

## КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

02

Журнал технической физики, т. 64, в. 1, 1994

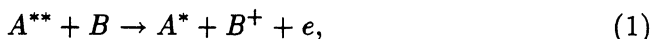
© 1994 г.

## РАСПАД ДОЛГОЖИВУЩИХ АВТОИОНИЗАЦИОННЫХ СОСТОЯНИЙ АТОМОВ В АТОМНЫХ СТОЛКНОВЕНИЯХ

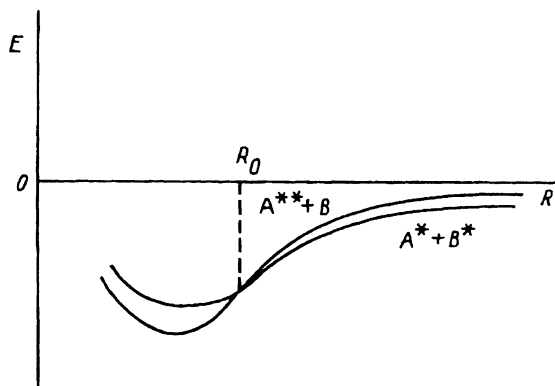
Б.Г.Краков

Времена жизни автоионизационных состояний (АС) атомов, как правило, достаточно малы и составляют  $10^{-12}$ – $10^{-14}$  с. Их распад обусловлен безызлучательными оже-переходами. Однако среди атомных АС существуют такие, оже-распад которых запрещен правилами отбора для матричных элементов. Характерным примером является АС  $3p(2p^2)$  в гелии, безызлучательный распад которого запрещен правилами отбора по четности [1]. Вследствие этого они распадаются за счет радиационных переходов и их время жизни на много порядков превышает время жизни обычных АС. В условиях атомных столкновений понижается симметрия системы, что приводит к смягчению правил отбора. Поэтому в процессе столкновения возможны электронные переходы, запрещенные в изолированном атоме. В связи с этим представляет интерес исследование распада долгоживущих АС в атомных столкновениях. В работе [2] рассчитывался распад АС  $3P$  в He при столкновении с быстрым электроном за счет перемешивания автоионизационных состояний в кулоновском поле.

Мы будем рассматривать безызлучательный распад долгоживущих АС при медленных столкновениях с атомами. Уравнение этой реакции имеет вид



где  $A^{**}$  и  $A^*$  — атом в долгоживущем АС и возбужденном состоянии соответственно;  $B$  — атом, чей потенциал ионизации меньше, чем разность энергий автоионизационного и возбужденного состояний. В начальном состоянии в области больших межъядерных расстояний  $R$  дальнедействующий потенциал для пары  $A^{**} + B$  определяется ван-дер-авальсовским взаимодействием  $U(R) = -C_6/R^6$  ( $C_6$  — постоянная Ван-дер-Ваальса). В конечном состоянии в связи с тем, что орбитальный момент атома  $A^*$  отличен от нуля, дальнедействующий потенциал имеет вид  $U(R) = -Q/2R^3$ , где  $Q$  — квадрупольный момент атома. Энергетический баланс реакции (1) имеет вид (всюду,



Качественный ход термов начального и конечного состояний реакции (1).

где специально не указано, используются атомные единицы)

$$E_1 - J_B - C_6/R^6 = E_2 - Q/2R^3 + E_e(R), \quad (2)$$

где  $E_1$  и  $E_2$  — энергии автоионизационного и возбужденного состояний атома  $A$ ,  $J_B$  — потенциал ионизации атома  $B$ ,  $E_e$  — энергия электрона.

На рисунке представлен качественный ход термов начального и конечного состояний квазимолекулы, составленной из сталкивающихся атомов. Межъядерное расстояние  $R_0$ , при котором пересекаются термы, определяет границу области, где процесс (1) энергетически возможен, т.е.  $E_e(R) > 0$  при  $R_0 < R < \infty$ .

