

# УПРУГОЕ РАССЕЯНИЕ МЕТАСТАБИЛЬНЫХ АТОМОВ $\text{He}(2^{1,3}S)$ АТОМАМИ $\text{Na}(3^2S)$ ПРИ ЭНЕРГИИ 68 мэВ

*Е. Ю. Ремета, В. И. Келемен, А. Н. Завилопуло, А. В. Снегурский\**

*Институт электронной физики Национальной академии наук Украины  
88000, Ужгород, Украина*

Поступила в редакцию 14 июня 1999 г.

С использованием метода спектроскопии метастабильных состояний впервые экспериментально измерено суммарное дифференциальное сечение упругого рассеяния метастабильных атомов гелия в состояниях  $2^3S$  и  $2^1S$  атомами натрия в основном состоянии при энергии взаимодействия в системе центра масс 68 мэВ. Для анализа экспериментальных данных проведен расчет парциальных фаз рассеяния с использованием метода фазовых функций в приближении оптического потенциала. Выполненный анализ позволил дать более подробную интерпретацию структуры дифференциального сечения. Обсуждаются вычисленные величины интегральных сечений, в частности, ионизации Пеннинга, диффузии, вязкости и спинового обмена.

PACS: 34.20.Cf, 34.40.+n

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Задача определения комплексного потенциала взаимодействия в системе, состоящей из возбужденного атома и атома в основном состоянии, и характеристик сопутствующих процессов к настоящему времени в достаточно полном объеме решена для случая взаимодействия двух атомов инертных газов. Что же касается межатомного взаимодействия, одним из партнеров в котором выступает атом металла, то эта проблема остается недостаточно изученной. В то же время данные такого рода весьма важны для анализа процессов, происходящих в активных средах лазеров на парах металлов, в частности ионных лазеров, в плазме различного происхождения, химии газов, жидкости, твердого тела и т. п. [1].

Изучение упругого столкновения атомных частиц является частью общего исследования свойств межатомного взаимодействия и характеристик процесса рассеяния. При этом прецизионные экспериментальные измерения дифференциальных сечений рассеяния и их энергетических зависимостей совместно с теоретическими вычислениями могут способствовать решению важной задачи определения оптического потенциала (см., например, [2]). Поэтому целью данной работы было определение диффе-

ренциального сечения упругого рассеяния (ДСР), а также теоретическое описание его особенностей и столкновительных характеристик для такой системы сильновзаимодействующих частиц как  $\text{He}(2^{1,3}S) + \text{Na}(3^2S)$ .

## 2. СХЕМА ТЕОРЕТИЧЕСКОГО РАСЧЕТА

Относительное движение атомов в адиабатическом приближении Борна—Оппенгеймера описывается, как известно, уравнением Шредингера (используется система центра масс, атомные единицы):

$$\left[ -\frac{1}{2\mu} \nabla_R^2 + V_{opt}(\mathbf{R}) - E \right] \Psi(\mathbf{R}) = 0, \quad (1)$$

где  $V_{opt} = V_R(\mathbf{R}) + iV_I(\mathbf{R})$  — оптический потенциал взаимодействия атомов,  $E$  — кинетическая энергия столкновения,  $\mu$  — приведенная масса атомов,  $\mathbf{R}$  — расстояние между ядрами.

В настоящее время имеются теоретические методики получения *ab initio* оптического потенциала для описания межатомного взаимодействия в системе из возбужденного метастабильного атома инертного газа ( $\text{Rg}^*$ ) и атома металла (М) [3–6]. В этих методиках эта система рассматривается как столкновительный автоионизационный комплекс  $\text{Rg}^*\text{M}$ . Полученные оптические потенциалы, характеризующиеся очень большой (несколько сотен мэВ) глуби-

\*E-mail: sneg@iep.uzhgorod.ua

ной потенциальной ямы, можно использовать для детального описания процесса упругого столкновения в системе  $Rg^*+M$ . В работе [2] оптический потенциал рассеяния  $He(2^1S) + Na(3^2S)$  определялся подгонкой по методу  $\chi^2$  дифференциальных сечений рассеяния, вычисленных в полуклассическом приближении, к измеренным экспериментально при энергиях столкновения 52, 92, 132, 188 и 207 мэВ в диапазоне лабораторных углов рассеяния  $\theta_L = 5^\circ-105^\circ$ . В работе [3] оптические потенциалы для процессов  $He(2^1S)$ ,  $He(2^3S) + Na(3^2S)$  были получены *ab initio* вычислением в терминах резонансной электронной энергии и автоионизационной ширины и использованы для вычисления ДСР в полуклассическом приближении и определения сечения ионизации Пеннинга в довольно широкой области энергий: 10–1000 мэВ. В [4] исходя из таких же предположений получены *ab initio* оптические потенциалы систем  $He(2^3S) + H, Li, Na$  и  $He(2^1S) + Na$ , которые используются для экспериментального и теоретического анализа характеристик электронных спектров процесса ионизации Пеннинга. Аналогичная методика была использована в [5] для систем  $He(2^{1,3}S) + Mg, Ca, Sr, Ba$ . В [6] обобщены значения величины потенциальной ямы действительной части оптического потенциала систем  $Rg^*M$  ( $Rg = He, Ne, Ar, Kr, Xe, M = Li, Na, K, Rb, Cs, Mg, Ca, Sr, Ba, Yb, Hg$ ), полученные на основе электронных спектров высокого разрешения при ионизации Пеннинга. В нашей работе [7] оптический потенциал из [2] был использован для квантовомеханического вычисления ДСР и других характеристик процесса рассеяния  $He(2^1S)$  на  $Na(3^2S)$  при 68 мэВ. Полученное таким образом ДСР использовалось для интерпретации измеренного суммарного сечения процессов  $He(2^{1,3}S) + Na(3^2S)$ . В [8, 9] на основе оптического потенциала из [2] был проведен теоретический фазовый анализ этого процесса при энергиях 52, 80 и 92 мэВ. В работе [10] оптический потенциал рассеяния  $He(2^3S)$  на  $Na(3^2S)$  использовался для полуклассического расчета сечения ионизации Пеннинга и такой интересной характеристики рассеяния триплетного гелия как обменное сечение в широкой области энергий.

