

тервале частот оценивается не хуже, чем в 5%. Расчетная зависимость (2) приведена на рис. 1 вместе с данными эксперимента. Нормировка проведена в точке $\Phi = 45^\circ$. Видно хорошее согласие расчета и экспериментальных данных.

Таким образом, данное исследование показало, что в достаточно широкой области частот вероятность процесса многофотонной ионизации при степени нелинейности $k_0 \leq 4$ имеет определенную зависимость от поляризации излучения, имеющую относительно простую аналитическую аппроксимацию.

Литература

- [1] Б. А. Зон, Л. П. Рапопорт, Н. Л. Манаков. Теория многофотонных процессов в атомах. Атомиздат. М., 1978.
- [2] S. Klarzfeld, A. Maquet. Phys. Rev. Lett., 29, 79, 1972.
- [3] V. Gontier, H. Trahin. Phys. Rev., A7, 2069, 1973.
- [4] Г. А. Делоне, Н. Л. Манаков, Г. К. Пискова, Л. П. Рапопорт. Труды ФИАН СССР, 115, 6, 1980.
- [5] Г. А. Делоне, Н. Б. Делоне, В. К. Золотарев, Н. Л. Манаков, Г. К. Пискова, М. А. Турсунов. ЖЭТФ, 65, 481, 1973.
- [6] Н. Б. Делоне, В. А. Коварский, А. В. Масалов, Н. Ф. Перельман. УФН, 131, 617, 1980.
- [7] N. L. Manakov, V. D. Ovsiannikov, M. A. Preobragenski, L. P. Rapoport. J. Phys., B11, 245, 1978.

Поступило в Редакцию 10 октября 1982 г.

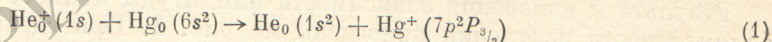
УДК 539.184

Опт. и спектр., 55, вып. 6, 1983

РАСЧЕТ СЕЧЕНИЙ ПЕРЕЗАРЯДКИ С ВОЗБУЖДЕНИЕМ ИОНА

Островский В. Н. и Толмачев Ю. А.

Нерезонансная перезарядка с возбуждением иона при тепловых энергиях сталкивающихся частиц является одним из наиболее распространенных механизмов создания инверсной заселенности в ионных лазерах. Эксперименты по измерению абсолютной величины эффективного сечения перезарядки ионов гелия с образованием возбужденного иона ртути



показали [1], что константа скорости этого процесса имеет величину $\approx 10^{-12} \text{ см}^3 \text{ с}^{-1}$, что соответствует среднему сечению перезарядки с возбуждением иона $\sim 10^{-17} \text{ см}^2$. Теоретическая оценка сечения реакции (1), основанная на модели одноэлектронного перехода [2] (как если бы возбуждения Hg^+ не происходило), дает $\sigma = 4 \cdot 10^{-21} \text{ см}^2$. Такое большое расхождение может быть связано только с ошибками вычисления величины расщепления термов в области ландау-зинеровского квазипересечения.

Данные экспериментального определения полных сечений перезарядки в системе ион инертного газа—атом металла II группы, а также оценки асимптотического поведения квазимолекулярных термов показывают [3], что перезарядка происходит при межъядерных расстояниях $\sim 10 \text{ а. е.}$ Следовательно, для определения величины расщепления можно пользоваться методами асимптотической теории [2]. Однако подобный тип двухэлектронного процесса, соответствующий процессу



до сих пор не рассматривался. В нашей работе найдено выражение для величины взаимодействия термов в области квазипересечения в случае одновременного изменения состояния двух электронов, когда один из них переходит с одной частицы на другую, а второй возбуждается, оставаясь на исходном центре.

