

дами из ниобия. Генерация происходила на половинной частоте, которая соответствующим образом менялась при изменении частоты накачки в пределах полосы малодобротного резонатора. С течением времени интенсивность генерируемых колебаний падала, что объясняется, по всей видимости, ухудшением свойств электродов при работе резонатора в жидком гелии при неоднократном охлаждении.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Billeter T. R., Girola A. J., Bjorkstam J. «J. Appl. Phys.», 1964, 35, 2159.
2. Иванов И. В., Ангелов И. М., Лаптев А. Г. «Изв. вузов. Радиоэлектроника», 1973, 16, 11, 28.
3. Иванов И. В., Ангелов И. М. Авторское свидетельство № 403064, 23 июня 1972 г.
4. Иванов И. В. «Вестн. Моск. ун-та. Сер. III, физ., астроном.», 1973, 14, 501.
5. Ангелов И. М. Канд. дис. МГУ, 1973.
6. Иванов И. В., Бузни И. М., Белокопытов Г. В., Рукин Е. И., Дашенко В. В. В кн.: Новые пьезо- и сегнетоматериалы и их применения. М., 1975.
7. Вендик О. Г., Дахнович А. А. и др. «Радиотехника и электроника», 1969, 14, 555.
8. Вендик О. Г., Кейс В. Н. и др. «Радиотехника и электроника», 1974, 19, 2215.
9. Агафонов Ю. А., Вендик О. Г. и др. «Изв. АН СССР, сер. физ.», 1975, 39, 841.

Поступила в редакцию  
30.3 1976 г.

Кафедра  
физики колебаний

УДК 539.192

А. В. ОБУХОВ

### ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ОБЩЕГО АЛГОРИТМА НЬЮТОНА—РАФСОНА ДЛЯ РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЙ ХАРТРИ—ФОКА

В статье [1] был применен новый метод для решения уравнений Хартри—Фока. Суть этого метода заключается в аппроксимации второй производной обычной разностной трехдиагональной схемой, в явном введении граничных условий в разностную схему, аппроксимирующую уравнения Хартри—Фока, и в использовании метода, аналогичного методу Ньютона—Рафсона. Решения систем нелинейных уравнений для нахождения собственных векторов, собственных значений и недиагональных множителей Лагранжа хартри-фоковского оператора. Расчеты, проведенные этим методом для атома Li, хорошо согласуются с результатами, полученными другими авторами [1].

В настоящей работе была исследована применимость общего алгоритма Ньютона—Рафсона [1] для нахождения собственных векторов, собственных значений и недиагональных множителей Лагранжа оператора Хартри—Фока при аппроксимации уравнений Хартри—Фока разностной схемой по методу Нумерова.

Расчеты были проведены для  $1s2s^1S$  состояния атома He, а также для основного состояния атома He. При расчете атома He были использованы следующие три типа замены радиальной переменной  $r$ :

$$1. \rho = r(1 + ar)^{-1}; \quad 2. \rho = Ln(r); \quad 3. \rho = \sqrt{r}. \quad (1)$$

Для атома He было использовано преобразование (1). Удобство этого преобразования заключается в том, что бесконечные пределы интегрирования по переменной  $r$  переводятся в конечные пределы по переменной  $\rho$ , при этом нет нужды рассматривать асимптотику решений при  $r \rightarrow 0$  и  $r \rightarrow \infty$ .

Результаты расчетов приведены в таблице.

Возбужденное состояние  $1s2s^1S$  атома He было выбрано как пример очень плохой сходимости итерационного процесса при решении уравнений Хартри—Фока стандартным методом [2]. Даже при включении в расчет процедур, улучшающих сходимость, в [3] потребовалось порядка 160 итераций для получения нужного самосогласования, у нас же для этой цели необходимо около 50 итераций при начальном приближении радиальных функций обычными водородоподобными неэкранированными функциями иона He<sup>+</sup>. Кроме того, если атомная конфигурация содержит две неза-

## Численные результаты по расчету атомов He и Ne

№ преобразователя по (I)	Число точек <i>N</i>						Интеграл перекрывания, ат. ед.
	40	60	80	100	120	Экстропол- рованное зна- чение <i>E</i> ат. ед.	
1	<i>n</i>	52	32	30	28	26	$2 \times 10^{-9}$
	<i>E</i>	-2,169212	-2,170695	-2,171226	-2,171474	-2,171610	
2	<i>n</i>	42	20	20	16	14	$2 \times 10^{-8}$
	<i>E</i>	-2,171177	-2,172048	-2,171949	-2,171923	-2,171914	
3	<i>n</i>	44	32	28	26	26	$5 \times 10^{-8}$
	<i>E</i>	-2,263289	-2,209580	-2,192495	-2,184895	-2,180852	
Атом Ne	<i>n</i>	43	24	21	28	22	-128,5463
	<i>E</i>	-125,9748	-127,2932	-127,8091	-128,0619	-128,2042	

*n* — число итераций уравнений Хартри — Фока, *E* — энергия атома в приближении Хартри — Фока.

