

01; 02

© 1990 г.

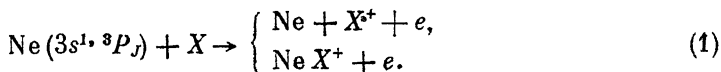
**ИОНИЗАЦИЯ ПРИ СТОЛКНОВЕНИЯХ
РЕЗОНАНСНО-ВОЗБУЖДЕННЫХ АТОМОВ $Ne(3s^{1,3}P_1)$
С АТОМАМИ Ag, Kr и Xe
РОЛЬ ПРЯМОГО
И ОБМЕННОГО МЕХАНИЗМОВ ИОНИЗАЦИИ**

А. Л. Загребин, Ю. Н. Себякин

Выполнен анализ структуры квазимолекулярных термов $Ne(2p^53s)+Ag, Kr, Xe$. Автоионизационные ширины резонансных квазимолекулярных состояний представлены в виде суммы вкладов прямого и обменного механизмов ионизации. Для прямого механизма использовано диполь-дипольное приближение. Обменные части автоионизационных ширины резонансных квазимолекулярных состояний выражены через ширины метастабильных состояний. С привлечением экспериментальных данных по сечениям ионизации атомов Ag, Kr и Xe метастабильными атомами $Ne(3s^2P_2)$ и $Ne(3s^3P_0)$ вычислены сечения ионизации резонансно-возбужденными атомами $Ne(3s^1P_1)$ и $Ne(3s^3P_1)$. Результаты расчетов согласуются с имеющимися экспериментальными данными для столкновений $Ne(3s^3P_1)+Ag, Kr, Xe$.

Введение

В последние годы значительно возрос интерес к процессам ионизации при медленных столкновениях атомов $Ne(3s)$ с атомами тяжелых инертных газов



где X — атомы Ag, Kr, Xe.

Практический интерес к этим реакциям обусловлен, в частности, созданием плазменных лазеров на переходах $Ne(3p-3s)$ с пеннингговской очисткой нижних лазерных уровней (см., например, [1-3]). Детальные экспериментальные исследования выполнены для метастабильных атомов $Ne(1s_2, 1s_5)^1$ [4-7]. В то же время столкновения с участием резонансно-возбужденных атомов $Ne(1s_2, 1s_4)$ экспериментально практически не исследовались (только в работе [8] измерялись сечения тушения $1s_4$ -состояния атома неона).

В настоящей работе выполнен анализ потенциалов взаимодействия для различных состояний квазимолекулы $Ne(2p^53s)+X(1S_0)$, определены автоионизационные ширины и вычислены сечения процесса (1) для столкновений с участием атома неона в резонансных $1s_2$ - и $1s_4$ -состояниях. В формулах используется атомная система единиц.

Потенциалы взаимодействия $Ne(2p^53s)+Ag, Kr, Xe$

Для теоретического расчета полного сечения ионизации в реакции (1) необходимо определить автоионизационные ширины $\Gamma(R)$ и потенциалы взаимодействия $U(R)$ для тех квазимолекулярных состояний $Ne(2p^53s)+X(1S_0)$,

¹ Ввиду сильного отклонения от LS-типа связи для атомных уровней конфигурации $Ne(2p^53s)$ далее используются обозначения Пашена (уровням $1P_1, 3P_0, 1, 2, 3$, обозначениях LS-связи соответствуют уровни $1s_2, 1s_3, 1s_4, 1s_5$ в обозначениях Иадена).

которые участвуют в процессе (1). Особенности структуры термов возбужденных состояний гетероядерных квазимолекул инертных газов $Y(np^5(n+1)s) + X(^1S_0)$ были исследованы в работах [9-11] в рамках метода эффективного гамильтониана [11-14]. В указанных работах показано, что диагональные матричные элементы $U_{\Omega(i)} = \langle 1s_i, \Omega | \hat{H} | 1s_i, \Omega \rangle$ (Ω — величина проекции полного электронного момента на межъядерную ось; $i=2, 3, 4, 5$) эффективного гамильтониана \hat{H} в базе квазимолекулярных волновых функций $|1s_i, \Omega\rangle$ типа связи «с», которые являются собственными функциями гамильтониана раздвиненных атомов, могут быть представлены в виде

$$\begin{aligned} U_{0^{+}(2)} &= \bar{U} - \frac{2}{3} \left(a^2 - \frac{b^2}{2} \right) \Delta V + E_2, & U_{1(2)} &= \bar{U} + \frac{1}{3} \left(a^2 - \frac{b^2}{2} \right) \Delta V + E_2, \\ U_{0^{-(3)}} &= \bar{U} + E_3, & U_{0^{+}(4)} &= \bar{U} + \frac{2}{3} \left(\frac{a^2}{2} - b^2 \right) \Delta V + E_4, \\ U_{1(4)} &= \bar{U} - \frac{1}{3} \left(\frac{a^2}{2} - b^2 \right) \Delta V + E_4, & U_{0^{-(5)}} &= \bar{U} + \frac{1}{3} \Delta V + E_5, \\ U_{1(5)} &= \bar{U} - \frac{1}{6} \Delta V + E_5, & U_{2(5)} &= \bar{U} + \frac{1}{3} \Delta V + E_5, \end{aligned} \quad (2)$$

$U_{\Omega(i)} \equiv U_{-\Omega(i)}$, где E_i — энергия атомного уровня Ne ($1s_i$); индекс $\Omega(i)$ указывает на величину Ω и адиабатическую корреляцию с атомным состоянием Ne ($1s_i$).

