

01; 02

© 1990 г.

ИОНИЗАЦИЯ И ВИБРОННЫЕ ПЕРЕХОДЫ ПРИ МЕДЛЕННЫХ СТОЛКНОВЕНИЯХ ВЫСОКОВОЗБУЖДЕННЫХ АТОМОВ С МОЛЕКУЛАМИ

Г. В. Голубков, Г. К. Иванов

Исследуются неупругие переходы и ионизация, протекающие при столкновении ридберговских атомов A^{**} с двухатомными молекулами X_2 . Рассмотрение проводится на основании информации об адиабатических и вибронных термах квазимолекулы $A^{**}X_2$, найденных асимптотическим методом. Показано, что при медленных столкновениях с колебательно-невозбужденными молекулами основным каналом обмена колебательной энергией являются прямые вибронные переходы в ковалентные состояния системы с $v=1$. Причем в квазирезонансных условиях, когда энергетический дефект мал (т. е. выполняются условия $|\Delta E| \ll \ll 1/n_1^3$ и $|\Delta E| \ll 1/n_0^3$, где n_0 и n_1 — квантовые числа при $v=0$ и 1), соответствующие сечения могут существенно превышать газокинетические. Исследован гарпунный механизм ионизации высоковозбужденных атомов A^{**} , обусловленный переходом на ионную конфигурацию $A^+X_2^-$ с последующей автоионизацией. Конкретные расчеты выполнены для молекул H_2 и N_2 .

Введение

Высоковозбужденные (ридберговские) состояния атомов и молекул в последние годы стали предметом интенсивного исследования, что объясняется их важной ролью в различных астрофизических и плазмохимических явлениях, а также возможностью широкого применения ридберговских состояний в различных областях прикладной физики. В настоящей работе рассматриваются особенности взаимодействия ридберговских атомов A^{**} с двухатомными молекулами X_2 , находящимися в основном состоянии, т. е. эффект Пеннинга исключается. Этим рассматриваемая ситуация отличается от тех, которые в теории взаимодействия ридберговских атомов и молекул исследованы наиболее подробно [1].

На первом этапе изучаются поверхности потенциальной энергии (ППЭ) квазимолекулы $A^{**}X_2$. Эта задача сводится к анализу поведения кулоновских уровней в поле двух нейтральных центров — ионного остова и молекулы X_2 (расстояние R между ними предполагается много больше их характерных размеров). Анализ проводится асимптотическим методом, позволяющим найти аналитическое представление для адиабатических ППЭ и вибронных термов квазимолекулы $A^{**}X_2$.

На втором этапе рассматривается динамика столкновительных процессов. Здесь используется подход, основанный на исследовании областей квазипересечения термов. При малых скоростях сталкивающихся частиц v_c этот подход представляется более последовательным, чем импульсное приближение, широко используемое в аналогичных задачах. Импульсное приближение (см., например, [1]) может быть строго обосновано при достаточно больших скоростях, в то время как рассматриваемая нами область $v_c \ll n^{-2}$ (n — главное квантовое число ридберговского атома, $\hbar = m_e e = 1$).

Следует отметить, что исследование столкновительных процессов на основе анализа электронных термов в системе $A^{**} + X_2$ проводилось и ранее. Вибронные переходы в этой системе изучались с помощью многоканальной модели потенциалов нулевого радиуса (ПНР) [2] (случай S -рассеяния). В приложе-

нии потенциалов конечного радиуса (позволяющих учитывать различные отклонения от нуля угловые моменты) (ПКР) [3] аналогичная задача решалась в [4, 5]. В работе [4] ППЭ системы $A^{**} + X_2$ рассматривалась с учетом Σ_u -резонансного состояния в $e^- - X_2$ рассеянии (модель молекулы H_2). В [5] с помощью приближения ПКР был сформулирован общий метод расчета взаимодействия термов ионной $A^+ X_2^-$ и ковалентных конфигураций. Теория располагает также асимптотически точным решением задачи о возмущении высоковозбужденных уровней атома в поле атома [6-10] и двухатомной молекулы [8] с учетом их поляризуемости и мультипольных характеристик. В настоящей работе асимптотический метод (без привлечения ПНР и ПКР моделей) применяется для исследования адиабатических ППЭ и вибронных термов квазимолекулы $A^{**} X_2$ с учетом влияния ионного остова в A^{**} , искажающего кулоновское поле на малых расстояниях. Изучены области псевдопересечения термов и наиболее эффективные каналы обмена энергией при медленных столкновениях частиц.

