

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 $4s3d^3D_{1,2,3} - 3d4p^3D^0_{1,2,3}$ (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].

Таблица 1
 $n_0 \cdot 10^{-4}, \text{ см}^{-3}$

$P,$ мм рт. ст.	$I,$ мА	$3d4p^3D_3^0 \rightarrow 4s3d^3D_1$	$4d4p^3D_2^0 \rightarrow 4s3d^3D_2$	$4d4p^3D_1^0 \rightarrow 4s3d^3D_1$
0,5	15	3,4	2,5	1
	30	20,5	4	7,5
	45	46	33	20
	60	87,5	66	47,6
1	30	10	7	4,8
	45	32	25	21
	60	40	50	28,5
1,5	30	2,6	1,8	—
	45	8,1	6,4	4,8
	60	—	17	9,3

Таблица 2

$P,$ мм рт. ст.	$I,$ мА	$n_0 \cdot 10^{-10} \text{ см}^{-3}$
0,5	15	4,6
	30	14
	45	46
	60	58
1	30	6
	45	10
	60	15
1,5	30	1,8
	45	6
	60	7

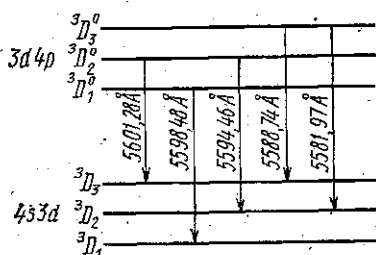


Рис. 1. Переходы $3D_{1,2,3}^0 \rightarrow 3D_{1,2,3}$ в спектре CaI

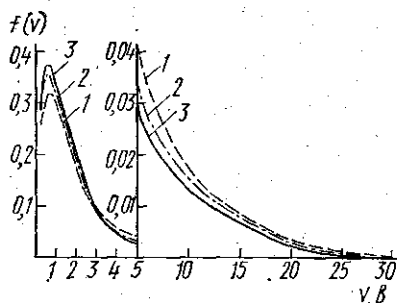


Рис. 2. $F(v)$ в разряде при токах: 1—15, 2—30 и 3—45 мА, давление гелия 0,5 мм рт. ст.

В тех случаях, когда наблюдалось самообращение резонансной линии кальция, для определения концентрации использовался метод, разработанный в нашей лаборатории [4].

В табл. 2 приведены концентрации невозбужденных атомов Ca для исследуемого диапазона токов и давлений.

Измерения функций распределения электронов по энергиям проводились методом двойного дифференцирования тока на зонд по потенциалу зонда. Полученные данные обрабатывались по формуле Дрюестейна. За потенциал пространства принимался нуль второй производной. Для измерений использовался цилиндрический зонд диаметром 0,1 мм и длиной 5 мм. На рис. 2 приведены функции распределения электронов по энергиям. Увеличение разрядного тока приводит к росту максимума кривой функции распределения и уменьшению доли электронов, энергии которых выше 3 эВ. Увеличение давления газа-наполнителя приводит к смещению максимума кривой распределения в область меньших энергий.

Для определения величин эффективных сечений возбуждения по формуле (1) необходимо знать ход функций возбуждения $q_{ki}(v)$ исследуемых линий. Так как линии одной серии имеют подобный ход функции возбуждения, то для всех исследуемых линий нами был взят ход функции возбуждения линии 5598,4 Å ($3d4p^3D_1^0 - 4s3d^3D_1$), измеренный [5]. Измеренные нами величины эффективных сечений возбуждения в максимумах функций возбуждения представлены в табл. 3; Q^{\max} — величины сечений, усредненные по всем измерениям.

В [5] для измеряемой серии известно сечение для линии 5598,48 Å. В этой работе получено значение сечения, равное $19 \cdot 10^{-18} \text{ см}^2$, при погрешности измерений в 40%. Ошибка наших измерений порядка 60%. Таким образом, в пределах ошибок измерений наблюдается удовлетворительное согласие с работой [5].

Таблица 3

P, мм рт. ст.	I, мА	$3d4p^3D_3^0 \rightarrow$ $\rightarrow 4s3d^3D_3$	$3d4p^3D_3^0 \rightarrow$ $\rightarrow 4s3d^3D_3$	$3d4p^3D_2^0 \rightarrow$ $\rightarrow 4s3d^3D_3$	$3d4p^3D_1^0 \rightarrow$ $\rightarrow 4s3d^3D_1$	$3d4p^3D_2^0 \rightarrow$ $\rightarrow 4s^3d^3D_3$
		1	2	3	4	5
0.5	15	—	215	122	53	—
	30	28	216	111	68	36
	45	21	150	82	56	20
	60	28	230	112	80	21
1	30	30	190	108	98	24
	45	37	230	160	138	33
	69	39	168	165	110	33
1,5	30	—	230	116	—	—
	45	32	158	110	79	—
	60	40	—	175	112	—
	\bar{Q}_{kl}^{\max}	32	198	128	90	28

1 — $\lambda = 5581\text{Å}$, 2 — $\lambda = 5588\text{Å}$, 3 — $\lambda = 5594\text{Å}$, 4 — $\lambda = 5598\text{Å}$, 5 — $\lambda = 5681\text{Å}$.

ЛИТЕРАТУРА

1. Касабов Г. А., Елисеев В. В. Спектроскопические таблицы для низкотемпературной плазмы. М., 1973.
2. Сб. Спектроскопия газоразрядной плазмы. Л., 1970, с. 7.
3. Burger H. C., van Cittert V. H. «Zs. f. Phys.», 1928, 51, 638.
4. Қидрасов Ф. X. Канд. дис. МГУ, 1974.
5. Гарга И. И. и др. «Оптика и спектроскопия», 1974, 37, 843.

Поступила в редакцию
7.4 1976 г.

Кафедра
электроники

9