Усредненные по Ω -состояниям диабатические потенциалы

$$\bar{U}_i = \frac{1}{2J_i + 1} \sum_{\Omega = -J_i}^{J_i} U_{\Omega(i)} \quad (3)$$

(J_i — полный электронный момент атома Ne ($1s_i$)) совпадают для всех атомных $1s_i$ -состояний ($\bar{U}_i \equiv \bar{U}$) и в обозначениях [9-11] соответствуют величине $\bar{U} = U_{\sigma} + \frac{1}{3} V_{\Sigma} + \frac{2}{3} V_{\Pi}$, где V_{Π} и V_{Σ} — потенциалы ион-атомного взаимодействия $Ne^+ + X$ в Π - и Σ -состояниях без учета спин-орбитального расщепления, U_{σ} — вклад в потенциал $U_{\Omega(i)}$ от взаимодействия с участием $3s$ -электрона [9-11, 13, 14]. Расщепления между диагональными матричными элементами выражаются через величину $\Delta V = V_{\Pi} - V_{\Sigma}$. Величины $a = -0.964$ и $b = 0.266$ [10] — амплитуды разложения атомных волновых функций промежуточного типа связи по функциям LS -типа связи

$$|1s_2, \Omega\rangle = a |^1P_1, \Omega\rangle + b |^3P_1, \Omega\rangle; \quad |1s_4, \Omega\rangle = b |^1P_1, \Omega\rangle + a |^3P_1, \Omega\rangle. \quad (4)$$

Далее будут использоваться также амплитуды $\alpha = 0.773$ и $\beta = -0.634$ разложения атомных функций по функциям jl -типа связи

$$\begin{aligned} |1s_2, \Omega\rangle &= \alpha \left({}^2P_{1/2} \right) 3s \left[1/2 \right]_1, \Omega \rangle + \beta \left({}^2P_{3/2} \right) 3s \left[\frac{3}{2} \right]_1, \Omega \rangle, \\ |1s_4, \Omega\rangle &= -\beta \left({}^2P_{1/2} \right) 3s \left[\frac{1}{2} \right]_1, \Omega \rangle + \alpha \left({}^2P_{3/2} \right) 3s \left[\frac{3}{2} \right]_1, \Omega \rangle. \end{aligned} \quad (5)$$

Недиагональные матричные элементы межатомного взаимодействия в рассматриваемом квазимолекулярном базисе имеют вид [9, 11]

$$\begin{aligned} \langle 1s_2, 0^+ | \hat{H} | 1s_4, 0^+ \rangle &= -ab \Delta V, & \langle 1s_3, 0^- | \hat{H} | 1s_5, 0^- \rangle &= \frac{\sqrt{2}}{3} \Delta V, \\ \langle 1s_2, 1 | \hat{H} | 1s_4, 1 \rangle &= \frac{ab}{2} \Delta V, & \langle 1s_2, 1 | \hat{H} | 1s_5, 1 \rangle &= \frac{b}{2} \Delta V, \\ \langle 1s_4, 1 | \hat{H} | 1s_5, 1 \rangle &= -\frac{a}{2} \Delta V. \end{aligned} \quad (6)$$

Полуэмпирические ион-атомные потенциалы взаимодействия V_{Π} и V_{Σ} предложены в работе [15] и приведены на рис. 1. Отметим, что в отличие от рис. 3

работы [10] эти потенциалы учитывают взаимодействия ионных конфигураций $Ne^+ + X$ и $Ne + X^+$.

В достижимой при тепловых энергиях ($E \leq 0.1$ эВ) области межъядерных расстояний ($R \geq 6-7 a_0$) величина $\Delta V \ll \Delta E_{i,k} = |E_i - E_k|$. Поэтому при построении адиабатических квазимолекулярных термов можно пренебречь недиагональными матричными элементами (6), так что адиабатические потенциалы взаимодействия практически совпадают с диагональными матричными элементами (2). Кроме того, расщепление между вырожденными в пределе $R \rightarrow \infty$ квазимолекулярными термами $U_{\Omega(i)} - U_{\Omega'(i)} \sim \Delta V$ мало по сравнению с кориолисовым взаимодействием $V_{\Sigma, \Omega}^{cor}$, соответствующих адиабатических $\Omega(1s_i)$ состояний ($V_{\Sigma, \Omega}^{cor} \sim \Delta V$, $V_{\Sigma, \Omega}^{cor} \ll v/\rho$; $v = (2E/\mu)^{1/2}$, μ — приведенная масса). В этом случае в процессе упругого столкновения $Ne(1s_i) + X$ реализуется тип связи «е» по Гунду [16] и при расчете сечения ионизации (1) можно не учитывать расщепление вырожденных в пределе $R \rightarrow \infty$ квазимолекулярных термов на Ω -компоненты.

