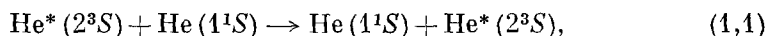


## ПРОЦЕССЫ УПРУГОГО РАССЕЯНИЯ МЕТАСТАБИЛЬНЫХ АТОМОВ ГЕЛИЯ В СОБСТВЕННОМ ГАЗЕ

*И. Я. Фуголь*

### 1. ОСОБЕННОСТИ УПРУГОГО РАССЕЯНИЯ МЕТАСТАБИЛЬНЫХ АТОМОВ ГЕЛИЯ $2^3S$

Упругое рассеяние возбужденных атомов гелия в газе нормальных атомов обладает рядом особенностей, которые связаны, во-первых, с квантовыми эффектами симметрии и, во-вторых, с необычным характером взаимодействия атомов. Сам гелий относится к числу тех немногих объектов, для которых существуют теоретические расчеты и поэтому возможно количественное сопоставление теории и эксперимента. В настоящем обзоре анализируются полное и диффузионное сечение рассеяния, а также процесс рассеяния метастабильных атомов



происходящий с передачей возбуждения. В этом процессе возбуждение передается от одного идентичного ядра к другому без обмена энергиями относительного поступательного и внутреннего движения отдельных атомов. Поэтому рассеяние по схеме (1,1) можно рассматривать как разновидность процесса упругого рассеяния.

Упругое рассеяние метастабильных атомов в собственном газе характеризуется двумя потенциалами взаимодействия —  $V_S$  и  $V_A$ . Они относятся к двум различным состояниям системы нормального и метастабильного атомов и отличаются характером симметрии волновой функции системы по отношению к перестановке тождественных ядер. Антисимметричный потенциал  $V_A$  соответствует антисимметричной волновой функции системы и обладает минимумом, благодаря которому существует молекула гелия  $\text{He}_2^*$  (звездочка обозначает возбужденное состояние). Молекулярный терм этого антисимметричного состояния есть  $2^3\Sigma_u^-$ . Симметричный потенциал  $V_S$  является чисто отталкивательным, а состояние имеет симметрию терма  $2^3\Sigma_g^+$ . Наличие двух потенциалов взаимодействия, по существу, есть следствие квантовых эффектов симметрии, и поэтому процесс рассеяния метастабильных атомов гелия, вообще говоря, не может быть описан классической теорией. Впервые квантовая теория столкновений идентичных атомов была развита Мессии с сотрудниками<sup>1-5</sup>. Процессы упругого рассеяния метастабильного и нормального атомов гелия были теоретически проанализированы Бэкингом и Далгарно<sup>6</sup>. Вычисление сечений упругого рассеяния для изотопов He-4 и He-3 проведено в работах<sup>7-8</sup>. Диффузионное сечение рассеяния метастабильных атомов инертных газов рассматривалось также Б. М. Смирновым и др.<sup>9</sup> на основе асимптотического выражения для энергии взаимодействия возбужденного атома и атома в основном состоянии в пределе больших расстояний между ними.

Другой особенностью метастабильной молекулы гелия  $\text{He}_2^*$  является наличие максимума на кривой потенциальной энергии  $V_A(R)$  при сравнительно больших расстояниях между ядрами ( $R = 4,5a_0$ ,  $a_0 = 0,53 \times 10^{-8}$  см — борковский радиус). Этот максимум обусловлен конкуренцией обменных сил различного типа. Потенциалы взаимодействия нормального и возбужденного атомов были рассчитаны в работе Бэкингема и Далгарно<sup>10</sup> и затем уточнены в работах<sup>11,12</sup>. Необходимо подчеркнуть, что величина максимума на кривой  $V_A(R)$  невелика (составляет доли электрон-вольта) и определяется разностью двух больших обменных энергий — энергии обмена электроном в атомах и энергии одновременного обмена электроном и ядром. Поэтому результаты вычислений дальнего действующего отталкивания весьма чувствительны к виду волновых функций. Вследствие приближенного характера расчета и сам факт существования дальнего действующего отталкивания, и закон изменения потенциала на больших расстояниях нуждаются в экспериментальном подтверждении и уточнении.

Для изучения дальнего действующего взаимодействия особый интерес представляют эксперименты по упругому рассеянию метастабильных и нормальных атомов при низких температурах.

Первое экспериментальное определение коэффициента диффузии метастабильных атомов гелия в собственном газе для  $300^\circ\text{K}$  принадлежит Эббинхаузу<sup>13</sup>. Косвенным путем Бионди<sup>14</sup> также получил значение коэффициента диффузии при комнатной температуре. Прямое экспериментальное измерение коэффициента диффузии при комнатной и азотной температурах было сделано Фелпсом и Молнаром<sup>15,16</sup>. Диффузия метастабильных атомов гелия-4 и гелия-3 во всем интервале температур от  $4,2^\circ\text{K}$  до  $300^\circ\text{K}$  изучена в работах<sup>17,7,8</sup>. Полное сечение рассеяния возбужденных атомов гелия измерено методом молекулярного пучка в работах<sup>18-22</sup>. Сечение процесса (1,1) с передачей возбуждения впервые было измерено в работе Коулгрова и др.<sup>23</sup> при комнатной температуре. В широком интервале температур сечение передачи возбуждения исследовано теми же авторами в работе<sup>24</sup>. Гринхоу<sup>25</sup> также измерил это сечение при комнатной температуре. В работе Бендта<sup>26</sup> определен коэффициент самодиффузии нормальных атомов гелия-3 в гелии-4 в интервале температур от  $2^\circ$  до  $500^\circ\text{K}$ . Данные Бендта позволяют вычислить геометрическое сечение самодиффузии нормальных атомов гелия.