Рассмотрим конкретную реализацию реакции (1). В качестве атома  $A^{**}$  выберем долгоживущее АС гелия  ${}^3P(2p^2)$ , а в качестве атома  $B$  — атом с одним валентным электроном, например  $\text{Na}$ . Если в начальном состоянии спины  $\text{He}$  и  $\text{Na}$  параллельны, то в конечном состоянии атом  $\text{He}$  оказывается в состоянии  $2^3P$ . В случае антипараллельных спинов конечное состояние  $\text{He}$  будет  $2^{1,3}P$ . Для расчета пороговых межъядерных расстояний  $R_0$  уравнение (2) примет вид

$$\Delta_{1,2} + Q_{1,2}/2R_0^3 - C_6/R_0^6 = 0, \quad (3)$$

где индексы 1 и 2 соответствуют конечным термам гелия  $2^1P$  и  $2^3P$  ( $\Delta_1 = 0.526$  и  $\Delta_2 = 0.498$ ).

Константа  $C_6$  для пары  $\text{He}({}^3P) + \text{Na}$  рассчитывалась по формуле [3]

$$C_6 = \alpha_1 [2(D_x^2)_{00} + 0.5(D_y^2)_{00} + 0.5(D_z^2)_{00}], \quad (4)$$

где  $\alpha_1$  — поляризуемость атома  $\text{Na}$ ,  $(D_n^2)_{00}$  — собственное значение оператора квадрата проекции дипольного момента атома  $\text{He}$  в рассматриваемом состоянии.

Используя одноконфигурационное приближение для волновой функции АС  $\text{He}$  и значение  $\alpha_1 = 162$  [4], получим значение  $C_6 = 1701$ . Согласно [5], вклад остальных конфигураций в величину  $C_6$  составляет около 20%. Расчет квадрупольного момента возбужденного атома гелия в  $1^3P$ -состоянии в том же приближении дает значение  $Q = 6$ . Вклад остальных конфигураций не превышает 35%. Необходимо отметить, что наличие больших показателей степени в уравнении (3)

приводит к тому, что  $R_0$  слабо зависит от значений  $Q$  и  $C_6$ . Для  $1,3P$ -термов  $R_0 = 3.8$ . Следовательно, реакция (1) для пары He+Na возможна вплоть до области достаточно тесного сближения атомов. Для оценки сечения реакции (1) при медленных столкновениях по аналогии с пеннинговской ионизацией воспользуемся формулой [6]

$$\sigma = F_w P \sigma_0, \quad (5)$$

где  $F_w$  — вероятность того, что процесс (1) разрешен по полному электронному спину сталкивающихся атомов,  $\sigma_0$  — сечение захвата за счет дальнего действующего потенциала взаимодействия частиц  $A^{**}$  и  $B$ ,  $P$  — вероятность ионизации при захвате.

Сечение захвата для потенциала  $U(R) = -C_6/R^6$  равно [7]

$$\sigma_0 = 1.5\pi(2C_6/E)^{1/3}, \quad (6)$$

где  $E$  — энергия относительного движения атомов.

Поскольку в конечном состоянии один из электронов атома  $A$  остается в возбужденном состоянии, то полный спин электронов сохраняется, следовательно,  $F_w = 1$ . Расчет вероятности ионизации связан с вычислением ширины АС квазимолекулы, составленной из атомов  $A^{**}$  и  $B$ . Расчет ширины уровней в квазимолекуле очень сложен и проделан лишь для простейших систем [7]. Наличие двух возбужденных электронов в атоме He и слабосвязанного электрона в атоме Na приводит к тому, что взаимодействие между ними при захвате сильно возрастает. Поскольку в квазимолекуле запрет на оже-переход снимается, то частота распада в этой области велика. Вероятность ионизации  $P$  при этом близка к единице [6]. Аналогичная ситуация наблюдается при столкновении метастабильного атома Ag с Na. Сечение ионизации для этой пары описывается формулой (5) при  $P = 1$  [8,9]. В результате расчет сечения (5) сводится просто к расчету  $\sigma_0$ . Часто, однако, в экспериментах измеряется не сечение  $\sigma$ , а константа скорости процесса  $\langle V\sigma \rangle$ . Тогда эффективное сечение процесса (1)  $\langle \sigma \rangle$  определяется по формуле [9]

