

О ВОЗМОЖНОСТИ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОГО ОПРЕДЕЛЕНИЯ ЧАСТОТ АВТОИОНИЗАЦИОННОГО РАСПАДА ВОЗБУЖДЕННЫХ МОЛЕКУЛЯРНЫХ СОСТОЯНИЙ

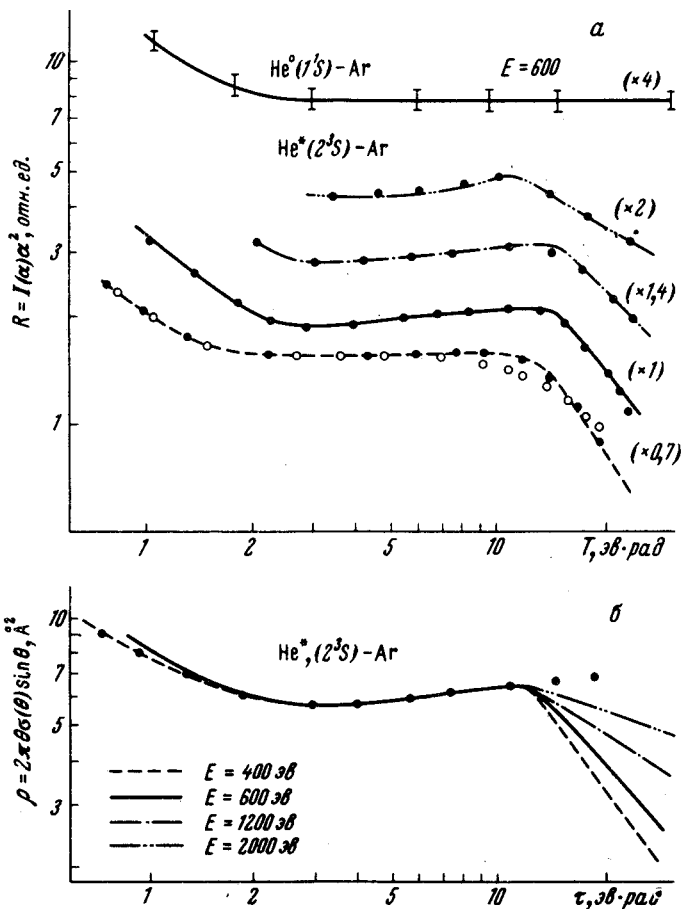
А.П.Калинин, В.Б.Леонас

На примере изучения столкновений с тесным сближением атомов метастабильного $He^* (2^3S)$ и $Ar (1S)$ показана возможность по экспериментальным данным о дифференциальном рассеянии определять потенциал взаимодействия и ширину автоионизационного уровня системы.

Частота распада (или ширина уровня) является важнейшей характеристикой квазистационарных состояний, неэмпирические вычисления которой крайне затруднены. Столкновения с ионизацией Пеннинга (ИП) создают удобный объект для детального изучения одного из видов распада – автоионизационного. Практически все выполненные в последние годы исследования ИП [1] ограничены диапазоном тепловых скорос-

тей и информация о потенциалах взаимодействия и ширине уровня получена для расстояний, превышающих характерные молекулярные размеры.

В настоящей работе делается попытка преодолеть это ограничение путем изучения дифференциального рассеяния (ДР) быстрых пучков метастабильных атомов $\text{He}^*(2^3S)$ в аргоне в диапазоне углов, отвечающих малым расстояниям сближения. Идея эксперимента основана на измерении ДР при разных относительных скоростях (энергии пучка $E = 400, 600, 1200, 2000$ эв); это позволяет в силу неизменности термов возбужденного и ионного состояний квазимолекулы связывать изменения наблюдаемой картины рассеяния с вариацией значений вероятности переходов.



Использовалась установка, аналогичная описанной в [2]. Пучок He^* получался путем перезарядки ионов He^+ в парах Na. Регистрация пучков осуществлялась каналным умножителем; для исследованных энергий пучка эффективность дискретного счета была одинаковой как для атомов He в основном, так и метастабильном состоянии. Измеряемой в эксперименте величиной является $I(\alpha)$ — полный ток упруго и неупруго рассеянных частиц, собираемый детектором в данном угловом поло-

жении и связанный с дифференциальным сечением рассеяния ($\sigma_{\Pi}(\theta) = \sigma_{\text{упр}}(\theta) + \sigma_{\text{ну}}(\theta)$) в лабораторной системе координат простым соотношением типа свертки:

$$I(\alpha) = A \int \sigma_{\Pi}(\theta) f_{\alpha}(\theta) \sin \theta d\theta \quad (1)$$

A — известная из условий эксперимента константа, $f_{\alpha}(\theta)$ — аппаратная функция [2]. Выражение (1) может быть использовано для процедуры обращения, т. е. нахождения сечения $\sigma_{\Pi}(\theta)$, описывающего измеренный ток $I(\alpha)$.

На рис. а линиями в приведенных координатах $R = I(\alpha)\alpha^2$, $T = \alpha E$ представлены результаты измерений для различных энергий пучка He^* (показана также зависимость $I(\alpha)$ для рассеяния атомов в основном состоянии; вертикальные штрихи дают типичный разброс отдельных измерений). На рис. б линиями в приведенных координатах $\rho = 2\pi\sigma(\theta)\theta \sin \theta$ и $\tau = \theta E$ показаны восстановленные по измеренным токам сечения $\sigma_{\Pi}(\theta)$. Как видно из рисунков для столкновений метастабильных атомов характерна картина рассеяния, отличная от таковой для $\text{He}(^1S)$, с резким спадом кривых $R(T)$, $\rho(\tau)$ в области приведенных углов T , $\tau > 12$ эв·рад. Отчетливо видна также зависимость крутизны спада от энергии. Указанные особенности являются потенциальным источником информации о частоте распада ν , описываемой шириной уровня $\Gamma(r)(\nu = \Gamma(r)/\hbar)$. Качественное и количественное истолкование этих, обусловленных ИП, особенностей, легко дать на основе трактовки столкновений атомов He^* и Ar в терминах рассеяния с вертикальными переходами между термами возбужденного $V^*(r)$ и конечного ионного $V^+(r)$ состояний квазимолекулы. При движении по траектории такой вертикальный переход "переключает" взаимодействие по потенциалу V^* на взаимодействие по V^+ .