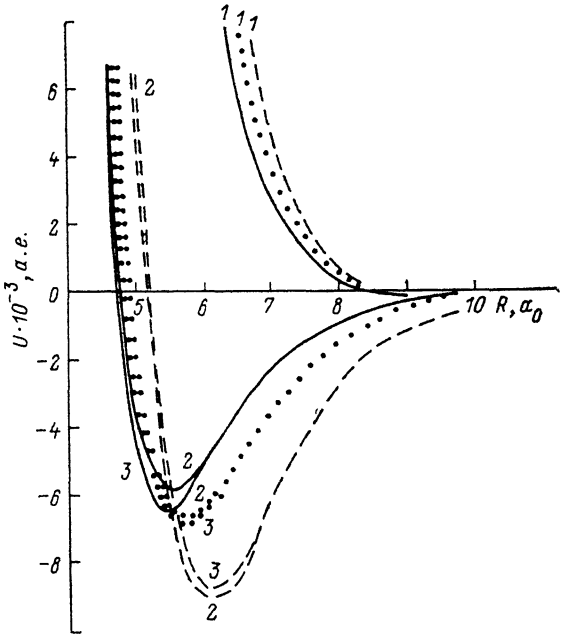


Рис. 1. Восстановленные по экспериментальным данным «эффективные» потенциалы $U_{eff} = \bar{U}$ взаимодействия $Ne(3s) + Ar, Kr, Xe$ [7, 17] и ион-атомные потенциалы V_{Σ}, V_{Π} [15].

Сплошные кривые 1-3 — $U_{eff}, V_{\Sigma}, V_{\Pi}$ для $Ne^*, Ne^+ + Ar$; пунктирные кривые 1-3 — $U_{eff}, V_{\Sigma}, V_{\Pi}$ для $Ne^*, Ne^+ + Kr$; штриховые кривые 1-3 — $U_{eff}, V_{\Sigma}, V_{\Pi}$ для $Ne^*, Ne^+ + Xe$.

Таким образом, при анализе процессов ионизации (1) при тепловых энергиях адиабатические потенциалы взаимодействия $Ne(2p^53s) + X(1S_0)$ для всех квазимолекулярных $\Omega(1s_i)$ -состояний можно считать совпадающими со средним адиабатическим потенциалом $\bar{U}(R)$. Поэтому в качестве \bar{U} естественно использовать потенциалы, восстановленные из экспериментальных данных. На рис. 1 приводятся эффективные потенциалы взаимодействия U_{eff} , найденные из экспериментальных данных по дифференциальному рассеянию в пересекающихся пучках [17] и по энергетической зависимости сечений пеннинговской ионизации [7] для столкновений метастабильных атомов $Ne(1s_3), Ne(1s_3) + Ar, Kr, Xe$.

Автоионизационные ширины квазимолекулярных состояний $Ne(2p^53s1^3P_1) + Ar, Kr, Xe$

Поскольку реакция ионизации (1) при тепловых энергиях происходит на достаточно больших межатомных расстояниях, то будем считать, что автоионизационные ширины $\Gamma_{\Omega(i)}(R)$ резонансных квазимолекулярных состояний ($i = 2, 4$) можно представить в виде суммы прямой дальнедействующей и обменной короткодействующей частей

$$\Gamma_{\Omega(i)}(R) = \Gamma_{\Omega(i)}^d(R) + \Gamma_{\Omega(i)}^{ex}(R) \quad (7)$$

(интерференцией вкладов прямого и обменного механизмов пренебрегаем [18]).

Основным взаимодействием, определяющим дальнедействующую ширину $\Gamma_{\Omega(i)}^d(R)$, является диполь-дипольное взаимодействие [19, 20]. В этом случае [21, 22]

$$\Gamma_{\Omega(i)}^d(R) = \left[\frac{1}{(\Omega-1)!(\Omega+1)!} \right]^2 \frac{f_i \sigma_p^{(x)} c}{\pi \omega_i^2} \frac{1}{R^6}, \quad (8)$$

где f_i и ω_i — сила осциллятора (для поглощения) и частота перехода в атоме Ne, c — скорость света, $\sigma_p^{(x)}$ — сечение фотоионизации атома X (просуммированное по конечным состояниям иона X^+).