Остановимся более подробно на основных особенностях процесса столкновения метастабильного атома гелия с атомами щелочных металлов. Взаимодействие в системе  $He(2^{1,3}S) + Na(3^2S)$  ( $\mu = 6214$  ат.ед.) характеризуется двумя значениями полного спина квазимолекулярных термов. Рассеяние атома гелия в синглетном состоянии происходит по одному дублетному квазимолекулярному терму  $^2\Sigma^+$ , в то время как для триплетного состояния взаимодействие протекает по двум термам — дублетному  $^2\Sigma^+$  (статистический вес 2/6) и кватрлетному  $^4\Sigma^+$  (статистический вес 4/6). Отметим, что взаимодействие по дублетным термам характеризуется комплексным оптическим потенциалом, в то время как по кватрлетному терму — действительным. Для вычислений по дублетным термам нами использовались расчетные потенциалы из работы [3], а для кватрлетного терма — потенциал, полученный в [10]. Вещественная часть оптического потенциала в [3] получена в приближении взаимодействующих конфигураций для молекулы  $NaHe^*$  с использованием подгонки к правильной асимптотической зависимости — потенциалу Ван-дер-Ваальса. Мнимые части этих оптических потенциалов (автоионизационные ширины) были получены с использованием метода моментов Стилтеса при дискретизации представления континуума системы  $e^- + NaHe^+$  в пространстве  $(L^2)$ . Кватрлетный потенциал  $^4\Sigma^+$  определялся на основании правила средних с использованием потенциалов систем  $He(2^3S)-He(2^3S)$  и  $Na(3^2S)-Na(3^2S)$  (см. [10]).

Вещественная часть дублетных оптических потенциалов в [3] характеризуется следующими параметрами для состояний гелия  $2^1S(2^3S)$ : сильным отталкиванием на расстояниях  $R \leq 0.2a_0$ ; нулевым значением при  $R_0 \simeq 5.75a_0$  ( $4.45a_0$ ); минимальным значением  $V_{Rm} = 300$  мэВ при  $R_m = 7.35a_0$  ( $V_{Rm} = 740$  мэВ,  $R_m = 5.85a_0$ ); асимптотическим поведением по закону  $\propto -C_6/R^6$ ,  $C_6 = 3660$  ат.ед. (2220 ат.ед.), которое «начинается» примерно с  $R_a = 8.22a_0$  ( $6.27a_0$ ). Мнимые части оптических потенциалов в [3] характеризуются почти экспоненциальным поведением при  $R \geq 5a_0$  с некоторым отклонением от него при  $R < 5a_0$ . При этом начиная с  $6a_0$  мнимая часть убывает для состояния  $2^1S$  быстрее, чем для  $2^3S$  [3] (например, при  $R = 11a_0$  триплетная часть в пять раз больше синглетной). Кватрлетный потенциал в [10] имеет вид потенциала Ван-дер-Ваальса с положительной добавкой:  $-C_6/R^6 + AR^B \exp(-CR)$ ,  $C_6 = 1970$  ат.ед. (ср.:  $C_6 = 2220$  ат.ед. для  $2^3S$  [3]),  $A = 0.0205$  ат.ед.,  $B = 4.81$ ,  $C = 1.206a_0^{-1}$ .

Малость энергии столкновения по сравнению с глубиной потенциальной ямы требует, по нашему мнению, чтобы теоретическая методика была в основном квантовомеханической, в то время как обычно используются различные модификации полуклассического приближения, поэтому теоретический расчет фаз рассеяния проводился нами с использованием метода фазовых функций [11, 12] с комплексным оптическим потенциалом.

Система уравнений для комплексной фазовой функции  $\delta_l(E, R) = \varepsilon_l(E, R) + i\eta_l(E, R)$  получается из (1) и имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{d\varepsilon_l}{dR} &= -\frac{1}{4k\eta_l} \{V_R [(1+\eta_l)^2(j_l \cos \varepsilon_l - n_l \sin \varepsilon_l)^2 - \\ &- (1-\eta_l)^2(j_l \sin \varepsilon_l + n_l \cos \varepsilon_l)^2] + 2V_I(1-\eta_l^2) \times \\ &\times (j_l \cos \varepsilon_l - n_l \sin \varepsilon_l)(j_l \sin \varepsilon_l + n_l \cos \varepsilon_l)\}, \\ \frac{d\eta_l}{dR} &= \frac{1}{2k} \{V_I [(1+\eta_l)^2 \times \\ &(j_l \cos \varepsilon_l - n_l \sin \varepsilon_l)^2 - \\ &- (1-\eta_l)^2(j_l \sin \varepsilon_l + n_l \cos \varepsilon_l)^2] - \\ &- 2V_R(1-\eta_l^2)(j_l \cos \varepsilon_l - n_l \sin \varepsilon_l) \times \\ &\times (j_l \sin \varepsilon_l + n_l \cos \varepsilon_l)\} \end{aligned} \quad (2)$$

с начальными условиями

$$\varepsilon_l(E, 0) = 0, \quad \eta_l(E, 0) = 1, \quad (3)$$

где  $\eta_l(E, R) = \exp[-2\bar{\eta}_l(E, R)]$ ,  $k^2 = 2\mu E$ , а  $j_l \equiv j_l(kR)$ ,  $n_l \equiv n_l(kR)$  — функции Риккати—Бесселя. Действительную  $\varepsilon_l(E)$  и мнимую  $\bar{\eta}_l(E)$  части парциальной фазы рассеяния  $\delta_l(E)$  получают из соответствующих фазовых функций:

$$\varepsilon_l = \lim \varepsilon_l(E, R), \quad \bar{\eta}_l(E) = -\frac{1}{2} \ln \lim \eta_l(E, R) \quad (4)$$

при  $R \rightarrow \infty$ .