$$\langle \sigma \rangle = \langle V\sigma \rangle / \langle V \rangle = 1.5\pi \Gamma(5/3)(2C_6/T)^{1/3}, \quad (7)$$

где  $T$  — температура газа.

В интервале температур 100–800° С сечение  $\langle \sigma \rangle$  для пары He+Na составляет 1.0–1.7·10<sup>-14</sup> см<sup>2</sup>. Эта оценка является несколько завышенной за счет завышенной величины вероятности ионизации  $P$ . Для сравнения отметим, что сечение пеннинговской ионизации пары He(<sup>1,3</sup>S)+Na составляет 1.7–1.4·10<sup>-15</sup> см<sup>2</sup> [10].

Экспериментально реакцию (1) для He(<sup>3</sup>P) можно наблюдать по уменьшению интенсивности линии  $\lambda = 320.4$  нм с увеличением концентрации паров Na. Это связано с тем, что вероятность реакции (1) пропорциональна концентрации примесных атомов, а вероятность радиационного распада от нее не зависит. Отметим, что энергетически возможны и другие конечные состояния реакции (1), например ион  $B^+$  в возбужденном состоянии, двухзарядный ион  $B^{2+}$ , ионы  $A^+$  и  $B^+$ . Однако образование этих состояний возможно за счет более высокого

порядка межэлектронного взаимодействия, что делает их вероятность малой по сравнению с конечным состоянием, рассмотренным нами.

Таким образом, долгоживущие или метастабильные атомные АС могут распадаться в атомных столкновениях за счет смягчения правил отбора. Наличие двух возбужденных электронов в начальном состоянии приводит к увеличению вероятности ионизации и росту сечения процесса по сравнению с одноэлектронными метастабильными состояниями. Оценка сечения распада АС  $\text{He}(^3P)$  при тепловых столкновениях с атомом Na дает величину  $1-2 \cdot 10^{-14} \text{ см}^2$ , что на порядок превосходит сечение пеннинговской ионизации для пары  $\text{He}(^1,^3S) + \text{Na}$ .

### Список литературы

- [1] Wu T.Y. // Phys. Rev. 1944. Vol. 66. N 11,12. P. 291-294.
- [2] Парилис Э.С., Кишиневский Л.М., Матвеев В.И., Краков Б.Г. Оже-процесс при атомных столкновениях. Ташкент: Фан, 1989. 240 с.
- [3] Смирнов Б.М. Возбужденные атомы. М.: Энергоиздат, 1982. 231 с.
- [4] Радциг А.А., Смирнов Б.М. Справочник по атомной и молекулярной физике. М.: Атомиздат, 1980. 240 с.
- [5] Проппин Р.Х. // Опт. и спектр. 1960. Т. 8. Вып. 3. С. 300-302.
- [6] Bates D.R., Bell K.L., Kingston A.E. // Proc. Phys. Soc. 1967. Vol. 91. P. 288-231.
- [7] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Механика. М.: Наука, 1988. 216 с.
- [8] Краков Б.Г., Парилис Э.С. // УФН. 1989. Т. 157. № 3. С. 477-517.
- [9] Смирнов Б.М. Возбужденные атомы. М.: Энергоиздат, 1982. 231 с.
- [10] Hotoz H., Niehaus A. // Z. Phys. 1968. Bd 125. N 2. P. 395-402.

Институт электроники  
Ташкент

Поступило в Редакцию  
4 ноября 1992 г.  
В окончательной редакции  
8 июня 1993 г.