

ОБЗОР

УДК 533.92

ПЕРЕЗАРЯДКА ПРИ МЕДЛЕННЫХ СТОЛКНОВЕНИЯХ

В. М. Смирнов

Исследуется метод расчета сечения перезарядки при малых скоростях столкновения атомных частиц, когда величина сечения перезарядки значительно превышает соответствующую атомную величину. Метод основан на двухуровневом приближении и связан с использованием асимптотических свойств квазимолекулы, составленной из сталкивающихся атомных частиц. Проведено систематическое сравнение результатов расчета сечений резонансной и нерезонансной перезарядки с малым дефектом резонанса и результатов соответствующих измерений.

В данном обзоре рассмотрена одноэлектронная перезарядка при столкновении медленных атомных частиц*, которая соответствует переходу электрона от одной частицы к другой. При этом исследуется случай, когда сечение перезарядки велико по сравнению с характерной атомной величиной. Поскольку в данном случае сечение перезарядки значительно превышает и сечения других переходов, рассматриваемый процесс может стать определяющим в ряде явлений астрофизики, физики верхних слоев атмосферы, а также явлений, происходящих в плазме, газовом разряде, квантовых усилителях и т. д. Так, например, резонансной перезарядкой (переход электрона от одной атомной частицы к другой такой же атомной частице) определяются такие характеристики, как подвижность в собственном газе, диффузия ионов на стенки в плазме.

Использованный в данной работе метод вычисления сечения перезарядки основан на предположении, что переход электрона совершается уже при больших (по сравнению с характерными атомными размерами) расстояниях между ядрами сталкивающихся частиц. Это происходит в случае, если соответствующие данным состояниям уровни энергии квазимолекулы сближаются при больших расстояниях между ядрами, так что при решении уравнения Шредингера для электрона можно ограничиться двумя состояниями. При этом сечение перезарядки удастся выразить через характеристики сталкивающихся атомных частиц.

Приближение двух уровней

1. Свойства квазимолекулы, имеющей два уровня. Рассмотрим случай перезарядки в процессе столкновения двух атомных частиц, когда переход электрона совершается при больших (по сравнению с характерными размерами атомных частиц) расстояниях между ядрами. Это возможно, если два уровня энергии квазимолекулы, составленной из данных атомных частиц, сближаются при больших расстояниях между их ядрами. При этом имеет место сильное взаимодействие между соответствующими этим уровням состояниями, и так как при больших расстояниях между атомами уровни энергии других состояний расположены далеко от уровней энергий рассматриваемых состояний, при определении сечения перехода можно ограничиться двухуровневым приближением.

Исследуем квазимолекулу, состоящую из двух атомных частиц при больших расстояниях между ними. Пусть φ_1 — атомная волновая функция, соответствующая нахождению электрона в поле одной атомной частицы и учитывающая влияние другой частицы; φ_2 соответствует нахождению электрона в поле другой атомной частицы. Будем считать, что уровни энергии рассматриваемых состояний оказываются друг к другу значительно ближе, чем уровни энергии других состояний. Тогда, ограничив-

* Атомная частица — атом или ион.

шись двумя состояниями, получим [1, стр. 332], что собственными функциями гамильтониана являются

$$\Psi_I = a_1\varphi_1 + a_2\varphi_2, \quad \Psi_{II} = -a_2\varphi_1 + a_1\varphi_2, \quad (1)$$

где

$$a_{1,2} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[1 \pm \frac{\kappa}{\sqrt{\kappa^2 + \Delta^2}} \right]^{1/2},$$

$$\kappa = H_{11} - H_{22}, \quad \Delta = 2H_{12}, \quad H_{ik} = \int \varphi_i^* H \varphi_k d\tau.$$

Гамильтониан электрона имеет вид

$$H = -\frac{1}{2}\nabla^2 + V(\mathbf{r}_1) + U(\mathbf{r}_2), \quad (2)$$

где U, V — эффективные потенциалы взаимодействия электрона с первым и вторым атомным остатком; $r_{1,2}$ — расстояние от электрона до соответствующего ядра. Пользуемся системой атомных единиц $\hbar = m_{\text{эл}} = e^2 = 1$ [2]. Асимптотический вид эффективных потенциалов взаимодействия

$$V(\mathbf{r}) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} -\frac{Z_1}{r}, \quad U(\mathbf{r}) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} -\frac{Z_2}{r}, \quad (3)$$

где Z_1, Z_2 — заряд первого и второго атомных остатков. Атомные волновые функции электрона, находящегося в поле соответствующего атомного остатка, являются решениями уравнений

$$\left[-\frac{1}{2}\Delta + V(\mathbf{r}) \right] \varphi_{1a\tau} = \varepsilon_1 \varphi_{1a\tau}, \quad \left[-\frac{1}{2}\Delta + U(\mathbf{r}) \right] \varphi_{2a\tau} = \varepsilon_2 \varphi_{2a\tau}. \quad (4)$$

Будем считать, что расстояние между ядрами достаточно велико, так что молекулярная волновая функция φ_1 мало отличается от $\varphi_{1a\tau}$ вблизи первого атома, а φ_2 мало отличается от $\varphi_{2a\tau}$ вблизи второго атома. На основе этого определим молекулярные волновые функции φ_1, φ_2 в области между атомами вблизи соединяющей их ядра оси. Воспользуемся тем, что уравнение Шредингера с гамильтонианом (2) в области, очень близкой к ядрам, где справедливо асимптотическое выражение (3), разделяется в эллиптических координатах: ξ, η, Φ [3, 4]

$$\xi = \frac{r_1 + r_2}{R}, \quad \eta = \frac{r_1 - r_2}{R}, \quad \varphi_1 = X(\xi)Y(\eta) \frac{e^{im\Phi}}{\sqrt{2\pi}},$$

$$\frac{d}{d\xi} \left[(\xi^2 - 1) \frac{dX}{d\xi} \right] + \left[-\frac{m^2}{\xi^2 - 1} + R(Z_1 + Z_2)\xi - p^2\xi^2 + C \right] X = 0, \quad (5)$$

$$\frac{d}{d\eta} \left[(1 - \eta^2) \frac{dY}{d\eta} \right] + \left[-\frac{m^2}{1 - \eta^2} + R(Z_2 - Z_1)\eta + p^2\eta^2 - C \right] Y = 0.$$

Здесь r_1, r_2 — расстояние от электрона до соответствующего ядра; R — расстояние между ядрами; m — проекция момента электрона на соединяющую ядра ось; $p^2 = -(\varepsilon - R^2/2)$, $\varepsilon = -(\gamma^2/2) - (Z_2/R)$ — энергия электрона, где $\varepsilon_1 = -\gamma^2/2$ — энергия атомного электрона; C — константа разделения.

В области около первого ядра волновая функция φ_1 совпадает с атомной волновой функцией. Асимптотическое выражение атомной волновой функции имеет вид

$$\varphi_{1a\tau} = Y_{lm}(\theta, \Phi) A r^Z r^{-1} e^{-r\gamma} \left[1 + \frac{Z_1}{2r\gamma^2} \left(\frac{Z_1}{\gamma} - 1 \right) - \frac{l(l+1)}{2r\gamma} + O\left(\frac{1}{r^2}\right) \right], \quad (6)$$

$$\left(Y_{lm}(\theta, \Phi) = \frac{e^{im\Phi}}{\sqrt{2\pi}} \left[\frac{(2l+1)(l-m)!}{2(l+m)!} \right]^{1/2} P_l^m(\cos\theta) \right),$$

где $Y_{lm}(\theta, \Phi)$ — нормированная угловая волновая функция; r, θ, Φ — сферические координаты электрона около первого ядра; l — момент атомного электрона. Константу A , которая определяется поведением электрона внутри атома, будем считать известной. Для нахождения волновой функции электрона φ_1 вблизи соединяющей ядра оси потребуем, чтобы решение уравнений (5) совпадало вблизи первого ядра со значением волновой функции (6) при малых углах $\theta = 2\sqrt{\xi} - 1/1 + \eta \ll 1$. В результате получим для константы разделения

$$C = \frac{R^2\gamma^2}{4} - RZ_1 - \frac{RZ_2}{2} + R\gamma(m+1).$$

В случае двух одинаковых атомов, находящихся в s -состоянии, это выражение переходит в результат работы [5]

$$\Delta = \left(\frac{4}{e}\right)^{z/R} \frac{R}{4} \varphi_{ar^2} \left(\frac{R}{2}\right).$$

3. Учет спинового состояния электрона и атомных остатков. Формула (10) получена в предположении, что потенциал взаимодействия электрона и атомного остатка не зависит от их спинового состояния. Поэтому она справедлива в случае, если спин одного из атомных остатков равен нулю, так что собственные волновые функции гамильтониана $\Psi_{1, \Pi}$ (1) являются произведением координатной волновой функции электрона на спиновую волновую функцию, а не суммой таких произведений, как это имеет место в общем случае. Если спины обоих атомных остатков отличны от нуля, молекулярные волновые функции электрона φ_1, φ_2 следует выражать в виде произведения координатной волновой функции электрона на спиновую функцию электрона и соответствующего атомного остатка, а в формуле (9) нужно произвести суммирование по электронным координатам.

Выполним эту операцию для случая, когда спины атомных остатков равны $1/2$ и рассматриваемое состояние атомов соответствует синглетному спиновому состоянию электрона и атомных остатков [6]. Тогда гамильтониан (2) принимает вид

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \Delta + V(r_1) + U(r_2) + V'(r_1)\sigma_1\sigma + U'(r_2)\sigma_2\sigma, \quad (11)$$

где σ — оператор спина электрона; σ_1, σ_2 — операторы спинов атомных остатков.

Так как потенциалы V', U' отличны от нуля лишь в ограниченной области порядка атомных размеров, то молекулярные волновые функции электронов Φ имеют вид

$$\Phi_1 = \varphi_1(r_1)S_1\eta_+(2), \quad \Phi_2 = \varphi_2(r_2)S_2\eta_+(1).$$

Здесь $\varphi_{1, 2}$ — координатные волновые функции электрона; синглетные спиновые функции электрона и атомного остатка равны

$$S_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} [\eta_+\eta_-(1) - \eta_-\eta_+(1)], \quad S_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} [\eta_+\eta_-(2) - \eta_-\eta_+(2)],$$

где $\eta_{\pm}(1), \eta_{\pm}(2)$ — спиновые функции соответствующего атомного остатка, отвечающие данному знаку проекции спина на выделенное направление; η_{\pm} — спиновая функция электрона. Используя ортогональность спиновых функций $\langle \eta_+ | \eta_- \rangle = 0$, $\langle \eta_{\pm} | \eta_{\pm} \rangle = 1$ и исключив спиновые координаты, для величины Δ в формуле (9) получим

$$\Delta = \frac{1}{2} \oint_s (\varphi_1 \nabla \varphi_2 - \varphi_2 \nabla \varphi_1) ds, \quad (12)$$

т. е. значение, в два раза меньшее, чем когда электрон находится в поле бесспиновых атомов и описывается теми же координатными волновыми функциями.

