line wing shape. The Demkov model". 28th EGAS, Graz, Austria, Abstracts, p.501 (1996).

3. E.N.Bichoutskaia, A.Z.Devdariani, Yu.N.Sebyakin "Dynamics of the spectral line satellite under state nonadiabatic interaction". XX ICPEAC, Vienna, Austria, Abstracts, p.FR026 (1997).

4. Е.Н.Бичукская, А.З.Девдариани, Ю.Н.Себякин "Сателлит спектральной линии как следствие неадиабатического взаимодействия атомов. Модель Демкова". Опт. и спектр., 85(1), 11-18, (1998).

5. Е.Н.Бичукская, А.З.Девдариани "Квазимолекулярная спектроскопия асимптотически запрещенных переходов. Атомы второй

группы в атмосфере инертных газов". XVI ФАС, Звенигород, Россия,
Тезисы, с.61-62, (1998).

6. Е.Н.Бичуцкая, А.З.Девдариани, А.Л.Загребин, Ю.Н.Себякин
"Квазимолекулярное излучение и неадиабатические переходы. I.
Квазимолекулы $\text{Ca}(4s4p\ ^3P_1, ^3P_2)$, $\text{Mg}(3s3p\ ^3P_1, ^3P_2)$ - $\text{He}(1s^2\ ^1S_0)$ ".
Опт. и спектр., 87(2), 213-218, (1999).

7. Е.Н.Бичуцкая, А.З.Девдариани, А.Л.Загребин
"Квазимолекулярное излучение и неадиабатические переходы. II.
Квазимолекула $\text{Ca}(4s4p\ ^1P, 4s3d\ ^1D)$ - $\text{He}(1s^2\ ^1S_0)$ ". Опт. и спектр.,
88(2), 197-202, (2000).

ЛР № 040815 от 22.05.97.

Подписано к печати 27.01.2000 г. Формат бумаги 60X90 1/16. Бумага офсетная. Печать
ризографическая. Объем 1,0 п.л. Тираж 100 экз. Заказ 1185.

Отпечатано в отделе оперативной полиграфии НИИХ СПбГУ
с оригинал-макета заказчика.

198904, Санкт-Петербург, Старый Петергоф, Университетский пр. 2.