Общая характеристика термов квазимолекулы $A^{**} X_2$

Наличие двух хорошо разделенных (а в первом приближении и независимых) нейтральных центров предопределяет характер возмущаемых ими кулоновских уровней системы. Ионным остовом возмущаются состояния с малым угловым моментом электрона l относительно возмущающего центра ($l=0, 1, 2$). Поле молекулы в свою очередь оказывает влияние только на такие суперпозиции состояний кулоновского центра, которые обладают малыми значениями углового момента L относительно молекулы X_2 . Эти две «разноцентровые» группы термов будем сокращенно называть l - и L -термами. При $n \gg 1$ система обладает также множеством термов, характерных для чисто кулоновского центра.

Введем колебательные волновые функции χ_v молекулы X_2^1 и функции $\Phi_{lm}^{(v)}$ и $\varphi_{LM}^{(v)}$, описывающие движение электрона с энергией $\epsilon_v = E - E_v$ (E_v — энергия колебаний X_2) в поле ионного остова A^+ и в окрестности возмущающей частицы X_2 (при $k_v^2 = 2(\epsilon_v + 1/R) > 0$), т. е.

$$\Phi_{lm}^{(v)}(\mathbf{r}) = (\pi\nu_v^2)^{1/2} R_{\nu_v l}(r) Y_{lm}(\hat{r}),$$

где $Y_{lm}(\hat{r})$ — шаровая функция; $R_{\nu_v l}(r)$ — радиальная волновая функция, которая для целочисленных значений $\nu_v + \mu_l = n$ ($\nu_v = (-2\epsilon_v)^{-1/2}$ — эффективное главное квантовое число, μ_l — квантовый дефект) совпадает с нормированной на единицу функцией атома A^{**} ;

$$\varphi_{LM}^{(v)}(\rho) = \sqrt{2} j_L(k_v \rho) Y_{LM}(\hat{\rho}), \quad (\rho = \mathbf{r} - \mathbf{R}),$$

$j_L(x)$ — сферическая функция Бесселя; \mathbf{r} и ρ — радиус-векторы, отсчитываемые от A^+ и X_2 соответственно; $\hat{\rho}$ — угловые переменные в системе X_2 .

В результате несложных преобразований (см. подробнее в [8, 11]) запишем систему алгебраических уравнений для матричных элементов оператора сдвига τ в виде

$$\begin{aligned} \tau_{vv'}^{LL'} &= \sum_{v''L''} K_{vv''}^{LL''} k_{v''} \text{ctg} \pi \nu_{v''} \tau_{v''v'}^{L''L'} + \sum_{v''L''} K_{vv''}^{LL''} \text{ctg} \pi (\nu_{v''} + \mu_l) \tau_{v''v'}^{L''L'}, \\ \tau_{vv'}^{lL} &= \sum_{v''L''} K_{vv''}^{lL''} k_{v''} \text{ctg} \pi \nu_{v''} \tau_{v''v'}^{L''L} + \sum_{v''L''} K_{vv''}^{lL''} \text{ctg} \pi (\nu_{v''} + \mu_l) \tau_{v''v'}^{L''L}, \end{aligned} \quad (1)$$

(суммирование по v'' распространяется только на состояния с $k_{v''} > 0$, которые вносят вклад в классически доступной области движения электрона, индексы m и M предполагаются фиксированными).