Формулу (12) можно получить описанным способом и в случае любых спинов атомных остатков. При этом гамильтониан электрона имеет вид (11). Существенно, что отвечающие за связь спинов потенциалы U', V' отличны от нуля в малой области порядка атомных размеров, в которой распределены остальные электроны данного атомного остатка. Величина Δ определяется областью координат электрона, значительно превышающей размеры атома. В этой области волновые функции Φ_1, Φ_2 — произведения координатной волновой функции электрона на спиновую функцию электрона и соответствующего атомного остатка. Поэтому $\Delta = a\Delta_{\text{коор}}$, где $\Delta_{\text{коор}}$ связана с зависимостью волновой функции электрона от координат и определяется формулой (10). Коэффициент a зависит от спинового состояния электрона и атомных остатков. Найдём эту величину в случае, когда электрон находится в поле двух ионов кислорода, и используем полученный результат при нахождении сечения резонансной перезарядки O^+ на O . Ион кислорода находится в состоянии $O^{+4}S$, т. е. имеет спин $3/2$. Для электрона, находящегося в поле одного иона, основным состоянием является O^3P . Будем рассматривать нижние энергетические состояния электрона. Это означает, что электрон образует спин 1 с тем из атомных остатков, в поле которого он в основном расположен. Пусть η_+ — спиновая функция электрона, $\zeta_{\alpha}, \chi_{\alpha}$ — спиновая функция атомного остатка с соответствующей величиной проекции спина на выделенное направление, Z_{β}, X_{β} — спиновая функция системы, состоящей из электрона и соответствующего остатка и обладающей проекцией спина β . Так как полный спин электрона и атомного остатка равен единице, эти последние функции имеют вид

$$Z_1 = \frac{1}{2} [\eta_+\zeta_{1/2} - \sqrt{3}\eta_-\zeta_{3/2}], \quad Z_{-1} = \frac{1}{2} [\eta_-\zeta_{1/2} - \sqrt{3}\eta_+\zeta_{-3/2}],$$

$$Z_0 = \frac{1}{\sqrt{2}} [\eta + \zeta_{-1/2} - \eta - \zeta_{1/2}].$$

Подобная же связь имеет место между функциями X_β и χ_α . Каждое спиновое состояние квазимолекулы, соответствующее нахождению электрона около первого атомного остатка, можно описать двумя числами α, β со спиновой функцией этого состояния $Z_{\beta\chi_\alpha}$. При этих значениях α, β имеется единственное состояние электрона, характеризующееся нахождением его около другого атомного остатка, так что спиновая функция этого состояния $\sum_{\gamma} c_{\gamma\zeta_{\gamma}} X_{\alpha+\beta-\gamma}$ не является ортогональной к $Z_{\beta\chi_\alpha}$. Опреде-

лив такие состояния при каждом значении α, β , найдем величину коэффициента $a_{\alpha\beta} = \left\langle Z_{\alpha\chi_\beta} \left| \sum_{\gamma} c_{\gamma\zeta_{\gamma}} X_{\alpha+\beta-\gamma} \right. \right\rangle$. Результаты в случае $\alpha < 0$ приведены в табл. 1.

Таблица 1

Проекция спина иона	Проекция спина атома		
	-1	0	1
$-\frac{3}{2}$	$\frac{3}{4},$ $X_{-1}\zeta_{-3/2}$	$\frac{\sqrt{6}}{4},$ $X_{-1}\zeta_{-1/2}$	$\frac{\sqrt{3}}{4},$ $X_{-1}\zeta_{1/2}$
$-\frac{1}{2}$	$\frac{\sqrt{7}}{4},$ $\frac{1}{\sqrt{7}} \left[X_{-1}\zeta_{-1/2} - \sqrt{6} X_0\zeta_{-3/2} \right]$	$\frac{\sqrt{6}}{4},$ $\frac{1}{\sqrt{3}} \left[\sqrt{2} X_0\zeta_{-1/2} - X_{-1}\zeta_{1/2} \right]$	$\frac{\sqrt{5}}{4},$ $\frac{1}{\sqrt{5}} \left[\sqrt{2} X_0\zeta_{1/2} - \sqrt{3} X_{-1}\zeta_{3/2} \right]$

Определим критерий применимости полученного соотношения (10). Во-первых, необходимо, чтобы при $r \sim R/2$ атомная волновая функция (4) совпадала со своим асимптотическим значением (7)

$$R\gamma_1 \gg \left| \frac{Z_1}{\gamma_1} - l_1 - 1 \right| \left(\frac{Z_1}{\gamma_1} + l_1 \right), \quad R\gamma_2 \gg \left| \frac{Z_2}{\gamma_2} - l_2 - 1 \right| \left(\frac{Z_2}{\gamma_2} + l_2 \right).$$

Кроме того, интеграл (10), вычисленный на основе волновых функций (7), совпадающих с точными вблизи оси, должен сходиться при малых $\xi - 1$, которые соответствуют малым углам θ_1, θ_2 , поскольку при вычислении этого интеграла использовалась малость величины $\xi - 1$. Перечисленные предположения оправдываются при выполнении условий

$$R(\gamma_1 + \gamma_2) \gg m^2, \quad R\gamma_1 \gg \left| \left(\frac{Z_1}{\gamma_1} - 1 \right) (m + 1) - l_1(l_1 + 1) \right|,$$

$$R\gamma_2 \gg \left| \left(\frac{Z_2}{\gamma_2} - 1 \right) (m + 1) - l_2(l_2 + 1) \right|.$$

Использованное при получении волновых функций (7) квазиклассическое приближение корректно, если выполняются соотношения

$$R\gamma \gg \left(\frac{Z_{1,2}}{\gamma_{1,2}} - 1 - \frac{m}{2} \right)^2 - \frac{m^2}{4},$$

где $\gamma = \gamma_{1,2}$.

4. Другие методы вычисления Δ . Наиболее распространенный способ определения асимптотического вида Δ при $R \rightarrow \infty$ связан с применением вариационного метода для нахождения каждого из молекулярных термов E_1 и E_2 отдельно. Этот метод был использован в большинстве конкретных расчетов [7-20] и соответствует при увеличении точности пробных волновых функций теории возмущений при разложении каждой из величин E_1, E_2 по малому параметру $1/R$. Учет экспоненциально малых членов [$\sim \exp(-\gamma R)$] при любом конечном числе варьируемых параметров является превышением точности метода, и так как величина Δ экспоненциально мала при

$R \rightarrow \infty$, вариационный метод не может дать асимптотически точного значения этой величины [24]. Ситуация подобна той, которая имеет место в задаче о надбарьерном отражении в квазиклассическом случае [22] или в адиабатической теории возмущений [23], где второй член теории возмущений того же порядка, что и первый, так что теория возмущений неприменима. Следует отметить, что при средних значениях R вариационный метод должен дать более точный результат, чем формула (10).

Особое место при вычислении величины расщепления термов занимает случай, когда электрон находится в поле двух кулоновских центров. При больших расстояниях между ядрами, когда электрон находится в поле одного центра в возбужденном состоянии, имеет место вырождение собственных состояний атома. Вырождение снимается за счет действия электрического поля второго иона, так что при больших расстояниях R между ядрами состояния электрона следует описывать параболическими квантовыми числами (а не сферическими, как это сделано в работе [9]). Уравнение Шредингера для электрона при любых R разделяется в эллиптических координатах (при $R \rightarrow \infty$ они переходят в параболические). Это значительно упрощает задачу и позволяет при вычислении асимптотического значения Δ наряду с главным членом определить следующие члены разложения. Таким способом можно оценить численный параметр разложения. В случае, например, электрона, находящегося в поле одинаковых кулоновских центров, первые два члена асимптотического разложения Δ имеют вид [36]

$$\Delta \equiv \frac{2\gamma^2}{n} \frac{(2R\gamma)^{2n_2+m+1}}{n_2!(n_2+m)!} e^{-R\gamma-n} \left[1 + \frac{n^2(4n_2+2n_1+3m+1)}{2RZ} \right],$$

где $\gamma = Z/n$; n , n_2 , n_1 , m — параболические квантовые числа. Для атома водорода в основном состоянии это дает

$$\Delta = \frac{4}{e} \text{Re}^{-R} \left(1 + \frac{1}{2R} \right). \quad (13)$$

Поскольку в рассматриваемом случае уравнение Шредингера для электрона разделяется, оно может быть решено численными методами без применения приближенного вариационного метода. Это дает возможность точно найти термы квазимолекулы при любых расстояниях между ядрами. Для иона молекулы водорода такая операция была проделана в работе [24]. Сравнение формулы (13) с результатами этой работы дает возможность еще более точно найти численный критерий применимости этой формулы. Такое сопоставление разности термов четного и нечетного состояний электрона в H_2^+ , полученного в работе [24] и найденного по формуле (13), приведено в табл. 2.

Таблица 2

R		2	3	4	5	6	7	8	9
$\Delta \cdot 10^8$	Точный расчет [24]	435,1	209,5	100,5	47,13	21,18	9,32	3,96	1,65
	$\Delta = 4\text{Re}^{-R-1}$	398	219,5	108	49,8	22,05	9,39	3,95	1,6}

5. Асимптотическое поведение атомной волновой функции. Таким образом, характеристика квазимолекулы Δ выражается через квантовые числа и параметры атомных частиц: заряд атомного остатка Z , энергию связи электрона в атоме $\gamma^2/2$, орбитальный момент электрона в атоме l и его проекцию на соединяющую ядра ось m , коэффициент A . Коэффициент A определяется поведением электрона в атоме; асимптотическое выражение нормированной на единицу радиальной волновой функции имеет вид

$$\varphi_{am}(r) = Ar^{2\gamma-1} e^{-r\gamma}. \quad (14)$$

Наиболее точный способ определения константы A может быть основан на спивании волновой функции, найденной методом Хартри — Фока, и волновой функции (14) на границе атома. Методом Хартри — Фока можно достаточно точно определить потенциал самосогласованного поля атомного остатка, а также одноэлектронную волновую функцию $\varphi_{ат}(r)$ в основной области распределения электрона. Поэтому если разложить эту функцию по системе собственных функций (4) электрона, находящегося в эффективном поле атомного остатка $\varphi = \sum c_k \varphi_k$, то окажется $1 - c_0^2 =$

$$= \sum_{k \neq 0} |c_k|^2 \ll 1. \text{ Однако поскольку вдали от атома волновая функция основного со-}$$

стояния затухает резче, чем волновые функции возбужденных состояний, при больших расстояниях электрона от ядра найденная методом Хартри — Фока волновая функция определяется прически возбужденных состояний и не дает асимптотически правильного значения. Асимптотически точное выражение волновой функции элект-

рона, которое является решением уравнения Шредингера для волновой функции электрона, находящегося в кулоновском поле атомного остатка, определяется формулой (14). Воспользуемся тем, что имеется область расстояний от электрона до ядра, в которой волновая функция Хартри — Фока еще мало отличается от «точной» одноэлектронной функции (4), но эта точная одноэлектронная функция уже совпадает со своим асимптотическим значением (14). Сшивая в этой области волновую функцию, полученную методом Хартри — Фока, с волновой функцией (14), определим таким способом величину A .

Таблица 3

Атом	He	Ne	Ar	Kr	H	Li	Na	K	Rb	Cs	N	O
γ	1,345	1,26	1,075	1,025	1	0,630	0,626	0,567	0,556	0,536	1,07	1
A	2,95	1,95	2,7	2,75	2	0,765	0,75	0,535	0,49	0,416	2,26	1,5
$A_{\text{кул}}$					2	0,81	0,79	0,58	0,54	0,45		

Если электрон в основном распределен в кулоновском поле атомного остатка, то коэффициент A мало отличается от значения, соответствующего водородоподобному атому. В случае последнего при целых Z/γ этот коэффициент равен [1, стр. 150]

$$A_{\text{кул}} = (2\gamma)^{Z/\gamma} \gamma / Z^{1/2} \Gamma^{1/2} \left(\frac{Z}{\gamma} + l + 1 \right) l^{1/2} \left(\frac{Z}{\gamma} - l \right). \quad (15)$$

В табл. 3 приведены значения коэффициента A для атомов инертных газов и щелочных металлов, найденные на основе сшивания функции Хартри — Фока с асимптотическим выражением (14) в работах [25, 26], а также полученные по формуле (15). Эти коэффициенты для атомов кислорода и азота найдены сравнением функции (14) и расчета Хартри — Фока [27] для указанных атомов.