Что касается обменной части ширины $\Gamma_{\Omega}^{ex(i)}(R)$, то можно показать, что для $i=2, 4$ усредненные по Ω значения $\Gamma_i(R) = \frac{1}{2J_i+1} \sum_{\Omega} \Gamma_{\Omega(i)}(R)$ выражаются через аналогичные усредненные ширины $\Gamma_3(R)$ и $\Gamma_5(R)$. Рассмотрим для этого более детально процесс вычисления матричного элемента обменного взаимодействия

$$V_{ij}^{ex} = \langle \Psi_i | \hat{V}^{ex} | \Psi_j \rangle, \quad (9)$$

где Ψ_i и Ψ_j — волновые функции начального и конечного состояний.

В приближении jl -связи для атома Ne ($3s$) имеем

$$\Psi_i = \sum_{m_j m_s} \left[\begin{matrix} j & 1/2 & J \\ m_j & m_s & \Omega \end{matrix} \right] |jm_j\rangle_{\text{Ne}^+} |so\rangle \left| \frac{1}{2} m_s \right\rangle |^1S_0\rangle_x, \quad (10)$$

$$\Psi_j = |^1S_0\rangle_{\text{Ne}} |\varepsilon l' m'_s\rangle \left| \frac{1}{2} m'_s \right\rangle |j' m'_j\rangle_{X^+}. \quad (11)$$

В формулах (10), (11) $|^1S_0\rangle_{\text{Ne}, X}$ — атомные волновые функции; $|jm_j\rangle$ и $|j' m'_j\rangle$ — волновые функции ионов Ne^+ и X^+ , j и j' — полные электронные моменты ионов Ne^+ и X^+ соответственно, J — полный электронный момент атома Ne ($3s$), $|so\rangle |^1/2 m_s\rangle$ — волновая функция (пространственная и спиновая) $3s$ -электрона, $|\varepsilon l' m'_s\rangle |^1/2 m'_s\rangle$ — волновая функция испущенного электрона с энергией ε . Предполагая, что возникающий матричный элемент можно представить в виду [23, 24]

$$\langle ^1S_0(x); jm_j; so | \hat{V}^{ex} | \varepsilon l' m'_s; ^1S_0(\text{Ne}); j' m'_j \rangle \simeq \langle so | \varepsilon l' 0 \rangle \langle ^1S_0(x); jm_j | \hat{V}^{ex} | ^1S_0(\text{Ne}); j' m'_j \rangle, \quad (12)$$

получаем

$$\begin{aligned} \Gamma_{\Omega}^{ex(j, j')} &\simeq \sum_{l', m_s, m'_j, j'} |\langle \Psi_i | \hat{V}^{ex} | \Psi_j \rangle|^2 = \\ &= \sum_{\varepsilon' m'_s m'_j j'} \left[\begin{matrix} j & 1/2 & J \\ m'_j & m'_s & \Omega \end{matrix} \right]^2 \langle so | \varepsilon l' 0 \rangle^2 \langle j' m'_j | \hat{V}^{ex} | jm_j \rangle^2, \end{aligned} \quad (13)$$

где $\Gamma_{\Omega}^{ex(j, j')}$ — обменная часть ширины квазимолекулярного состояния типа связи I [9, 13, 14], соответствующего атомному jl -типу связи.

Усредненная по Ω ширина

$$\Gamma_{(j, j')}^{ex} = \frac{1}{2J+1} \sum_{\Omega=-J}^J \Gamma_{\Omega}^{ex(j, j')} \simeq \frac{1}{2J+1} \sum_{\varepsilon' m'_j j'} \langle so | \varepsilon l' 0 \rangle^2 \langle jm_j | \hat{V}^{ex} | j' m'_j \rangle^2 \quad (14)$$

не зависит от значения полного момента J , что позволяет выразить ширины Γ_i^{ex} для $i=2, 4$ через аналогичные величины для $i=3, 5$. Для этого учтем, что атомные $1s_{-}$ и $1s_{+}$ -состояния являются суперпозициями (5) состояний jl -типа связи с $J=1$. Тогда

$$\begin{aligned} \Gamma_2^{ex}(R) &= \alpha^2 \Gamma_3^{ex}(R) + \beta^2 \Gamma_5^{ex}(R), \\ \Gamma_4^{ex}(R) &= \beta^2 \Gamma_3^{ex}(R) = \alpha^2 \Gamma_5^{ex}(R). \end{aligned} \quad (15)$$

Поскольку для метастабильных состояний ($i=3, 5$) $\Gamma_i^{ex} \gg \Gamma_i^d$, то можно считать, что для этих состояний полная усредненная ширина совпадает с обменной ($\Gamma_i \simeq \Gamma_i^{ex}$). Величины $\Gamma_i(R)$ ($i=3, 5$) восстанавливаются из экспериментальных данных (см., например, [2-7, 17]). Отметим, что в настоящее время отсутствуют надежные методы расчета обменных ширин. Для определения вклада обменного механизма взаимодействия в сечение процесса (1) для $i=2, 4$ будет использоваться соотношение (15) с $\Gamma_{3,5}^{ex} = \Gamma_{3,5}$.

