

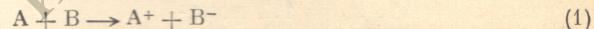
УДК 539.186.2

## ПЕРЕДАЧА ЭЛЕКТРОНА В АТОМНЫХ СТОЛКНОВЕНИЯХ

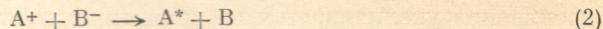
Г. К. Иванов

С помощью уравнений для оператора сдвига уровней и квазиклассических упрощений функции Грина исследуется взаимодействие атома, содержащего слабосвязанный электрон, с нейтральными частицами (атомами и молекулами). Для потенциала конечного радиуса действия получены асимптотически точные выражения, описывающие взаимодействие ковалентных состояний с ионным. Полученные результаты применимы и в тех случаях, которые не охватываются известной моделью точечного потенциала. Проведен теоретический анализ исследовавшихся экспериментально процессов образования отрицательных ионов в соударениях атомов калия с молекулами  $O_2$  и  $Cl_2$ . С учетом конечной величины фаз рассеяния получена спектроскопическая формула для сдвига оптической линии сильновозбужденного атома в инородном газе.

1. В работе рассматриваются процессы передачи электрона при столкновении атома A, содержащего слабосвязанный электрон, с нейтральными частицами B (атомами или молекулами), обладающими устойчивыми состояниями отрицательного иона



Эти процессы и обратная им ион-ионная рекомбинация



играют важную роль во многих физических явлениях. Так, процессы (2) при тепловых соударениях приводят к образованию возбужденных атомов и могут поэтому использоваться в лазерных системах.

Теоретической разработке приближенных методов расчета образования и разрушения отрицательных ионов посвящены работы [1-3]. Недавно в работе [4] был получен и асимптотически точный результат для взаимодействия  $V_{ai}$  ковалентных состояний с ионным, рассматриваемым по модели электрона в поле точечного потенциала. Такая модель хорошо описывает свойства s-электрона в отрицательных ионах, но не пригодна при рассмотрении более сложных электронных конфигураций. В то же время простое сравнение результатов работ [4] и [3] показывает, что в оценке конкретных процессов (1) и (2) асимптотически точные [4] и приближенные [3] методы расчета могут расходиться по порядку величины. В настоящей работе асимптотически точные выражения для  $V_{ai}$  будут получены для тех случаев, которые не охватываются моделью точечного потенциала.

2. При малых скоростях соударяющихся частиц задача о неупругих переходах на первом этапе сводится к исследованию состояний слабосвязанного электрона в суммарном поле атомного остова  $U(\mathbf{r})$  и находящейся на фиксированном расстоянии  $R$  от него неподвижной нейтральной частицы B [потенциал  $V(\mathbf{r}-\mathbf{R})$ ]. При этом удобно пользоваться следующими уравнениями для оператора сдвига уровня  $\tau$  (матричные элементы этого оператора по невозмущенным волновым функциям  $\phi_{nLM}(\mathbf{r})$  электрона в атоме дают смещения уровней под действием возмущающей частицы):

$$\left. \begin{aligned} \tau &= t(G_E - G_0)\tau, \\ t &= V + VG_0t. \end{aligned} \right\} \quad (3)$$

Здесь  $G_E$  — функция Грина электрона энергии  $E < 0$  в атоме,  $G_0$  — произвольная одноэлектронная функция Грина. Уравнения (3) получаются тождественным преобразованием уравнения Липпмана—Швингера. Дальнейшее рассмотрение существенно зависит от той области расстояний, в которой находится возмущающая частица ( $\hbar=m=e=1$ ).

Рассмотрим сначала область подбарьерного движения  $R > |E|^{-1}$  (предполагается, что на больших расстояниях взаимодействие электрона с остовом  $A^+$  чисто кулоновское  $U(r) = -1/r$ ).