Порядок этой системы равен числу учитываемых состояний L, l и v . Элементы $K_{vv'}^{LL'}$, $K_{vv'}^{lL}$ и $K_{vv'}^{lL'}$ здесь определены следующим образом:

¹ Ориентацию молекулы X_2 мы считаем фиксированной, описывая вращение в адиабатическом приближении, и опускаем соответствующие угловые функции. Не рассматриваются также и спиновые переменные, поскольку они без труда могут быть включены в общую схему.

$$K_{vv'}^{LL'} = \langle \chi_{\nu} \Phi_{LM}^{(\nu)} | K | \Phi_{L'M'}^{(\nu')} \chi_{\nu'} \rangle, \quad K_{vv'}^{L'L} = \langle \chi_{\nu'} \Phi_{L'M'}^{(\nu')} | K | \Phi_{LM}^{(\nu)} \chi_{\nu} \rangle, \quad (2)$$

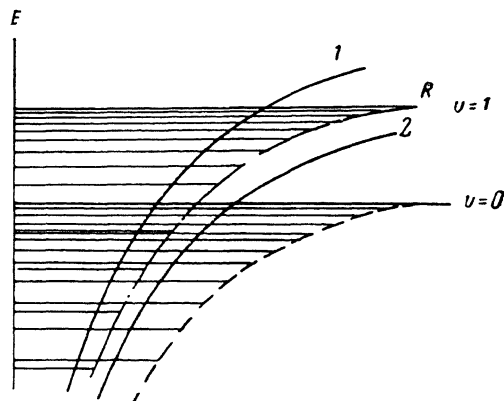
$$K_{vv'}^{L'L} = \langle \chi_{\nu'} \Phi_{L'M'}^{(\nu')} | K | \Phi_{L'M'}^{(\nu')} \chi_{\nu'} \rangle. \quad (2)$$

Существуют два механизма взаимодействия медленных электронов с молекулами: прямой и резонансный. Прямой механизм (потенциальное или фоновое рассеяние) описывается, как известно, в адиабатическом приближении

$$\sqrt{k_{\nu} k_{\nu'}} K_{vv'}^{(0)LL'} = - \langle \chi_{\nu} | \text{tg } \delta_{L\nu} | \chi_{\nu'} \rangle \delta_{LL'}, \quad (3)$$

$\delta_{L\nu}$ — фаза упругого рассеяния, определенная при энергии, равной кинетической энергии электрона в точке расположения молекулы X_2 (как обычно, предполагается, что для гомеоатомных молекул L является «хорошим» квантовым числом).

Недиагональные по ν члены в (3) малы по сравнению с диагональными из-за наличия малого параметра a_0/ξ_s (a_0 — амплитуда нулевых колебаний, ξ_s — равновесное расстояние в молекуле X_2), поэтому взаимодей-



Ковалентные и ионные термы системы $A^{**}+X_2$, принадлежащие различным колебательным состояниям молекулы X_2 и иона X_2^- .

Штриховая линия и штрихпунктир — границы области классического движения электрона при $\nu=0$ и 1. 1 — U_i ($\nu=1$), 2 — U_i ($\nu=0$).

ствие вибронных термов $A^{**}X_2$ существенно только в окрестности их псевдопересечения. При наличии резонансного взаимодействия оператор

$$K = K^{(0)} + \sum_s V \frac{|\varphi_r^{(s)}\rangle \langle \varphi_r^{(s)}|}{E' - (E_r + E_s)} V \quad (E' = E + 1/R), \quad (4)$$

где $\varphi_r^{(s)}$ — полные волновые функции s -го состояния ионной конфигурации $A^+X_2^-$, E_r и E_s — положение резонанса и энергия колебаний комплекса X_2^- .

Полюса второго слагаемого в (4) определяют положение термов ионной конфигурации $U_i^{(s)}(R) = E_r + E_s - 1/R$, принадлежащих различным колебательным состояниям s . Оператор (4) задается единым образом как для положительных, так и отрицательных энергий. Схематическое изображение ковалентных и ионных термов системы $A^{**}+X_2$ дано на рисунке.

