

выкладок $(b + \Delta) = \pi$. На рисунке приведено аналитическое решение задачи (3) и решение, полученное методом Рунге, для случаев

$$U(f) = f, \quad U(f) = (f - \pi/2)^2 \text{ и } U(f) = \begin{cases} (f - \pi/2)^2, & f < \pi/2, \\ -(f - \pi/2)^2, & f > \pi/2. \end{cases}$$

Как видно из графиков, решение, полученное методом Рунге, хорошо аппроксимирует решение точной задачи уже при числе базисных функций $N=3$. Таким образом, предлагаемый метод дает значительный выигрыш во времени счета и может быть рекомендован для решения реальных физических задач.

ЛИТЕРАТУРА

[1] Пытьев Ю. П. // Матем. моделирование. 1989. 1, № 5. С. 44. [2] Деклу Ж. Метод конечных элементов. М., 1976.

Поступила в редакцию
30.11.90

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3. ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ. 1991. Т. 32, № 3

АТОМНАЯ И ЯДЕРНАЯ ФИЗИКА

УДК 539.186.2

СЕЧЕНИЯ ВОЗБУЖДЕНИЯ $3p^5 3d$ -УРОВНЕЙ АРГОНА ЭЛЕКТРОНАМИ

В. Э. Бубелев, А. Н. Грум-Гржимайло

(НИИЯФ)

Получены сечения возбуждения всех уровней тонкой структуры $3p^5 3d$ -конфигурации атома аргона электронами. Расчеты проведены в приближении искаженных волн с учетом обменной амплитуды. Результаты сравниваются с известными экспериментальными данными.

Информация о сечениях возбуждения электронами уровней тонкой структуры аргона с конфигурацией $3p^5 3d$ важна для приложений в физике газового разряда и лазерной физике, а также для исследования механизмов возбуждения атомов. Экспериментальное изучение этих величин затруднено. Уровни $3d$ радиационно распадаются на уровни $4p$ с эмиссией в далекой инфракрасной области. Это препятствует применению оптического метода измерения сечений, в котором, кроме того, крайне сложно учесть процессы вторичного заселения излучающих состояний. Для трех уровней $3d$ с полным моментом $J=1$, распадающихся на основное состояние аргона с излучением в вакуумном ультрафиолете, данные скудны [1]. При интегрировании дифференциальных по углу рассеяния сечений (электрический метод) недостаточное разрешение электронных детекторов позволило получить результаты лишь для половины из общего числа $3d$ -уровней. [2]. Этот способ может дать плохо контролируемую ошибку экстраполяции на малые и большие углы рассеяния. Проведено также несколько измерений спектров потерь электронов под малыми углами [3], не содержащих количественных данных о величине сечений.

Надежные систематически расчеты к настоящему времени отсутствуют. Известны лишь полуэмпирические результаты для состояний с $J=1$, основанные на экспериментальных данных по спектрам потерь и расчетах обобщенных сил осциллятора $3s-3d$ -перехода [4, 5], а также полукваликативные оценки для нужд физики плазмы [6, 7]. В работе [8] проводились исследования дифференциальных характеристик возбуждения состояний $3p^5 3d$ ($J=1$).

В данном кратком сообщении мы приводим наши результаты, полученные методом искаженных волн с атомными волновыми функциями в промежуточном типе связи. Качество волновых функций проверялось сопоставлением вероятностей излучательных переходов с участием $3d$ -уровней со спектроскопическими данными [9] и с более точными расчетами [10]. Анализ показал хорошее качество волновых функций всех уровней, кроме тех, которые имеют полный момент $J=1$. В вычислениях сечений учитывались прямая и обменная амплитуды. Искаженные волны рассчитывались с использованием оптического потенциала конечного состояния аргона

[11]. Более подробное обсуждение модели и расчетов будет опубликовано в другой работе.

Величины рассчитанных сечений возбуждения всех $3d$ -уровней приведены в таблице. Для состояний приняты обозначения Рака. На рис. 1, 2 расчеты сравниваются с полученными электрическим методом данными по шести отдельным уровням [2]. В подписях к рисункам указаны экспериментальные пороги и полученные нами разложения волновых функций по базисным функциям LS -связи.