В настоящем обзоре обсуждаются и сравниваются между собой результаты теоретических и экспериментальных исследований сечений упругих процессов с точки зрения восстановления потенциала взаимодействия метастабильных и нормальных атомов гелия.

## 2. ОСНОВНЫЕ СООТНОШЕНИЯ КВАНТОВОЙ ТЕОРИИ РАССЕЯНИЯ

Сечения рассеяния различных процессов определяются амплитудой рассеяния  $f$ . Квантовомеханическое выражение для амплитуды  $f$  должно быть найдено с учетом свойств симметрии сталкивающихся атомов. Квантовая теория рассеяния идентичных атомов в невозбужденном состоянии содержится в известных работах Мессии и др.<sup>1-5</sup>. Приведем результаты вычисления амплитуды и дифференциального сечения рассеяния для возбужденных и нормальных атомов при наличии двух потенциалов взаимодействия<sup>3,6</sup>.

При столкновении возбужденного и нормального атомов гелия принцип тождественности частиц применим только к ядрам. В случае гелия-4, ядра которого не имеют спина и описываются статистикой Бозе — Эйнштейна, волновая функция системы  $\Phi_{B,-2}$  должна быть симметрична

относительно перестановки ядер, т. е.

$$\Phi_{B,-\vartheta} = \Phi_+. \quad (2,1)$$

Индекс «+» означает симметризацию волновой функции по координатам ядер. Аналогичное соотношение справедливо и для амплитуд рассеяния этих функций. Вероятность рассеяния пропорциональна дифференциальному сечению

$$|f_{B,-\vartheta}|^2 = |f_+|^2, \quad (2,2)$$

где  $f_+$  — амплитуда рассеяния функции  $\Phi_+$ .

В случае гелия-3, ядра которого обладают спином  $1/2$  и подчиняются статистике Ферми — Дирака, полная волновая функция  $\Phi_{\Phi,-\text{д}}$  антисимметрична относительно перестановки ядер. Эта функция конструируется обычным способом из произведений спиновых и координатных функций:

$$\Phi_{\Phi,-\text{д}} = \chi_- \Phi_+ + \chi_+ \Phi_-, \quad (2,3)$$

где  $\chi_+$  и  $\chi_-$  — симметричная и антисимметричная по ядрам спиновые функции, а  $\Phi_-$  — координатная функция, антисимметричная относительно перестановки ядер. Согласно Мотту и Мессии <sup>4</sup> дифференциальное сечение рассеяния неполяризованных атомов гелия-3 выражается через амплитуды  $f_+$  и  $f_-$  формулой

$$|f_{\Phi,-\text{д}}|^2 = \frac{1}{4} |f_+|^2 + \frac{3}{4} |f_-|^2. \quad (2,4)$$

При наличии двух потенциалов взаимодействия,  $V_S(R)$  и  $V_A(R)$ , полную волновую функцию  $\Phi$  системы идентичных атомов можно представить в форме <sup>6</sup>

$$\Phi = \varphi_S \psi_S(R) + \varphi_A \psi_A(R); \quad (2,5)$$

здесь  $\varphi_S$  и  $\varphi_A$  — волновые функции, описывающие электроны в атомах при фиксированном положении ядер,  $\varphi_S$  — симметрична, а  $\varphi_A$  — антисимметрична по отношению к перестановке ядер. Функции  $\psi_S(R)$  и  $\psi_A(R)$  описывают относительное движение ядер ( $\psi_S$  — симметрична, а  $\psi_A$  — антисимметрична по ядрам) и удовлетворяют уравнениям Шрёдингера с потенциалами взаимодействия  $V_S(R)$  и  $V_A(R)$  соответственно:

$$[\Delta + k^2 - M\hbar^{-2}V_{S,A}(R)]\psi_{S,A} = 0; \quad (2,6)$$

здесь

$$k = \frac{Mv}{2\hbar} \quad (2,7)$$

— волновое число относительного движения атомов гелия с массой  $M$  и относительной скоростью  $v$ .

Амплитуды рассеяния функций  $\psi_S$  и  $\psi_A$  обычным образом связаны с фазами рассеяния парциальных волн:

$$f_S(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) [\exp(2i\beta_l) - 1] P_l(\cos \theta), \quad (2,8)$$

$$f_A(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) [\exp(2i\gamma_l) - 1] P_l(\cos \theta). \quad (2,9)$$

Фазы рассеяния  $\beta_l$  соответствуют потенциалу симметричного состояния  $V_S(R)$ , а  $\gamma_l$  — потенциалу  $V_A(R)$ .