Численное интегрирование системы (2), которое должно начинаться с некоторого конечного расстояния  $r > 0$ , сопряжено с большими трудностями вследствие сильного отталкивательного взаимодействия на малых расстояниях и сингулярного поведения  $n_l(kR)$  для  $l > 0$ . В работе [11] рассмотрено решение этой задачи для трех типов поведения потенциала взаимодействия  $V(R)$  при  $R \rightarrow 0$ : несингулярного (или слабо сингулярного),  $R^2V(R) \rightarrow 0$ ; сильно сингулярного,  $R^2V(R) \rightarrow \infty$ ; промежуточного между двумя указанными,  $R^2V(R) = \text{const}$ . Потенциал взаимодействия в нашей задаче соответствует первому типу. Поэтому начальное выражение для  $\delta_l(E, r)$  будет следующим:

$$\begin{aligned} \varepsilon_l(E, r) &\approx -\frac{1}{k} \int_0^r dR j_l^2(kR) V_R(R), \\ \eta_l(E, r) &\approx 1. \end{aligned} \quad (5)$$

Здесь использовано то, что при достаточно малых  $r$  в уравнении для  $\varepsilon_l(E, R)$  остается только первое слагаемое, в котором пренебрегается вторым и третьим членами после возведения в квадрат. Пренебрежение означает, что для малых  $l$  (в нашем случае  $\leq 30$ ) и при использовании разложения для  $j_l(kR)$

$$|\varepsilon_l(E, r)| \ll \frac{(kr)^{2l+1}}{(2l+1)!!(2l-1)!!}, \quad (6)$$

и тогда для  $r \rightarrow 0$

$$\varepsilon_l(E, r) \approx -\frac{k^{2l+1}}{[(2l+1)!!]^2} \int_0^r dR V_R(R) R^{2l+2}. \quad (7)$$

Заметим, что в [7] получены аналитические выражения для  $\varepsilon_l(E, r)$  и  $\eta_l(E, r)$  на малых расстояниях ( $kr \leq 0.05$ ) при использовании оптического потенциала из [2]. Вещественная часть этого потенциала имеет вид модифицированного двойного потенциала Морзе без правильного ван-дер-ваальсовского асимптотического поведения, а мнимая часть — простую экспоненциальную зависимость:  $V_I(R) = 40 \exp(-1.85R)$  (в ат.ед.). Полученные в [7] выражения показывают сильную зависимость искомым частей фазовой функции  $\delta_l(E, r)$  от орбитального момента  $l$ , волнового вектора  $k$  и параметров данного оптического потенциала.

Система уравнений (2) с начальными условиями (3) интегрировалась нами численно методом 4-го порядка типа «предсказание—коррекция» с автоматическим контролем величины шага. Здесь использовалось предсказание по Адамсу—Башфорту с коррекцией по Адамсу—Мултону и модификацией [13]. Согласно указанным методам, вычисление парциальных фаз проводилось с точностью  $10^{-4}$  рад.

Вычисление фаз рассеяния по дублетным термам для орбитальных моментов  $l \geq 150$ , начиная с которых вещественная часть фаз  $\varepsilon_l$  меньше 0.08 рад, а мнимая часть  $\bar{\eta}_l$  практически равна нулю ( $< 10^{-16}$  рад), проводилось в полуклассическом приближении. Расчет фаз для квартетного терма осуществлялся только в полуклассическом приближении. Для используемой нами величины энергии столкновения 68 мэВ вычисление фаз проводилось до  $l_{max} = 660$  (для двух  $^2\Sigma^+$ -термов) и до  $l_{max} = 300$  (для одного  $^4\Sigma^+$ -терма). Следует заметить, что значения фаз при решении уравнений (2)–(4) начиная с  $l \geq 145$  стремились к полуклассической величине и при  $\varepsilon_l < 0.09$  рад подчинялись зависимости  $\propto l^{-5}$  [14], обусловленной рассеянием на потенциале Ван-дер-Ваальса. Конечное число учитываемых парциальных волн диктовалось величиной фаз  $\varepsilon_l \leq 10^{-4}$  рад. Суммируя все сказанное выше по поводу вычислительного алгоритма и использования полуклассического приближения, можно утверждать, что мы гарантированно получали три значащих цифры в сечениях как дифференциального, так и интегрального типов.

Переходами между термами  $^2\Sigma^+$  и  $^4\Sigma^+$  (для  $\text{He}(2^3S) + \text{Na}(3^2S)$ -рассеяния), обусловленными спин-орбитальным взаимодействием, мы пренебрегали, и расчет фаз для каждого терма проводился

независимо. Это приближение вполне удовлетворительно, ибо взаимодействию между атомами в квазимолекуле соответствуют  $\Sigma$ -термы, когда спин-орбитальное взаимодействие в первом приближении (по проекции полного спина) равно нулю и является весьма малым как во втором приближении, так и в первом по спин-спиновому взаимодействию [15]. Таким образом, предложенная нами методика вычислений содержит как квантовое, так и полуклассическое описание.

