

О МЕХАНИЗМЕ ВОЗБУЖДЕНИЯ В СИСТЕМЕ $\text{Na}^+ + \text{Ne}$

Е.Е.Никитин, М.Я.Овчинникова, А.И.Шушин

Проведены вычисления поляризации и интенсивностей компонент спектральных линий $\text{Na}(3p)$, $\text{Ne}(2p^5 3p)$ и обсуждаются возможные механизмы возбуждения их при столкновениях $\text{Na}^+ + \text{Ne}$ при больших энергиях. Объяснен эффект максимальной поляризации линий $J = 1 \rightarrow J' = 0$.

Изучение интерференционной структуры сечений возбуждения [1 — 4] наряду с поляризацией излучения [5 — 7], возникающего при столкновениях в системе $\text{Na}^+ + \text{Ne}$, позволяет, в принципе, выяснять механизмы тех или иных процессов возбуждения.

В настоящей работе делается попытка провести корреляцию между наблюдаемой поляризацией и интенсивностью различных компонент спектральных линий $\text{Na}(3p)$ и $\text{Ne}(2p^5 3p)$ и механизмом возбуждения этих состояний при больших энергиях столкновения ($E \gtrsim 10 \text{ кэВ}$).

Поведение термов, коррелирующих с рассматриваемыми однократно возбужденными состояниями, определяется потенциалом взаимодействия ионных остовов $\text{Na}^+ + \text{Ne}^+$, расщепляемым при малых расстояниях на Σ и Π термы, к которому следует добавить энергию МО (молекулярной орбиты) внешнего электрона. Именно расщепление $\Delta U \sim 2 - 4 \text{ эВ}$ между МО уровнями внешнего электрона при расстояниях $1,5 \text{ ат.ед.} < R < 20 \text{ ат.ед.}$ ответственно за интерференционную структуру сечений [3 — 5]. Будем предполагать, что первоначально при $R_0 \approx 1,5 \text{ ат.ед.}$ система возбуждается на нижний Σ -терм (Na^+, Ne^+) ионных остовов, в то время как внешний электрон может занимать либо две σ -МО (σ -случай), либо две π -МО (π -лучай).

В пределе больших энергий ($E \sim 10^4 \text{ эВ}$) вычисление функций возбуждения проводится в следующем приближении: 1) траектории движения ядер считаются прямолинейными; 2) предполагается, что возникает состояние со спином $S = 0$ (спин начального состояния) и спинорбитальное взаимодействие Ne^+ ($\sim 520 \text{ см}^{-1}$) не успевает создать заметную долю триплетных состояний; 3) для расчета вероятностей атомных состояний пользуемся "внезапной аппроксимацией", т.е. проектированием при переходе от МО к атомным состояниям. Соответствующий параметр Мессии равен 0,13 при $E = 10^4 \text{ эВ}$ и среднем дефекте резонан-

са атомных уровней порядка 1500 см^{-1} ; 4) считаем, что ориентация Σ -состояния остова (Ne^+) остается неподвижной в пространстве при состояниях, больших $R_1 \approx 4 \text{ ат.ед.}$, начиная с которых Σ -и Π -термы Na^+Ne^+ вырождены. Это означает, что в момент перехода молекулярных состояний в атомные ($R \sim 20 \text{ ат. ед.}$) волновая функция остова имеет вид $\Psi_{\text{ост.}} = \cos \Theta \Sigma + \sin \Theta (\Pi_{+1} - \Pi_{-1}) / \sqrt{2}$, где для $\sin \Theta = R_0 / R_1$ в расчетах принималось оценочное значение $\sin \Theta = 0,25$.

При построении МО внешнего электрона, допустимых при исходном Σ состояниях остовов, учитывалось сохранение полной симметрии состояния относительно отражения в плоскости столкновения. Например, для π -механизма возможной МО является орбита $\pi_x = (\pi_{+1} - \pi_{-1}) / \sqrt{2}$.