Как уже отмечалось при анализе структуры квазимолекулярных термов, при тепловых энергиях в процессе столкновения $\text{Ne}(1s_i) + X(1S_0)$ реализуется тип связи угловых моментов «е» по Гунду. В этом случае для неполяризованных атомов $\text{Ne}(1s_i)$ в состояниях с единичным полным электронным моментом ($i=2, 4$) вероятность ионизации в процессе столкновения (1) определяется выражением [21, 22]

$$P_i(E, \rho) = 1 - \frac{1}{3} \left\{ \exp \left(-2 \int_{R_t}^{\infty} \frac{\Gamma_1(i) R}{v(R)} dR \right) + 2 \exp \left(-2 \int_{R_t}^{\infty} \frac{\Gamma_0(i) + \Gamma_1(i)}{2v(R)} dR \right) \right\}, \quad (16)$$

где $R_t(E, \rho)$ — точка поворота классического движения в потенциале $U(R)$, $v(R) = v(1 - \rho^2/R^2 - (U(R)/E))^{1/2}$, ширины $\Gamma_{\Omega(i)}$ определены формулой (7). Формулу (16) можно представить в виде

$$P_i = P_i^d + P_i^{ex} - P_i^d P_i^{ex}, \quad (17)$$

где вероятности P_i^d и P_i^{ex} определяются формулой (16) с учетом только прямой $\Gamma_{\Omega(i)}$ или только обменной $\Gamma_{\Omega^x(i)}$ частей автоионизационной ширины.

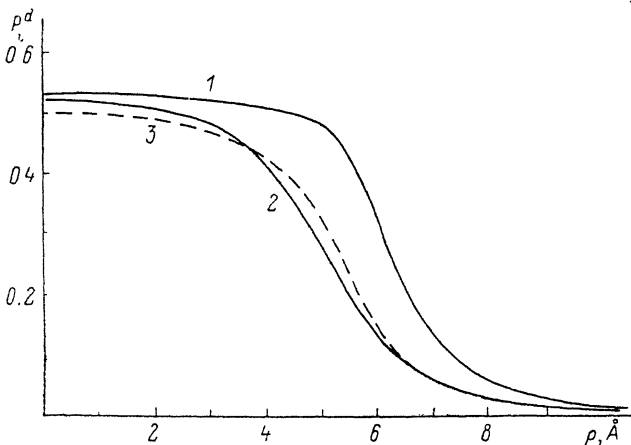


Рис. 2. Вероятности ионизации $P_i^d(\rho)$ для столкновений $\text{Ne}(1s_i) + \text{Ar}$.

Расчет по формуле (16) с ширинами $\Gamma_{\Omega(i)}^d$ (8). 1 — P_i^d ($E = 0.025$ эВ), 2 — P_i^d ($E = 0.1$ эВ), 3 — $1 \cdot P_i^d$ ($E = 0.050$ эВ).

Ширина $\Gamma_{\Omega(i)}^d$ имеет зависимость $\Gamma^d \sim 1/R^6$ (8), тогда как для обменной ширины Γ^{ex} характерно более быстрое экспоненциальное убывание $\Gamma^{ex} \sim \exp(-\lambda R)$ [4-7, 17]. Поэтому вероятность P_i^{ex} быстрее убывает с ростом ρ , чем вероятность $P_i^d(\rho)$, и в области параметров удара ρ , при которых обменный механизм дает основной вклад в сечение ионизации, вероятность P_i^d меняется незначительно. Этот вывод подтверждается сопоставлением вычисленных по формулам (16) и представленных на рис. 2 зависимостей $P_{2,4}^d(\rho)$ для столкновений $\text{Ne}(1s_{2,4}) + \text{Ar}$ с приведенными в [5] аналогичными зависимостями $P(\rho)$ для столкновений метастабильных атомов $\text{Ne}(1s_{3,5})$, когда вероятность $P(\rho)$ определяется только обменным механизмом. Таким образом, полное сечение ионизации

$$\sigma_i(E) = 2\pi \int_0^{\infty} P_i(\rho) \rho d\rho \quad (18)$$

можно представить в виде

$$\sigma_i = \sigma_i^d + (1 - \bar{P}_i^d) \sigma_i^{ex}, \quad (19)$$

где σ_i^d и σ_i^{ex} вычисляются по формуле (18) с вероятностями P_i^d и P_i^{ex} соответственно; \bar{P}_i^d — характерное значение величины P_i^d в области параметров удара, определяющих сечение σ_i^{ex} .