Вероятность перехода между двумя состояниями при столкновении медленных атомных частиц

1. Постановка задачи. Определим вероятность перехода между двумя состояниями при столкновении медленных атомных частиц в двухуровневом приближении*. Ищем волновую функцию электрона в виде

$$\Psi = [c_1(t)\varphi_1 + c_2(t)\varphi_2] \exp \left[-i \int \frac{(H_{11} + H_{22})}{2} dt' \right]. \quad (16)$$

Подставляя это выражение в уравнение Шредингера $i\partial\Psi/\partial t = H\Psi$, умножив это уравнение на φ_1^* , φ_2^* и проинтегрировав по координатам электрона, получим систему уравнений для коэффициентов c_1 , c_2

$$i\dot{c}_1 = \frac{\kappa}{2} c_1 + \frac{\Delta}{2} c_2, \quad i\dot{c}_2 = \frac{\Delta}{2} c_1 - \frac{\kappa}{2} c_2, \quad (17)$$

причем величины κ и Δ даются формулой (1). При получении (17) предполагалось, что функции φ_1 и φ_2 ортогональны и мало изменяются в области расстояний между ядрами, при которых происходит переход. Можно показать, что в рассматриваемом случае, когда переход совершается при больших расстояниях между ядрами, система уравнений (17) справедлива, если скорости столкновения частиц малы

$$v \ll Z/\gamma, \quad (18)$$

где v — относительная скорость столкновения частиц; Z — заряд атомного остатка.

Систему уравнений (17) следует решить с начальным условием $c_1(-\infty) = 1$, $c_2(-\infty) = 0$. Вероятность перехода при этом равна $w = |c_2(\infty)|^2$. Как видно из системы уравнений (17), $|c_1| = \text{const}$ и $|c_2| = \text{const}$ при $\Delta \ll \kappa$, а $|c_1 + c_2| = \text{const}$ и $|c_1 - c_2| = \text{const}$ при $\Delta \gg \kappa$. Заметим, что нарушение этих равенств оказывается малым, если выполнены данные условия. В области расстояний между ядрами δR , где $\Delta \sim \kappa$, происходит переход от одной системы собственных функций гамильтониана к другой. Поэтому в данной области межъядерных расстояний δR происходят неадиабатические переходы между рассматриваемыми состояниями.

* Здесь будет использован метод прицельных параметров, который справедлив, если основной вклад в сечение вносят столкновения с большими моментами $l = \mu\rho v \gg 1$, где μ — приведенная масса ядер, v — их относительная скорость, ρ — прицельный параметр столкновения. Большие сечения переходов для рассматриваемых процессов и не очень малые скорости столкновения полностью оправдывают применимость этого метода.

Используя свойства системы уравнений (17), будем решать ее, считая, что имеется только одна неадиабатическая область δR в окрестности точки R_1 . Рассмотрим случай, когда минимальное расстояние сближения атомных частиц (точка поворота) $R_{пов}$ меньше R_1 . Тогда удобно разбить область t на пять частей [32]

$$\begin{array}{ccccc} \text{I} & \text{II} & \text{III} & \text{IV} & \text{V} \\ R(t) > R_1 & R(t) \sim R_1 & R(t) < R_1 & R(t) \sim R_1 & R(t) > R_1 \end{array} \quad (19)$$

Система уравнений (17) в области II имеет такой же вид, как в области IV, если произвести замену $t \rightarrow -t$. В таком же соответствии находятся области I и V. При решении системы уравнений (17) воспользуемся тем, что в областях I, III, V при малых скоростях столкновения переходы между состояниями, которые являются в данных областях собственными состояниями гамильтониана, адиабатически маловероятны. В областях II и IV решим систему уравнений (17) с данными зависимостями $\Delta(t)$ и $\kappa(t)$ и полученные решения сошьем со значениями коэффициентов в предыдущей и последующей областях. При этом будем считать, что области II и IV достаточно разделены, т. е. $R - R_{пов} > \delta R$.

2. Формула Никитина и ее предельные случаи. Из проведенного анализа следует, что для определения вероятности перехода достаточно определить зависимости $\Delta(t)$ и $\kappa(t)$ в областях II и IV, где совершаются неадиабатические переходы. Поэтому выбор зависимости $\Delta(t)$ и $\kappa(t)$ определяется требованием, чтобы в областях II и IV их значения не сильно отличались от точных и в то же время позволяли относительно просто решить систему уравнений (17). Наиболее общая зависимость $\Delta(t)$ и $\kappa(t)$, при которой система уравнений (17) была решена в аналитическом виде, предложена Е. Е. Никитиным [28]

$$\kappa(t) = \epsilon_0 - B \cos \mu e^{-t/\tau_0}, \quad \Delta(t) = B \sin \mu e^{-t/\tau_0}. \quad (20)$$

Здесь κ и Δ зависят от трех параметров: ϵ_0 , μ , τ_0 . Константа B связана с началом отсчета времени, так что она не войдет в окончательный результат. Зависимость (20) реализуется в области II. Переход в область IV осуществляется заменой $t \rightarrow -t$. Вероятность перехода из состояния 1 в состояние 2, найденная путем решения системы уравнений (17) при наличии зависимости (20) в областях II и IV, дается формулой

$$W = 4 \exp(2\lambda \cos \mu) \operatorname{sh}^{-2} 2\lambda \operatorname{sh} [\lambda(1 - \cos \mu)] \operatorname{sh} [\lambda(1 + \cos \mu)] \sin^2 \zeta, \quad (21)$$

$$\left(\lambda = \frac{\pi \epsilon_0 \tau_0}{2}, \quad \zeta = \frac{1}{2} \int_{\text{III}} \sqrt{\kappa^2 + \Delta^2} dt \right),$$

где ζ — разность фаз собственных волновых функций гамильтониана (16), которая набирается при прохождении системой области III.

Рассмотрим предельные случаи формулы (21).

Формула Ландау — Зинера ($\mu \ll 1$, $\lambda \gg 1$, $B = \epsilon_0$). При таком соотношении между параметрами в области перехода при $t \rightarrow 0$ $\kappa(t) = \frac{\epsilon_0}{\tau_0} t = F v_R t$, $\Delta = \epsilon_0 \mu \approx$

$\approx \text{const}$. Усредняя по сдвигу фазы $\sin^2 \zeta = 1/2$, получим для вероятности перехода формулу Ландау — Зинера [29, 30]

$$W = 2e^{-S}(1 - e^{-S}), \quad S = \lambda \theta^2 = \frac{\pi \Delta^2}{2F v_R}.$$

Формула Розена — Зинера ($\mu = \pi/2$). В этом случае $\kappa(t) = \epsilon_0 = \text{const}$, $\Delta = B \exp(-t/\tau_0)$, и вероятность перехода, согласно формуле (21), равна

$$W = \sin^2 \zeta \operatorname{ch}^{-2} \frac{\pi \epsilon_0 \tau_0}{2}. \quad (22)$$

При этом, как показано в [32],

$$\zeta = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\Delta}{2} dt. \quad (22a)$$

Если усреднить по фазе $\sin^2 \zeta = 1/2$, получим формулу Розена — Зинера [31]

$$W = \frac{1}{2} \operatorname{ch}^{-2} \frac{\pi \epsilon_0 \tau_0}{2}. \quad (22b)$$

Резонансная перезарядка ($\mu = \pi/2$, $\epsilon_0 = 0$). Из формул (22), (22a) при $\epsilon_0 = 0$ получим [33]

$$W = \sin^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\Delta}{2} dt. \quad (23)$$

Адиабатическое приближение ($\lambda \gg 1$). Усреднение по фазе $\sin^2 \zeta = 1/2$ дает

$$W = 2 \exp[-2\lambda(1 - \cos \mu)]. \quad (24)$$

Это выражение совпадает с результатом адиабатической теории возмущений [23, 24], учитывающей в верхней части комплексной плоскости t лишь один нуль разности энергии $\sqrt{\kappa^2 + \Delta^2}$, который расположен ближе других к действительной оси.

3. Вероятность резонансной перезарядки. Рассмотрим процесс резонансной перезарядки более подробно [33] ввиду простоты и важности этого перехода. Резонансная перезарядка представляет собой переход электрона от одного атомного остатка к другому такому же атомному остатку. При этом в силу симметрии гамильтониана система его собственных функций делится на четные g и нечетные u , сохраняющие и меняющие знак при отражении электрона относительно плоскости симметрии. При больших расстояниях между атомами $\psi_{g, u} = 1/\sqrt{2}[\varphi(1) \pm \varphi(2)]$, где $\varphi(1, 2)$ соответствует нахождению электрона около данного атома. Если электрон при $t \rightarrow \infty$ находится около первого атома, то в формуле (12) $c_u(-\infty) = c_g(-\infty) = 1/\sqrt{2}$. Так как в рассматриваемом случае $\kappa = 0$, система (17) решается в общем виде, и волновая функция (16) при использовании вышеуказанных начальных условий имеет вид (с точностью до несущественной фазы)

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{2}} \psi_g \exp\left(+i \int_{-\infty}^t \frac{\Delta}{2} dt'\right) + \frac{1}{\sqrt{2}} \psi_u \exp\left(-i \int_{-\infty}^t \frac{\Delta}{2} dt'\right). \quad (25)$$

Проследим за движением электрона между атомами во времени. Полный ток электрона через плоскость симметрии от первого атома ко второму равен

$$I = \int j ds = \frac{i}{2} \int_s (\Psi \nabla \Psi^* - \Psi^* \nabla \Psi) ds = \frac{\Delta}{2} \sin \int_{-\infty}^t \Delta dt',$$

так как, согласно (9), $\Delta = \int_s [\varphi(1) \nabla \varphi(2) - \varphi(2) \nabla \varphi(1)] ds$. Таким образом, электрон совершает переходы от одного атомного остатка к другому с частотой $\sim \Delta$. Вероятность нахождения электрона в поле второго атомного остатка

$$\frac{dw}{dt} = I, \quad w(-\infty) = 0.$$

Решением этого уравнения является

$$w = \sin^2 \int_{-\infty}^t \frac{\Delta}{2} dt'. \quad (26)$$

При $t \rightarrow \infty$ эта формула переходит в (23).

4. Переходы с участием p -состояния. До сих пор рассматривался случай, когда в переходе участвовало только два состояния. При этом задача сводилась к системе двух линейных дифференциальных уравнений первого порядка (17), решение которых давало возможность определить вероятность перехода. Такая ситуация имеет место, если переход совершается между двумя s -состояниями электронов. Если же одним из состояний является p -состояние, то возникает система типа (17), но из большего числа уравнений, так что проблема усложняется. Однако поскольку недиагональный матричный элемент гамильтониана (10) равен нулю для состояний с разными проекциями момента электрона на выделенное направление, данная система большого числа уравнений имеет относительно простую структуру. При этом в случае малых относительных скоростей и больших прицельных параметров столкновения система многих уравнений разбивается на независимые системы уравнений, содержащие не более двух переменных. Таким образом, получаем задачу той же сложности, что и в случае перехода между двумя s -состояниями. Покажем это на примере перехода между двумя p -состояниями электрона, а также в случае s - и p -состояний.