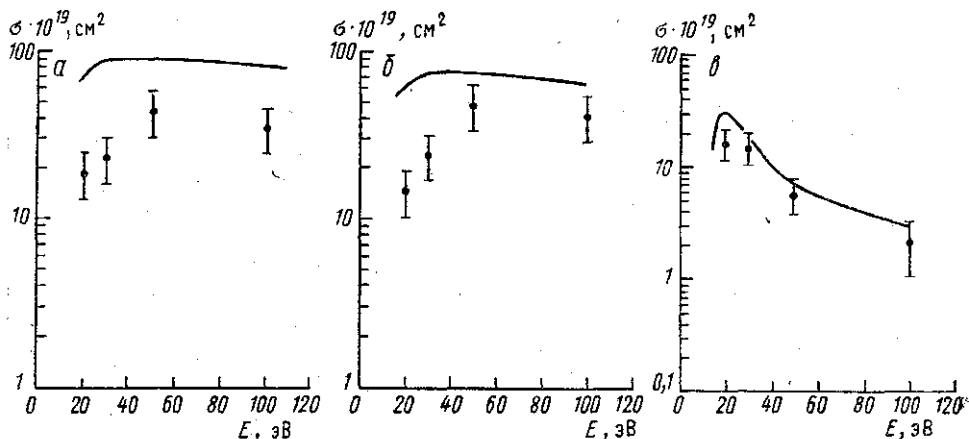


Рис. 1. Сечения возбуждения уровней с $J=1$ (а, б), 3 (в): а — $3d[3/2]_1$ (14,153 эВ, 59,1% $^1P+40,9\%$ 3D); б — $3d'[3/2]_1$ (14,304 эВ, 39,5% $^1P+3,5\%$ $^3P+56,9\%$ 3D); в — $3d[7/2]_3$ (14,13 эВ, 2,9% $^3D+27,3\%$ $^1F+69,9\%$ 3F). Экспериментальные точки взяты из работы [2]

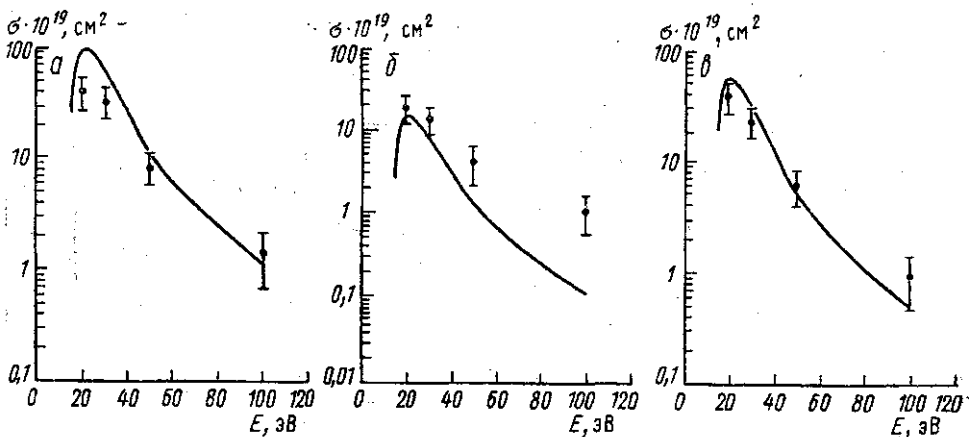


Рис. 2. Сечения возбуждения уровней с $J=2$ (а, б), 4 (в): а — $3d[3/2]_2$ (13,903 эВ, 4,6% $^1D+88,4\%$ $^3P+7,0\%$ 3D); б — $3d'[5/2]_2$ (14,214 эВ, 32,8% $^1D+21,7\%$ $^3D+45,4\%$ 3F); в — $3d[7/2]_4$ (13,979 эВ, 100% 3F). Экспериментальные точки взяты из работы [2]

Уровни с $J=1, 3$ возбуждаются за счет как прямой, так и обменной амплитуд (рис. 1). Сечения возбуждения состояний с $J=1$ (рис. 1, а, б) имеют широкий максимум и медленно спадают с ростом энергии, демонстрируя типичное для дипольных переходов поведение. Как и в расчетах [4, 8], полученные сечения превышают экспериментальные примерно в 2 раза. Третий уровень с $J=1$ практически не имеет синглетной компоненты, и ход сечения в области максимума определяется быстро убывающей с ростом энергии обменной амплитудой перехода на 3P - и 3D -компоненты (см. таблицу). Для уровней с $J=3$ сечение при больших энергиях определяется прямой октупольной амплитудой, которая убывает с энергией быстрее дипольной.