Общее спектральное представление для функции Грина имеет вид

$$G_E(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_{nLM} \frac{\psi_{nLM}(\mathbf{r}) \psi_{nLM}^*(\mathbf{r}')}{E - E_{nL}} + \int \frac{\psi_p(\mathbf{r}) \psi_p^*(\mathbf{r}')}{E - p^2/2} dp,$$

где  $\psi_{nLM}(\mathbf{r}) = \Phi_{nL}(r) Y_{LM}(\theta, \varphi)$ ,  $\psi_p(\mathbf{r})$  — волновые функции дискретного и непрерывного спектра. В этой сумме можно выделить две группы состояний электрона в атоме ( $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \ll |\mathbf{r} + \mathbf{r}'|/2 \approx R$ ).

К первой из них относятся непрерывный спектр и те состояния дискретного с  $E_{nL} > U(R)$ , классические орбиты которых охватывают возмущающий центр и для которых  $\psi_{nLM}$  не малы (в экспоненциальном смысле). При суммировании вклада этой отдаленной по энергии от рассматриваемого значения  $E < U(R)$  группы состояний можно отказаться от дискретной структуры уровней при  $U(R) < E_{nL} < 0$ , заменив  $E_{nL}$  на непрерывный параметр  $E'$ . Учтем, далее, что в квазиклассике при  $R^2 \gg (1/p'^2) |\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \psi_{nLM}(r) \psi_{nLM}^*(r') \sim \cos[\mathbf{p}'(\mathbf{r} - \mathbf{r}')]$ , где  $p'^2 = 2(E' - U(R))$ , причем суммирование (интегрирование) по  $L$  и  $M$  эффективно сводится к усреднению вектора  $\mathbf{p}'$  по всем возможным направлениям. Последующее интегрирование по  $|\mathbf{p}'|$  ведется в пределах от 0 до  $\infty$  и в результате получается функция Грина свободного электрона с измененным отсчетом энергии  $\tilde{E} = E - U(R)$ . Другая группа состояний с  $E_{nL} < U(R)$  (их конечное число) характеризуется экспоненциально малым вкладом в  $G_E(r, r')$ , исключая узкие неперекрывающиеся полоски энергии вблизи положений невозмущенных уровней  $E_{nL}$ .

Таким образом, при  $R > |E|^{-1}$ ,  $R^2 \gg (1/\alpha^2) |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$  в окрестности невозмущенного уровня  $|E - E_{nL}| \ll \Delta E$  ( $\Delta E$  — расстояние от этого уровня до соседних) можно пользоваться следующим квазиклассическим выражением для функции Грина:

$$G_E(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_M \frac{\psi_{nLM}(\mathbf{r}) \psi_{nLM}^*(\mathbf{r}')}{E - E_{nL}} - \frac{e^{-\alpha(R) |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}}{2\pi |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}, \quad \alpha(R) = \sqrt{2[U(R) - E]}. \quad (4)$$

Если теперь в качестве  $G_0$  в (3) использовать

$$G_0 = -\frac{e^{-\alpha(R) |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}}{2\pi |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|},$$

уравнение (3) сводится, очевидно, к системе алгебраических

$$\tau_{\lambda\lambda} = \sum_{\lambda'} \frac{t_{\lambda\lambda'} \tau_{\lambda'\lambda}}{E - E_{nL}}, \quad (5)$$

построенных на матричных элементах  $t$ -оператора по вырожденным состояниям атома.

Обсудим структуру входящих в полученные выше формулы  $t$ -операторов. В общем случае они функции трех переменных [5]:  $q$ ,  $q'$  и  $E$ .  $q$ ,  $q'$  — импульсы, зависимость от которых можно найти, пользуясь связью  $t$ -оператора с амплитудой рассеяния в разложении по парциальным волнам

$$(e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}, t e^{i\mathbf{k}'\mathbf{r}}) = -2\pi A(\mathbf{k}, \mathbf{k}', E) e^{i(\mathbf{k}' - \mathbf{k})\mathbf{R}}, \quad (6)$$

причем на физической поверхности при  $k^2 = k'^2 = 2E$

$$A(\mathbf{k}, \mathbf{k}', E) = \sum_l (2l+1) f_l(E) P_l(\cos \theta), \quad f_l = 1/(g_l - ik), \quad \cos \theta = \mathbf{k}\mathbf{k}'/k^2. \quad (7)$$