Если переход происходит между двумя p -состояниями, волновую функцию электронов (16) удобно представить в виде

$$\Psi = \sum_i [b_i Y_{1i}(\theta_1, \Phi) \varphi_1(r_1) + c_i Y_{1i}(\theta_2, \Phi) \varphi_2(r_2)] e^{-\frac{i}{2} \int (H_{11} + H_{22}) dt'}, \quad (27)$$

где r_1, θ_1, Φ и r_2, θ_2, Φ — полярные координаты, началом которых является соответствующее ядро, а полярной осью служит направление прицельного параметра. Угловая волновая функция Y_{lm} описывает состояние электрона с моментом l и проекцией m на полярную ось. Используем ортогональность угловых волновых функций $\langle Y_{li}(\theta, \Phi) | Y_{lk}(\theta, \Phi) \rangle = \delta_{ik}$, а также определение недиагонального матричного элемента гамильтониана $\langle Y_{li}(\theta, \Phi) \phi_1 | H | Y_{lk}(\theta_2, \Phi) \phi_2 \rangle = (\Delta_l / 2) \delta_{ik}$. Подставив волновую функцию (27) в уравнение Шредингера $i\partial\psi/\partial t = H\psi$, умножим его слева на одну из электронных функций, по которым ведется разложение, и проинтегрируем по электронным координатам. Получим систему уравнений для коэффициентов b_i, c_i , которая при выполнении условия (18) разбивается на три независимые системы двух уравнений, имеющих вид

$$\begin{aligned} i\dot{b}_0 &= \frac{\kappa}{2} b_0 + \left(\frac{\Delta_0}{2} \frac{\rho}{R} + \frac{\Delta_1}{2} \frac{vt}{R} \right) c_0, & i\dot{c}_0 &= -\frac{\kappa}{2} c_0 + \left(\frac{\Delta_0}{2} \frac{\rho}{R} + \frac{\Delta_1}{2} \frac{vt}{R} \right) b_0 \\ i\dot{\tilde{b}} &= \frac{\kappa}{2} \tilde{b} + \left(\frac{\Delta_0}{2} \frac{vt}{R} + \frac{\Delta_1}{2} \frac{\rho}{R} \right) \tilde{c}, & i\dot{\tilde{c}} &= -\frac{\kappa}{2} \tilde{c} + \left(\frac{\Delta_0}{2} \frac{vt}{R} + \frac{\Delta_1}{2} \frac{\rho}{R} \right) \tilde{b} \\ i\dot{\bar{b}} &= \frac{\kappa}{2} \bar{b} + \frac{\Delta_1}{2} \bar{c}, & i\dot{\bar{c}} &= -\frac{\kappa}{2} \bar{c} + \frac{\Delta_1}{2} \bar{b} \end{aligned} \quad (28)$$

где $\tilde{b} = (b_1 + b_2) / 2$, $\tilde{c} = (c_1 - c_2) / 2$ и таким же способом определяются коэффициенты \bar{b} , \bar{c} , закон относительного движения атомов считается свободным: $R^2 = \rho^2 + v^2 t^2$, ρ — прицельный параметр столкновения. Величина $\Delta_{0,1}$ соответствует недиагональному матричному элементу гамильтониана, взятому по состояниям с соответствующей проекцией момента электрона на выделенное направление, причем в случае p -состояния, согласно (10), $\Delta_1 = 2\Delta_0 / R(\gamma_1 + \gamma_2)$. При получении системы (28) было использовано условие медленности столкновения атомов, а также предположение о большом прицельном параметре столкновения частиц, что позволяет ограничиться в волновой функции (27) конечным числом состояний. Эти два условия соответствуют медленности вращения оси квантования, что и приводит к расщеплению системы шести уравнений на три независимые системы двух уравнений. Роль медленности вращения оси квантования может быть лучше понята на примере перехода между s - и p -состояниями электрона.

При рассмотрении перехода между s - и p -состояниями электрона представим волновую функцию электрона в виде

$$\begin{aligned} \Psi &= \left[\sqrt{\frac{3}{4\pi}} \phi_1(r_1) (a_1 \cos \theta_1 + a_2 \sin \theta_1 \cos \Phi + a_3 \sin \theta_1 \sin \Phi) + \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{\sqrt{4\pi}} b \phi_2(r_2) \right] \exp \left[-\frac{i}{2} \int (H_{11} + H_{22}) dt' \right]. \end{aligned}$$

Подставив это разложение в уравнение Шредингера, получим систему уравнений для коэффициентов

$$\begin{aligned} i\dot{b} &= -\frac{\kappa}{2} b + \frac{\Delta}{2} a_1, & i\dot{a}_1 &= \frac{\kappa}{2} a_1 + \frac{\Delta}{2} b - i\dot{a}_2, \\ i\dot{a}_2 &= \frac{\kappa}{2} a_2 + i\dot{a}_1, & i\dot{a}_3 &= \frac{\kappa}{2} a_3. \end{aligned} \quad (29)$$

Здесь α — угол между векторами \mathbf{v} и \mathbf{R} . Связь между коэффициентами a_1, a_2 определяется вращением соединяющей ядра оси. Если вращение достаточно медленное, так что величина α в области перехода мала по сравнению с κ , система уравнений расщепляется. Действительно, при меньших расстояниях между ядрами R величина α мала по сравнению с Δ , которая резко зависит от R . Поэтому в области расстояний между ядрами, где происходят переходы между состояниями, из системы уравнений (29) выделяется система уравнений (17), такая же, как и в случае двух s -состояний. Это справедливо, если

$$\alpha_{1R_1} = \frac{v_0}{R_1^2} \ll \kappa, \quad (30)$$

где ρ — прицельный параметр столкновения; v — скорость столкновения; R_1 — область перехода, $\Delta(R_1) = \kappa(R_1)$.

Как видно из системы (29), если

$$\delta\alpha \ll \kappa \quad (30a)$$

($\delta\alpha$ — изменение угла α при прохождении системой области перехода), то в области перехода членом $i\dot{a}$ можно пренебречь. Однако при меньших расстояниях между

ядрами, пока Δ , $\kappa \leq \alpha$, этим членом пренебрегать нельзя. В результате в области расстояний между ядрами, где $\alpha b a < \Delta$, $\kappa < \alpha$ и R меньше R_1 , происходят дополнительные переходы между состояниями. Так, в случае (22) при $\lambda e \sigma_0 / 2 \ll 1$ вероятность перехода электрона из p - в s -состояние, усредненная по проекции момента электрона до столкновения, оказывается равной $1/3 \sin^2 \zeta (1 + \sin^2 \chi)$ вместо $1/3 \sin^2 \zeta$, как это было бы в случае выполнения (30). Здесь χ — угол между векторами v и R , так что при одном значении этого угла расстояние между ядрами равно R_1 , а при другом — Δ , $\kappa \sim \alpha$.

Сечение перезарядки при медленном столкновении частиц

1. Сечение резонансной перезарядки. Для этого случая, согласно (23), имеем соотношение

$$\sigma = \int_0^{\infty} 2\pi\rho d\rho \sin^2 \zeta, \quad \zeta(\rho) = \int_0^{\infty} \Delta(t) dt. \quad (31)$$

Взяв этот интеграл для некоторых типов зависимости $\zeta(\rho)$ [$\zeta \sim (\rho^2 + C)^{-1}$, $(\rho^2 + C)^{-2}$, $e^{-\beta\rho^2}$], О. Б. Фирсов [33] предложил искать сечение в виде $\sigma = \pi R_0^2 / 2$, $\zeta(R_0) = 1/\pi$. Бейтс и Бойд [35] показали, что такой способ определения сечения достаточно точен и для зависимости $\zeta \sim 1/\rho^n$.

Вычислим асимптотическое значение сечения в предположении, что его величина велика по сравнению с квадратом размера атома. Рассмотрим сначала случай [36], когда можно пренебречь упругим рассеянием атомных частиц и воспользоваться законом свободного относительного движения. При больших ρ интеграл $\zeta(\rho)$ быстро сходится вблизи $t = 0$ и равен

$$\zeta(\rho) = \frac{1}{v} \sqrt{\frac{\pi\rho}{2\gamma}} \Delta(\rho), \quad \rho \gg \frac{n + 1/2}{2\gamma}, \quad \text{если } \Delta \sim \rho^n e^{-\gamma\rho}. \quad (31a)$$

Как видно, ζ быстро затухает с увеличением ρ , но при малых v эта величина становится порядка единицы уже при больших значениях прицельного параметра столкновения. Из (31) следует, что в области прицельных параметров, где ζ имеет большую величину, $\sin^2 \zeta$ сильно осциллирует и его значение можно заменить $1/2$. Таким образом, при прицельных параметрах, где $\zeta \leq 1$, его величина совпадает с асимптотическим значением, а там, где такое совпадение не наблюдается, $\sin^2 \zeta$ сильно осциллирует и его можно заменить $1/2$. Поэтому при определении сечения можно воспользоваться асимптотическим выражением $\zeta(\rho)$. Это обстоятельство было использовано в работах [11—19], где проводились конкретные расчеты сечений, но в довольно грубой форме, отчего страдает точность вычислений. Здесь будет найдено асимптотически точное значение сечения [35] на основе определения первых членов разложения сечения по малому параметру $1/\sqrt{\sigma}$.

Как видно из (31a), при малых скоростях столкновения имеется область прицельных параметров столкновения ρ , для которых ζ еще большая величина, но уже совпадает со своим асимптотическим значением ($\rho \gg n/2\gamma$). Выберем точку ρ_0 , лежащую в этой области, так что $\zeta(\rho_0) = \pi k \gg 1$, k — целое число. Разобьем интеграл (27) на две части. Поскольку $\zeta(\rho)$ большая величина при $\rho \leq \rho_0$, $\sin^2 \zeta$ в этой области быстро осциллирует и его можно заменить $1/2$. Получим [35]

$$\int_0^{\rho_0} 2\pi\rho d\rho \sin^2 \zeta = \frac{\pi\rho_0^2}{2} + O\left(\frac{1}{\gamma\rho_0}\right).$$

При $\rho > \rho_0$ введем величину $g(\rho)$: $\zeta(\rho) = g(\rho)e^{-\gamma\rho}$. В области ρ , определяющей величину интеграла $\int_{\rho_0}^{\infty} 2\pi\rho d\rho \sin^2 \zeta$, функция $g(\rho)$ является плавной по сравнению

с $e^{-\gamma\rho}$, так как в этой области ζ совпадает со своим асимптотическим выражением (31a), причем наиболее резкая зависимость содержится в экспоненте. Поэтому при вычислении второго интеграла будем считать величину g постоянной, учитывая, что, как видно из (31a), при малых скоростях столкновения g — большая величина. Вычислим асимптотическое значение второго интеграла при $g \gg 1$ с точностью до членов $\sim \text{const}$. Имеем ($\rho = 1/\gamma \ln g/\zeta$)

$$\int_{\rho_0}^{\infty} 2\pi\rho d\rho \sin^2 \zeta = \frac{\pi}{\gamma^2} \ln g(C + \ln 2\pi k) - \frac{\pi}{2\gamma^2} \ln^2 \pi k + \frac{\pi}{2\gamma^2} (C + \ln 2)^2 - \frac{\pi^3}{24\gamma^2},$$

где $C = 0,577$ — постоянная Эйлера. Полное сечение

$$\sigma = \frac{\pi R_0^2}{2} - \frac{\pi^3}{24\gamma^2} + O\left(\frac{1}{\gamma R_0}\right), \quad (32)$$