Зная амплитуды рассеяния  $f_S(\theta)$  и  $f_A(\theta)$ , нетрудно найти амплитуды  $f_+(\theta)$  и  $f_-(\theta)$ . Для этого необходимо произвести процедуру симметризации волновой функции, а именно: для  $f_+(\theta)$  надо взять симметричную, а для  $f_-(\theta)$  — антисимметричную по ядрам части полной амплитуды рассеяния:

$$f_S(\theta) + f_A(\theta). \quad (2,10)$$

Перестановка ядер отвечает изменению угла рассеяния  $\theta$  на  $\pi - \theta$ . Симметричная (антисимметричная) часть амплитуды  $f_S(\theta)$  есть

$$\frac{1}{2} [f_S(\theta) \pm f_S(\pi - \theta)], \quad (2,11)$$

а симметричная (антисимметричная) часть амплитуды  $f_A(\theta)$  равна

$$\frac{1}{2} [f_A(\theta) \mp f_A(\pi - \theta)]. \quad (2,12)$$

Изменение знака перед вторым членом в (2,12) обусловлено антисимметрией электронной волновой функции  $\Phi_A$  относительно перестановки ядер. Следовательно, для амплитуд  $f_{\pm}$  получаем формулу

$$f_{\pm}(\theta) = \frac{1}{2} \{ [f_S(\theta) + f_A(\theta)] \pm [f_S(\pi - \theta) - f_A(\pi - \theta)] \}. \quad (2,13)$$

Квадрат модуля этих амплитуд можно представить в форме

$$|f_{\pm}(\theta)|^2 = \frac{1}{4} [|f_S(\theta) + f_A(\theta)|^2 + |f_S(\pi - \theta) - f_A(\pi - \theta)|^2] \pm S(\theta), \quad (2,14)$$

где  $S(\theta)$  — интерференционные слагаемые, содержащие произведения типа  $f_{S,A}(\theta) f_{S,A}(\pi - \theta)$ . Известно <sup>4</sup>, что амплитуды рассеяния  $f_S(\theta)$  и  $f_A(\theta)$  имеют «острый» максимум при малых значениях  $\theta$ , т. е. функции  $f_{S,A}(\theta)$  и  $f_{S,A}(\pi - \theta)$  не перекрываются, а их произведение близко к нулю. По этой причине интерференционными слагаемыми можно пренебречь, а дифференциальные сечения  $|f_+(\theta)|^2$  и  $|f_-(\theta)|^2$  оказываются одинаковыми. Следовательно, равны между собой дифференциальные сечения рассеяния метастабильных атомов гелия-4 и гелия-3:

$$\begin{aligned} |f(\theta)|^2 &= |f_{B.-\Theta}|^2 = |f_{\Phi.-\Delta}|^2 = \\ &= \frac{1}{4} [|f_S(\theta) + f_A(\theta)|^2 + |f_S(\pi - \theta) - f_A(\pi - \theta)|^2]. \end{aligned} \quad (2,15)$$

Первый член в (2,15) можно рассматривать как вероятность прямого упругого рассеяния возбужденных и нормальных атомов; второй член обусловлен различием в потенциалах  $V_S$  и  $V_A$  и описывает процесс рассеяния с передачей возбуждения (1,1).

Знание дифференциального сечения рассеяния позволяет выразить через фазы рассеяния полное сечение, сечение диффузии и сечение передачи возбуждения.

Полное сечение  $Q$  определяется формулой

$$Q = 2\pi \int_0^\pi d\theta \sin \theta |f(\theta)|^2 = 4\pi k^{-2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l, \quad (2,16)$$

где четные фазы  $\delta_{2l} = \beta_{2l}$  определяются потенциалом  $V_S$ , а нечетные фазы  $\delta_{2l+1} = \gamma_{2l+1}$  — потенциалом  $V_A$ .

Диффузионное (транспортное) сечение есть

$$Q_d = 2\pi \int_0^\pi d\theta \sin \theta (1 - \cos \theta) |f(\theta)|^2 = 4\pi k^{-2} \sum_{l=0}^{\infty} (l+1) \sin^2 (\delta_l - \delta_{l+1}). \quad (2,17)$$

Сечение передачи возбуждения  $Q_{tr}$  определяется той частью дифференциального сечения рассеяния (2,15), которая связана с различием потенциалов взаимодействия и перестановкой ядер (второе слагаемое в (2,15)). Дифференциальное сечение передачи возбуждения равно

$$|f_{tr}(\theta)|^2 = \frac{1}{4} |f_S(\pi - \theta) - f_A(\pi - \theta)|^2. \quad (2,18)$$

Сечение передачи  $Q_{tr}$  дается выражением

$$\begin{aligned} Q_{tr} &= 2\pi \int_0^\pi d\theta \sin \theta |f_{tr}(\theta)|^2 = \frac{\pi}{2} \int_0^\pi d\theta \sin \theta |f_S(\theta) - f_A(\theta)|^2 = \\ &= \pi k^{-2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2(\beta_l - \gamma_l). \end{aligned} \quad (2,19)$$

Все сечения ( $Q$ ,  $Q_d$  и  $Q_{tr}$ ) однозначно определяются фазами рассеяния  $\beta_l$  и  $\gamma_l$ , которые в свою очередь связаны с видом потенциалов взаимодействия  $V_S$  и  $V_A$ .

### 3. ПОТЕНЦИАЛЫ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

Потенциалы взаимодействия метастабильных и нормальных атомов  $^3\Sigma_u^+$  и  $^3\Sigma_g^+$  состояний были вычислены Бэкингом и Далгарно<sup>10</sup> в первом порядке теории возмущений с помощью метода Гайтлера — Лондона. Они получили следующую формулу для энергии взаимодействия:

$$V_{S,A} = \frac{H^{(1)} - 2H^{(2)} \pm (H^{(3)} - 2H^{(4)})}{I^{(1)} - 2I^{(2)} \pm (I^{(3)} - 2I^{(4)})}, \quad (3,1)$$