Найденные парциальные фазы рассеяния  $\delta_l(E)$  были использованы для нахождения дифференциальных сечений упругого рассеяния  $d\sigma_{el}/d\Omega_c$  [14, 15]:

$$\frac{d\sigma_{el}(E, \theta_c)}{d\Omega_c} = \frac{g}{4k^2} \left| \sum_l (2l+1)(S_l-1)P_l(\cos \theta_c) \right|^2, \quad (8)$$

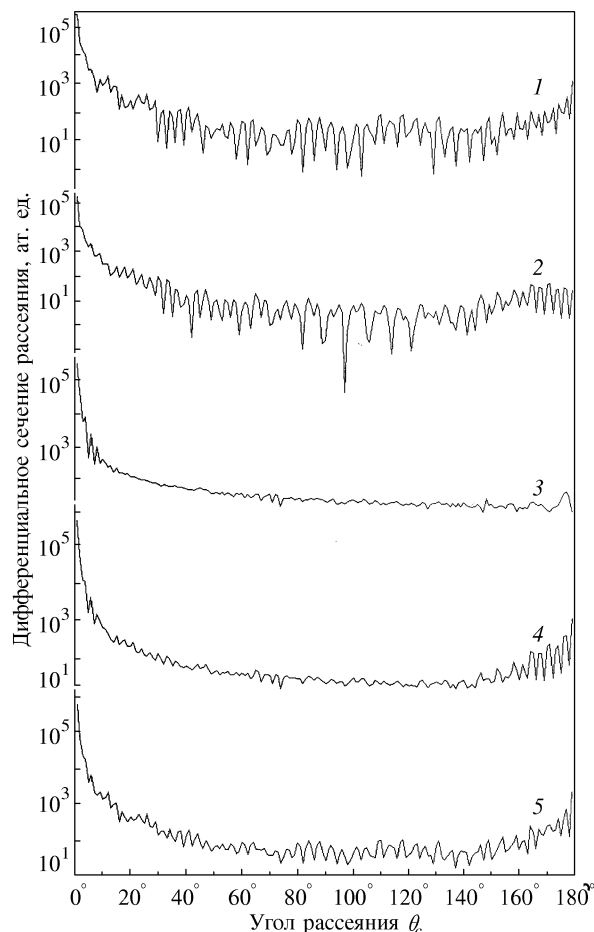
$$S_l = \exp[2i\delta_l(E)],$$

где статистические веса составляют  $g = 1$  для  $\text{He}(2^1S)$ ,  $g = 1/3$  для  $\text{He}(2^3S)$  в случае дублетных термов и  $g = 2/3$  для квартетного терма.

Зависимость (по  $l$ ) вещественных частей парциальных фаз для  $^1S$  ( $^3S$ )-рассеяния по  $^2\Sigma^+$ -термам имеет максимум при  $l = 37$  (28). Это означает, что рассеяние характеризуется такой чертой, как сияние (глюрия) на малые углы.

Дифференциальные сечения упругого рассеяния синглетного и триплетного метастабильных состояний атома гелия на атоме натрия для энергии 68 мэВ, рассчитанные нами в системе центра масс во всем диапазоне углов, приведены на рис. 1, а в лабораторной системе с учетом экспериментального диапазона углов рассеяния — на рис. 2. Как и следовало ожидать, угловая зависимость сечений обладает сильной интерференционной структурой. Сравнение дублетных ДСР для  $\text{He}(2^1S)$  и  $\text{He}(2^3S)$  (рис. 1, кривые 1 и 2) при этом показывает, что они имеют как низкочастотную (более выраженную для синглетного состояния), так и высокочастотную структуру. Квартетное же ДСР (кривая 3) имеет только высокочастотную структуру (напомним, что квартетные фазы рассеяния вычислены полуклассически). Величина квартетного ДСР в диапазоне углов ( $\sim 0.5^\circ$ – $150^\circ$ ) несколько превышает дублетное сечение для триплетного состояния (ср. кривые 3 и 2) и сопоставима с ДСР для синглетного (кривая 1). Поэтому суммарное по обоим термам ДСР для триплетного состояния (кривая 4) носит в основном черты квартетного ДСР, кроме области углов  $\theta_c = 150^\circ$ – $180^\circ$ .

Таким образом, можно отметить, что приведенным на рис. 1 теоретическим дифференциальным сечениям упругого рассеяния как по отдельным термам (кривые 1, 2, 3), так и по суммарным (кривые



**Рис. 1.** Вычисленные дифференциальные сечения упругого рассеяния метастабильных атомов  $\text{He}(2^{1,3}S)$  атомами  $\text{Na}(3^2S)$  в системе центра масс при энергии  $E = 68$  мэВ: 1 — синглетное  $2^1S$ -состояние, дублетный терм; 2 — триплетное  $2^3S$ -состояние, дублетный терм; 3 — триплетное  $2^3S$ -состояние, квартетный терм; 4 — триплетное  $2^3S$ -состояние, суммарное по обоим термам; 5 — сумма по двум состояниям

4, 5) присуща сложная структура угловой зависимости. Отметим также, что сечения рассеяния синглетного и триплетного состояний гелия по дублетным термам (кривые 1, 2) имеют как общие черты, так и отличительные особенности. В частности, абсолютное значение триплетного ДСР (кривая 2) несколько меньше синглетного (кривая 1), а их угловые зависимости в области  $5^\circ$ – $40^\circ$  и  $110^\circ$ – $180^\circ$  существенно различны.