Нетрудно показать, что полученное в асимптотической теории для одноэлектронной задачи представление величины обменного взаимодействия H_{12} [2] может быть обобщено на случай одновременного изменения состояний двух электронов

$$\Delta = 2H_{12} = \oint_S dS_1 \int dr_2 [\Psi_I(r_1, r_2) n_S \nabla_{r_1} \Psi_{II}(r_1, r_2) - \Psi_{II}(r_1, r_2) n_S \nabla_{r_1} \Psi_I(r_1, r_2)]. \quad (3)$$

Для простоты записи электроны считаются здесь различимыми. Для первого электрона, переходящего с одной атомной частицы на другую, интегрирование ведется по плоскости S , перпендикулярной орбитальной оси и проходящей через ее середину, n_s — единичный вектор нормали к S . Интегрирование по r_2 распространяется на весь объем. Волновые функции квазимолекулы Ψ_I и Ψ_{II} при разведении ядер переходят соответственно в волновые функции начального и конечного состояний разведенных атомов.

Если использовать в качестве Ψ_I и Ψ_{II} произведения одноэлектронных волновых функций разведенных атомов, то интеграл (3) обратится в нуль из-за ортогональности орбиталей второго электрона. Таким образом, решающее значение здесь приобретает учет отличия квазимолекулярных волновых функций от атомных, который осуществляется введением зависящих от r_1 и r_2 множителей — поправочных функций. Он облегчается тем, что при больших межъядерных расстояниях R основной вклад в интеграл (3) дают две области. Для первого электрона эта область близка к середине межъядерного отрезка [2], а для второго — к ядру B (если в результате перезарядки получается не слишком сильно возбужденное состояние B^{**}). Это позволяет приближенно разделить зависимости от r_1 и r_2 в гамильтониане и факторизовать поправочные функции для начального и конечного состояния.

В начальном состоянии возмущением является взаимодействие электронов с ионом A^+ (межэлектронное взаимодействие учитывается в двухэлектронной волновой функции атома B). В конечном состоянии возмущение дается взаимодействием электронов между собой и с «чужим» атомным остовом. Для первого электрона поправочные функции соответствуют движению глубоко под потенциальным барьером и находятся известным в асимптотической теории методом. Для второго электрона поправочные функции требуют знать вблизи ядра B , где можно воспользоваться обычной теорией возмущений. В окончательном выражении потенциал взаимодействия разлагается по мультиполям, что дает

$$\Delta = \Delta_1 \frac{1}{E_{B^{**}} - E_{B^+}} \sum_{l=1}^{\infty} \left(\frac{2}{R} \right)^{l+1} \langle \varphi_{B^+} | r_{2b}^l P_l(\cos \gamma_{2b}) | \varphi_{B^{**}} \rangle, \quad (4)$$

где Δ_1 — расщепление, вычисленное по известным формулам асимптотической теории для одноэлектронной перезарядки так, как если бы возбуждение частицы B^+ не происходило, φ_{B^+} и $\varphi_{B^{**}}$ — волновые функции иона B^+ в основном и конечном возбужденном состояниях, $P_l(z)$ — полином Лежандра, r_{2b} и γ_{2b} — сферические координаты второго электрона в системе с центром в ядре B и осью, направленной вдоль межъядерной оси.

Фактически в сумме, стоящей в (4), всегда присутствует лишь один член с $l = \Delta l_2$, где Δl_2 — изменение орбитального момента электрона для рассматриваемого перехода в ионе B^+ . Очевидно, что величина Δ быстро убывает с ростом Δl_2 , и максимальный вклад дают переходы с $\Delta l_2 = 1$. В случае $s \rightarrow s$ переходов соотношение (4) приводит к $\Delta = 0$, и для вычисления расщепления необходимо учесть члены второго порядка малости в теории возмущений для состояния второго элемента.