где  $H^{(1)}$  — усредненная энергия кулоновского взаимодействия между электронами и ядрами,  $H^{(2)}$  — энергия обменного взаимодействия вследствие обмена электронами,  $H^{(3)}$  — обменная энергия при обмене ядрами,  $H^{(4)}$  — обменная энергия при одновременном обмене электронами и ядрами;  $I^{(k)}$  — соответствующие нормировочные интегралы. В работе<sup>10</sup> приведены значения величин  $H^{(k)}$  и  $I^{(k)}$  в зависимости от расстояния между ядрами. Слагаемое с  $H^{(3)}$  за счет чисто ядерного обмена имеет значение только на малых расстояниях и приводит к появлению минимума при  $R \approx 2a_0$ . В области расстояний  $R > 2a_0$  им можно пренебречь. На этих же расстояниях кулоновская энергия  $H^{(1)}$  оказывается существенно меньше энергии электронного обмена  $2H^{(2)}$  вследствие сильной экранировки ядер электронами. Различие между потенциалами  $V_S$  и  $V_A$  при  $R > 2a_0$  вызвано слагаемым  $H^{(4)}$ . Для симметричного потенциала члены  $H^{(2)}$  и  $H^{(4)}$  складываются и дают отталкивательное взаимодействие. Для антисимметричного потенциала конкуренция этих двух членов, входящих с разными знаками, приводит к появлению максимума дальнего действующего отталкивания. По расчетам Бэкинга и Далгарно высота «горба» в максимуме при  $R = 4a_0$  составляет 0,29 эв. Убывание потенциалов дальнего действующего отталкивания описывается функцией

$$V_{S,A}(R) \sim aR^2 \exp\left(-1,18 \frac{R}{a_0}\right) \pm bR \exp\left(-1,87 \frac{R}{a_0}\right). \quad (3,2)$$

Начиная с расстояния  $7a_0$ , второе слагаемое в (3,2) несущественно (величина  $H^{(4)}$  в (3,1) пренебрежимо мала) и оба потенциала  $V_S$  и  $V_A$  практически совпадают. В этой области потенциалы также хорошо аппроксимируются степенной зависимостью вида

$$V_{S,A}(R) = \text{const} \cdot R^{-6}. \quad (3,3)$$

На рис. 1 приведены зависимости этих потенциалов взаимодействия от  $R$ . В этой же работе Бэкингема и Далгарно обсуждаются поправки второго приближения к энергии взаимодействия за счет ван-дер-ваальсовых сил. Ван-дер-ваальсовы силы играют существенную роль на расстояниях  $R > 4a_0$  и определяются поляризуемостью атомов. Так как поляризуемость метастабильных атомов не известна с достаточной точностью, авторы построили потенциальные кривые для двух значений ван-дер-ваальсовой энергии:  $-10R^{-6}$  и  $-20R^{-6}$  (в ат. ед. \*)). С учетом энергии  $-20R^{-6}$  максимум отталкивания оказался равным  $0,146$  эв и расположен при  $R = 4,25a_0$ .

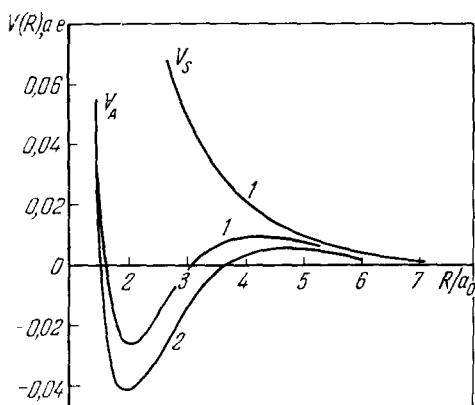


Рис. 1. Потенциалы взаимодействия метастабильного ( $2^3S$ ) и нормального ( $1^1S$ ) атомов гелия.

1 — потенциалы, рассчитанные Бэкингом и Далгарно в первом приближении (Б.—Д.)<sup>6</sup>; 2 — потенциал  $V_A(R)$  согласно Пошусте и Матсену (П.—М.)<sup>12</sup>.

Работа Бэкингема и Далгарно вызвала интерес и стимулировала дальнейшие теоретические исследования. Наиболее детальные вычисления потенциалов взаимодействия были предприняты Матсенем с сотрудниками<sup>11,12</sup>. В отличие от работы<sup>10</sup>, они использовали вариационный метод расчета. В работе<sup>11</sup> было подтверждено существование максимума на потенциальной кривой  $V_A(R)$ , его высота оценена в  $0,19$  эв при  $R = 4,5a_0$ . Авторы работы<sup>11</sup> связывают отличие от результатов Бэкингема и Далгарно с использованием лучшей аппроксимации для волновых функций. В более поздней работе Пошусты и Матсена<sup>12</sup> приводятся уточненные данные

расчета  $V_A(R)$  до  $R = 6a_0$ . Согласно<sup>12</sup> высота максимума равна  $0,138$  эв при  $R = 4,5a_0$  \*). На рис. 1 показан потенциал взаимодействия Пошусты и Матсена. Отметим, что высота максимума, оцененная в<sup>10</sup> с учетом второго приближения для  $V_A(R)$ , неплохо согласуется с расчетом Пошусты и Матсена<sup>12</sup>. Совсем недавно Далгарно и его сотрудники сделали новый расчет статической поляризуемости атомов гелия в состояниях  $1^1S$ ,  $2^3S$  и др.<sup>39</sup>. Используя результаты этих расчетов, они нашли константу ван-дер-ваальсового взаимодействия  $-CR^{-6}$  метастабильного и нормального атомов гелия, которая оказалась равной  $C = 29,1$  а. е. Это значение постоянной  $C$  больше тех, которые использовались при вычислении потенциалов взаимодействия  $V_S(R)$  и  $V_A(R)$  в работе<sup>10</sup>. Увеличение ван-дер-ваальсового взаимодействия должно привести к некоторому понижению потенциальной кривой взаимодействия в области больших расстояний по сравнению с потенциалом в<sup>10</sup>. Асимптотическое поведение энергии взаимодействия метастабильных и нормальных атомов инертных газов на больших расстояниях рассмотрено в работах Б. М. Смирнова и др.<sup>27,9,40</sup>. Величины энергии взаимодействия по данным различных авторов приведены в таблице на стр. 435.