При детектировании света в направлении, нормальном к пучку, как в [5 - 7], интенсивности компонент с поляризацией, параллельной и перпендикулярной оси пучка (z), для перехода $\gamma J \rightarrow \gamma' J'$ равны:

$$I_{\parallel}(\gamma J \rightarrow \gamma' J') = k \lambda^3 \langle D_x \rangle^2 ; \quad I_{\perp}(\gamma J \rightarrow \gamma' J') = k \lambda^3 (\langle D_x \rangle^2 + \langle D_y \rangle^2) / 2,$$

где $\langle D_i \rangle^2 = \sum_{M'} | \langle \psi^0(\gamma, J) | \hat{D}_i | \psi(\gamma', J', M') \rangle |^2$.

Здесь $\psi^0(\gamma, J)$ - вклад состояния γJ в исходной МО-функции. I_{\parallel} и I_{\perp} выражаются [8] через силы соответствующих атомных линий [9], $3j$ -символы и веса $\kappa(\gamma, J)$ -структуры $L = J, S = 0$ в атомных состояниях γJ . Величины $\kappa(\gamma, J)$, влияющие на суммарную интенсивность, но не на степень поляризации, были вычислены с помощью гамильтониана, типа предложенного в [10], хорошо описывающего как уровни мультиплета $\text{Ne}(2p^5 3p)$, так и силы линий $3p-3s$ -перехода.

В указанном приближении проведен расчет относительных интенсивностей $I = I_{\parallel} + I_{\perp}$ и степеней поляризации $\Pi = (I_{\parallel} - I_{\perp}) / (I_{\parallel} + I_{\perp})$ компонент $3p-3s$ переходов для Na и для уровней p_1, p_2, p_4, p_5, p_6 Ne с заметной долей синглетной конфигурации. Расчет показывает, что для переходов $\gamma J \rightarrow \gamma' J'$ неона из состояний с $J = 1$ $\Pi(J \rightarrow J')$ не зависит от механизма и для $J' = 0, 1, 2$ имеем соответственно $\Pi = -1, \Pi = 0,33, \Pi = -0,077$. В полном соответствии с экспериментом [5 - 7] максимальной перпендикулярной поляризацией обладают линии $J = 1 \rightarrow J' = 0$. Этот факт, также как независимость Π от механизма процесса для всех переходов из состояния $J = 1$ можно понять уже из соображений сохранения симметрии при отражении в плоскости столкновения. Действительно, при таком отражении волновая функция $\psi(\gamma, J, M)$ Ne переходит в $(-1)^{J-M} \psi(\gamma, J, -M)$. Так что для $J = 1$ разрешенным оказывается лишь состояние $[\psi(\gamma, 1, 1) + \psi(\gamma, 1, -1)] / \sqrt{2}$, в то время как состояние с $M = 0$, ответственное за параллельную компоненту перехода $J = 1 \rightarrow J' = 0$, оказывается запрещенным. Однако, для линий $J = 3/2 \rightarrow J' = 1/2$ натрия и $J = 2 \rightarrow J' = 1, 2$ неона величины Π чувствительны к механизму (σ или π) и равны соответственно

$$\begin{aligned} \Pi^{\sigma}(3/2 \rightarrow 1/2) &= 0,33, \quad \Pi^{\sigma}(2 \rightarrow 1) = 0,54, \quad \Pi^{\sigma}(2 \rightarrow 2) = -0,92, \\ \Pi^{\pi}(3/2 \rightarrow 1/2) &= -0,43, \quad \Pi^{\pi}(2 \rightarrow 1) = 0,29, \quad \Pi^{\pi}(2 \rightarrow 2) = -0,35. \end{aligned}$$