где R_0 — прицельный параметр столкновения, для которого

$$\zeta(R_0) = \frac{e^{-C}}{2} = 0,28. \quad (32a)$$

Соотношение (32) получено в предположении наличия свободного относительно движения иона и атома. Описанным выше способом можно определить сечение резонансной перезарядки и в случае, когда на его величину существенно влияет упругое рассеяние сталкивающихся частиц. Воспользовавшись тем, что сечение резонансной перезарядки определяется асимптотическим видом $\zeta(\rho)$, а интеграл $\zeta(\rho)$ при больших ρ быстро сходится вблизи $t = 0$, получим [37]

$$\sigma = \begin{cases} \frac{\pi R_0^2}{2} \left[1 - \frac{u(R_0)}{E} \right], & R_0 \geq R_{\min}^{\text{захв}} = \left[\frac{a(n-2)}{2E} \right]^{1/n} \\ \frac{\sigma_{\text{захв}}}{2} = \frac{\pi n}{2(n-2)} \left[\frac{a(n-2)}{2E} \right]^{2/n}, & R_0 \leq R_{\min}^{\text{захв}}, \end{cases} \quad (33)$$

где R_0 определяется соотношением

$$\zeta(R_0) \equiv \frac{\Delta(R_0)}{v} \left(\frac{\pi R_0}{2\gamma} \right)^{1/2} \left[1 - \frac{R_0 u'(R_0)}{2E} \right]^{-1/2} = 0,28. \quad (33a)$$

Здесь использовано асимптотическое значение потенциала взаимодействия сталкивающихся частиц $u = -a/R^n$; E — энергия частиц в системе центра инерций; $R_{\min}^{\text{захв}}$ — наибольшее значение расстояния минимального сближения частиц, при котором еще возможен захват; $\sigma_{\text{захв}}$ — сечение захвата частиц. Нижняя часть сечения (33) учитывает возможность захвата иона атомом, который происходит при $a > 0$, $n > 2$. Захват иона приводит к сильному сближению частиц, так что вероятность перезарядки при таких столкновениях равна $1/2$. Если при данном потенциале взаимодействия захват невозможен, следует учитывать только верхнюю часть сечения. Заметим, что в точке $R_0 = R_{\min}^{\text{захв}}$ совпадают не только верхняя и нижняя части сечения (33), но и их первые производные.

Формулы (32), (33) описывают резонансную перезарядку s -электрона. Используя формулы (10), (31), выпишем соотношение (29) для перехода s -электрона более подробно. Имеем [5]

$$\zeta(R_0) \equiv \frac{1}{v} \sqrt{\frac{\pi}{2\gamma}} e^{-\frac{Z}{\gamma}} A^2 R_0^{\frac{2Z}{\gamma}} - \frac{1}{2}} e^{-R_0\gamma} = 0,28, \quad (34a)$$

$$\sigma = \frac{\pi R_0^2}{2}.$$

В случае резонансной перезарядки p -электрона сечение имеет вид $\sigma = \frac{1}{3} \sigma_0 + \frac{1}{3} \sigma_1 + \frac{1}{3} \sigma_2$, где σ_0 соответствует перезарядке электрона с нулевой проекцией мо-

мента на направление вектора прицельного параметра, σ_1 отвечает нулевой проекции момента на направление скорости, а σ_2 связано с нулевой проекцией момента электрона на направление, перпендикулярное плоскости движения (траектория движения предполагается прямолинейной). Сечения σ_0 , σ_1 , σ_2 определяются формулой (32), но каждому из них соответствует свое значение $\Delta_1 = \left(\frac{2}{\pi R_0 \gamma} \right)^{1/2} \Delta_0$, $\Delta_2 = \left(\frac{1}{R_0 \gamma} \Delta_0 \right)$.

Воспользовавшись тем, что при $\rho \sim R_0$ величина Δ экспоненциально убывает, с помощью (10), (32) получим следующую формулу для сечения резонансной перезарядки p -электрона:

$$\sigma = \frac{\pi R_0^2}{2} - \frac{\pi}{8\gamma^2} \left[\frac{\pi^2}{3} + \ln^2 \left(\frac{\pi}{2} \right)^{1/2} R_0 \gamma \right], \quad (34b)$$

где R_0 связано со скоростью столкновения v соотношением

$$\left(\frac{\pi}{2} \right)^{-\frac{1}{6}} (R_0 \gamma)^{-1/2} \zeta_0(R_0) \equiv \frac{3A^2}{v\gamma} \left(\frac{\pi}{2} \right)^{1/2} e^{-\frac{Z}{\gamma}} R_0^{\frac{2Z}{\gamma}} - 1} e^{-R_0\gamma} = 0,28 \quad (34b)$$

В случае резонансной перезарядки протона на атоме водорода формула (34) принимает вид

$$R_0^{3/2} e^{-R_0} = 0,15v, \quad \sigma = \frac{\pi R_0^2}{2}. \quad (35)$$

На рис. 1 проведено сравнение сечения, рассчитанного по этой формуле, с экспериментально измеренной величиной [38—40] и результатами расчетов [12] и [41]. На рис. 2 экспериментально найденное сечение резонансной перезарядки иона цезия на его атоме [42—45, 95] сравнивается с полученным по формуле (34).

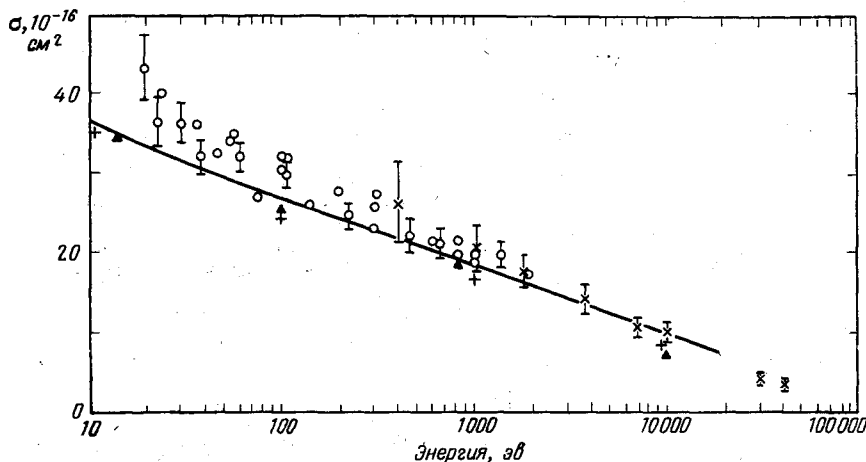


Рис. 1. Резонансная перезарядка протона на атоме водорода. Кривая — формула (35), + — расчет [12], ▲ — расчет [41], × — [38, 39], ○ — [40]

Резонансная перезарядка ионов инертных газов на их атомах представляет собой случай, для которого получена формула (12), когда спины обоих атомных остатков равны $1/2$. Поскольку совершающий переход электрон находится в p -состоянии, связь сечения резонансной перезарядки со скоростью столкновения v в этом случае согласно (10), (12), (34б) дается соотношением

$$\sigma = \frac{\pi R_0^2}{2}, \quad \frac{3}{2\gamma} \left(\frac{\pi}{2}\right)^{1/2} A^2 e^{-\frac{1}{\gamma}} R_0^{\frac{2}{\gamma}-1} e^{-R_0\gamma} = 0,28v. \quad (36)$$

Сравнение полученного на основе этой формулы сечения резонансной перезарядки ионов гелия, неона и аргона на своем атоме с экспериментально найденным значением [42, 46—67] проведено на рис. 3. В табл. 4 даны ссылки на работы, в которых

Таблица 4

Процесс	Литература	Процесс	Литература	Процесс	Литература
K ⁺ + K	[42, 43, 68]	H ⁻ + H	[71]	He ²⁺ + He	[73]
Kr ⁺ + Kr	[42, 56, 53, 63, 60, 69, 75]	K ⁻ + K	[72]	Ne ²⁺ + Ne	[63, 73, 75]
Rb ⁺ + Rb	[43, 95]	Na ⁻ + Na	[72]	Ar ²⁺ + Ar	[63, 73]
Xe ⁺ + Xe	[61, 42, 56, 53, 63]	Rb ⁻ + Rb	[72]	Kr ²⁺ + Kr	[63, 73, 75]
Hg ⁺ + Hg	[70]	Cs ⁻ + Cs	[72]	Xe ²⁺ + Xe	[63, 73]
Li ⁺ + Li	[100]	Zn ⁺ + Zn	[102]	Ne ³⁺ + Ne	[74, 75]
Cd ⁺ + Cd	[101, 102]			Kr ³⁺ + Kr	[74, 75]

были измерены сечения резонансной перезарядки ионов на атомах, не вошедшие в рис. 1—5, 7.

2. Сечение перехода в случае Ландау — Зинера. Случай Ландау — Зинера соответствует такому процессу перезарядки, когда в области перехода разность диагональных матричных элементов линейно зависит от времени и меняет знак, а недиагональный матричный элемент гамильтониана для рассматриваемых состояний почти не изменяется в области перехода. Эта ситуация имеет место при таком столкновении атомных частиц, когда в результате соударения двух ионов образуются два атома или атом и ион, и в обратном случае [76—79]. В то время как в состоянии квази-молекулы, составленной из двух ионов, при больших расстояниях между ядрами R

имеет место сильное кулоновское взаимодействие, в другом состоянии квазимолекулы, которое отвечает атому и иону (атому), имеет место слабое поляризационное взаимодействие. Поэтому при больших расстояниях между ядрами частиц R возможно сильное сближение термов квазимолекулы, соответствующих данным состояниям.

При прохождении во время столкновения атомных частиц области расстояний, соответствующих сближению термов, возможны переходы между рассматриваемыми состояниями. Конкретные расчеты частичной перезарядки многозарядного иона на атоме, выполненные на основе формулы Ландау — Зинера, проведены в работах [7—10], расчеты рекомбинации при столкновении положительного и отрицательного иона проделаны в работах [80, 81].

Разность диагональных матричных элементов гамильтониана равна в рассматриваемом случае $\kappa = \Delta \epsilon_0 - (Z_1 - Z_2) / R$, где $\Delta \epsilon_0$ — разность между энергиями связи электрона в данных состояниях квазимолекулы при $R \rightarrow \infty$; Z_1, Z_2 — заряды атомных остатков, в поле которых находится электрон. Случай Ландау — Зинера реализуется, если в области перехода вблизи R_1 величина Δ не успевает измениться. Это выполняется, если $\delta R \ll 1 / \gamma$, ибо $\Delta \sim e^{-\gamma R}$. Так как $\delta R \sim (v / F)^{1/2}$,

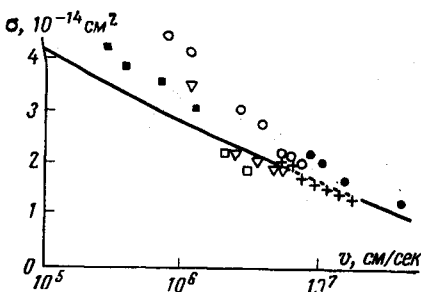


Рис. 2. Резонансная перезарядка Cs^+ на атоме Cs. Кривая — формула (34), \square — [42], \bullet — [43], ∇ — [44], \circ — [45], $+$ — [95]

где $F = dx / dR_{1R_1}$, то это условие дает

$$R_1 \gamma \ll (|Z_1 Z_2| / v)^{1/2}. \quad (37)$$

Это условие существенно ограничивает область применимости формулы Ландау — Зинера [82] *

Если условие (37) выполняется, так что формула Ландау — Зинера (19) для вероятности перехода оказывается справедливой, сечение перехода дается формулой [83]

$$\sigma = 4\pi p R_1^2 I \left(\frac{\pi \Delta^2}{2Fv} \right), \quad I(\eta) = \int_1^\infty \frac{dx}{x^3} e^{-\eta x} (1 - e^{-\eta x}). \quad (38)$$

Здесь p — вероятность образования конечного состояния, определяемая законом сохранения спина и его проекции. Функция $I(\eta)$, которая может быть записана в виде комбинации неполных γ -функций, была вычислена Моисавичем [73] и представлена на рис. 4.