Формулы (6) и (7) можно получить, если ввести оператор, дифференцирующий функцию  $e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}}(d_{lm})$  и  $e^{i\mathbf{k}'\mathbf{r}}(d_{lm}^*)$  в точке  $\mathbf{R}$ ,

$$t = -8\pi^2 \sum_{l,m} |2E|^{-l} f_l(E) d_{lm} d_{lm}^*, \quad d_{lm} = q^l Y_{lm}(\theta_q, \varphi_q), \quad \mathbf{q} = i\nabla|_{\mathbf{r}=\mathbf{R}}. \quad (8)$$

Отметим, что при  $k^2 \neq k'^2 \neq 2E$  полученная с помощью (8) амплитуда (6) имеет правильную структуру лишь для потенциала конечного радиуса действия  $r_0$  при  $kr_0 < 1$ ,  $k'r_0 < 1$ . Если, однако, при расчете матричных элементов мы не выходим за пределы физической поверхности, формулой (8) можно пользоваться в самых общих предположениях о характере взаимодействия электрона с нейтральной возмущающей частицей. Именно такие условия создаются при рассмотрении квазиклассических состояний с большими квантовыми числами. Кроме того, матричные элементы  $t$ -оператора выходят на физическую поверхность и при расчете асимптотического поведения низкорасположенных термов, где при  $R \gg |E|^{-1}$  вблизи  $R \Phi(r) = \Phi(R) e^{i\mathbf{k}(r-\mathbf{R})}$  ( $k = i\sqrt{-2E}$ ) равенство  $k^2 = 2E$  выполняется автоматически.

Формула (8) легко обобщается на случай слегка несферических потенциалов, описывающих, например, силовое поле двухатомных молекул  $X_2$ , когда наряду с истинным квантовым числом  $m$  (проекцией момента на ось молекулы) возможна еще классификация и по  $l$ . В этом случае нужно учитывать только, что  $f_l$  зависит и от  $m$ , а векторы проектируются не на произвольное направление (как в случае сферического потенциала), а на выделенную ось молекулы.

3. Пользуясь формулами (5) и (8), легко определить в общем случае смещение изолированного  $s$ -уровня атома полем нейтральной частицы, например молекулы  $X_2$ ,

$$\Delta\epsilon_s = -2\pi \sum_{l,m} f_{lm}(\tilde{E}) \left( \frac{\Phi_s^{(l)}(R)}{\alpha^l} \right)^2 |Y_{lm}(\theta, \varphi)|^2, \quad (9)$$

$\theta$  — угол между осью молекулы и направлением вектора  $\mathbf{R}$ ,  $\Phi_s^{(l)}$  —  $l$ -я производная  $\Phi_s$ <sup>1</sup>

Допустим теперь, что в одном из состояний  $(l, m)$  электрон и молекула способны образовать устойчивый отрицательный ион. Этим состояниям отвечают полюса в функциях  $f_{lm}$ , определяемых аналитическим продолжением наблюдаемых на эксперименте амплитуд рассеяния в области отрицательных энергий.

Используя известное разложение для  $g_{lm}$  в (7) при малых энергиях [7]

$$\alpha^{2l} g_{lm} = c_{lm}^{(0)} + c_{lm}^{(1)} \alpha^2$$

(справедливое для взаимодействия конечного радиуса), имеем уравнение ( $l \geq 1$ )

$$E - E_s - \Delta\epsilon_s' + 2\pi (\Phi_s^{(l)})^2 |Y_{lm}(\theta, \varphi)|^2 \frac{1}{c_{lm}^{(0)} + c_{lm}^{(1)} \alpha^2} = 0 \quad (10)$$

(штрих означает исключение состояния  $l, m$ ), которое дает следующее выражение для взаимодействия смещенного  $s$ -терма с ионным  $(l, m)$ -термом. Отметим, что между квантовыми числами  $l, m$  и общепринятой классификацией существует простая связь, например,  $l = 1, m = 0$  отвечает

<sup>1</sup> Для смещения уровней сильноизбужденных состояний атома полем сферически симметричной частицы, когда  $f_{lm}$  не зависит от  $m$ , формула (9) переходит в результат Смирнова [6] при условии замены  $\alpha f_l(\tilde{E})$  на коэффициенты  $c_l$ , определяемые из решения точного уравнения в поле  $V$  при отрицательных энергиях.