Из рис. б видно, что вплоть до $\tau \sim 12$ эв·рад приведенные сечения $\rho(\tau)$ для разных энергий ложатся на единую кривую. Это означает, что участок $\tau < 12$ эв·рад. отвечает невозмущенному переходами чисто упругому рассеянию $\sigma_{\Pi}(\theta) = \sigma_{\text{упр}}(\theta)$ и может быть использован для определения V^* по $\sigma_{\text{упр}}(\theta)$. Наилучший подгон вычисленных с пробными V^* значений $\sigma_{\text{упр}}(\theta)$ (точки рис. б) достигается для потенциала, описываемого полиномом $V^* = \sum_{n=0}^5 a_n r^n$ (где r в Å, а V^* в эв). Значения коэффициентов в интервале $r = 1,2 + 2,65$ Å равны $a_0 = -6,398$, $a_1 = 114,50$, $a_2 = 2633,95$, $a_3 = 1449,02$, $a_4 = -1361,18$, $a_5 = 464,15$, для $r > 2,65$ Å $a_0 = a_1 = a_2 = a_3 = a_4 = 0$, $a_5 = 44,84$. Этот потенциал в области $r \sim 3,4$ Å дает значения, согласующиеся с найденными в экспериментах с тепловыми пучками [1].

Свертку (1) в классическом приближении ($\sigma(\theta) = (b/\sin \theta) db/d\theta$) можно записать в следующем удобном для вычислений виде:

$$I(\alpha) = A \left\{ \iint b f_{\alpha}(\theta_{\text{ВХ}}) P_{\text{ВХ}} db dr + \iint b f_{\alpha}(\theta_{\text{ВЫХ}}) P_{\text{ВЫХ}} db dr + \int b P_{\text{упр}} f_{\alpha}(\theta_{\text{упр}}) db \right\}.$$

(2)

Здесь $P_{\text{вх}}(r, b)$, $P_{\text{вых}}(r, b)$ – плотности вероятности перехода в точке r на входном и выходном участках траектории; $P_{\text{упр}}(b)$ – вероятность возбуждения возбужденного состояния и соответственно упругого рассеяния; $\theta_{\text{вх}}(r, b)$, $\theta_{\text{вых}}(r, b)$ – функции отклонения, определяемые взаимодействием по составным потенциалам с переключением $V^* \rightarrow V^*$ в точке r ; $\theta_{\text{упр}}(b)$ – угол упругого рассеяния для V^* . Функции отклонения вычислялись по процедуре, предложенной в [3]. Вероятности $P_{\text{вх}}(r, b)$, $P_{\text{вых}}(r, b)$, $P_{\text{упр}}(b)$ известным образом связаны с $\Gamma(r)$ [4]. При пренебрежении $2\Sigma - 2\Pi$ расщеплением системы HeAr^+ в качестве эффективного V^+ можно использовать экспоненциальную аппроксимацию ($V^+ = 790 \exp(-3,9 r)$) значений, вычисленных в [5]. Для аналитического описания ширины уровня была принята обычная зависимость $\Gamma(r) = B \exp(-\beta r)$. Располагая информацией о потенциалах V^* , V^+ , из измеренных токов $I(a)$ можно получить сведения о параметрах B и β .

Численный подгон $I(a)$ проводился по выражению (2) на ЭВМ БЭСМ-6 с использованием техники Монте-Карло; статистическая точность $\sim 3\%$ требовала $\sim 10^4$ траекторий. На рис. а точками показаны вычисленные значения $R(T)$ для параметров $B = 1240 \text{ эв}$, $\beta = 5 \text{ \AA}^{-1}$. Параметры работы [6] ($B = 27,2$; $\beta = 2,84$) дают худшее согласие (кружки на рис. а).

Возможность количественного описания проделанных измерений и согласие вычисленных (для $B = 1240$, $\beta = 5$) значений сечений ионизации $Q(E) = 2\pi \int b (1 - P_{\text{упр}}(b)) db$ с независимыми измерениями для $E = 400 + 1600 \text{ эв}$ [7] позволяют заключить, что использованный нами вариант спектроскопии столкновений – действительно удобный инструмент определения основных характеристик автоионизационных состояний. Аналогичные измерения проведены для систем $\text{He}^* - \text{Kr}$, $\text{He}^* - \text{Xe}$, $\text{He}^* - \text{H}_2$.

Институт космических исследований
Академии наук СССР

Поступила в редакцию
14 мая 1975 г.

Литература

- [1] С. Н. Chen, Н. Haberland, Y. T. Lee. J. Chem. Phys., **61**, 3095, 1974.
- [2] В. Б. Леонас. УФН, **107**, 1, 29, 1972.
- [3] F. J. Smith. Physica, **30**, 497, 1964.
- [4] W. H. Miller. J. Chem. Phys., **52**, 3563, 1970.
- [5] В. К. Никулин. ЖТФ, **41**, 41, 1971.
- [6] R. E. Olson. Phys. Rev., **A6**, 1031, 1972.
- [7] J. T. Moseley, J. R. Peterson, D. C. Lorents, M. Hollstein. Phys. Rev., **A6**, 1025, 1972.