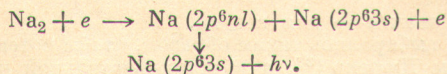


Непосредственным доказательством такой точки зрения было бы экспериментальное обнаружение жестких фотонов $h\nu'_1, h\nu'_2$ (~ 50 эв у Li и ~ 27 эв у Na).

Исходя из величины сечения изучаемых переходов [2, 4] и относительной величины вторичных максимумов, можно заключить, что эффективность разрушения указанных автоионизационных состояний на уровне s -электрона составляет $10^{-19} \div 10^{-20}$ см².

Что же касается других особенностей, лежащих вблизи 1-го потенциала ионизации (для Li при $E=20, 27$ эв и для Na при $E=11, 13.3, 16, 24, 29$ эв), то они, по-видимому, обязаны иному происхождению. Возможно, что они являются результатом образования компаунд-состояний Li^- и Na^- , которые разрушаются на уровне с большими главными квантовыми числами. Нельзя также исключать вероятности того, что эти вторичные пики являются результатом интерференции амплитуд различных парциальных волн.

С другой стороны, известно [7], что в парах щелочных металлов всегда имеются их молекулярные образования, которые в результате возбуждения электронным ударом предиссоциируют и вносят вклад в заселение высоковозбужденных уровней, т. е. имеет место реакция



Для более определенной интерпретации всех наблюдаемых особенностей необходимо провести еще ряд дополнительных исследований, включая и другие щелочные атомы.

Авторы искренне благодарны И. П. Запесочному за постановку и руководство работой, а также за ценные замечания при обсуждении результатов.

Литература

- [1] И. П. Запесочный, Л. Л. Шимон. *Опт. и спектр.*, 19, 12, 1965.
- [2] И. С. Алексахин, И. П. Запесочный. *Опт. и спектр.*, 21, 131, 1966; 22, 843, 1967.
- [3] И. П. Запесочный, О. Б. Шпеник. *ЖЭТФ*, 50, 4, 1966.
- [4] P. Feldman, R. Novik. *Phys. Rev.*, 160, 143, 1967.
- [5] И. П. Запесочный, И. С. Алексахин. *ЖЭТФ*, 55, 76, 1968.
- [6] J. D. Garcia, J. E. Mask. *Phys. Rev.*, 138A, 987, 1965.
- [7] А. Н. Несмеянов. Давление пара химических элементов. Изд. АН СССР, М., 1961.

Поступило в Редакцию 27 июля 1971 г.

УДК 539.186.3

ПОТЕНЦИАЛЫ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ АТОМОВ ЩЕЛОЧНЫХ МЕТАЛЛОВ С АТОМАМИ БЛАГОРОДНЫХ ГАЗОВ

Е. В. Никифоров и Л. Д. Щерба

1. Потенциалы взаимодействия атомов щелочных металлов M ($M=Li, Na, K, Rb, Cs$) с атомами благородных газов X ($X=Ar, Kr, Xe$) в последнее время интенсивно изучаются [1-4]. Из экспериментов по низкоэнергетическому рассеянию хорошо известна форма потенциальной кривой в области «ямы». Наилучшая обработка данных, полученных из этих экспериментов, проведена в работе [3]. Данные о потенциале в области отталкивания получены из экспериментов по высокоэнергетическому рассеянию только для небольшого числа систем $M-X$ [1]. Потенциал, справедливый во всей области исследованных значений энергии, был надежно сконструирован для единственной системы $K-Kr$ [1].

В настоящей работе предложена формула, хорошо описывающая потенциалы всех рассматриваемых систем, как в области «ямы», так и в области отталкивания. Кроме того, приведены оптимальные значения параметров потенциалов ϵ (глубина «ямы») и r_m (равновесное расстояние), полученные при статистической обработке имеющихся в литературе данных.