полненные оболочки одинаковой симметрии и если число электронов в одной оболочке равно числу электронов в другой оболочке (как в  $1s2s$ -конфигурации атома He), то достичь ортогональности двух радиальных функций, описывающих эти оболочки, стандартным методом невозможно. Это связано с тем, что при вычислении стандартным методом недиагональный множитель Лагранжа для этих двух открытых оболочек обращается в бесконечность.

При использовании общего алгоритма Ньютона — Рафсона для решения уравнений Хартри — Фока этой проблемы не возникает, так как в этом методе существует общая единообразная процедура для определения диагональных и недиагональных множителей Лагранжа, не зависящая от чисел заполнения электронных оболочек. Так, при расчете атома He интеграл перекрытия между  $1s$  и  $2s$  функциями не превышает  $10^{-7}$ .

Расчет  $1s2s^4s$  состояния атома He демонстрирует высокую степень сходимости итерационного процесса для выбранного нами метода решения уравнений Хартри — Фока. Интересно заметить, что энергия атома в приближении Хартри — Фока зависит от выбранного преобразования радиальной переменной. Даже экстраполированные значения энергии отличаются в пятой значащей цифре для разных преобразований.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Cayford J. K., Fimple W. R. et. al. «Phys.», 1974, 15, 81.
2. Hartree D. R. The Calculation of Atomic Structures. N. Y., 1957.
3. Froese Fisher C. «J. Comput. Phys.», 1972, 10, 21.

Поступила в редакцию  
28.5 1976 г.

Кафедра  
физической химии химфака

УДК 537.525.1

Л. М. ВОЛКОВА, А. М. ДЕВЯТОВ, В. Х. ФАЗЛАЕВ, А. А. БОБРОВ

## ИНТЕНСИВНОСТИ И СЕЧЕНИЯ ВОЗБУЖДЕНИЯ СМЕЩЕННЫХ ЛИНИЙ, ИЗЛУЧАЕМЫХ В КАЛЬЦИЕВОМ ПОЛОМ КАТОДЕ

В работе измерены интенсивности смещенных линий из серии  $4s3d^3D_{1,2,3} - 3d4p^3D_{1,2,3}^0$  (рис. 1). Исследование уравнения баланса, описывающего заселение и опустошение уровней, дало возможность определить величины эффективных сечений в максимуме функции возбуждения исследуемых линий из соотношения

$$Q_{ki}^{\max} = \frac{I_{ki}}{h\nu_{ki} \sqrt{\frac{2e}{m} n_0 n_e} \int_{\varepsilon_{ik}}^{\infty} q_{ki}(\varepsilon) \frac{\varepsilon i''(\varepsilon) d\varepsilon}{\int_0^{\infty} i''(\varepsilon) \sqrt{\varepsilon} d\varepsilon}}, \quad (1)$$

где  $I_{ki}$  — интенсивность спектральной линии,  $n_e$ ,  $n_0$  — концентрация электронов и атомов в основном состоянии,  $q_{ki}(\varepsilon)$  — оптическая функция возбуждения,  $i''(\varepsilon)$  — вторая производная электронного тока на зонд.

Измерения проводились в разряде в кальциевом полом катоде диаметром 15 мм и длиной 50 мм с гелиевым наполнением при токах разряда 15, 30, 45 и 60 мА и давлениях гелия 0,5; 1 и 1,5 мм рт. ст.

Для измерения интенсивности спектральных линий в абсолютных единицах измерительная установка была проградуирована с помощью ленточной вольфрамовой лампы типа Сп 8-200. В табл. 1 приведены концентрации возбужденных атомов для верхних исследуемых уровней. Значения сил осцилляторов для соответствующих переходов взяты из работы [1].

Концентрация невозбужденных атомов  $n_0$  кальция для разрядного тока 15 мА определялась по измерению реабсорбции резонансной линии  $\text{CaI}/\lambda = 4227,6 \text{ \AA}$  методом одного зеркала [2], при больших разрядных токах использовался метод Бургера и Ван-Ситтерга [3].