Степень поляризации $\Pi_{\text{СТ}}$, вычисленная в предположении равновероятного заселения всех атомных состояний с данным J , четных относительно отражения в плоскости столкновения, для переходов из $J = 2$ Ne оказывается равной $\Pi_{\text{СТ}}(2 \rightarrow 1) = 0,12$, $\Pi_{\text{СТ}}(2 \rightarrow 2) = -0,13$. Два механизма возбуждения существенно различаются и распределением интенсивностей внутри мультиплета Ne ($3p$), Na ($3p$). Для σ -механизма максимальной интенсивностью обладают линии $\lambda = 5852 \text{ \AA}$ с уровня p_1 ($J = 0$) и очень малой интенсивностью линий с уровнями p_2 , p_5 с $J = 1$. В то же время для π -механизма имеет место обратное соотношение в заселении этих состояний. При $\sin \Theta = 0,25$ распределение интенсивностей характерных линий $\lambda_1 = 5852 \text{ \AA}(p_1)$, $\lambda_2 = 6163 \text{ \AA}(p_2)$, $\lambda_3 = 6717 \text{ \AA}(p_5)$, $\lambda_4 = 6096 \text{ \AA}(p_4)$, $\lambda_5 = 6143 \text{ \AA}(p_6)$, $\lambda_6 = 5890 \text{ \AA}(\text{Na}, J = 3/2)$, $\lambda_7 = 5896 \text{ \AA}(\text{Na}, J = 1/2)$ имеет вид $I_1 : I_2 : I_3 : I_4 : I_5 : I_6 : I_7 = 1,87 : 0,011 : 0,044 : 0,34 : 0,65 : 1,73 : 0,58$ для σ механизма и $I_1 : I_2 : I_3 : I_4 : I_5 : I_6 : I_7 = 0,125 : 0,16 : 0,66 : 0,24 : 0,445 : 1,01 : 0,58$ для π -механизма соответственно.

| Уровень | p_1 | p_2 | p_3 | p_4 | p_5 | p_6 | p_7 | p_8 | p_9 | p_{10} |
|-------------------------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|----------|
| \tilde{I}_σ | 115 | 3,3 | 0 | 50 | 4 | 77 | 1,4 | 33 | 0 | 0 |
| \tilde{I}_π | 9,7 | 65 | 0 | 51 | 84 | 77 | 30 | 33 | 0 | 0 |
| $I_{\text{эксп}}^{[7]}$ | 13 | 46 | 4 | 53 | 41 | 77 | 27 | 44 | 25 | 14 |

В таблице дано сравнение рассчитанных (σ - и π -механизмов) и экспериментальных [7] относительных сумм интенсивностей $\tilde{I}(\gamma, J) = \sum_{\gamma' J'} (I_{\parallel} + 2I_{\perp})$ для всех линий, приводящих к обеднению состояния γJ (числа нормированы на одинаковую с [7] суммарную интенсивность излучения с уровня p_6). Хотя наше приближение не описывает возбуждения триплетных состояний p_3 , p_9 , p_{10} , тем не менее сравнение указывает на одновременный вклад как σ -, так и π -каналов возбуждения. Однако, за осцилляционную структуру можно считать ответственной интерференцию π -состояний.

Представляет интерес проведение дальнейших расчетов для меньших энергий и для всех изученных в [7] ион-атомных пар.

Авторы благодарны С.Б.Бобашеву за интерес к работе.

Институт химической физики
Академии наук СССР

Поступила в редакцию
4 мая 1975 г.

Литература

- [1] С.В.Бобашев. Письма в ЖЭТФ, 11, 389, 1970.
- [2] З.З.Латыпов, А.А.Шапоренко. Письма в ЖЭТФ, 12, 177, 1970.
- [3] В.А. Анкудинов, С.В.Бобашев, В.И.Перель. ЖЭТФ, 60, 906, 1971.
- [4] N.H.Tolk, C.W.White, S.H.Dworetzky, D.L.Simmes. Abstracts VII ICPEAC, Amsterdam, 1971, p.584.

- [5] N.H.Tolk, C.W.White, S.H.Neff, W. Lihten . Phys.Rev. Lett.,31, 671, 1973.
- [6] T.Andersen, A.K.Nielsen, K.J.Olsen. Phys. Rev. Lett., 31,139, 1973.
- [7] T.Andersen, A.K.Nielsen, K.J.Olsen. Phys. Rev., 10A, 2174, 1974.
- [8] И.И.Собельман. Введение в теорию атомных спектров, М., ГИФМЛ, 1963.
- [9] S.Inatsugu, J.R.Holmes. Phys. Rev., 11A, 26, 1975.
- [10] S.Feneuille, M.Klapisch, E.Koenig,S.Liberman. Physica, 48, 571, 1970
-