состоянию  $\Sigma_u$  отрицательного молекулярного иона,  $l = 2$ ,  $m = \pm 1$  — состоянию  $\Pi_g$  и т. д.

$$V_{si}^2 = \pi \eta |c_{lm}^{(1)}|^{-1} |\Phi_s^{(l)}(R)|^2 |Y_{lm}(\theta, \varphi)|^2, \quad (11)$$

$\eta = 2$  при  $m \neq 0$ ,  $\eta = 1$  при  $m = 0$ .

Коэффициент  $c_{lm}^{(1)}$  можно связать с наблюдаемой на эксперименте амплитудой  $f_{lm}$  при положительной энергии, равной по величине энергии связи электрона в  $B^-$

$$[2c_{lm}^{(1)}]^{-1} = |f_{lm}(|\varepsilon_B|)| (2\varepsilon_B)^{1-l}. \quad (12)$$

Если отрицательный молекулярный ион образуется в различных колебательных состояниях  $v$ , имеется целая сетка ионных термов, отстоящих друг от друга на величину колебательного кванта  $\omega$ . Для определения взаимодействия с каждым из этих термов выражение (11) умножается, как обычно [2], на соответствующий фактор Франка—Кондона.

Аналогичные, но несколько более сложные выражения для  $\Delta\varepsilon_a$  и  $V_{ai}$  с помощью формул (5) и (8) могут быть получены и для вырожденных состояний атома. В этом случае наряду с  $\Sigma$ -термом (9) появляются и другие смещенные компоненты уровня.

Для атома, образующего отрицательный ион в  $p$ -состоянии (в этом состоянии образуются отрицательные ионы целого ряда элементов, например O, S, Cl), можно получить следующее выражение для взаимодействия  $nL$ -уровня с ионным термом:

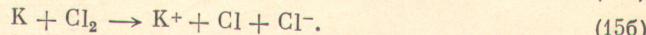
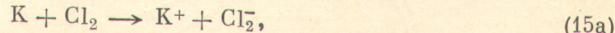
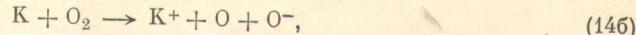
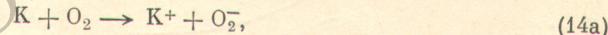
$$V_{ai}^2 = \frac{3}{2} |f_1(|\varepsilon_B|)| (2L+1) \left[ (\Phi'_{hL}(R))^2 + (\Phi_{nL}(R))^2 \frac{L(L+1)}{R^2} \right]. \quad (13)$$

Сравнивая (13) с квадратом аналогичного выражения для взаимодействия с ионным  $s$ -состоянием  $[V_{ai}(s)]^2 = 2\pi |\psi_{nL0}|^2 \alpha$  (это выражение получается и при использовании модели точечного потенциала [4]), находим, что

$$[V_{ai}(p)]^2/[V_{ai}(s)]^2 \sim |f_1| \alpha \ll 1.$$

Таким образом, в процессах (2) с участием отрицательных ионов, образованных  $p$ -электронами, заселяются более глубокие уровни, чем для ионов с  $s$ -электронами (при той же энергии сродства).

4. Обратимся теперь к процессам образования отрицательных молекулярных ионов. В работе Бухтеева, Быдина и Дукельского [8] были опубликованы экспериментальные данные о сечениях захвата электронов молекулами  $O_2$  и  $Cl_2$  в столкновениях с атомами калия



Было показано, что в соударениях с молекулами кислорода с подавляющей вероятностью образуются молекулярные ионы  $O_2^-$ , в то время как для молекул хлора более эффективным процессом является образование атомарных отрицательных ионов. Поскольку, как мы видели, все особенности процесса (1) определяются характером взаимодействия свободного электрона с молекулой, это обстоятельство легко объясняется при взаимном сопоставлении термов  $O_2$  и  $O_2^-$  [9],  $Cl_2$  и  $Cl_2^-$ . В первом случае вертикальный электронный переход сопровождается образованием устойчивого иона в состоянии  $\Pi_g$  (преимущественно на нулевом колебательном уровне), во втором он приводит к диссоциации молекулы (как в случае  $I_2^-$  [10]) на  $Cl$  и  $Cl^-$ .