Формула (38) соответствует переходу электрона между двумя s -состояниями. Обобщение ее на случай, когда электрон находится в состоянии с более высоким моментом, проводится тривиально, но, видимо, не имеет практического значения.

3. Сечение перехода в случае Розена — Зинера. Этот случай осуществляется при так называемом случайном резонансе, когда разность энергий связи электрона с каждым из атомных остатков значительно меньше любой из этих величин, и соответствует перезарядке, при которой разность диагональных матричных элементов гамильтониана $\kappa(t)$ не изменяется в области перехода, а недиагональный матричный элемент $\Delta(t)$ экспоненциально зависит от времени. Введем расстояние R_1 , при котором происходят неадиабатические переходы, и R_0 по формуле (32а):

$$\Delta(R_1) = \kappa, \quad \zeta(R_0) = \frac{\Delta(R_0)}{v} \left(\frac{\pi R_0}{\gamma_1 + \gamma_2} \right)^{1/2} = 0,28. \quad (39)$$

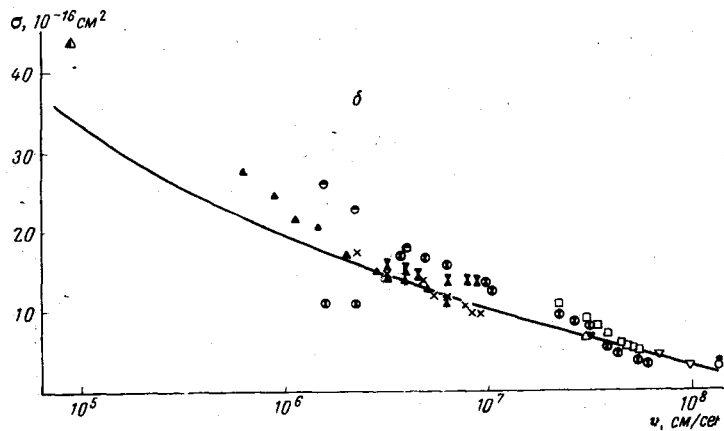
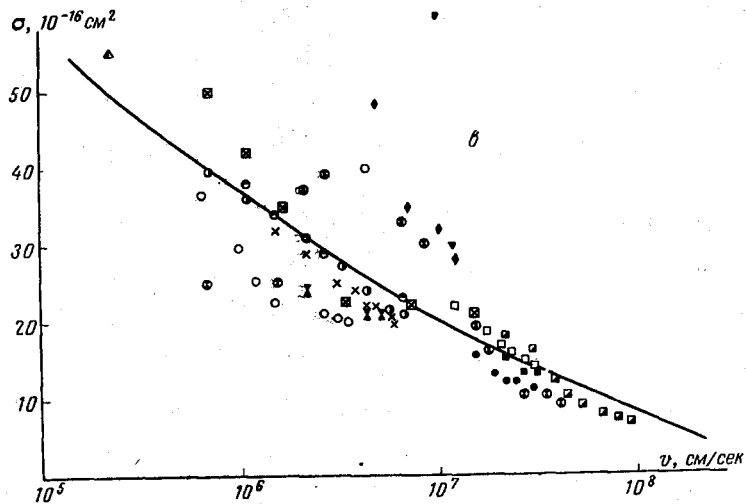
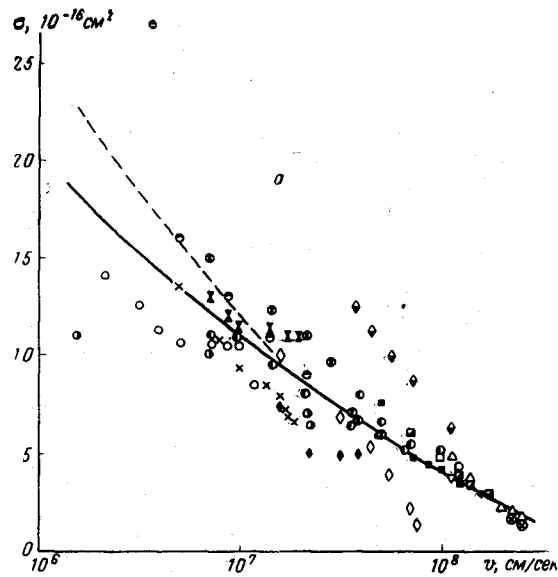
Предполагая, что частицы движутся по прямолинейным траекториям, на основе формулы (22) получим для сечения перезарядки

$$\sigma = \int_0^\infty 2\pi r dr w = \int_0^{R_1} 2\pi r dr \text{ch}^{-2} \frac{\alpha}{x} \sin^2 \zeta,$$

где

$$\alpha = \frac{\pi \kappa}{(\gamma_1 + \gamma_2) v}, \quad x = \sqrt{1 - \frac{\rho^2}{R^2}}.$$

* В [84] рассмотрен случай, когда $\Delta \sim e^{-\gamma R}$, $\kappa \sim Ft$. Критерий применимости полученных результатов к реальному случаю шире: $\delta R \ll R_1$ или $(v / |Z_1 Z_2|)^{1/2} \ll 1$. Однако конечный результат в этом случае не удастся выразить в аналитическом виде.



Объяснения к рисункам 4-6

— расчет по формуле (36)

Результаты экспериментальных работ:

- | | | | |
|--------|--------|--------|----------|
| ◇ [46] | ○ [52] | △ [58] | ▲ [64] |
| ◆ [47] | × [53] | ▽ [59] | ● [65] |
| ◊ [48] | ◻ [54] | ○ [60] | ⊠ [66] |
| ○ [49] | ⊙ [55] | ▲ [61] | ▼ [67] |
| ■ [50] | ⌘ [56] | ▴ [62] | --- [68] |
| ○ [51] | ⊗ [57] | □ [63] | |

Рис. 3. Резонансная перезарядка He^+ на He (а); Ne^+ на Ne (б); Ag^+ на Ag (в)

При вычислении сечения используем соотношение, которое хорошо выполняется в среднем

$$\sin^2 \zeta = \begin{cases} \frac{1}{2}, & \rho < R_0 \\ 0, & \rho > R_0. \end{cases} \quad (40)$$

Анализ показывает, что такая замена приводит к ошибке в интеграле $\sim 1/R_0\gamma$. Заметим, однако, что учет членов $\sim 1/R_0\gamma$ является превышением точности метода,

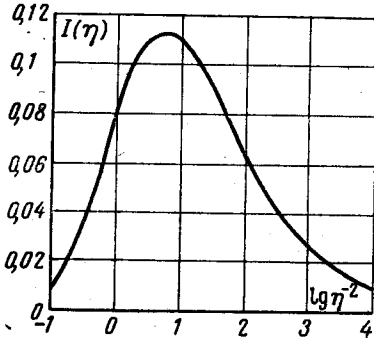


Рис. 4. Функция $I(\eta)$, вычисленная в [73]

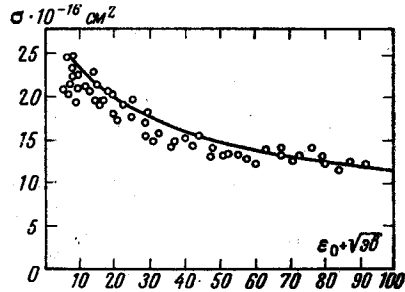


Рис. 5. Резонансная перезарядка иона кислорода на атоме кислорода; кривая — расчет, точки — эксперимент [87, 88]

ибо формула (22) получена в предположении, что точка поворота достаточно удалена от области перехода $R_{\text{пов}} - R_1 > 1/\gamma$, да и положение области перехода R_1 определено с точностью до $1/\gamma$. Используя соотношение (40), получим

$$\sigma = \int_0^{\min(R_1, R_0)} \pi \rho d\rho \operatorname{ch}^{-2} \frac{\alpha}{x} = \begin{cases} \int_0^{R_0} \pi \rho d\rho \operatorname{ch}^{-2} \frac{\alpha}{x}, & R_0(v) < R_1 \\ \int_0^{R_1} \pi \rho d\rho \operatorname{ch}^{-2} \frac{\alpha}{x}, & R_0(v) > R_1 \end{cases}$$

Как видно, в первом случае ($R_0 < R_1$) величина $\alpha < 0,35/\sqrt{\gamma R_0} \ll 1$, так что сечение мало отличается от сечения, определяемого по формуле резонансной перезарядки. Имеем

$$\sigma = \begin{cases} \frac{\pi R_0^2}{2} + \frac{\pi R_1^2}{2} \ln \left[1 - \frac{R_0^2}{R_1^2} + \alpha^2 \right], & R_0 < R_1 \\ \frac{\pi R_1^2}{2} f(\alpha), & R_0 > R_1, \end{cases} \quad (41)$$

где

$$f(\alpha) = \int_0^1 2x dx \operatorname{ch}^{-2} \frac{\alpha}{x}.$$

Асимптотическое поведение $f(\alpha)$ дается формулами $f(\alpha) = 1 + \alpha^2 \ln \alpha^2$, $\alpha \rightarrow 0$ и $f(\alpha) = 4\alpha^{-1} e^{-2\alpha} (1 - 3/2\alpha)$, $\alpha \rightarrow \infty$, а значения функции при промежуточных значениях аргумента следующие:

α	0,2	0,4	0,6	0,8	1,0	1,2	1,4	1,6
$f(\alpha)$	0,859	0,647	0,456	0,358	0,203	0,131	0,084	0,0536

Из формулы (41) следует, что сечение перезарядки имеет плоский и слабо выраженный максимум при скорости $R_0(v) = R_1$. Поскольку величина R_1 определяется с точностью $1/\gamma$, соответствующая максимуму сечения скорость столкновения может

быть найдена лишь с точностью до множителя порядка единицы. При этом, однако, величина самого сечения определяется достаточно надежно.

Полученный результат относится к случаю перехода между двумя s -состояниями электрона. Случай перехода с участием p -состояний мы рассмотрим на конкретных примерах, которые изучались экспериментально, используя при этом результаты п. 4 первого раздела. Теоретическое рассмотрение подобных вопросов, проведенное в работах [85, 86], связано с модельными предположениями и не является корректным.

Конкретные случаи перезарядки

1. Резонансная перезарядка O^+ на его атоме. На рис. 5 полученная расчетным путем зависимость сечения резонансной перезарядки иона кислорода на его атоме от скорости столкновения сравнивается с экспериментально измеренной [85, 86].