### 3. ЭКСПЕРИМЕНТ

Эксперимент выполнялся с использованием техники пересекающихся пучков методом спектроско-

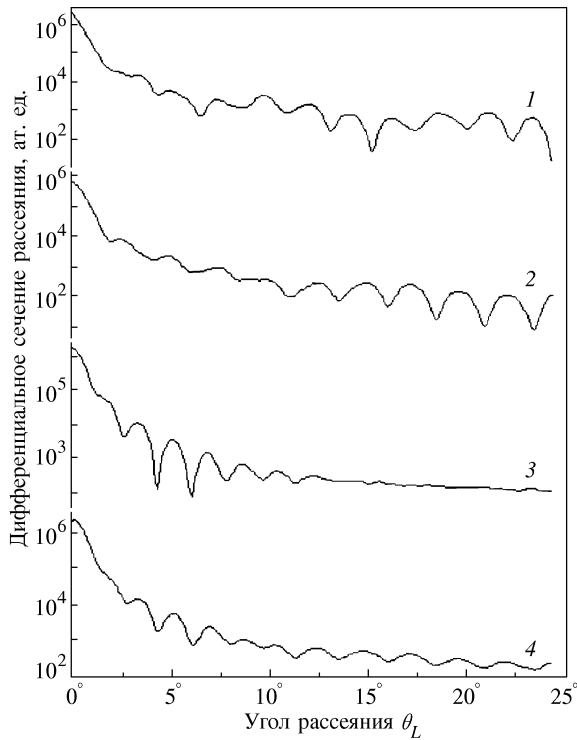


Рис. 2. То же, что на рис. 1, но в лабораторной системе без суммирования по двум состояниям гелия

пии метастабильных состояний [16]. Пучок метастабильных атомов создавался с помощью сверхзвукового источника соплового типа с продольным электронным возбуждением, а пучок атомов натрия формировался эффузионным источником щелевого типа. Детектором рассеянных метастабильных атомов служил КЭУ, позволявший измерять ДСР в диапазоне углов рассеяния  $\theta_L = 0.5^\circ - 20.5^\circ$  при угловом разрешении  $\Delta\theta_L = 0.5^\circ$ . Шаг сканирования кривой ДСР составлял  $0.5^\circ$ . Из-за специфики эксперимента селекция метастабильных атомов по отдельным состояниям не проводилась, таким образом, измеренное ДСР является суммарным для обоих метастабильных состояний (синглетного и триплетного). Полученная кривая ДСР (см. рис. 3) является результатом многократного сканирования диапазона углов рассеяния, причем величина относительного статистического разброса в каждой точке экспериментальной кривой не превышала 5%. «Неидеальность» экспериментальной аппаратной функции потребовала дополнительной процедуры усреднения расчетных ДСР с учетом реальных параметров эксперимента ( $\Delta\theta_L \geq 0.5^\circ$ ,  $\Delta V_{\text{He}} = \pm 545$  м/с,  $\Delta V_{\text{Na}} = \pm 140$  м/с). Кроме того, отметим, что в погрешность измерения экспериментальных кривых вносят вклад неопределенность угла рассеяния (в

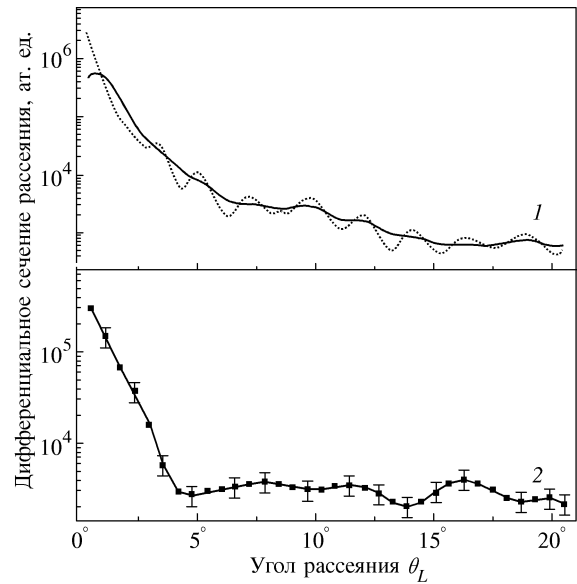


Рис. 3. Дифференциальные сечения упругого рассеяния метастабильных атомов  $\text{He}(2^{1,3}S)$  атомами  $\text{Na}(3^2S)$  в лабораторной системе при  $E = 68$  мэВ (сумма по двум состояниям): 1 — расчет ( $a_0^2/\text{стер}$ ) без усреднения (штриховая кривая) и с усреднением по  $1.5^\circ$  (сплошная); 2 — экспериментальное сечение (отн. ед.)

среднем для всего диапазона углов  $\approx 5\%$ ), неопределенность скорости частиц ( $\approx 10\%$ ) и неопределенность детектирования полезного сигнала ( $\approx 5\%$ ). Таким образом, суммарная ошибка относительных измерений с учетом усреднения экспериментальных кривых по оценке не должна превышать 25%. Доверительный интервал, определенный с учетом сказанного выше, указан на рис. 3 и, как видим, не превышает амплитуды нерегулярностей сечения.

Экспериментальная кривая ДСР, представленная на рис. 3, имеет резкий спад в области малых углов рассеяния с последующими низкочастотными ( $3^\circ - 5^\circ$ ) нерегулярностями сечения на пологом участке. Для объяснения такого хода суммарного дифференциального сечения нами с использованием предложенной выше теоретической схемы были рассчитаны ДСР в лабораторной системе.