Поскольку для иона  $O_2^-$  имеются более полные данные об энергии сродства ( $\varepsilon_B = 0.5$  эВ) и его терме ( ${}^3\Pi_g$ ), ограничимся расчетом реакции (14a).

Сечение определяется формулой

$$\sigma = \pi p \int 2e^{-\xi_s} (1 - e^{-\xi_s}) \exp \left[ -\sum_{\alpha} \xi_{\alpha} \right] \rho d\rho d \cos \vartheta, \quad (16a)$$

которая четко отражает динамику реакций типа (1). Здесь

$$\xi_{\alpha} = \frac{2\pi |V_{\alpha i}|^2 R_{\alpha}^3}{\sqrt{R_{\alpha}^2 - \rho^2}}, \quad R_{\alpha} = (E_{\alpha} - \epsilon_B)^{-1}, \quad (16b)$$

$\rho$  — прицельный параметр линейной траектории. Множитель  $2e^{-\xi_s}(1 - e^{-\xi_s})$  под интегралом в (16a) — вероятность захвата  $4s$ -электрона атома калия в ионное состояние  $\Pi_g(V_{si}^2)$  расчитывается по формуле (11) с  $l = 2$  и  $m = \pm 1$ ) при двукратном прохождении точки  $R_s$ ;  $\exp \left[ -\sum_{\alpha} \xi_{\alpha} \right]$ , где суммирование распространяется на все остальные пересекаемые ионным термом уровни, — вероятность оставаться в ионном состоянии при дальнейшем движении частиц. Множитель  $p = 1/3$  появляется из-за различия статистических весов  $O_2 ({}^3\Sigma)$  и  $O_2^- ({}^2\Pi)$  в спиновых состояниях. Так как параметры  $\xi_{\alpha}$  зависят от угловой ориентации молекулы, которая в процессе столкновения остается неизменной, в формулу (16a) входит интегрирование по углу  $\vartheta$ .

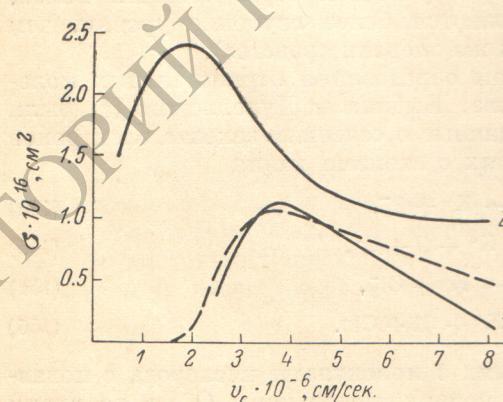
Анализ показывает, что в условиях эксперимента [8] на процесс (14a), кроме основного состояния с

$$V_{si}^2 = \frac{15}{4} [c_{21}^{(1)}]^{-1} |\Phi''_s(R_s)|^2 t^2 (1 - t^2) (t = \cos \vartheta),$$

существенно влияет лишь возможность заселения  $4p$ -уровня, для которого расчет по формулам (5) и (8) дает

$$V_{pi}^2 = \frac{45}{4} [c_{21}^{(1)}]^{-1} \left[ \left( \Phi_p'' + \frac{1}{2R^2} \Phi_p' \right)^2 t^2 (1 - t^2) + (\Phi_p')^2 \frac{1}{R^2} (1 - 3t^2 + 4t^4) \right].$$

Рассчитанная по этим формулам с использованием асимптотических волновых функций [3, 7] зависимость сечения от скорости  $v_c$  хорошо объясняет экспериментальные данные: быстрый рост сечения, достижение максимума и дальнейший плавный спад. Наилучшее согласие с экспериментом достигается при  $c_{21}^{(1)} = 2.7$  (см. рисунок).



Зависимость сечения образования отрицательных ионов от скорости  $v_c$ .