| Уровень | Энергия (эВ) | | | | | | |
|------------------------|--------------|-------|------|------|------|------|------|
| | 16 | 20 | 30 | 40 | 50 | 60 | 100 |
| 3d [3/2] ₂ | 26,1 | 99,3 | 65,2 | 25,4 | 10,7 | 5,5 | 1,1 |
| 3d [5/2] ₂ | 9,8 | 19,7 | 10,1 | 3,76 | 1,5 | 0,74 | 0,12 |
| 3d' [5/2] ₂ | 7,8 | 17,3 | 9,0 | 3,33 | 1,31 | 0,63 | 0,11 |
| 3d' [3/2] ₂ | 6,0 | 14,4 | 7,68 | 2,83 | 1,08 | 0,5 | 0,08 |
| 3d [7/2] ₃ | 22,2 | 31,62 | 19,0 | 10,1 | 6,42 | 5,68 | 2,80 |
| 3d [5/2] ₃ | 9,2 | 13,4 | 9,66 | 6,83 | 5,04 | 4,2 | 2,76 |
| 3d' [5/2] ₃ | 11,1 | 17,2 | 11,4 | 6,94 | 4,8 | 4,71 | 2,4 |
| 3d [1/2] ₁ | 50,0 | 80,9 | 59,4 | 31,2 | 20,5 | 16,5 | 11,5 |
| 3d [3/2] ₁ | 64,7 | 69,4 | 89,0 | 89,0 | 88,3 | 87,3 | 77,8 |
| 3d' [3/2] ₁ | 56,8 | 59,0 | 72,7 | 71,5 | 70,5 | 69,6 | 61,6 |
| 3d [1/2] ₀ | 12,0 | 24,2 | 16,7 | 6,5 | 2,7 | 1,36 | 0,27 |
| 3d [7/2] ₄ | 36,2 | 58,2 | 31,7 | 11,5 | 4,76 | 2,41 | 0,45 |

(рис. 1, в). Расчетные данные хорошо соответствуют экспериментальным, несколько превышая их в максимуме.

В нашей модели уровни с $J=0, 2, 4$ возбуждаются только за счет обменной амплитуды. Это приводит к резкому падению рассчитанных сечений с ростом энергии. Для уровня с $J=4$ наблюдается хорошее согласие с экспериментом (рис. 2, в). Для уровней с $J=2$ ситуация сложнее. Расчеты удовлетворительно воспроизводят данные [2] для состояния $3d [3/2]_2$ (в особенности при больших энергиях), в то время как для состояния $3d' [5/2]_2$ рассчитанное сечение при 100 эВ на порядок меньше экспериментального (рис. 2, а, б). Такое отличие в соответствии между теоретическими и экспериментальными результатами для этих двух уровней может быть связано с существенно различным весом компоненты 1D в их волновых функциях. При тех энергиях, для которых обменная амплитуда мала, сечение для уровня $3d' [5/2]_2$ с большой 1D -компонентой может определяться вкладом прямой амплитуды второго порядка, учитывающей виртуальные дипольные переходы через промежуточные состояния. В наших приближениях эти переходы не учитываются.

Представленные результаты показывают, что метод перспективен при расчете сечений возбуждения состояний тонкой структуры, в особенности для переходов высокой мультипольности и интеркомбинационных переходов. Для дальнейшего улучшения теоретической модели актуален учет виртуальных переходов через промежуточные уровни.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Mental J. E., Morgan H. D. // Phys. Rev. 1976. A14. P. 957. [2] Chutjian A., Cartwright D. C. // Phys. Rev. 1981. A23. P. 2178. [3] Lassetre E. N., Skerbele A., Dillon M. A., Ross K. J. // J. Chem. Phys. 1968. 48. P. 5066. [4] Peterson L. R., Allen J. E. // J. Chem. Phys. 1972. 56. P. 6068. [5] Ganap P. S., Green A. E. S. // Phys. Rev. 1971. A4. P. 182. [6] Eggarter E. // J. Chem. Phys. 1975. 62. P. 833. [7] Bretagne J., Calledé G., Legentil M., Puech V. // J. Phys. D. 1986. 19. P. 761. [8] Балашов В. В., Грум-Гржимайло А. Н., Храпов А. А. // Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон. 1988. 29, № 2. С. 78. [9] Wiese W. L., Wridges J. M., Kornblith R. L., Kelleher D. E. // J. Opt. Soc. Am. 1969. 59. P. 1206. [10] Lilly R. A. // J. Opt. Soc. Am. 1976. 66. P. 245. [11] Bartschat K., Madison D. H. // J. Phys. B. 1987. 20. P. 5839.

Поступила в редакцию
18.06.90