2. Нами предлагается следующая формула для потенциальной кривой:

$$V(r) = \epsilon \left[\frac{6}{n-6} \left(\frac{kr_m}{r} \right)^n - \frac{n}{n-6} \left(\frac{kr_m}{r} \right)^6 \right], \quad (1)$$

где

$$k = 1 + A \left\{ 1 - \exp \left[- \left(\frac{r - r_m}{\gamma} \right)^2 \right] \right\}.$$

Формула (1) является модификацией потенциала Леннарда—Джонса ($n, 6$) и переходит в него при $A=0$. Дополнительные параметры A и γ позволяют изменять форму потенциальной кривой в широких пределах, причем параметры A и γ могут принимать различные значения для $r > r_m$ и $r < r_m$. В безразмерных единицах при $n=12$ формула принимает следующий вид:

$$V^*(r^*) = \left(\frac{k_{\pm}}{r^*}\right)^{12} - 2\left(\frac{k_{\pm}}{r^*}\right)^6, \quad (2)$$

где

$$r^* = r/r_m, \quad V^* = V/\varepsilon,$$

$$k_{\pm} = 1 + A_{\pm} \left\{ 1 - \exp \left[- \left(\frac{1 - r^*}{\gamma_{\pm}} \right)^2 \right] \right\},$$

знак «+» для $r > r_m$, знак «-» для $r < r_m$.

Параметры A_{\pm} и γ_{\pm} выбирались таким образом, чтобы потенциал в области «ямы» совпадал с потенциалом Дюрена [3], а в отталкивательной части — с данными по высокоэнергетическому рассеянию. Формула (2) хорошо удовлетворяет этим требованиям со следующими значениями дополнительных параметров: $A_{+}=0.035$; $\gamma_{+}=0.1$; $A_{-}=-0.24$; $\gamma_{-}=0.4$. При построении потенциала в области отталкивания экспериментальные данные работы [11] были представлены в безразмерных единицах с использованием значений параметров ε и r_m из таблицы (о выборе параметров таблицы см. ниже). В безразмерных единицах при достаточно высоких значениях энергии потенциалы различных систем М—Х сильно различаются, но при $V^* \approx 10$ различие между ними невелико и лежит приблизительно в пределах погрешности эксперимента (см. рисунок). Это позволило воспользоваться единой формулой для описания потенциалов всех систем М—Х в области невысоких положительных значений энергии. На рисунке представлены потенциал (2) с вышеприведенными значениями параметров A_{\pm} и γ_{\pm} , потенциал Дюрена [3] и потенциал Леннарда—Джонса (12, 6). Из рисунка видно, что и двухпараметровый потенциал Леннарда—Джонса и потенциал Дюрена неприменимы в области отталкивания. Приведенный на рисунке потенциал для системы К—Kr [11] незначительно отличается от потенциала (2).

Значения параметров r_m и ε

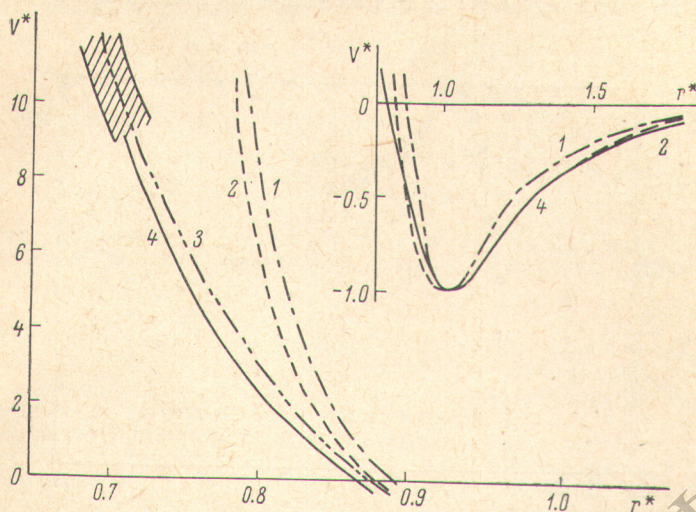
Система	Данная работа					Работа [3]	
	r_m , отн. ед.	$\Delta r_{m \max}$, %	r_m , Å	ε , см ⁻¹	$\Delta \varepsilon_{\max}$, %	r_m , Å	ε , см ⁻¹
Li—Ar	0.98	3	4.80	44.8	3	—	—
Li—Kr	0.95	2	4.65	72.0	10	4.65±0.35	63.9±6.5
Li—Xe	0.96	2	4.70	112.3	4	—	—
Na—Ar	0.99	3	4.85	45.3	10	4.81±0.23	41.7±2.5
Na—Kr	0.97	2	4.75	71.0	6	4.73±0.16	68.9±1.5
Na—Xe	0.98	3	4.80	103.0	3	4.91±0.08	100.0±1.5
K—Ar	1.03	2	5.05	43.2	4	5.05±0.25	43.2±1.5
K—Kr	1.00	—	4.90	73.0	9	4.84±0.20	73.0±10
K—Xe	1.00	2	4.90	117.3	5	—	—
Rb—Ar	1.05	—	5.15	43.2	—	—	—
Rb—Kr	1.01	—	4.95	75.5	—	—	—
Rb—Xe	1.01	—	4.95	108.2	—	—	—
Cs—Ar	1.07	4	5.25	43.8	6	—	—
Cs—Kr	1.04	—	5.10	72.5	—	—	—
Cs—Xe	1.04	4	5.10	110.2	6	—	—