Факт существования максимума дальнего действующего отталкивания для гелия оказался сначала неожиданным. Однако в последние годы

\*) Атомная единица энергии  $e^2/a_0 = 27,21$  эв, а единица длины  $a_0 = 0,53 \cdot 10^{-8}$  см.

\*\*) Следует указать, что на графике и в таблицах работы<sup>12</sup> высота максимума равна  $0,138$  эв, в то время как в тексте приводится другое значение —  $0,08$  эв.

Энергия взаимодействия метастабильных ( $2^3S$ ) и нормальных атомов гелия по данным различных авторов (в ед.  $10^{-3}$  а. е. = 0,0272 эв)

| R,<br>ед. $a_0$ | $V_A$                                           |                       |                                               |                                               | $V_S$                 |                                               |
|-----------------|-------------------------------------------------|-----------------------|-----------------------------------------------|-----------------------------------------------|-----------------------|-----------------------------------------------|
|                 | Б. — Д. <sup>10</sup> ,<br>1-е прибли-<br>жение | П. — М. <sup>12</sup> | асимпто-<br>тика<br>П. — С. — Ч. <sup>9</sup> | эмпириче-<br>ский потен-<br>циал <sup>8</sup> | Б. — Д. <sup>10</sup> | эмпириче-<br>ский потен-<br>циал <sup>8</sup> |
| 4,0             | 10,35                                           | 3,2                   | 13                                            | 3,2                                           | 21,13                 | 21                                            |
| 4,5             |                                                 | 5,1                   |                                               | 5,1                                           |                       |                                               |
| 5,0             | 6,11                                            | 5,05                  | 5,4                                           | 5,05                                          | 8,1                   | 8,1                                           |
| 5,5             |                                                 | 4,3                   |                                               | 4,3                                           |                       | 5,4                                           |
| 6,0             | 3,00                                            | 3,2                   | 2,1                                           | 3,2                                           | 3,3                   | 3,3                                           |
| 6,5             |                                                 |                       |                                               | 1,6                                           |                       | 1,75                                          |
| 7,0             | 1,33                                            |                       | 0,78                                          | 0,6                                           | 1,4                   | 0,6                                           |
| 7,5             |                                                 |                       |                                               | 0,25                                          |                       | 0,25                                          |
| 8,0             | 0,57                                            |                       | 0,28                                          | 0,1                                           | 0,6                   | 0,1                                           |
| 8,5             |                                                 |                       |                                               | 0,05                                          |                       | 0,05                                          |
| 9,0             | 0,23                                            |                       | 0,1                                           |                                               | 0,23                  |                                               |
| 10,0            | 0,08                                            |                       | 0,04                                          |                                               | 0,08                  |                                               |

подобные максимумы отталкивания были теоретически предсказаны и для других возбужденных состояний молекулы гелия и молекулы водорода<sup>28, 29</sup>. Наличие такого максимума, по-видимому, возможно и для возбужденных состояний молекулы неона<sup>30</sup>. Можно думать, что потенциальный барьер на кривой взаимодействия существует и для возбужденных состояний многих молекул, состоящих из одинаковых атомов.

#### 4. ЭМПИРИЧЕСКИЙ ПОТЕНЦИАЛ. РАСЧЕТ СЕЧЕНИЙ УПРУГИХ ПРОЦЕССОВ

Потенциальный барьер затрудняет образование молекулы  $He_2^*$  и оказывает существенное влияние на процессы рассеяния метастабильных и нормальных атомов. Поэтому важно иметь надежные данные о величине дальнего действующего отталкивания. Вследствие приближенного характера теоретических расчетов большой интерес представляет решение «обратной» задачи — восстановление потенциальной кривой по экспериментальным данным.

В самых грубых чертах идея восстановления потенциала заключается в следующем. По экспериментальным данным находится сечение рассеяния при данной средней энергии (температуре). Величина сечения определяет радиус рассеяния  $a$ , а энергия частиц — высоту потенциала при этом значении радиуса. Зная зависимость сечения от энергии (температуры), можно найти потенциальную кривую. Очевидно, что таким способом можно восстановить только потенциалы отталкивания. В действительности же потенциал отталкивания не может быть восстановлен столь простым путем. Это связано прежде всего с тем, что столкновение имеет нелокальный характер: рассеяние связано с целой областью на потенциальной кривой. Нелокальность проявляется уже в самом единичном акте рассеяния, в виде изменения скорости частиц при взаимодействии. Кроме того, нелокальность возникает за счет распределения частиц по скоростям, а в квантовом случае — вследствие принципа неопределенности. На самом деле, для восстановления потенциала необходимо, используя те или иные эвристические соображения, подобрать такую потенциальную

функцию, чтобы рассчитанные с ее помощью сечения и их температурная зависимость совпадали с экспериментом. В случае гелия теоретически вычисленные потенциалы находятся в полуколичественном согласии с экспериментом. Экспериментальные данные позволяют исправить и уточнить потенциал взаимодействия.