Электрон в атоме кислорода находится в p -состоянии, так что сечение определяется по формулам (34а), (34б). Кроме того, следует учесть зависимость Δ от спинового состояния электрона и атомных остатков, которая дана в табл. 1. Усредняя сечение по спиновому состоянию атома и иона, находим, что в рассматриваемом случае величину Δ в формуле (34б) следует заменить на $(\Pi a_i)^{1/2} \Delta = 0,595 \Delta$, причем значения

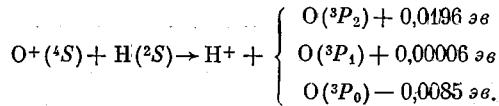
коэффициентов a_i берутся из табл. 1. При малых скоростях столкновения следует учитывать, что перезарядка с переходом между состояниями с разной тонкой структурой носит перезонансный характер. Основное состояние атома кислорода 3P_1 , причем расстояние между уровнями с полным моментом $I = 2$ и 1 , 2 и 0 , 1 и 0 равны соответственно $0,019$, $0,028$ и $0,009$ эв. Сечение перезарядки было найдено по формуле

$$\sigma = \frac{\pi R_0^2}{2} \sum_{i, k} \frac{g_{ik}}{81} f(s_{ik}) \left(\frac{g_{ik}}{81} = \frac{(2I_i + 1)(2I_k + 1)}{81} \right),$$

где $g_{ik}/81$ — вероятность того, что начальному состоянию соответствует момент I_i , конечному — I_k , $s_{ik} = \pi \Delta \varepsilon_{ik} / 2\nu v$, $\Delta \varepsilon_{ik}$ — расстояния между уровнями с соответствующим значением момента. Эта формула справедлива, если вероятности перехода из состояния i во все другие состояния близки, и отличается от формулы (41) тем, что для некоторых переходов величина R_i заменяется на R_0 , что в рассматриваемой области скоростей вполне разумно. При энергии налетающего иона $E_i = 100$ эв величина

$$\sum_{i, k} \frac{g_{ik}}{81} f(s_{ik}) = 0,9.$$

2. Перезарядка O^+ на атоме водорода. Этот процесс может идти по следующим каналам:



Перезарядка иона кислорода на атоме водорода играет существенную роль при изучении процессов, происходящих в верхних слоях атмосферы [90—93]. Атом кислорода в основном состоянии $O(^3P)$ образуется в результате присоединения p -электрона к иону $O^+(^4S)$. Вероятность того, что электрон образует с ионом спин 1, что приводит к образованию атома в основном состоянии, равна $3/8$. При этом p -электрон, присоединяемый к иону $O^+(^4S)$, в атоме $O(^3P)$ может иметь любое из трех значений проекции на выделенное направление. Используя одноэлектронное приближение, которое учитывает спин и момент атомного остатка, получим в данном случае для сечения рассматриваемого процесса в области не очень малых скоростей столкновения

$$\sigma = \frac{3}{8} \sum_i \frac{(2I_i + 1)}{9} \sigma_i.$$

Здесь $3/8$ — вероятность, что реакция пойдет по каналу, в котором полный спин электрона и иона равен 1; $2I_i + 1/9$ — вероятность образования при этом атома в состоянии с данным полным моментом. Сечение образования атома с данным полным моментом I_i определяем по формуле (41). Сравнение вычисленного сечения перезарядки с экспериментально измеренным [40, 89] проведено на рис. 6.

3. Перезарядка протона на атом кислорода. Эта реакция обратная по отношению к предыдущему процессу. Рассмотрим ее в области более высоких скоростей столкновения, в которой проведены эксперименты [87, 88]. Если условие (30) выполняется, сечение перехода при не очень малых скоростях столкновения, согласно (41), равно

$$\sigma = \frac{1}{3} \frac{\pi R_0^2}{2}.$$

Здесь множитель $1/3$ соответствует вероятности того, что в точке перехода проекция момента p -электрона на направление соединяющей ядра оси равна нулю. На рис. 7 найденное по этой формуле сечение перехода сравнивается с измеренным. При больших скоростях столкновения, когда относительная скорость столкновения

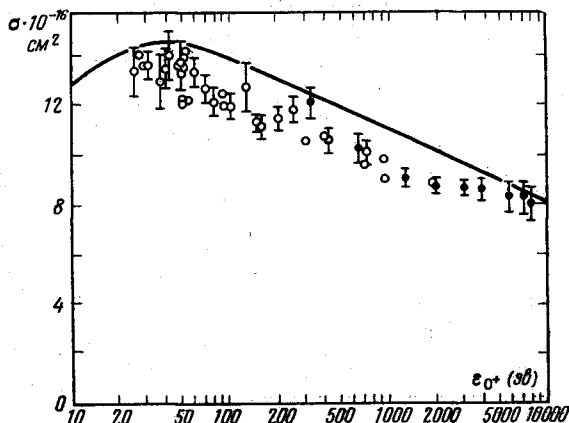


Рис. 6. Перезарядка иона кислорода на атоме водорода; кривая — расчет, эксперимент: \circ — [40], \bullet — [89]

становится порядка характерной скорости электрона на орбите, определенный вклад в сечение вносят переходы электрона в возбужденные состояния атома водорода. Поэтому в этой области скоростей сечение перезарядки должно быть больше результата расчета по данной формуле.

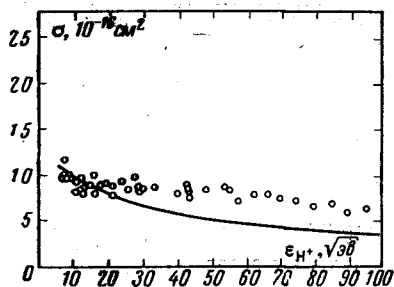


Рис. 7

Рис. 7. Перезарядка протона на атоме кислорода; кривая — расчет, \bullet — эксперимент [87, 88]

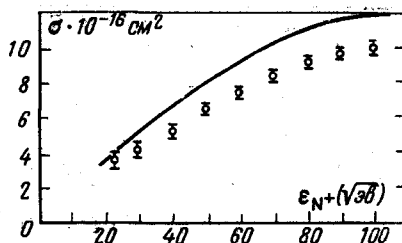
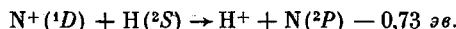
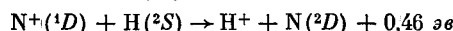
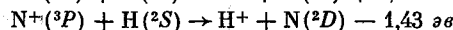
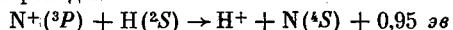


Рис. 8

Рис. 8. Перезарядка иона азота на атоме водорода; кривая — расчет, \circ — эксперимент [89]

4. Перезарядка иона азота на атоме водорода. При столкновении иона азота с атомом водорода в рамках одноэлектронного приближения наиболее существенными являются следующие переходы:



Одноэлектронное приближение предполагает в данном случае, что при присоединении p -электрона к атомному остатку с данными спином и моментом образуется атом с соответствующим рассматриваемому состоянию спином и моментом. Сечение каждого из перечисленных процессов ищем в виде

$$\sigma = k_S k_L \sigma_0,$$

где σ_0 — определяется по формуле (41); k_S — вероятность того, что реакция пойдет по каналу с образованием данного полного спина электрона и иона; k_L — вероятность того, что в области перехода $R \approx R_1$ проекция момента электрона на направление соединяющей ядра оси равна нулю. При этом условии (30) предполагается вы-

полненным. Приводим значения коэффициентов k_S , k_L для перечисленных процессов:

Процесс	1	2	3	4
k_S	$5/8$	$3/8$	1	1
k_L	$1/3$	1	$13/15$	$3/5$

Как видно, существенную роль в рассматриваемом процессе играет перезарядка возбужденных ионов азота. На рис. 8 полученное экспериментально сечение перезарядки [89] сравнивается с рассчитанным. При этом предполагается, что число ионов $N^+(^3P)$ и $N^+(^1D)$ в источнике пропорционально их стат. весу ($9/14$ и $5/14$), а другие возбужденные ионы азота в источнике не образуются.

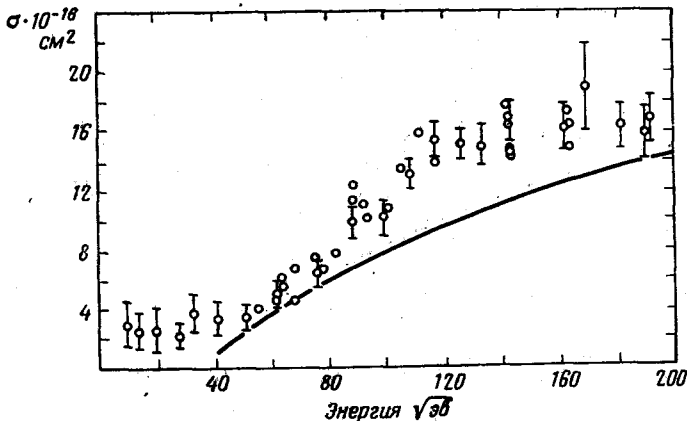
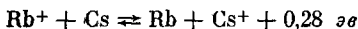


Рис. 9. Перезарядка α -частицы на атоме водорода
Кривая — расчет, \circ — эксперимент [40]

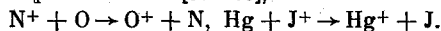
5. Другие случаи. На рис. 9 результаты измерений сечения перезарядки [40] $He^{++} + H \rightarrow He^+ + H$ сравниваются с расчетом по формуле (41). В данном случае для состояния He^+ с $n=2$ и основного состояния атома водорода $\Delta = 4\sqrt{2} e^{-3/2} R^2 e^{-R\delta} \delta_{n_1,0} \delta_{n_2,0}$, где n, n_1, n_2, m — параболические квантовые числа, характеризующие состояние электрона в возбужденном ионе гелия. При вычислении сечения предполагалось, что $\kappa(R)$ и R не изменяются в области перехода, что несколько занижает сечение. Следует отметить, что при малых скоростях столкновения, как предсказывает теория, сечение должно убывать экспоненциально. Это не подтверждается экспериментом. Очевидно, в источнике присутствует определенная доля возбужденных атомов водорода, что существенно отражается на величине сечения.

На рис. 10 экспериментальное сечение перезарядки [94—96]



сравнивается с рассчитанным по формуле (41). Обсуждаемый процесс является наиболее простым из всех рассмотренных, так как электрон в обоих случаях находится в s -состоянии, а спины атомных остатков равны нулю. Кроме того, при $R_1 = 15,8$, когда $\kappa = \Delta$, поляризационное взаимодействие иона с атомом еще мало, и формула Розена — Зинера хорошо подходит для расчета сечения. Расхождение результатов теории и эксперимента при малых скоростях столкновения, а также то, что измеренные сечения прямого и обратного процессов не совпадают, очевидно, связано с присутствием возбужденных атомов.