1 — для процесса  $K + O_2 \rightarrow K^+ + O_2^-$  (эксперимент [8]);  
2 — для процесса  $K + Cl_2 \rightarrow K^+ + Cl + Cl^-$  (эксперимент [1]). Штриховая линия — теоретическая кривая, рассчитанная по параметрам  $O_2$ .

Касаясь процесса (15b), отметим, что соответствующая ему теоретическая кривая должна быть аналогична рассчитанной (предполагается, что состояние  $Cl^-$  также  $\Pi_g$ ). Сечение при этом должно иметь характерную угловую зависимость в распределении вылетающих ионов  $Cl^-$ : оно минимально при  $\vartheta = 0, \pi/2$  и максимально в области углов  $\pi/4, 3\pi/4$ . Этот факт, по-видимому, мог бы использоваться при идентификации состояний молекулярных ионов.

5. В заключение рассмотрим коротко вопрос о возмущении сильно возбужденного атома полем нейтральной частицы, находящейся в классически доступной области движения электрона  $R < |E|^{-1}$ . Влияние инородного газа на положение оптической линии атома может наблюдаться экспериментально и это обстоятельство лежит в основе спектроскопичес-

кого метода исследования рассеяния медленных электронов на атомах [11-14].

Здесь мы исследуем, используя уравнения (3), случай, когда, как и в [13, 14], уровень не слишком близко примыкает к границе сплошного спектра  $E = 0$ , где справедлив известный результат Ферми [11].

Можно показать, что при  $R < |E|^{-1}$  имеет место следующее представление для квазиклассической функции Грина водородоподобного атома ( $R^2 \gg (1/k^2) |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$ ,  $k^2 = 2[E - U(R)]$ ):

$$G_E(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_{L, M} \pi n^3 \psi_{nLM}(\mathbf{r}) \psi_{nLM}^*(\mathbf{r}') \operatorname{ctg} \pi(n + \Delta_L) - \frac{\cos k |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}{2\pi |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \quad (17)$$

( $\Delta_L$  — ридберговский сдвиг уровня). Причем, если смещение исследуемого уровня в поле частицы меньше расстояния от этого уровня до соседних, можно ограничиться учетом одного (соответствующего этому уровню) полюсного члена

$$G_E(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_M \frac{\psi_{nLM}(\mathbf{r}) \psi_{nLM}^*(\mathbf{r}')}{E - E_{nL}} - \frac{\cos k |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}{2\pi |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}. \quad (18)$$

Напомним, что суммирование по  $M$  учитывает возможное вырождение уровня.

Таким образом, и в области  $R < |E|^{-1}$  для определения сдвига уровней имеем систему простых алгебраических уравнений

$$\tau_{\lambda\lambda} = \sum_{\lambda'} \frac{K_{\lambda\lambda'} \tau_{\lambda'\lambda}}{E - E_{nL}}, \quad (19)$$

построенных в отличие от (5) на  $K$ -матрице

$$K = V + VPG_0K, \quad PG_0 = -\frac{\cos k |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}{2\pi |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}; \quad (20)$$

при положительных энергиях  $\tilde{E} = k^2/2 > 0$  [ $P$  в (20) означает исключение особенности в смысле главного значения].

В соответствии с (20) смещение  $nL$ -уровня атома полем сферически симметричной частицы при  $L \ll n$  определяется выражением

$$\Delta \epsilon_{nL} = -\frac{2\pi}{k} |\psi_{nL0}(\mathbf{R})|^2 \sum_l (2l + 1) \operatorname{tg} \delta_l(R), \quad (21)$$

так что для сдвига оптической линии сильно возбужденного атома в инородном газе плотности  $N$  имеем

$$\Delta = -2\pi N \int \frac{1}{k} |\psi(\mathbf{R})|^2 \sum_l (2l + 1) \operatorname{tg} \delta_l(R) d\mathbf{R}. \quad (22)$$

Полученная формула при малых фазах рассеяния, когда при  $l \geq 1$   $\delta_l = 0$ , а  $(-1/k) \operatorname{tg} \delta_0$  заменяется на длину рассеяния, переходит в известный результат Ферми [11] и лишь в этой области совпадает с результатами работ Алексеева и Собельмана [13] и Смирнова [14] (стр. 125), в которых учитывалась конечная величина фаз рассеяния. Отличие (22) от соответствующей формулы работы [13], в которую вместо  $\operatorname{tg} \delta_l$  входит  $(1/2) \sin 2\delta_l$ , объясняется недостатками использованного в [13] импульсного приближения. Формулы [13] для сдвига и уширения уровней можно получить при непоследовательном использовании в уравнениях (19)  $t$ -матрицы, определенной при положительных энергиях, если дополнительно принять во внимание квазиклассическую связь координаты и импульса частицы.