Если пренебречь колебательными переходами в молекуле, то уравнения (1) будут описывать основные группы ковалентных термов с большими l ($l \sim n$) и малыми l ($l \sim 1$) соответственно, т. е.

$$\begin{aligned} 1 - k_{\nu} K_{vv}^{LL} \text{ctg } \pi \nu_s &= 0, \\ 1 - K_{vv}^{L'L} \text{ctg } \pi (\nu_s + \mu_l) &= 0, \end{aligned} \quad (5)$$

а при наличии резонансов в $e^- - X_2$ рассеянии и ионные термы $U_i^{(s)}$. При удалении от классической точки поворота ($R_0 = 2n_s^2$) L -термы меняются по корневому закону

$$U_{LM}^{(s)}(R) = E_s - \frac{1}{2n_s^2} + K_{vv}^{LL} \left(\frac{2}{R} - \frac{1}{\nu_s^2} \right)^{1/2} \frac{1}{\pi \nu_s^2},$$

где величина K_{vv}^{LL} при малых значениях $|E|_{\beta} \ll 1$, $|E|^{1/2}/|Q| \ll 1$ известным образом выражается через длину рассеяния a , поляризуемость β и квадрупольный момент Q молекулы X_2 [8]. Сдвиг ридберговских уровней с $l \sim 1$ и $\mu_l \neq 0$, согласно (5), есть

$$\Delta_{lm}^{(s)} = K_{vv}^{L'L} \frac{1}{\pi \nu_s^2},$$

где K_{vv}^{ll} в наиболее важном случае, когда преобладает S -рассеяние электрона на молекуле X_2 , связан с элементом K_{vv}^{ll} соотношением

$$K_{vv}^{ll} = 2\pi |\Phi_{lm}^{(v)}(\mathbf{R})|^2 K_{vv}^{LL} \quad (L=0).$$

Поскольку $|\Phi_{lm}^{(v)}|^2 \sim 1/(k_v R^2)$ (k_v — квазиклассический импульс электрона в точке R), отношение $\Delta_{lm}^{(v)}/\Delta U_{LM}^{(v)} \sim (k_v/R)^{-2}$. Поэтому в дальнейшем изменениями в положении l -термов мы будем пренебрегать, полагая $K_{vv}^{ll} = 0$.

Взаимодействие вибронных состояний квазимолекулы $A^{**}X_2$

Выражения (5) получены в предположении, что описываемые ими группы термов не взаимодействуют друг с другом. Учет взаимодействия при малых v ($v \sim 1$) дает ППЭ, близкую к адиабатической поверхности. Квазипересечения ППЭ, возникающие в такой перестроенной системе термов, ответственные за процессы, протекающие с изменением углового момента l или энергии атома при неизменном колебательном состоянии молекулы X_2 . Вибронные же переходы формируются за счет квазипересечения термов, принадлежащих различным колебательным состояниям. Для определенности рассмотрим два семейства ковалентных термов с $v=0$ и 1. Терм, отвечающий состоянию $v=1$, может меняться довольно резко (на фоне слабоменяющихся термов $v=0$) и пересекать целую совокупность таких термов. Расщепление $\Delta = 2V$ термов в точке их квази-пересечения $R_c^{(v)}$ может быть найдено из уравнений (1), если выделить в них соответствующую пару сильно связанных состояний. Для величин V_{vv}^{LL} и $V_{vv'}^{ll}$, описывающих взаимодействие nLv с $n'Lv'$ - и $n'lv'$ -состояниями, имеем

$$|V_{vv'}^{LL}|^2 = \frac{k_v k_{v'}}{\pi^2 v^3 v'^3} |K_{vv'}^{LL}|^2, \quad (6)$$

$$|V_{vv'}^{ll}|^2 = \zeta_{v'} |V_{vv'}^{LL}|^2, \quad (7)$$

где ζ_v характеризует вероятность нахождения электрона с кинетической энергией $E_k = E - E_v + 1/R$ вблизи молекулы X_2 и определяется как $(R\xi - \text{вектор } \mathbf{R} \text{ в системе координат, связанной с } X_2)$

$$\zeta_v = \frac{8\pi^2}{k_v} |Y_{LM}(\hat{R}_\xi)|^2 |Z_{Ll}^{(v)}(\mathbf{R})|^2,$$

$$Z_{Ll}^{(v)}(R) = \begin{cases} \Phi_{lm}^{(v)}(\mathbf{R}), & L = 2p, \\ \frac{1}{i} \bar{\Phi}_{lm}^{(v)}(\mathbf{R}), & L = 2p + 1 \end{cases} \quad (8)$$

($\bar{\Phi}_{lm}^{(v)}$ отличается от $\Phi_{lm}^{(v)}$ сдвигом фазы на $\pi/2$).