Анализ экспериментальных результатов для сечения реакции (1) с участием метастабильных атомов Ne ($1s_{3,5}$) показывает [5], что величина вероятности ионизации за счет обменного механизма при тепловых энергиях удовлетворяет условию $P_{3,5} < 0.4$. В этом случае (так как ширины $\Gamma_{2,4}^{ex}$ и $\Gamma_{3,5}$ связаны соотношением (15)) имеем $P_{2,4}^{ex} \leq 0.4$. Разлагая экспоненту в формуле (16) в ряд, для вероятности P_i^{ex} получаем

$$P_i^{ex} \simeq 2 \int_{R_i}^{\infty} \frac{\Gamma_i^{ex}(R)}{v(R)} dR. \quad (20)$$

Таким образом, вероятности P_i^{ex} ($i=2, 4$) выражаются через усредненные ширины Γ_i^{ex} . Подставляя выражения для $\Gamma_{2,4}^{ex}$ через $\Gamma_{3,5}$ (формула (15)) в (20) и учитывая, что характер траекторий для всех исходных состояний атома

Сечения ионизации σ_i (в \AA^2) при столкновениях Ne ($1s_i$) + X

Химический элемент X	E , эВ	σ_2^a	σ_4^a	P_2^a	P_4^a	σ_3^b	σ_5^b	σ_2^c	σ_4^c	$\langle \sigma_i \rangle^B$
Ar	0.025	74.6	6.6	0.52	0.050	10.0	13.4	80.1	18.0	24
	0.050	59.9	5.1	0.50	0.047	11.2	13.3	67.4	18.9	
	0.075	53.4	4.5	0.49	0.046	18.1	14.2	61.8	19.5	
	0.100	49.5	4.2	0.49	0.046	19.6	14.8	58.5	20.2	
Kr	0.025	88.1	8.1	0.56	0.055	16.8	14.8	95.1	22.8	18
	0.050	69.7	6.1	0.53	0.051	21.1	15.6	78.6	23.0	
	0.075	61.6	5.3	0.52	0.050	22.8	16.2	71.3	23.2	
	0.100	56.8	4.9	0.51	0.049	24.5	16.7	67.3	23.8	
Xe	0.025	105	10.0	0.59	0.061	8.5	15.4	109.6	21.8	29
	0.050	81.3	7.4	0.56	0.056	20.9	15.4	89.5	24.0	
	0.075	71.3	6.3	0.54	0.054	21.0	16.6	79.2	23.7	
	0.100	65.3	5.7	0.54	0.053	21.7	17.5	74.5	23.9	

Примечание. ^a — расчет данной работы, ^b — эксперимент [7], ^B — эксперимент [8] при комнатной температуре.

Ne ($3s$) при тепловых столкновениях с атомом X ($X=Ar, Kr, Xe$) определяется потенциалом $\bar{U}(R)$ (см. выше), получаем связь сечений ионизации $\sigma_{2,4}^{ex}$ с сечениями ионизации $\sigma_{3,5}$

$$\sigma_2^{ex} = \alpha^2 \sigma_3 + \beta^2 \sigma_5, \quad \sigma_4^{ex} = \beta^2 \sigma_3 + \alpha^2 \sigma_5. \quad (21)$$

Таким образом, окончательные выражения для сечений ионизации σ_i при $i=2, 4$ могут быть записаны в виде

$$\begin{aligned} \sigma_2 &= \sigma_2^d + (1 - \bar{P}_2^d)(\alpha^2 \sigma_3 + \beta^2 \sigma_5), \\ \sigma_4 &= \sigma_4^d + (1 - \bar{P}_4^d)(\beta^2 \sigma_3 + \alpha^2 \sigma_5), \end{aligned} \quad (22)$$

где $\sigma_{2,4}^d$ определяются формулой (18) с вероятностями $P_{2,4}^d$, вычисленными по формуле типа (16) для ширин $\Gamma_{2(i)}^d$ (8); \bar{P}_2^d, \bar{P}_4^d — средние значения вероятностей P_2^d и P_4^d при $\rho \leq 5 \text{\AA}$, а в качестве сечений $\sigma_{3,5}$ можно взять экспериментально измеренные сечения ионизации процесса (1) для метастабильных состояний Ne ($1s_{3,5}$). Отметим, что некоторая неопределенность в выборе средних значений $\bar{P}_{2,4}^d$ не приводит к заметной погрешности значений σ_2 и σ_4 , так как при $i=2$ в (22) определяющим является первый член σ_2^d , а при $i=4$ — величина $P_4^d \ll 1$.

