

Алгоритм для расчёта зеемановского расщепления.

SUNWORLD - КОМПЛЕКС ПРОГРАММ И ДАННЫХ
ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ ФИЗИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ
В СОЛНЕЧНОЙ АТМОСФЕРЕ

I. ZEEMAN - АЛГОРИТМ РАСЧЕТА ЗЕЕМАНОВСКОЙ СТРУКТУРЫ СПЕКТРАЛЬНЫХ ЛИНИЙ.

С.Г.МОЖАРОВСКИЙ

Что такое эффект Зеемана и как он проявляется при наблюдении солнечных спектральных линий подробно описано Бреем и Лоухедом (1964).

Наша задача описать алгоритм, полностью определяющий структуру зеемановского расщепления.

ОСНОВНЫЕ ФОРМУЛЫ

Состояние атома, внесенного в магнитное поле, изменяется - приобретает значение ранее вырожденное магнитное квантовое число M , которое пробегает значения от J до $-J$.

(Если L - орбитальный момент электрона, а S - спиновый, то J - суммарный момент, который меняется от $|L-S|$ до $L+S$)

Когда атом излучает или поглощает свет в процессе перехода электрона с одного уровня на другой, то образующаяся спектральная линия расщепляется на подкомпоненты. Правила отбора для M разрешают три типа компонент:

компонента	!	low	up	
π	!	$M \rightarrow M$		
$\sigma_{b(blue)}$	!	$M \rightarrow M+1$		(1)
$\sigma_{r(red)}$	!	$M \rightarrow M-1,$		

каждая из которых специфичным образом поляризована.

Т.к. структура зеемановского расщепления для линий излучения и поглощения идентична, для полного описания алгоритма достаточно рассматривать переходы только с нижнего атомного уровня на верхний (low $\rightarrow$ up), т.е. переходы, соответствующие линиям поглощения.

Соответствующие π и σ компонентам факторы Ланде (т.е. состояния компонент от положения нерасщепленной линии в единицах Лоренца) будут равны :

$$\begin{aligned} g_l \cdot M - g_u \cdot M & \quad \text{для } \pi, \\ g_l \cdot M - g_u \cdot (M+1) & \quad \text{для } \sigma_b \text{ и} \quad (2) \\ g_l \cdot M - g_u \cdot (M-1) & \quad \text{для } \sigma_r, \end{aligned}$$

где g_l и g_u - факторы Ланде нижнего и верхнего атомных уровней. Они также измеряются в единицах Лоренца

$$o = 4.66860 \cdot 10^{-5} \left[\text{cm}^{-1} \cdot \text{G}^{-1} \right] = \frac{e}{4\pi \cdot m_e \cdot c},$$

могут быть определены лабораторным способом (их можно взять из

таблицы Ш.Мур (1971)), а если нет отклонений от LS -связи, то вычисляются по формуле:

$$g = 1 + \frac{J(J+1) - L(L+1) + S(S+1)}{2J(J+1)}, \quad (3)$$

где S - спиновое, L - орбитальное квантовые числа, J - суммарный квантово-механический момент.

Относительные интенсивности компонент, которые будут наблюдаться в продольном магнитном поле, задаются таблицей 1:

	$J \rightarrow J-1$	$J \rightarrow J$	$J \rightarrow J+1$
$\sigma_r \quad M \rightarrow M-1$	$\frac{1}{4}(J+M)(J+M-1)$	$\frac{1}{4}(J+M)(J-M+1)$	$\frac{1}{4}(J-M+2)(J-M+1)$
$\pi \quad M \rightarrow M$	$(J+M)(J-M)$	$M \cdot M$	$(J+1+M)(J+1-M)$
$\sigma_b \quad M \rightarrow M+1$	$\frac{1}{4}(J-M)(J-M-1)$	$\frac{1}{4}(J-M)(J+M+1)$	$\frac{1}{4}(J+M+2)(J+M+1)$

Суммы относительных интенсивностей P_i нормируются следующим образом:

$$\sum_{i \in \pi} P_i = \sum_{i \in \sigma_r, \sigma_b} P_i = \frac{1}{2}$$

Структуру зеемановского расщепления принято записывать в виде дроби Рунге (см. Фриш С.Э. "Оптические спектры атомов" §§62-64, физматгиз, М., Л., 1963), в которой приводятся факторы Ланде всех компонент расщепления в виде обыкновенных дробей с одним и тем же значением знаменателя и разными числителями. Дело в том, что согласно формуле (3) факторы Ланде для обоих атомных уровней g_l и g_u записываются в виде обыкновенных дробей. Таким образом, знаменатель дроби Рунге, это наименьшее общее кратное знаменателей g_l и g_u (умноженное на 2, если квантовые числа принимают полуцелые значения).