Потенциалы дальнего действия отталкивания  $V_A(R)$  и  $V_S(R)$  были восстановлены по температурной зависимости коэффициента и сечения диффузии в наших работах <sup>7, 8</sup>. Построенный эмпирический потенциал в области больших расстояний

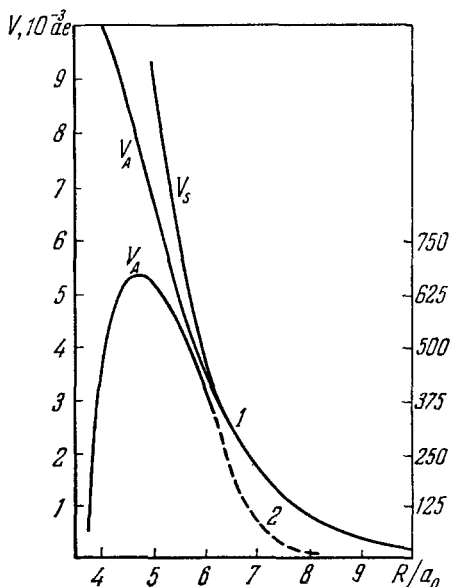


Рис. 2. Дальнедействующая часть потенциала взаимодействия He ( $2^3S$ ) — He ( $1^1S$ ).

1 — потенциал Бэкингема и Далгарно; 2 — эмпирический потенциал. Температурная шкала справа вычислена по соотношению  $\mu v_d^2 = 2V(R)$ , где  $\mu = M/2$  — приведенная масса,  $v_d = (5\kappa T/\mu)^{1/2}$  — диффузионная скорость.

в диффузии проявляются гораздо слабее, чем в полном сечении. Это связано с тем, что в сечение диффузии малые углы рассеяния не дают заметного вклада из-за множителя  $(1 - \cos \theta)$  (см. (2,17)). Кроме того, роль квантовых эффектов симметрии, связанных с передачей возбуждения, мала при низких температурах, когда различие между потенциалами  $V_A(R)$  и  $V_S(R)$  мало по сравнению с каждым из них. Для полного сечения и сечения передачи возбуждения квантовые эффекты являются более существенными.

Перейдем теперь к вычислению сечений упругого рассеяния с использованием эмпирического потенциала. Будем исходить из формул квантовой теории рассеяния. Хотя сечение диффузии можно было бы вычислять классически, для единообразия все сечения  $Q$ ,  $Q_d$ ,  $Q_{tr}$  будем рассчитывать по квантовым формулам (2,16), (2,17) и (2,19). Фазы рассеяния определим по квазиклассическим формулам Джеффриса <sup>4</sup>:

$$\delta_l = \int_0^\infty dR \left[ k^2 - \frac{M}{\hbar^2} V(R) - \frac{(l+1/2)^2}{R^2} \right]^{1/2} - \int_0^\infty dR \left[ k^2 - \frac{(l+1/2)^2}{R^2} \right],$$

потенциал в области больших расстояний ( $R > 4a_0$ ) приведен на рис. 2; соответствующие значения энергии даны в таблице. Эмпирический потенциал  $V_A$  в области максимума расходится с потенциалом Бэкингема и Далгарно (Б.—Д.) и совпадает с данными Пошусты и Матсена (П.—М.). Эмпирический потенциал с хорошей точностью следует асимптотике (при  $R > 6a_0$ )

$$V_A(R) \sim AR^2 \exp(-2,04R), \\ A = 21,12 \text{ а. е.}, \quad (4,1)$$

или

$$V_A(R) \sim CR^{-12}, \quad C = 75 \text{ а. е.}$$

Здесь  $R$  выражено в единицах  $a_0$ . Эмпирический потенциал при больших расстояниях спадает круче, чем потенциал Б.—Д. первого приближения. Эксперименты показывают, что различие между  $V_A$  и  $V_S$  не существенно при  $R > 7a_0$ . Потенциал  $V_S$  при  $R < 6a_0$  выбран в соответствии с расчетом Б.—Д. во втором приближении.

Использование диффузионного сечения для восстановления потенциала удобно по той причине, что и квантовые дифракционные эффекты



где  $V(R) = V_S(R)$  для фаз  $\beta_l$  и  $V(R) = V_A(R)$  для фаз  $\gamma_l$ . Нижним пределом интегрирования является наибольший корень подынтегральной функции. Выражение (4,2) справедливо в квазиклассическом приближении, условия применимости которого, как известно, имеют вид

$$a \gg \lambda = \frac{\hbar}{Mv}, \quad aV(a) \gg \hbar v; \quad (4,3)$$

здесь  $a$  — радиус рассеивающего потенциала, а  $V(a)$  имеет порядок величины потенциала в этой области. Для потенциалов взаимодействия нормального и метастабильного гелия, изображенных на рис. 2, условия квазиклассичности выполняются вплоть до скоростей  $v \approx 4 \cdot 10^4$  см·сек<sup>-1</sup>, что примерно соответствует  $T \approx 20^\circ$  К.