Из (7) и (8) следует, что $|V_{vv'}^{ll}|^2 / |V_{vv'}^{LL}|^2 \sim (k_v R)^{-2}$, т. е. в орбитально-вырожденном состоянии термы искажаются сильнее и соответственно сильнее взаимодействуют с другими термами.

Из уравнений (1) нетрудно также определить взаимодействие nLv - и nlv -состояний с состояниями ионной конфигурации $A^+X_2^-$. В этом случае

$$|V_{vs}^{li}|^2 = \frac{\Gamma_{vs}}{2\pi v^3}, \quad (9)$$

$$|V_{vs}^{li}|^2 = \zeta_v \frac{\Gamma_{vs}}{2\pi v^3}, \quad (10)$$

где Γ_{vs} — парциальная амплитуда распада квазистационарного комплекса X_2^- по каналу $e^- - X_2$ рассеяния.

Сечения вибронных переходов

Рассмотрим теперь столкновение высоковозбужденного атома A^{**} с молекулой X_2 (находящейся в основном состоянии), т. е. процессы

$$A^{**}(n, l \sim 1) + X_2(v=0) \rightarrow A^{**}(n', l \gg 1) + X_2(v'), \quad (11)$$

$$A^{**}(n, l \gg 1) + X_2(v=0) \rightarrow A^{**}(n', l \gg 1) + X_2(v'). \quad (12)$$

Состояния с малыми l ($l \sim 1$) заселяются обычно при резонансном фотопоглощении, а состояния с $l \gg 1$ — электронным ударом. При низких скоростях v_c сталкивающихся частиц переходы происходят в областях псевдопересечения термов. Известная точно решаемая модель в теории неадиабатических переходов [12] приводит к выводу, что достаточно надежная оценка сечений может быть получена в приближении независимых ландау-зинеровских переходов. Составим выражение для параметра Ландау—Зинера, с помощью которого описывается вероятность неадиабатического перехода между двумя пересекающимися термами

$$\eta_{rr'} = \frac{2\pi |V_{rr'}|^2}{F_c v_c^2}, \quad (13)$$

где $V_{rr'}$ определяются формулами (6), (7) и (9), (10); F_c — сила, действующая со стороны крутого терма вдоль траектории.

Для простоты, считая эти траектории прямолинейными, ее можно записать в виде

$$F_c = \frac{1}{R} \left| \frac{dU_{LM}}{dR} \right| \sqrt{R^2 - \rho_c^2},$$

где ρ_c — прицельный параметр.

Ниже нам понадобится величина $\eta_{rr'}^{(0)}$, соответствующая лобовому соударению ($\rho_c=0$).

Неупругий переход ($n, v=0$) \rightarrow ($n', v=0$) связан с прохождением двух областей неадиабатичности. В соответствующее выражение для вероятности процесса малый множитель η входит дважды. Такой процесс менее вероятен, чем прямой вибранный переход, сечение которого можно представить как

$$\sigma_{01}^{L} = 4\pi g_{\lambda L} R_c^4 \frac{k_0 k_1^2 |K_{01}^{LL}|^2}{v_c^2 \nu_0^2 |K_{11}^{LL}|}. \quad (14)$$

Множитель $g_{\lambda L}$, входящий в (14), равен $g_{LL}=1/n_0^2$ в случае орбитально-вырожденных L -состояний. Для $\lambda=l$, согласно (8),²

$$g_{lL} = \frac{1}{(k_0 R_c)^2} \sin^2 \left(\alpha_l + \pi \mu_l + \frac{\pi L}{2} \right), \quad (15)$$

где α_l — кулоновская фаза в точке пересечения R_c (в (14) предполагается усреднение по m и угловым ориентациям X_2).