Т.к. расщепление зеркально симметрично относительно центра линии, в дроби Рунге перечисляется только половина π -компонент (для $M \geq 0$) и σ -компонент (только σ_r компоненты).

Для полного описания зеемановской структуры нужна еще дробь с относительными интенсивностями компонент, которые вычисляются по таблице 1.

ПРИМЕРЫ ОПИСАНИЙ СТРУКТУРЫ ЗЕЕМАНОВСКОГО РАСЩЕПЛЕНИЯ:

ЛИНИЯ	ПЕРЕХОД	ДРОБЬ РУНГЕ	ОТНОСИТ. ИНТЕНС-ТИ
Fe I 6302.5	z 5P 1 - e 5D 0	$\frac{(0),5}{2}$	$\frac{(2),1}{4}$
Fe I 6151.6	a 5P 3 - y 5D 2	$\frac{(0,1,2),12,11,10,9,8}{6}$	$\frac{(18,16,10),15,10,6,3,1}{4}$
Fe II 6149.2	b 4D ½ - z 4P ½	$\frac{(4),4}{3}$	$\frac{(1),1}{4}$

ЗАМЕЧАНИЕ ОТНОСИТЕЛЬНО ЦЕНТРАЛЬНОЙ π -КОМПОНЕНТЫ.

Центральная π -компонента имеющая фактор Ланде $g=0$ учитывается при подсчете интенсивностей как бы 2 раза - для $g=+0$ и для $g=-0$. Такую удвоенную интенсивность принято указывать в дроби, описывающей относительные интенсивности. Она автоматически вытекает из формул Таблицы 1, когда $M=0$. Однако возникает две проблемы:

1. Необходимо учитывать неравноправность интенсивности центральной π -компоненты при всех расчетах.
2. Если $M \neq 0$, но при этом фактор Ланде данной π -компоненты $g=0$, то необходимо взятую из таблицы 1 интенсивность удваивать искусственно, т.е. учитывать интенсивность компонент с $M=-M$.

ПОЛУЧЕНИЕ АЛГОРИТМА

Чтобы узнать структуру расщепления линии нужно просто посчитать для каждой компоненты фактор Ланде по формуле (2) и относительную интенсивность из таблицы 1. Но для этого нужно перебрать по порядку все ее компоненты.

Покажем этот перебор на примерах :

π - компоненты ($\Delta M = 0$); $J_l = 3, J_u = 2$:

$$\begin{array}{cccccc} J_u & & -2 & -1 & 0 & 1 & 2 \\ & & & & | & | & | \\ J_l & -3 & -2 & -1 & 0 & 1 & 2 & 3 \end{array} \quad \begin{array}{l} M_{begin} = 0 \text{ или } \frac{1}{2} \\ M_{end} = \min(J_l, J_u) \end{array}$$

σ_r - компоненты ($\Delta M = -1$); $J_l = 3, J_u = 2$:

$$\begin{array}{cccccc} J_u & & -2 & -1 & 0 & 1 & 2 \\ & & \backslash & \backslash & \backslash & \backslash & \backslash \\ J_l & -3 & -2 & -1 & 0 & 1 & 2 & 3 \end{array} \quad \begin{array}{l} M_{begin} = 3 = J_l \\ M_{end} = -1 = -(J_u - 1) \end{array}$$

σ_r - компоненты ($\Delta M = -1$); $J_l = 2, J_u = 3$:

$$\begin{array}{cccccc} J_u & -3 & -2 & -1 & 0 & 1 & 2 & 3 \\ & \backslash & \backslash & \backslash & \backslash & \backslash & & \\ J_l & & -2 & -1 & 0 & 1 & 2 & \end{array} \quad \begin{array}{l} M_{begin} = 2 = J_l \\ M_{end} = -2 = -(J_u - 1) \end{array}$$

Из примера видно, каким образом нужно выбирать начальное и конечное значения M_{begin} и M_{end} , чтобы перебрать все π и σ -компоненты.