#### 4. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Суммарные расчетные ДСР в лабораторной системе представлены на рис. 3 (кривые 1) в сравнении с экспериментом (кривая 2). Как видим, основной ход экспериментального ДСР в целом совпадает с ходом теоретического — дифракционный максимум ( $\theta_L < 5^\circ$ ) с последующим интерференционным поведением, которое проявляется на теорети-

ческих кривых в виде высокочастотной ( $\theta_L < 1^\circ$ ) и низкочастотной ( $\theta_L \approx 3^\circ - 5^\circ$ ) структур. Как видно на рис. 3, выполненное нами усреднение по аппаратной функции привело к сглаживанию высокочастотной структуры. Низкочастотная структура суммарного ДСР определяется в основном структурой рассеяния  $2^1S$ -атомов гелия (см. также рис. 2). Структура ДСР обусловлена интерференцией волн рассеяния, соответствующих трем ветвям прицельного расстояния как функций углов рассеяния [17]. Эти три ветви прицельного расстояния соответствуют трем частям использованных нами оптических потенциалов: притяжение на периферии (потенциал Ван-дер-Ваальса), центральное притяжение (потенциальная яма) и центральное отталкивание на малых расстояниях. По-видимому, излом ДСР при  $5^\circ$  обусловлен поведением этих частей оптических потенциалов, влияющих на формирование парциальных фаз. Более того, вследствие большой глубины ямы  $V_{Rm}$  в оптическом потенциале и малой энергии столкновения  $E$  отношение  $E/V_{Rm}$  (равное 0.23 и 0.1 для  $1S$ - и  $3S$ -состояний) является весьма малым, и это позволяет считать, что поведение ДСР для обоих состояний гелия отражает явление орбитирования (периодические колебания неусредненных ДСР с шагом около  $2^\circ$  на рис. 3). При этом величина парциальных фаз, начиная с орбитального момента  $l = 37$  и до  $l = 76$ , регулярно принимает значения, приближенно кратные  $\pi$ . По-видимому, экспериментальный при  $\theta_L \approx 14^\circ$  и теоретический при  $\theta_L \approx 15^\circ$  минимумы могут быть следствием орбитирования по  $2^1\Sigma^+$ -терму, в большей мере для рассеяния  $2^1S$ -состояния гелия и в меньшей мере для состояния  $2^3S$ .

Для рассеяния  $\text{He}(2^1S)$  в [7] нами вычислено ДСР с использованием оптического потенциала из [2]. Вещественная часть этого потенциала медленно уменьшается в два раза на интервале  $R = 0.1 - 0.5a_0$ , тогда как вещественная часть оптического потенциала в [3] на этом же интервале убывает примерно в 33 раза. Мнимая часть оптического потенциала в [2] значительно больше мнимой части оптического потенциала из [3]: более чем в  $10^4$  раз для  $R = 0.1a_0$  и в 10 раз для  $R = 6a_0$ . На больших же расстояниях она быстро становится значительно меньше мнимой части потенциала из [3], например, для  $R = 15a_0$  — в 1500 раз. При этом  $R_0 = 5.53a_0$ ,  $R_m = 6.3a_0$ ,  $V_{Rm} = 300$  мэВ (ср. с вышеприведенными соответствующими параметрами оптического потенциала в [3]). Вычисленное в [7] ДСР в лабораторной системе не имело низкочастотной структуры и характеризовалось монотонным поведением, в то время как качественное совпадение с результатами нашего эксперимента наблюдалось лишь на участке

до  $\approx 5^\circ$ . Такое поведение согласуется с результатом работы [3], где ДСР  $\text{He}(2^1S)$  при  $E = 52$  мэВ имеет плавный ход для оптического потенциала из [2] и излом при  $5^\circ$  для потенциала из [3]. Более того, ДСР, вычисленные в [7] в предположении  $V_I(R) = 0$ , для углов от  $30^\circ$  до  $120^\circ$  лежат выше ДСР, полученных при  $V_I(R) \neq 0$ , что согласуется с описанным в работе [1] поведением ДСР для рассеяния  $\text{He}(2^1S) + \text{Ar}$ . Таким образом, можно заключить, что оптические потенциалы из [3] в целом верно отражают природу межатомного взаимодействия рассматриваемой системы частиц.

Вычисленные нами фазы рассеяния позволили более полно описать процесс рассеяния и получить в итоге следующие сечения интегрального типа: диффузии,  $\sigma_D$ ; вязкости,  $\sigma_\eta$ ; упругого рассеяния,  $\sigma_{el}$ ; поглощения (ионизации Пеннинга),  $\sigma_i$ ; полное,  $\sigma$  [14, 15]:

$$\sigma_D(E) = 2\pi \int d\theta_c \sin \theta_c (1 - \cos \theta_c) \frac{d\sigma_{el}}{d\theta_c},$$

$$\sigma_\eta(R) = 2\pi \int d\theta_c \sin^3 \theta_c \frac{d\sigma_{el}}{d\theta_c},$$

$$\sigma_{el}(E) = \sum_l \sigma_l(E), \quad \sigma_l(E) = \frac{\pi}{k^2} (2l+1) |S_l - 1|^2, \quad (9)$$

$$\sigma_i(E) = \frac{g\pi}{k^2} \sum_l (2l+1) (1 - |S_l|^2),$$

$$\sigma(E) = \frac{2\pi}{k^2} \sum_l (2l+1) (1 - \text{Re } S_l) = \sigma_{el}(E) + \sigma_i(E)$$

(см. таблицу). Вклад сечений по квартетному терму  $4^1\Sigma^+$  для процесса  $\text{He}(2^3S) + \text{Na}(3^2S)$  по сравнению с вкладом сечений, соответствующих терму  $2^1\Sigma^+$ , весьма велик: он сравним с последним для  $\sigma_D$  и превышает его в 3.5 раза для  $\sigma_\eta$  и в 2.5 и 2.3 раза для  $\sigma_{el}$  и  $\sigma$ . Нами в работе [7] отмечалось большое влияние неупругих процессов на сечение диффузии, вычисленное с оптическим потенциалом из [2] для рассеяния  $\text{He}(2^1S) + \text{Na}(3^2S)$ , которое уменьшается примерно в два раза.