Вычисленные по формуле (22) сечений σ_2 и σ_4 приведены в таблице. При расчетах использовались экспериментальные сечения σ_3 и σ_5 [7] (для энергии $E = 0.025$ эВ экспериментальные данные в [7] отсутствуют, поэтому взяты значения σ_3 и σ_5 , вычисленные в [7] с использованием потенциалов \bar{U} и восстановленных зависимостей $\Gamma(R)$), потенциал $\bar{U}(R)$ [17], силы осцилляторов $f_{2,4} = 0.15$ и $f_4 = 0.01$ [25], сечения фотоионизации из [26, 27].

Расчетные сечения ионизации слабо зависят от относительной энергии столкновения (в рассмотренном энергетическом интервале). Как следует из результатов вычислений, основной вклад ($\sim 85\%$) в сечение σ_2 вносит диполь-дипольный механизм формирования ширины и полученные значения величины σ_2 в 3—4 раза превышают сечения ионизации для метастабильных $1s_3$ - и $1s_5$ -состояний. Для ионизации из $1s_4$ -состояния вследствие малого значения силы осциллятора соответствующего перехода вклад дальнедействующей части ширины в сечение σ_4 не превышает 20—25%, и определяющим в этом случае является обменное взаимодействие. Вычисленные значения сечений σ_4 ($E = -0.025$ эВ) хорошо согласуются с экспериментальными значениями $\langle \sigma_4 (T = 300 \text{ K}) \rangle$, полученными в работе [8] в условиях газовой ячейки.

Вычисление величин σ_2^d и σ_4^d показало, что в рассматриваемом случае существенный вклад в результате расчетов вносит эффект искривления траекторий сталкивающихся атомов. Это обстоятельство связано с существенно отталкивательным характером потенциала $\bar{U}(R)$, так что при тепловых энергиях недостижимы межатомные расстояния $R \leq 6a_0$. Сравнение приведенных в таблице величин σ_2^d и σ_4^d с аналогичными значениями, вычисленными по формуле [20—22]

$$\sigma_i^d = 0.982\pi\Gamma\left(\frac{3}{5}\right)\left(\frac{3}{16}\frac{f_i\sigma_p^{(i)}c}{\omega_i^2v}\right)^{2/5}, \quad (23)$$

которая получается из выражения (16) для прямолинейных траекторий с $\Gamma_{\infty(i)} = \Gamma_{\infty}^{(i)}$, показало, что в данной ситуации формула (23) дает результаты, завышенные для σ_2^d в 5—6 раз и в 1.4—1.6 раз для σ_4^d (наибольшее отличие получается в тех случаях, когда вероятность ионизации мала). Такое завышение значений сечений объясняется тем, что для прямолинейных траекторий $R^d \rightarrow 1$ при $\rho \rightarrow 0$, в то время как для реальных траекторий в отталкивательном потенциале $\bar{U}(R)$ область $R \leq 6a_0$ вообще не достижима, при малых ρ имеем $R^d \leq 0.5$ (рис. 2). Теоретическая оценка сечения ионизации σ_4 для столкновений с атомом Ag по формуле (23) для $E = 0.025$ эВ формально приводит к разумному значению $\sigma_4 \simeq 34 \text{ \AA}^2$, но по существу, как следует из результатов, приведенных в таблице, основной вклад в сечение σ_4 в данном случае вносит не диполь-дипольный механизм взаимодействия, а обменный, который и определяет величину сечения σ_4 (0.025 эВ) $\simeq 18 \text{ \AA}^2$.

Заключение

Выполненный анализ структуры квазимолекулярных термов $\text{Ne}(2p^53s) + \text{Ar}, \text{Kr}, \text{Xe}$ и свойств квазимолекулярных автоионизационных ширин позволил выразить сечения ионизации при столкновениях резонансно-возбужденных атомов $\text{Ne}(1s_2)$, $\text{Ne}(1s_4)$ с атомами $\text{Ar}, \text{Kr}, \text{Xe}$ через вычисленные сечения $\sigma_{2,4}^d$, учитывающие вклад прямого механизма ионизации, и экспериментальные сечения для метастабильных состояний $\text{Ne}(1s_3)$ и $\text{Ne}(1s_5)$. Такой подход может быть использован и при анализе других процессов ионизации с участием резонансно-возбужденных атомов (например, $\text{Ne}^* + \text{H}_2, \text{N}_2$ и т. д.), так как в настоящее время отсутствуют надежные методы расчета автоионизационных ширин, обусловленных обменным взаимодействием. В то же время для метастабильных состояний процессы ионизации экспериментально исследованы существенно полнее, чем для резонансных.