Интегрирование в формуле (4,2) проводилось графическим способом для определенных значений  $k$  в интервале от  $k = 1 \cdot 10^8$  см<sup>-1</sup> ( $E = 0,038 \cdot 10^{-3}$  а. е.) до  $k = 1 \cdot 10^9$  см<sup>-1</sup> ( $E = 3,8 \cdot 10^{-3}$  а. е.). На рис. 3 приведена зависимость величины фазы от номера при различных энергиях  $E$ . Видно, что при больших энергиях ( $E \sim 10^{-3}$  а. е.) проявляется различие в фазах  $\gamma_l$  и  $\beta_l$  для разных потенциалов. При малых энергиях заметную величину имеют лишь несколько первых фаз. Число фаз  $l$ ,

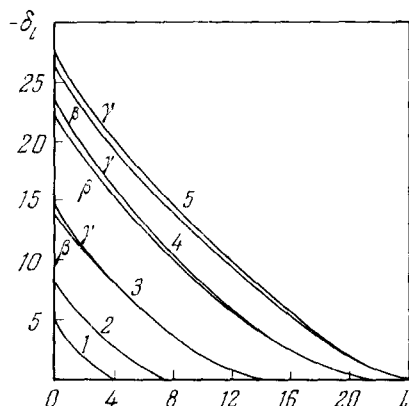


Рис. 3. Зависимость фаз рассеяния от номера при различных энергиях  $E = \hbar^2 k^2 / M$  (в а. е.)

1 —  $E = 0,05 \cdot 10^{-3}$ ; 2 —  $E = 0,15 \cdot 10^{-3}$ ;  
3 —  $E = 0,6 \cdot 10^{-3}$ ; 4 —  $E = 1,6 \cdot 10^{-3}$ ;  
5 —  $E = 2,4 \cdot 10^{-3}$ .

существенных для рассеяния, примерно равно числу парциальных волн, которые укладываются на характерном радиусе рассеяния, т. е.

$$l \approx ka. \quad (4,4)$$

Поэтому при вычислении сечений в области низких энергий можно ограничиться несколькими фазами, в то время как при больших энергиях число фаз возрастает.

По известным фазам рассеяния для эмпирических потенциалов были вычислены полное сечение рассеяния  $Q$  (2,16), диффузионное сечение  $Q_d$  (2,17) и сечение

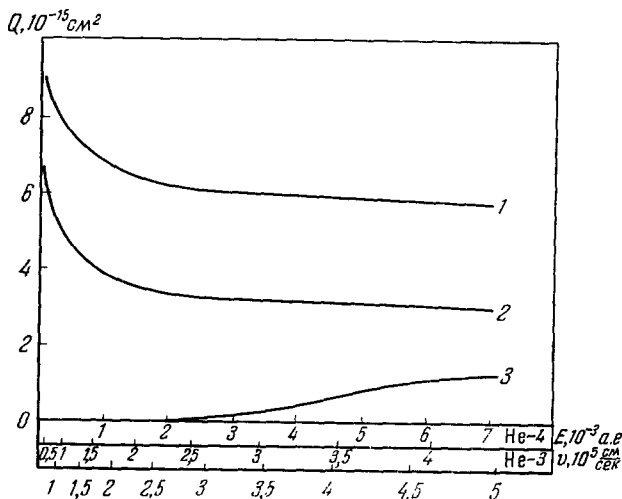


Рис. 4. Сечения рассеяния метастабильного ( $2^3S$ ) и нормального атомов гелия.

1 — полное сечение  $Q$ ; 2 — сечение диффузии  $Q_d$ ; 3 — сечение передачи возбуждения  $Q_{tr}$ .

сечение передачи возбуждения  $Q_{tr}$  (2,19). Кривые зависимости всех этих сечений от энергии приведены на рис. 4. Полное и диффузионное сечения имеют довольно большую величину:  $Q$  меняется от  $0,6 \cdot 10^{-14}$  до  $0,9 \cdot 10^{-14}$  см<sup>2</sup>, а  $Q_d$  от  $0,3 \cdot 10^{-14}$  до  $0,7 \cdot 10^{-14}$  см<sup>2</sup>. Столь значительные сечения рассеяния отражают существование дальнего действующего отталкивания

между метастабильными и нормальными атомами гелия. Возрастание сечений с понижением энергии связано с увеличением эффективного радиуса рассеивающего потенциала. Кривые полного и диффузионного сечений можно с достаточной точностью аппроксимировать для больших скоростей формулой вида

$$Q = \alpha + \frac{\beta}{v}, \quad (4,5)$$

где  $v$  — относительная скорость,  $v = 2\hbar k/M$ .

Для полного сечения

$$\alpha = 5,2 \cdot 10^{-15} \text{ см}^2, \quad \beta = 2,8 \cdot 10^{-10} \text{ см}^3 \text{сек}^{-1}. \quad (4,6)$$

Для диффузионного сечения интерполяционные коэффициенты равны

$$\alpha_d = 2,6 \cdot 10^{-15} \text{ см}^2, \quad \beta_d = 2 \cdot 10^{-10} \text{ см}^3 \text{сек}^{-1}. \quad (4,7)$$

Заметим, что интерполяция вида (4,5) для полного сечения удовлетворительна при  $v \geq 2 \cdot 10^5 \text{ см} \cdot \text{сек}^{-1}$ ; вычисленные значения  $Q(v)$  при малых скоростях возрастают медленнее, чем по формуле (4,5). Для малых скоростей ( $v < 2 \cdot 10^8 \text{ см/сек}$ ) зависимость полного сечения от скорости  $Q(v)$  гораздо лучше аппроксимируется степенной функцией вида

$$Q = C_1 v^{-0,18} \text{ (км/сек)}, \quad C_1 = 8 \cdot 10^{-15} \text{ см}^2. \quad (4,8)$$

Интерполяция (4,5) для диффузионного сечения является достаточно хорошей даже при малых скоростях благодаря более быстрому возрастанию  $Q_d$  с уменьшением скорости (см. рис. 4). Значения  $\alpha$  представляют собой предельные значения сечений рассеяния при больших скоростях.