Заметим, что с увеличением n_0 сечение быстро уменьшается. Физическая причина здесь достаточно очевидна, поскольку с ростом n_0 возрастает размер ридберговского атома A^{**} и электрону «труднее» попасть в область перехода. Понятна и зависимость $\sigma \sim v_c^{-1}$, так как чем выше скорость, тем быстрее происходит область взаимодействия.

В табл. 1 приведены некоторые типы процессов (11), (12) с участием молекул H_2 и N_2 . Причем для процессов (11) представлены также данные, рассчитанные с весами $\langle g_{lL} \rangle$, усредненными по фазам осциллирующих функций (когда $\langle \sin^2(\alpha_l + \pi \mu_l + \pi L/2) \rangle$ в (15) полагается равным 1/2). Сечения этих процессов записаны в виде

$$\sigma_{01} = C \frac{|K_{01}|^2}{|K_{11}|} \frac{1}{v_c}. \quad (16)$$

Первые три процесса в табл. 1 относятся к типу (12) и протекают с участием L -термов, формируемых из орбитально-вырожденных состояний, когда сечение не зависит от свойств атома. Во всех рассмотренных случаях экзотермические реакции ($\Delta E > 0$) происходят вследствие прямого вибранный перехода на терм $L=0$. Принятые значения длин рассеяния и квадрупольных моментов составляют: $a=1.1$ [13] и $Q=0.5$ [14] для молекулы H_2 и $a=0.4$ [13] и $Q=-1.1$

² Если X_2 обладает отличным от нуля спином, то в (14) следует включить множитель $(1/2) (g_{X_2^-} / g_{X_2}) (g_{X_2^-}$ и g_{X_2} — спиновые веса).

Характеристики некоторых типов процессов (11), (12), рассчитанные с помощью формул (14), (16)

Процессы	ΔE , эВ	C	$\langle C \rangle$
$H (n=7) + H_2 (v=0) \rightarrow H (n'=4) + H_2 (v'=1)$	0.027	1.24	—
$H (n=5) + N_2 (v=0) \rightarrow H (n'=4) + N_2 (v'=1)$	0.014	5.17	—
$H (n=13) + N_2 (v=0) \rightarrow H (n'=6) + N_2 (v'=1)$	0.005	0.08	—
$Li (7s) + H_2 (v=0) \rightarrow Li (n'=4) + H_2 (v'=1)$	0.013	0.07	0.49
$Li (8p) + N_2 (v=0) \rightarrow Li (n'=5) + N_2 (v'=1)$	0.014	0.88	0.52
$K (9p) + N_2 (v=0) \rightarrow K (n'=5) + N_2 (v'=1)$	-0.007	1.96	1.75
$Na (12p) + N_2 (v=0) \rightarrow Na (n'=6) + N_2 (v'=1)$	-0.024	0.22	0.12

[14] для N_2 . Величины квантовых дефектов атомов щелочных металлов взяты из [15].

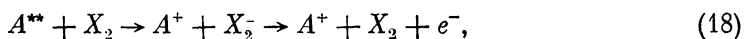
В двух последних эндотермических реакциях ($\Delta E < 0$) система переходит на термы $L=1$, $M=\pm 1$ (здесь необходимо также учитывать поляризуемость молекулы N_2 $\beta=11.7$ [14]). Для молекулы H_2 в качестве оценки можно принять $|K_{01}|^2/|K_{11}| \sim 0.1$. При тепловых энергиях характерная относительная скорость $v_c \sim 10^{-2}-10^{-3}$. В этих условиях сечения некоторых реакций существенно превышают газокINETические.

Перейдем теперь к рассмотрению неупругих переходов с участием ионной конфигурации $A^+X_2^-$. С этой целью оценим сечение образования состояния $A^+ + X_2^-(s)$, предполагая, что $v_c \gg 1/n^3$ и $(\Gamma_{vs}/n^3 v_c E_r^2) \ll 1$. При этих условиях сечение прямого перехода с терма $A^{**}X_2$ на ионный терм равно

$$\sigma_{\lambda_s}^{i_s} = 2\pi g_{\lambda L} R_{vs}^{(-)'} \frac{\Gamma_{vs}}{v_c v_c^3}, \quad (17)$$

где $R_{vs}^{(-)} = 1/(E_r + E_s - U_{\lambda}^{(v)})$ — точка пересечения термов; $g_{\lambda L}$ — статистический вес, определенный в (15).