Значение структуры квазимолекулярных термов позволяет также оценить величины сечений для ряда других возможных элементарных процессов при столкновениях $\text{Ne}(1s_i) + \text{Ar}, \text{Kr}, \text{Xe}$. В частности, вычисления, выполненные аналогично тому, как это сделано в [28], показали, что при $T = 300 \text{ K}$ величины сечений неупругих переходов $1s_4 \rightarrow 1s_5$ в атоме неона при столкновениях с атомами $\text{Ar}, \text{Kr}, \text{Xe}$ имеют следующий порядок: $\langle \sigma_{4 \rightarrow 5} \rangle \sim 10^{-5} \text{ \AA}^2$, $\langle \sigma_{5 \rightarrow 4} \rangle \sim 10^{-6} \text{ \AA}^2$, а сечение радиационного распада $1s_5$ -состояния $-\langle \sigma_{\text{rad}}(1s_5) \rangle \sim 10^{-10} \text{ \AA}^2$. Таким образом, эти сечения пренебрежимо малы по сравнению с сечениями реакции (1).

Авторы благодарны А. З. Девдариани за обсуждение результатов работы.

- [1] *Басов Н. Г., Александров В. А., Данилычев В. А.* и др. // Письма в ЖЭТФ. 1985. Т. 41. Вып. 4. С. 156—158.
- [2] *Бункин Ф. В., Дергачев В. И., Месяц Г. А.* и др. // Изв. АН СССР. Сер. физ. 1986. Т. 50. № 6. С. 1064—1074.
- [3] *Басов Н. Г., Данилычев В. А.* // УФН. 1986. Т. 148. № 1. С. 55.
- [4] *Niehaus A.* // Phys. of Electr. and Atom. Collisions. Inv. Papers XII ICPEAC. North Holland Publishing Company, 1982.
- [5] *Aguilar Navarro A., Brunetti B., Rossi S.* et al. // J. Chem. Phys. 1985. Vol. 82. N 2. P. 773—779.
- [6] *Bubert W., Bregel T., Allan R.* et al. // Z. Phys. 1985. Vol. A320. N 2. P. 105—123.
- [7] *Verheijen M. J., Beijerinck H. C. W.* // Chem. Phys. 1986. Vol. 102. N 1, 2. P. 255—273.
- [8] *Yokoyama A., Hatano Y.* // Chem. Phys. 1981. Vol. 63. N 1. P. 59—65.
- [9] *Девдариани А. З., Загребин А. Л.* // Опт. и спектр. 1986. Т. 61. Вып. 2. С. 231—240.
- [10] *Загребин А. Л., Павловская Н. А.* // Опт. и спектр. 1987. Т. 62. Вып. 2. С. 264—272.
- [11] *Девдариани А. З., Загребин А. Л.* // Химия плазмы. Вып. 16. М.: Энергоатомиздат, 1988. С. 44—92.
- [12] *Никитин Е. Е., Уманский С. Я.* Полуэмпирические методы расчета взаимодействия атомов. М.: ВИНТИ, 1980. 145 с.
- [13] *Девдариани А. З., Загребин А. Л.* // Хим. физика. 1985. Т. 4. № 4. С. 445—452.
- [14] *Девдариани А. З., Загребин А. Л.* // Хим. физика. 1985. Т. 4. № 6. С. 739—749.
- [15] *Hausmann D., Morgner H.* // Mol. Phys. 1985. Vol. 54. N 5. P. 1085—1099.
- [16] *Никитин Е. Е., Уманский С. Я.* Неадиабатические переходы при медленных атомных столкновениях. М.: Атомиздат, 1979. 192 с.
- [17] *Gregor R. W., Siska P. E.* // J. Chem. Phys. 1981. Vol. 74. N 2. P. 1078—1092.
- [18] *Child H. S.* Mol. Collisions Theory. London: Academic Press, 1974.
- [19] *Katsuura K.* // J. Chem. Phys. 1965. Vol. 42. N 11. P. 3771—3774.
- [20] *Смирнов Б. М., Фирсов О. Б.* // Письма в ЖЭТФ. 1965. Т. 2. Вып. 6. С. 478—482.
- [21] *Девдариани А. З., Загребин А. Л., Касьяненко С. В.* и др. // ЖТФ. 1985. Т. 55. Вып. 2. С. 368—378.
- [22] *Devdariani A. Z., Zagrebini A. L., Kasyanenko S. V.* et al. // J. Phys. B. 1987. Vol. 20. N 11. P. 2447—2466.
- [23] *Miller W. H., Morgner H.* // J. Chem. Phys. 1977. Vol. 67. N 11. P. 4923—4930.
- [24] *Morgner H.* // J. Phys. B. 1985. Vol. 18. N 2. P. 251—258.
- [25] *Радицг А. А., Смирнов Б. М.* Параметры атомов и атомных ионов. Справочник. М.: Энергоатомиздат, 1986.
- [26] *West J. B., Marr G. V.* // Proc. Roy. Soc. (London). 1976. Vol. A349. N 2. P. 397—402.
- [27] *Hudson R. D., Kieffer L. J.* // Atomic Data. 1971. Vol. 2. P. 205—209.
- [28] *Девдариани А. З., Загребин А. Л.* // Опт. и спектр. 1985. Т. 59. Вып. 2. С. 256—260.