Если мы вычисляем структуру расщепления на компьютере, то дробь Рунге и относительные интенсивности компонент проще задать в виде двух массивов действительных чисел, однако, для подсчетов вручную удобнее именно целые дроби. В литературе структура зеемановского расщепления линий чаще всего приводятся также в виде обыкновенных дробей.

КОМПЬЮТЕРНАЯ ПРОГРАММА

Самым удобочитаемым языком программирования является Паскаль. Конкретно программа вычисления зеемановской структуры линий была написана на Паскале ОС РАФОС, а затем переведена на Турбо Паскаль. Основные алгоритмы сведены в **Unit ZEE**, листинг которого помещен в приложение 1. Программа **ZEEMAN** демонстрирует использование **Unit ZEE** - читает символьное обозначение атомного перехода в файле, вычисляет структуру расщепления, записывает ее в другой текстовый файл и показывает картинку расщепления на экране. Листинг программы **ZEEMAN**, ее **INCLUDE**-файлов и входного файла данных, описывающего в виде примера атомные переходы помещен в приложение 2.

В программном модуле **ZEE** содержатся:

1. Два варианта структуры данных для описания зеemanовского расщепления.

Первый вариант - это запись (**record**), которая включает количество компонент расщепления всего, количество п-компонент, массив действительных значений факторов Ланде, массив относительных интенсивностей.

Во втором варианте факторы Ланде и относительные интенсивности представлены в виде обыкновенных дробей следующим образом

массив числителей дроби Рунге,
массив числителей относительных интенсивностей,
знаменатель дроби Рунге,
нормирующий знаменатель интенсивностей.

2. Соответственно, два варианта функции определения структуры расщепления линии в виде дроби Рунге

```
SetRUNGE И
SetIRUNGE.
```

Первая из функций достаточно хорошо прокомментирована, чтобы из нее был ясен алгоритм вычисления структуры зеemanовского расщепления. Обе функции содержат проверки входных параметров на соответствие физическому смыслу.

- ### 3. Функция проверки совместимости квантовых чисел J, L и S : TestJLS

4. Функция нахождения фактора Ланде атомного уровня в случае L-S связи для известных квантовых чисел J, L и S в двух вариантах :

CalcG_LS - в виде действительного числа,
CalcGI_LS - в виде обыкновенной дроби.

5. Функция определения квантовых чисел J, L и S - т.е. суммарного, орбитального и спинового из символического описания атомного уровня :
GetQUAN

Символьное описание должно иметь стандартный вид - длину 10 символов и строгое расположение полей:

[illegible]

Следующие процедуры предназначены только для варианта представления структуры расщепления в виде целых дробей:

6. Процедура, позволяющая выстроить сигма-компоненты по убыванию интенсивностей:

ReversZEE

7. Процедура для вывода информации о расщеплении линии в текстовый файл:

OutZEE

8. Процедура для вычисления эффективного фактора Ланде:

CalcGEff

Программа **ZEEMAN** включает ряд **INCLUDE** файлов:

1. **Utils** - полезные вспомогательные процедуры, среди них:
ОСТАНОВКА ДО НАЖАТИЯ НА ЛЮБУЮ КЛАВИШУ
ПРЕОБРАЗОВАНИЕ ЦЕЛОГО В СТРОКУ
ВЫВОД СООБЩЕНИЯ ОБ ОШИБКЕ И ОСТАНОВ ПРОГРАММЫ
ОТКРЫТИЕ ТЕКСТОВОГО ФАЙЛА
2. **GrInit** - подключение графического пакета Турбо Паскаля
3. **ZeeDrow** - процедуры для рисования зеемановской структуры
4. **ZeeDemo1** - расчет расщепления и вывод результатов в файл
5. **ZeeDemo2** - расчет расщепления и вывод на экран картинки