Таким образом, предложенный нами потенциал (2) с приведенными значениями дополнительных параметров A_{\pm} и γ_{\pm} и с параметрами r_m и ε из таблицы применим для описания потенциалов всех систем М—Х в области $V^* \leq 9$ ($r^* > 0.7$).

3. Параметры r_m и ε , полученные различными авторами, как правило, существенно различаются, причем расхождение превышает экспериментальные ошибки, особенно для r_m . В работе [3] обработка экспериментальных данных по r_m и ε выполнена только для шести наиболее подробно изученных систем.

При определении параметров r_m для всех систем М—Х мы пользовались процедурой, аналогичной процедуре, предложенной в [12]. Для этого данные различных работ [1-10] были выражены в относительных единицах. Нормировка велась по си-

стеме К—Кг с последующим усреднением данных различных авторов для одинаковых систем. Абсолютная величина r_m была выбрана равной 4.90 Å. Величины параметров ε определялись непосредственным усреднением. В таблице приведены вычисленные



Потенциальные кривые для систем М—Х.

1 — потенциал Леннарда-Джонса (12, 6), 2 — потенциал Дюрена [3], 3 — потенциал работы [11] для К—Кг, 4 — потенциал (2) $A_+ = 0,035$; $\gamma_+ = 0,1$; $A_- = -0,24$; $\gamma_- = 0,4$. Заштрихованная область соответствует значениям потенциалов различных систем М—Х, исследованных в работе [11], при значениях $r^* \approx 0,7$.

значения r_m и ε для сравнения результаты работы [3]; также приведены усредненные данные для r_m в относительных единицах. Хорошее согласие между значениями параметров шести систем работы [3] и настоящей работы свидетельствует о надежности значений параметров, полученных в настоящей работе для всех систем М—Х.

Литература

- [1] R. V. Bernstein, I. T. Muckerman. Adv. in Chem. Phys., 12, 389, 1967.
- [2] W. E. Baylis. J. Chem. Phys., 51, 2665, 1969.
- [3] R. Düren, G. P. Raabe, Ch. Schlier. Z. Phys., 214, 410, 1968.
- [4] U. Buck, H. Pauly. Z. Physik, 208, 390, 1968.
- [5] K. Rother, L. Bernstein. Phys. Rev., 130, 2333, 1963.
- [6] Fr. von Busch. Z. Physik, 199, 518, 1967.
- [7] B. Pauly. Z. Physik, 196, 343, 1966.
- [8] P. Hundhausen. Z. Physik, 187, 305, 1965.
- [9] D. Beck, H. G. Loesch. Z. Physik, 195, 444, 1966.
- [10] K. Rother. J. Chem. Phys., 42, 3307, 1965.
- [11] C. I. Malerich, R. I. Cross. J. Chem. Phys., 52, 386, 1970.
- [12] S. I. Croucher, I. L. Clark. J. Phys., B2, 603, 1969.

Поступило в Редакцию 13 августа 1971 г.

УДК 539.186

О ВОЗБУЖДЕНИИ СОСТОЯНИЙ $Zr^{54}Ar I$ И $ZsZr^6Ar II$ ЭЛЕКТРОННЫМ УДАРОМ

И. Г. Жуков, И. П. Запесочный и П. В. Фельцан

В течение ряда лет на кафедре квантовой электроники велась работа по созданию спектрофотометрической установки для изучения возбуждения газообразных объектов в вакуумной ультрафиолетовой области спектра. Первый вариант ее был описан в [1, 2]. В настоящей работе использована аналогичная установка, но со значительно улучшенными отдельными узлами и основными характеристиками.