Теоретические значения сечений ионизации Пеннинга  $\sigma_i$ , полученные из расчетной кривой [3] при энергии 68 мэВ, равны приблизительно  $257a_0^2$  и  $114a_0^2$  для  $\text{He}(2^1S)$  и  $\text{He}(2^3S)$  соответственно (ср. с нашими значениями  $\sigma_i$  из таблицы).

Кривая зависимости  $\sigma_i(E)$ , рассчитанной в [2] с помощью полученного в этой же работе оптического потенциала при рассеянии  $\text{He}(2^1S)$ , проходит систематически выше соответствующей кривой, полученной в [3]. Сечение ионизации, вычисленное нами с оптическим потенциалом из [2]  $\sigma_i = 247a_0^2$ , меньше полученной в этой же работе величины  $\sigma_i = 332a_0^2$

Сечения интегрального типа для процесса рассеяния  $\text{He}(2^{1,3}S) + \text{Na}(3^2S)$  при энергии 68 мэВ  
(в единицах  $a_0^2$ )

Сечение	$\text{He}(2^1S) + \text{Na}(3^2S)$ , дублет	$\text{He}(2^3S) + \text{Na}(3^2S)$			Общее суммарное
		Дублет	Квартет	Суммар.	
$\sigma_{el}$	2070	605	1550	2155	4225
$\sigma_i$	115	58.0	—	58.0	173
$\sigma$	2185	663	1550	2213	4398
$\sigma_D$	424	143	132	275	699
$\sigma_\eta$	335	65.9	243	309	644

(см. [7]). Заметим здесь, что вычисление фаз рассеяния в [3] (и, по-видимому, в [2]) было проведено в рамках только полуклассического приближения. Экспериментальное значение сечения  $\sigma_i$  при 50 мэВ составляет  $214a_0^2$  ( $\pm 100\%$ ) [18]. Таким образом, сечение  $\sigma_i(E)$ , рассчитанное в [7], имеет промежуточное значение между величинами, приведенными в работах [2] и [18], а полученная нами величина (при энергии 68 мэВ) — значительно ниже теоретической в [3].

Аналогичная картина наблюдается и для сечения ионизации при рассеянии  $\text{He}(2^3S)$ . Имеются два экспериментальных значения: при энергии около 40 мэВ  $\sigma_i \simeq 114a_0^2$  ( $+5\%$ ,  $-10\%$ ) [19] и при 50 мэВ  $\sigma_i \simeq 86a_0^2$  ( $\pm 100\%$ ) [18]. Расчетные данные [3] лежат выше этих значений, а вычисленная нами величина (при энергии 68 мэВ) намного меньше значения  $\sigma_i$  в [3]. Отметим, что полученное в полуклассическом приближении в [10] значение  $\sigma_i$  при 68 мэВ составляет около  $122a_0^2$  (с учетом статистического веса  $1/3$ ), что значительно (более чем в два раза) выше полученного нами значения и несколько превышает  $\sigma_i$  в [3]. Заметим, что вещественная часть оптического потенциала в [10] — это потенциал Ленарда-Джонса (12.6) с  $R_0 = 5.35a_0$ ,  $R_m = 6.0a_0$ ,  $V_{Rm} = 735$  мэВ, а мнимая часть имеет вид  $V_I(R) = 0.6 \exp(-R)$  [ат.ед.]. Сравнение этого потенциала с аналогичным в [3] показывает, что они совпадают в области минимума потенциала и асимптотики, однако потенциал в [10] имеет более сильное отталкивание при  $R < R_0$ . Мнимая часть потенциала в [10] больше мнимой части потенциала из [3] в 50 раз на малых расстояниях и примерно в 1.2 раза при  $R = 15a_0$ .

В работе [4] обсуждается отношение сечений ионизации в процессах  $\text{He}(2^1S)$ ,  $\text{He}(2^3S) + \text{Na}$ , определяемое как экспериментально, так и теоретиче-

ски. При этом утверждается, что оно слабо зависит от энергии столкновения. Для энергии 70 мэВ, по данным эксперимента в [4], это отношение равно  $2.8$  ( $\pm 30\%$ ), а по данным эксперимента в [20] —  $3.1$  ( $\pm 30\%$ ). Из эксперимента в работе [18] следует, что для энергий 50 мэВ оно равно 2.5. Теоретические значения этого отношения систематически меньше 3, что отвечает соотношению статистических весов спин-разрешенных столкновений для этих процессов. Так, величина отношения, полученная по вычисленным нами значениям сечений ионизации (см. таблицу), равна 2.0. Величина этого же отношения по результатам работы [3] составляет 2.2 для 50 мэВ и 2.3 для 68 мэВ. В [4] с использованием оптического потенциала из [3] получено значение 2.18, в то время как с вещественной частью оптического потенциала, полученной в [4] *ab initio*, и мнимой частью из [3] оно составляет 2.15. Как видно, найденное нами значение хорошо коррелирует со всеми этими данными.

В работе [10] указывается на процесс спинового обмена, который возможен для рассеяния  $\text{He}(2^3S)$  на  $\text{Na}(3^2S)$ . Амплитуда такого процесса равна  $f(m_1, m_2; m'_1, m'_2; E, \theta_c) = (2^{1/2}/3)[f_q(E, \theta_c) - f_d(E, \theta_c)]$ , где  $m_1, m_2, m'_1, m'_2$  — проекции спинов атомов Na и He до и после столкновения соответственно ( $m_1 + m_2 = m'_1 + m'_2$ ), а  $f_q$  и  $f_d$  — амплитуды рассеяния по квартетному (парциальная фаза  $\eta_q(E)$ ) и по дублетному (парциальная фаза  $\delta_{ld}(E) = \varepsilon_{ld}(E) + i\bar{\eta}_{ld}(E)$ ) термам. Соответствующее полное сечение спинового обмена имеет вид

$$\sigma^{tr}(E) = \frac{2\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \times \left\{ 1 + \eta_{ld}^2(E) - 2\eta_{ld}(E) \cos\left(2[\varepsilon_{ld}(E) - \varepsilon_{lq}(E)]\right) \right\}, \quad (10)$$

где  $\eta_{ld}(E)$  связана с мнимой частью фазы  $\bar{\eta}_{ld}(E)$ .