Ионное состояние может заселяться после прохождения точки $R_{vs}^{(-)}$ как при сближении, так и разлете частиц A^{**} и X_2 , причем условие $(\Gamma_{vs}/n^3 v_c E_r^2) \ll 1$ позволяет рассматривать эти две области переходов независимо друг от друга, взяв в качестве $\sigma_{\lambda_s}^{i_s}$ соответствующую сумму вкладов. Эта величина дает верхнюю оценку сечений процессов типа (11), (12) и столкновительной ионизации



которая может быть весьма эффективной, поскольку ионный терм в точке $R_s^* = 1/(E_r + E_s)$ пересекает границу сплошного спектра и в области $R > R_s^*$ становится автоионизационным. Конкретная реализация процессов (11), (12) и (18), протекающих по гарпунному механизму, определяется последующей эволюцией состояния $A^+ + X_2^-(s)$ с момента его образования в окрестности точки $R_{vs}^{(-)}$.

Для нахождения сечения перехода воспользуемся результатами модели Демкова—Ошерова [12], в которой при описании эволюции системы по ионному терму достаточно ограничиться учетом взаимодействия с L -состояниями. Тогда при условии $|\Delta E| \ll E_r$, где $\Delta E = (1/2)[(1/n'^2) - (1/n^2)]$, суммирование по промежуточным главным квантовым числам n'' и интегрирование по прицельному параметру удается выполнить в аналитическом виде. Окончательное выражение для сечения $n\lambda v \rightarrow n'Lv$ перехода выглядит следующим образом:

$$\sigma_{n\lambda v \rightarrow n'Lv}^{i_s} = \sigma_{\lambda_s}^{i_s} E_1 \left(\frac{\beta |\Delta E|}{v_c} \right) \frac{\beta}{v_c v_c^3}, \quad (\beta = \Gamma_{vs} R_{vs}^{(-)'}), \quad (19)$$

где $E_n(x)$ — интегральная показательная функция.

Полученное выражение состоит из трех сомножителей, каждый из которых имеет прозрачный физический смысл. Первый представляет собой сечение за-

хвата в ионное состояние (17). Второй сомножитель описывает эффективную вероятность движения по ионному терму и, наконец, третий — вероятность перехода в конечное $n'L$ -состояние.

Роль ионной конфигурации в процессе ионизации высоковозбужденного атома A^{**} молекулой X_2

Согласно [16], где рассматривалась ударная ионизация за счет вытеснения терма в сплошной спектр, ионизация является полной, если $2\Gamma_{rs}^*(R_{rs}^{**} - v_c^2)^{1/2} \times \times v_c^{-1} > 1$. Очевидно, что в нашем случае увеличение кинетической энергии сталкивающихся частиц при этих условиях происходит на стадии сближения, а уменьшение — на стадии разлета. Соответствующее сечение ионизации с $n\lambda$ -го уровня, протекающей по гарпунному механизму, т. е. в результате перехода на ионный терм, в рассматриваемых условиях принимает вид

$$\sigma_{n\lambda v \rightarrow \text{ion}}^{i*} = \sigma_{\lambda v}^{i*} E_2(x), \quad (20)$$

где

$$x = \frac{1}{v_c} \Gamma_{rs} R_{rs}^{(-)} I_n,$$

I_n — энергетический порог реакции ($I_n = 1/2n^2$).

Выражения (19) и (20) получены для фиксированного состояния $X_2^-(s)$. Вследствие малости параметров γ_{nv}^i в каждом акте взаимодействия состояния

Таблица 2

Рекомендуемые значения параметров в формулах (19), (20) для описания процессов $A^{**} + N_2$

s	Γ_{0s}	Γ_{1s}	R_s^*	s	Γ_{0s}	Γ_{1s}	R_s^*
0	1.1	2.3	11.8	3	1.7	0.7	9.0
1	2.3	1.3	10.7	4	0.9	1.6	8.3
2	2.4	0.01	9.8	5	0.4	1.5	7.7

Примечание. Значение Γ_{0s} дано в единицах (10^{-3} а. е.).