Случаю  $\delta_l = \pi/2$  соответствует проявление резонанса в рассеянии электрона на возмущающих частицах. При этом уравнение (21) необходимо рассматривать совместно с условием  $k \operatorname{ctg} \delta_l = 0$ , определяющим

положение терма автоионизационного состояния отрицательного иона:  
 $E_i = \varepsilon_B^* - 1/R > 0$ .

Для потенциала конечного радиуса  $k \operatorname{ctg} \delta_l = k^{-2l} [c_l^{(0)} - C_l^{(1)} k^2]$  и имеется простая связь между взаимодействием  $V_{ai}$  ковалентного терма с ионным и шириной резонанса в рассеянии электрона на атоме Г

$$V_{ai}^2 = \frac{\pi}{k} |\psi_{nL0}(\mathbf{R})|^2 \tilde{\Gamma}, \quad \tilde{\Gamma} = (2l + 1) \Gamma. \quad (23)$$

Формулы (21)–(23) применимы, если сдвиг уровня или величина  $V_{ai}$  не превышают расстояния между уровнями.

В противном случае необходимо пользоваться выражением (17), которое совместно с (3) следующим образом описывает поведение кулоновских уровней ( $\Delta_L = 0$ ) в окрестности их пересечения с ионным термом:

$$n = \frac{1}{\pi} \operatorname{arc ctg} \frac{R - R_n}{\tilde{\Gamma} R_n^2}, \quad R_n = \left( \frac{1}{2n^2} + \varepsilon_B^* \right)^{-1}. \quad (24)$$

Отметим, что зависимость типа (24) была получена ранее в работе Демкова и Комарова [15] в рамках общей модели ионизационных процессов. Полученные здесь результаты дополняют эту модель конкретным определением входящих в нее параметров и могут использоваться для количественного исследования процессов ионизации, относительно которых в настоящее время накоплен обширный экспериментальный материал.

Автор благодарен А. С. Компанейцу и Ф. И. Далидчику за обсуждение результатов работы.

### Литература

- [1] D. R. Bates, I. T. Lewis. Proc. Phys. Soc., A 68, 173, 1955.
- [2] D. R. Bates, I. J. M. Boyd. Proc. Phys. Soc., A 69, 910, 1956.
- [3] Б. М. Смирнов, ДАН СССР, 161, 92, 1965; 173, 316, 1967.
- [4] И. В. Комаров, П. А. Погорелый, А. С. Тиболов. Опт. и спектр., 27, 198, 1969.
- [5] А. С. Давыдов. Теория атомного ядра. Физматгиз, М., 1963.
- [6] Б. М. Смирнов. ТЭХ, 7, 154, 1971.
- [7] Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. Квантовая механика. Физматгиз, М., 1963.
- [8] А. М. Бухтеев, Ю. Ф. Быдин, В. М. Дукельский. ЖЭТФ, 31, 688, 1961.
- [9] А. Брэнском. Атомные и молекулярные процессы, 95. Изд. «Мир», М., 1964.
- [10] M. A. Biondi, R. E. Fox. Phys. Rev. 109, 2008, 2012, 1958.
- [11] E. Fermi. Nuovo cimento. 11, 157, 1934.
- [12] О. Б. Фирсов. ЖЭТФ, 21, 627, 634, 1951.
- [13] В. А. Алексеев, И. И. Собельман. ЖЭТФ, 49, 1274, 1965.
- [14] Б. М. Смирнов. Атомные столкновения и элементарные процессы в плазме. Атомиздат, М., 1968.
- [15] Ю. Н. Демков, И. В. Комаров. ЖЭТФ, 50, 286, 1966.

Поступило в Редакцию 9 февраля 1973 г.