Сравнение рассчитанных с помощью формулы (4) сечений перезарядки с результатом эксперимента было выполнено для процесса (1). Предполагалось, что при больших R терм квазимолекулы, соответствующий конечному состоянию, горизонтален, а в начальном состоянии учитывалось поляризационное взаимодействие. Квазипересечение термов происходит при $R_0 = 6.4$ а. е. Оценка Δ_1 осуществлялась по формулам асимптотической теории [2]. Величина дипольного матричного элемента перехода для второго электрона вычислялась в при-

ближении Бейтса—Дамгаард с помощью таблиц [4]. Полное эффективное сечение перезарядки рассчитывалось по известным формулам для ландау-зинеровского перехода. Для рассматриваемой системы реализуется случай, когда расщепление термов мало по сравнению с кинетической энергией частиц в области квазипересечения, тогда согласно [5],

$$\sigma = 4\pi R_0^2 \frac{2\pi H_{12}^2}{\hbar |\Delta F|} \frac{v_0}{v_i^2}, \quad (5)$$

где ΔF — разность сил на квазипересекающихся термах, v_i — начальная скорость столкновения, v_0 — скорость в точке $R=R_0$ при лобовом столкновении. В условиях эксперимента [1] (тепловые энергии столкновения) скорость v_0 определяется в основном ускорением ядер при их сближении по начальному притягивательному терму ($v_0 \gg v_i$). Результаты расчета константы скорости перезарядки дают $\bar{\sigma} = 1.5 \cdot 10^{-16}$ см², что превосходит полученное в [1] значение только на порядок.

Полученное расхождение может быть обусловлено двумя причинами. С одной стороны, как указывают авторы [1], при определении величины сечения на основании данных эксперимента не были учтены все возможные переходы из состояния $\text{Hg}^+ (7p^2P_{3/2})$, и приведенное значение может быть занижено. С другой стороны, при теоретическом расчете мы не учитывали существование квазипересечений, приводящих к заселению других состояний иона ртути. Поскольку сечение реакции (1) составляет $\sim 10^{-2} \div 10^{-3}$ от полного сечения перезарядки ионов гелия на атомах ртути, число состояний, возбуждающихся при перезарядке, может быть велико.

Литература

- [1] Ю. А. Пиотровский, Ю. А. Толмачев, С. В. Касьяненко. Опт. и спектр., 52, 754, 1982.
- [2] Б. М. Смирнов. Асимптотические методы в теории атомных столкновений. Атомиздат, М., 1973.
- [3] A. R. Turner-Smith, J. M. Green, C. E. Webb. J. Phys. B, 6, 114, 1973.
- [4] И. И. Собельман. Введение в теорию атомных спектров. Наука, М., 1977.
- [5] Е. Е. Никитин, С. Я. Уманский. Неадиабатические переходы при медленных атомных столкновениях. Атомиздат, М., 1979.

Поступило в Редакцию 26 октября 1982 г.

УДК 535.39 : 539.216

Опт. и спектр., 55, вып. 6, 1983

ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТОДОМ ИК СПЕКТРОСКОПИИ ОТРАЖЕНИЯ—ПОГЛОЩЕНИЯ СВЕРХТОНКИХ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИХ СЛОЕВ В СТРУКТУРАХ МЕТАЛЛ—ДИЭЛЕКТРИК—ПОЛУПРОВОДНИК

Толстой В. П. и Крылов В. Н.

Сверхтонкие диэлектрические слои, находящиеся в зоне контакта твердых тел различного химического состава, в значительной мере, как известно, определяют электрофизические, оптические, механические и многие другие свойства зоны сопряжения данных тел. Исследование контактных соединений является, однако, одной из наиболее сложных задач при физико-химическом исследовании твердых тел, поскольку анализируемое вещество представляет собой, как правило, слой толщиной от долей до нескольких нм и, кроме того, «маскируется» основным объемом граничащих сред. Среди спектроскопических методов исследования данных соединений известны методы оже- и рентгеноэлектронной спектроскопии [1], позволяющие определять состав сверхтонких слоев, находящихся в поверхностном слое вещества, и, естественно, состав контактного соединения после разрушения одной из граничащих сред.