Вычисленное нами значение сечения равно  $\sigma^{tr}(68 \text{ мэВ}) = 300a_0^2$ . При этом основная его часть ( $298a_0^2$ ) была получена для волн с  $l$  от нуля до 149, когда  $\varepsilon_{ld}$  и  $\eta_{ld}$  находили из квантовомеханического расчета с использованием оптического потенциала из [3]. Фаза  $\varepsilon_{ld}$ , как мы отмечали ранее, вычислена в полуклассическом приближении с потенциалом из [10]. По данным этой работы сечение  $\sigma^{tr}(68 \text{ мэВ})$  составило  $200a_0^2$ . Как уже указывалось выше, сечение ионизации Пеннинга для  $\text{He}(2^3S)$  в [10] больше полученного нами, что свидетельствует о малых значениях  $\eta_{ld}$  (парциальное сечение ионизации пропорционально  $1 - \eta_{ld}^2$ ). Следствием этого (см. формулу (10)) и является малая величина обменного сечения в [10]. Таким образом, сечение спинового обмена весьма чувствительно к мнимой части парциальных фаз, а значит, и к мнимой части используемого оптического потенциала.

### 5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Экспериментальное и теоретическое исследование упругого рассеяния атомов  $\text{He}(2^{1,3}S)$  атомами  $\text{Na}(3^2S)$  при энергии 68 мэВ, выполненное в данной работе, позволило впервые интерпретировать структуру, наблюдающуюся в ДСР в диапазоне малых углов рассеяния. Так, нами обнаружено, что низкочастотная структура угловой зависимости дифференциальных сечений обусловлена интерференцией амплитуд от различных частей потенциала взаимодействия вместе с явлением орбитирования. Эта структура определяется в основном особенностями рассеяния метастабильных атомов гелия в синглетном состоянии.

Использованные нами для вычислений квантовые и полуклассические представления для системы сильновзаимодействующих атомных частиц  $\text{Rg}^*\text{M}$  в приближении оптического потенциала, при нахождении которого эта система рассматривается как автоионизационный комплекс, верно описывают характеристики процесса упругого рассеяния при данной энергии.

Сечения ионизации Пеннинга, вычисленные нами с такими оптическими потенциалами находятся в хорошем количественном согласии с имеющимися экспериментальными данными.

Полное сечение спинового обмена для рассеяния метастабильных атомов гелия в триплетном состоянии весьма чувствительно к величине мнимой части оптического потенциала, и квантовомеханическое описание при этом является определяющим.

Авторы выражают благодарность О. Б. Шпенику и И. И. Фабриканту за ценные обсуждения результатов работы, Дж. С. Козну за предоставлен-

ные данные по оптическим потенциалам, Х. Хотопу, О. И. Зацаринному и И. О. Цапфелу за поддержку и помощь в выполнении работы.

### ЛИТЕРАТУРА

1. В. Б. Леонас, *Межмолекулярные взаимодействия и столкновения атомов и молекул*, ВИНТИ, Москва (1980).
2. H. Haberland and W. Weber, *J. Phys. B* **13**, 4147 (1980).
3. J. S. Cohen, R. L. Martin, and N. F. Lane, *Phys. Rev. A* **31**, 152 (1985).
4. A. Merz, M. W. Muller, M.-W. Ruf et al., *Chem. Phys.* **145**, 219 (1990).
5. M.-W. Ruf, A. J. Yencha, H. Hotop et al., *Z. Phys. D* **37**, 219 (1996).
6. H. Hotop, T. E. Roth, M.-W. Ruf et al., *Theoretical Chemistry Account* (1998).
7. Е. Ю. Ремета, В. И. Келемен, А. М. Завилопуло и др., *Укр. физ. журн.* **44**, 1077 (1999).
8. Е. Yu. Remeta, V. I. Kelemen, A. V. Snegursky, and A. M. Zaviropulo, in *Proc. 19 SPIG*, Zlatibor, Yugoslavia (1998), p. 155.
9. Е. Yu. Remeta and V. I. Kelemen, in *Proc. 6th EPS Conf. on Atom. and Molec. Phys. (ECAMP)*, Siena, Italy (1998), p. 4.23.
10. В. А. Картошкин, *Опт. и спектр.* **85**, 196 (1998).
11. В. В. Бабилов, *Метод фазовых функций в квантовой механике*, Наука, Москва (1988).
12. Ф. Калоджеро, *Метод фазовых функций в теории потенциального рассеяния*, Мир, Москва (1972).
13. Г. Корн, Т. Корн, *Справочник по математике*, Наука, Москва (1978).
14. Н. Мотт, Г. Месси, *Теория атомных столкновений*, Мир, Москва (1969).
15. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика. Нерелятивистская теория*, Наука, Москва (1989).
16. А. В. Снегурский, А. И. Жуков, А. Н. Завилопуло, *Укр. физ. журн.* **39**, 300 (1994).
17. Е. Е. Никитин, С. Я. Уманский, *Неадиабатические переходы при медленных атомных столкновениях*, Атомиздат, Москва (1979).
18. H. Hotop and A. Niehaus, *Z. Phys.* **238**, 452 (1970).
19. C. E. Johnson, C. A. Tipton, and M. G. Robinson, *J. Phys. B* **11**, 927 (1978).
20. M.-W. Ruf, A. J. Yencha, and H. Hotop, *Z. Phys. D* **5**, 9 (1987).