Другие процессы, которые относятся к перезарядке при малом дефекте резонанса и были исследованы экспериментально [97—99],



Москва

Поступила в редакцию
17 III 1965

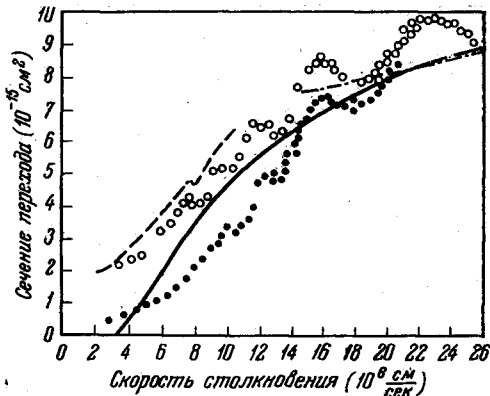


Рис. 10. Перезарядка иона рубидия на атоме цезия и иона цезия на атоме рубидия.
Кривая — расчет, эксперимент: $Rb^+ + Cs \rightarrow Cs^+ + Rb$, — — — [94], \circ — [95], — — — [96]; \bullet — $Cs^+ + Rb \rightarrow Rb^+ + Cs$ [95]

ЛИТЕРАТУРА

1. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, Квантовая механика, Физматгиз, 1963.
2. Г. Бете, Э. Солпитер, Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами. ИЛ, 1960.
3. Г. Бете, Квантовая механика простейших систем. ОНТИ, 1936.
4. С. С. Герштейн, В. Д. Кривченко, Ж. эксперим. и теор. физики, 40, 1491, 1960.
5. Б. М. Смирнов, Ж. эксперим. и теор. физики, 47, 518, 1964.
6. Б. М. Смирнов, О. Б. Фирсов, Ж. эксперимент. и теор. физики, 47, 232, 1964.
7. D. R. Bates, V. L. Moiseiwitsch. Proc. Phys. Soc., A67, 805, 1954.
8. A. Dalgarno. Proc. Phys. Soc., A67, 1010, 1954.
9. T. J. M. Boyd, V. L. Moiseiwitsch. Proc. Phys. Soc., A70, 809, 1957.
10. Г. Н. Огурцов, И. Ш. Флакс, Ж. эксперим. и теор. физики, 42, 721, 1962.
11. Ю. Н. Демков, Зап. ИГУ, 146, 74, 1952.
12. A. Dalgarno, H. N. Yada v. Proc. Phys. Soc., A66, 173, 1953.
13. J. D. Jackson, Canad. J. Phys., 32, 60, 1954.
14. A. Dalgarno, M. R. C. McDowell. Proc. Phys. Soc., A69, 615, 1956.
15. T. J. M. Boyd, A. Dalgarno. Proc. Phys. Soc., A72, 694, 1958.
16. V. L. Moiseiwitsch. Proc. Phys. Soc., A69, 653, 1956.
17. A. F. Ferguson, V. L. Moiseiwitsch. Proc. Phys. Soc., A74, 457, 1959.
18. J. P. Iovitzu, N. I. Pallas. Proc. Phys. Soc., A75, 807, 1960.
19. E. F. Gurnee, I. L. Magee. J. Chem. Phys., 26, 1237, 1957.
20. И. К. Фетисов, О. Б. Фирсов, Ж. эксперим. и теор. физики, 37, 95, 1959.
21. C. Hering. Rev. Mod. Phys., 34, 631, 1962.
22. В. Л. Покровский, И. М. Халатников, Ж. эксперимент. и теор. физики, 40, 1713, 1960.
23. А. М. Дыхне, Ж. эксперим. и теор. физики, 41, 1324, 1961.
24. D. R. Bates, K. Ledsham, A. L. Stewart. Phil. Trans. Roy. Soc., A246, 215, 1953.
25. Б. М. Смирнов, М. И. Чибисов, Ж. техн. физики, 35, 117, 1965.
26. Б. М. Смирнов, М. И. Чибисов, Ж. эксперим. и теор. физики, 48, 939, 1965.
27. Д. Хартри. Расчеты атомных структур. ИЛ, 1958.
28. Е. Е. Никитин, Оптика и спектроскопия, 13, 761, 1962; 18, 763, 1965.
29. L. Landau. Phys. Z. Low., 2, 41, 1932.
30. C. Zener. Proc. Roy. Soc., A137, 696, 1932.
31. N. Rosen, C. Zener. Phys. Rev., 40, 502, 1932.
32. Ю. Н. Демков, Ж. эксперим. и теор. физики, 45, 195, 1963.
33. О. Б. Фирсов, Ж. эксперим. и теор. физики, 21, 1001, 1951.
34. А. М. Дыхне, А. В. Чаплик, Ж. эксперим. и теор. физики, 43, 889, 1962.
35. D. R. Bates, A. U. Boyd. Proc. Phys. Soc., 80, 1301, 1962.
36. Б. М. Смирнов, Ж. эксперим. и теор. физики, 46, 1017, 1964.
37. Б. М. Смирнов, Докл. АН СССР, 157, 325, 1964.
38. W. L. Fite, R. T. Brackmann, W. R. Snow. Phys. Rev., 112, 1161, 1958.
39. W. L. Fite, R. F. Stebbings, D. C. Hummer, R. T. Brackmann. Phys. Rev., 119, 663, 1960.
40. W. L. Fite, A. H. Smith, R. F. Stebbings. Proc. Roy. Soc., A268, 527, 1962.
41. Ю. Е. Мурахвер, Ж. эксперим. и теор. физики, 42, 1241, 1962.
42. Р. М. Кушнир, Б. М. Палюх, Л. А. Сена, Изв. АН СССР, сер. физ., 23, 1007, 1959.
43. Д. В. Чуасели, У. Д. Николашвили, А. И. Гулдамишвили, Ж. эксперим. и теор. физики, 30, 817, 1960; Изв. АН СССР, сер. физ., 24, 970, 1960.
44. Р. М. Кушнир, И. М. Бучма, Изв. АН СССР, сер. физ., 24, 986, 1960.
45. L. L. Marino, A. C. H. Smith, E. Caplinger, Phys. Rev., 128, 2243, 1962.
46. R. A. Smith. Proc. Cambr. Phil. Soc., 30, 514, 1934.
47. J. P. Keene. Phil. Mag., 40, 369, 1949.
48. H. W. Berry. Phys. Rev., 74, 843, 1948.
49. J. V. Hasted. Proc. Roy. Soc., A205, 421, 1951.
50. Н. В. Федоренко. Ж. техн. физики, 24, 2113, 1954.
51. Potter. J. Chem. Phys., 22, 974, 1954.
52. J. V. Hasted, J. V. H. Stedeford. Proc. Roy. Soc., 227, 466, 1955.
53. J. A. Dillon, W. F. Sheridan, H. D. Edwards, S. N. Grosh. J. Chem. Phys., 23, 776, 1955.
54. Н. В. Федоренко, В. В. Афросимов, Д. М. Каминкер, Ж. техн. физики, 26, 1929, 1956.
55. H. V. Galbody, J. V. Hasted. Proc. Roy. Soc., 238, 314, 1957.
56. S. N. Grosh, W. F. Sheridan. Ind. J. Phys., 31, 337, 1957.
57. S. K. Allison. Phys. Rev., 110, 670, 1953.
58. C. F. Barnett, P. M. Stier. Phys. Rev., 109, 385, 1958.
59. P. M. Jones, F. R. Ziemba, F. P. Moses, E. Everhart. Phys. Rev., 113, 182, 1959.
60. E. Gustafsson, E. Lindholm. Arkiv. Fys., 18, 219, 1960.

61. B. Ziegler, *Z. Phys.*, **136**, 108, 1953.
62. F. J. De Heer, W. Huisenga, J. Kistemaker. *Physica.*, **23**, 187, 1957.
63. И. П. Флакс, Е. С. Соловьев, *Ж. техн. физики*, **28**, 599, 1958.
64. W. H. Gramer. *J. Chem. Phys.*, **28**, 688, 1958.
65. J. M. Slueters, E. De Haas, J. Kistemaker. *Physica*, **25**, 1356, 1959.
66. F. M. Devienne, J. Souget, R. Clavier. *Compt. Rend.*, **256**, 2331, 1963.
67. W. H. Gramer, J. H. Simons, *J. Chem. Phys.*, **26**, 4272, 1957.
68. А. М. Бухтеев, Ю. Ф. Быдин, *Ж. техн. физики*, **29**, 12, 1959.
69. Н. В. Федоренко, И. П. Флакс, Л. П. Филиппенко, *Ж. эксперим. и теор. физики*, **38**, 719, 1960.
70. В. М. Палюх, Л. А. Сена. *Ж. эксперим. и теор. физики*, **20**, 481, 1950.
71. D. G. Hummer, R. F. Stebbings, W. L. Fite, L. M. Branscomb, *Phys. Rev.*, **119**, 668, 1960.
72. Ю. Ф. Быдин, *Ж. эксперим. и теор. физики*, **46**, 1612, 1964.
73. M. Islam, J. B. Hasted, H. B. Gilbody, I. V. Ireland. *Proc. Phys. Soc.* **79**, 1118, 1962.
74. И. П. Флакс, Л. Г. Филиппенко, *Ж. техн. физики*, **29**, 1100, 1959.
75. И. П. Флакс, Г. Н. Огурцов, Н. В. Федоренко, *Ж. эксперим. и теор. физики*, **41**, 1094, 1961.
76. D. R. Bates, H. S. W. Massey. *Phil. Trans. Roy. Soc.*, **A239**, 269, 1948.
77. D. R. Bates, H. S. W. Massey. *Phil. Mag.* **45**, 111, 1954.
78. D. R. Bates, A. Dalgarno. *The airglow and auroral*. Pergamon Press, 1956.
79. Г. Мессе, Е. Бархон. *Электронные и ионные столкновения*. ИЛ, 1958.
80. D. R. Bates, J. T. Lewis. *Proc. Phys. Soc.*, **A68**, 173, 1955.
81. Б. М. Смирнов, *Докл. АН СССР*, **161**, 92, 1965.
82. D. R. Bates, *Proc. Roy. Soc.*, **A257**, 22, 1960.
83. V. L. Moiseiwitsch. *Meteors Spec. Suppl. to J. Atmos. — and Terr. Phys.*, **2**, 23, 1955.
84. В. К. Быховский, Е. Е. Никитин, *Ж. эксперим. и теор. физики*, **48**, 1499, 1965.
85. D. Rapp, I. Ortenburger. *J. Chem. Phys.* **33**, 1230, 1960.
86. D. Rapp, W. E. Francis. *J. Chem. Phys.* **37**, 261, 1962.
87. R. F. Stebbings, A. C. H. Smith, H. Ehrhardt, *J. Geophys. Res.*, **69**, 2349, 1964.
88. R. F. Stebbings, A. C. H. Smith, H. Ehrhardt. *Atomic collis proces. Proc. III Conference Amsterdam*, 1964.
89. R. F. Stebbings, W. L. Fite, D. G. Hummer. *J. Chem. Phys.* **33**, 1226, 1960.
90. A. Dalgarno, *Ann. geophys.* **17**, 16, 1961; *Успехи физ. наук*, **79**, 115, 1963.
91. J. W. Dungey. *Physics of the Ionosphere*. London, 1955.
92. W. B. Hansen, J. B. Ortenburger. *J. Geophys. Res.*, **66**, 1425, 1961.
93. D. Rapp, *J. Geophys. Res.*, **68**, 1773, 1963.
94. L. L. Marino. *Atomic Collis. Processes. Proc. III Conference, Amsterdam*, 1964.
95. J. Perel, R. H. Vernon, H. L. Daley. *Phys. Rev.*, **138**, 937, 1965.
96. D. Chkuaceli, A. I. Gouldamachvili, U. D. Nicoleychvili. *6 Intern. Conference on the Ion. Phenom. in Gases. Paris*, 1963, 475.
97. R. F. Stebbing, A. C. H. Smith, H. B. Gilbody. *J. Chem. Phys.*, **38**, 2280, 1963.
98. H. Edmonds, J. B. Hasted. *Proc. Phys. Soc.* **84**, 991, 1964.
99. H. Edmonds, J. B. Hasted. *Atomic Collis Processes. Proc. III Conference. Amsterdam*, 1964.
100. D. C. Lorents, G. Black. *Phys. Rev.*, **137A**, 1049, 1965.
101. Р. М. Кушнир, Г. М. Колоснюк, А. В. Милянчук, Б. М. Палюх, *Вестн. Львовск. ун-та, Сер. физ.*, Львов, 1964, 81, 82.
102. Р. М. Кушнир, Б. М. Палюх, Л. С. Савчин. *Ж. техн. физики*, **35**, 2212, 1965.