с различными v слабо перемешиваются. Это означает, что связанно-связанные переходы $n_v \rightarrow n_v'$ происходят в основном без изменения колебательного состояния молекулы X_2 . Поэтому для получения полного сечения достаточно просуммировать парциальные сечения (20) по различным s (учитывая при этом и возможное вырождение ионного терма).

Приведем для иллюстрации некоторые конкретные примеры. Как известно, в системе $e^- + N_2$ при низких энергиях электрона имеется резонанс, обусловленный автораспадным Σ_n -состоянием ($L=1, M=0$). Для описания процессов $A^{**} + N_2$, связанных с заселением Σ_n -состояния N_2^- , в формулах (19), (20) можно положить $E_r = 1.7$ эВ, $\Gamma = 0.5$ эВ [5] (при этих значениях параметров количественно воспроизводится эксперимент по ионизации атомов K в основном состоянии молекулами водорода [4]). В табл. 2 приведены также рекомендуемые значения параметров формул (19), (20) для процессов с участием молекулы N_2 . Мы воспользовались результатами достаточно простой аналитической модели [17], хорошо описывающей резонансное $e^- - N_2$ рассеяние (${}^2\Pi_g$ — резонанс с энергией $E_r = 2.3$ эВ).

Список литературы

- [1] Ридберговские состояния атомов и молекул / Под ред. Р. Стеббингса, Ф. Даннинга. М.: Мир, 1985.
- [2] Далидчик Ф. И., Иванов Г. К. // Опт. и спектр. 1973. Т. 34. Вып. 5. С. 863—867.
- [3] Иванов Г. К. // ТЭХ. 1974. Т. 10. № 4. С. 450—455.
- [4] Иванов Г. К. // ТЭХ. 1974. Т. 10. № 3. С. 303—309.
- [5] Иванов Г. К. // Опт. и спектр. 1974. Т. 37. Вып. 4. С. 636—642.
- [6] Алексеев В. А., Собельман И. И. // ЖЭТФ. 1965. Т. 49. Вып. 4. С. 1274—1283.
- [7] Смирнов Б. М. Атомные столкновения и элементарные процессы в плазме. М.: Атомиздат, 1968. 364 с.

- [8] *Иванов Г. К.* // Опт. и спектр. 1977. Т. 43. Вып. 5. С. 1044—1049.
[9] *Omont A.* // J. Phys. 1977. Vol. 38. N 5. P. 1343—1352.
[10] *Du N. Y., Greene C. H.* // Phys. Rev. 1987. Vol. A36. N 2. P. 971—974.
[11] *Golubkov G. V., Ivanov G. K.* // Z. Phys. 1984. Vol. A319. P. 17—23.
[12] *Демков Ю. Н., Ошеров В. И.* // ЖЭТФ. 1967. Т. 53. Вып. 5. С. 1589—1599. *Nikitin E. E., Umanskiĭ S. Ya.* Theory of Slow Atomic Collisions. Springer Series in Chemical Physics 30. Berlin; Heidelberg; New York; Tokyo, 1984. 434 p.
[13] *Иванов Г. К.* // Опт. и спектр. 1976. Т. 40. Вып. 6. С. 965—970.
[14] *Радицг А. А., Смирнов Б. М.* Справочник по атомной и молекулярной физике. М.: Атомиздат, 1980. 224 с.
[15] *Собельман И. И.* Введение в теорию атомных спектров. М.: Наука, 1977. 45 с.
[16] *Голубков Г. В., Далидчик Ф. И., Иванов Г. К.* // ЖЭТФ. 1977. Т. 72. Вып. 8. С. 439—449.

Институт химической физики АН СССР
Москва

Поступило в Редакцию

29 марта 1989 г.

В окончательной редакции

20 ноября 1989 г.