Сечение передачи возбуждения начинает возрастать при энергиях выше  $0,6 \cdot 10^{-3}$  а. е. и имеет существенно меньшую величину, чем диффузионное и полное сечения. Этот факт отражает совпадение потенциалов  $V_S$  и  $V_A$  на больших расстояниях из-за наличия «горба» на потенциале  $V_A$ . Величина  $Q_{tr}$  достигает максимума при энергиях порядка  $4 \cdot 10^{-3}$  а. е. ( $\sim 0,1 \text{ эв}$ ); при этом  $Q_{tr} \approx 1,3 \cdot 10^{-15} \text{ см}^2$ .

Между различными сечениями существуют простые предельные соотношения при малых и больших энергиях. В области малых значений  $k$  основную роль играет  $s$ -рассеяние ( $l = 0$ ). В формулах (2,16) и (2,17) следует оставить только первые слагаемые с  $l = 0$ . Нулевая фаза  $\delta_0$  асимптотически равна  $\delta_0 = -ka$ , где  $a$  — эффективный радиус рассеяния при предельно малых энергиях. Из формул (2,16) и (2,17) получаем следующие предельные соотношения для полного и диффузионного сечений:

$$Q \doteq Q_d = 4\pi a^2, \quad (4,9)$$

т. е. при  $k \rightarrow 0$  ( $ka \ll 1$ ) полное и диффузионное сечения совпадают. Для рассматриваемых потенциалов  $V_A$  и  $V_S$  условие  $ka \ll 1$  выполняется при скоростях атомов  $v \ll 10^4 \text{ см} \cdot \text{сек}^{-1}$ . Сечение передачи возбуждения в этой области энергий заведомо равно нулю, поскольку фазы  $\beta_l$  и  $\gamma_l$  одинаковы.

Начиная со скоростей порядка  $v \geq 10^5 \text{ см} \cdot \text{сек}^{-1}$  выполняется другой предельный случай  $ka \gg 1$ . В рассеяние дают вклад все парциальные волны с  $l \leq ka$ . Для выяснения связи предельных значений сечений  $Q$ ,  $Q_d$  и  $Q_{tr}$  рассмотрение можно проводить в приближении прямоугольных барьеров с эффективными радиусами  $a_A(v)$  и  $a_S(v)$ , зависящими от скорости частиц. При больших значениях  $ka$  фазы рассеяния  $\beta_l$  и  $\gamma_l$  велики по сравнению с единицей (рис. 5). Рассмотрим предельное значение полного сече-

ния (2,16). Квадраты синусов в этом выражении можно заменить средним значением, равным  $1/2$ , а суммирование по  $l$  — интегрированием. Верхний предел интегрирования для четных фаз равен  $ka_S$ , а для нечетных  $ka_A$ . В результате получим

$$Q = \pi (a_S^2 + a_A^2). \quad (4,10)$$

Предельное значение сечения диффузии можно вычислить аналогичным способом в той области энергий, где не только сами фазы велики, но и разности фаз типа  $\beta_l - \gamma_{l+1}$  много больше единицы; тогда

$$Q_d = \frac{\pi}{2} (a_S^2 + a_A^2). \quad (4,11)$$

Формула (4,11) справедлива, если

$$k|a_S - a_A| \gg 1. \quad (4,12)$$

Действительно, для прямоугольного барьера фазы асимптотически равны  $\delta_l = -ka - l\pi/2$ , а разности типа  $\delta_l - \delta_{l+1} = \pi/2 \pm k(a_S - a_A)$ . Поэтому в той области энергий, где различие между потенциалами является малым, соотношение (4,11) может нарушаться. Там, где выполняется неравенство (4,12), между сечениями  $Q$  и  $Q_d$  существует следующая связь:

$$Q = 2Q_d. \quad (4,13)$$

Наконец, в той же области энергий, когда выполняется условие (4,12), для сечения передачи получаем

$$Q_{tr} = \frac{\pi}{4} (a_S^2 + a_A^2) = \frac{1}{2} Q_d \pm \frac{1}{4} Q. \quad (4,14)$$

Предельные соотношения (4,14) показывают, что сечение диффузии в два раза больше сечения передачи возбуждения и в два раза меньше полного сечения. Как известно, различие между  $Q$  и  $Q_d$  связано с квантовыми эффектами — вкладом рассеяния на малые углы в полное сечение. Соотношения (4,14) справедливы при энергии частиц как меньших, так и больших высоты «горба» на потенциале  $V_A$ . Однако эффективный радиус рассеяния  $a_A$  уменьшается при энергии, превосходящей высоту «горба». Как видно из рис. 4 и из интерполяционных коэффициентов (4,6) и (4,7), предельные соотношения (4,14) хорошо выполняются для всех трех сечений. Действительно, при больших  $k$   $Q = 5,2 \cdot 10^{-15} \text{ см}^2$ ,  $Q_d = 2,6 \cdot 10^{-15} \text{ см}^2$ , а  $Q_{tr} = 1,3 \cdot 10^{-15} \text{ см}^2$ .

Мы провели также численные расчеты с использованием потенциала Бэкингема и Далгарно. Результаты для сечений диффузии и передачи возбуждения совпали с соответствующими вычислениями работы <sup>6</sup> \*). Сечения  $Q_d$  и  $Q_{tr}$  с потенциалом Б.—Д., как и следовало ожидать, были больше сечений, вычисленных по эмпирическому потенциалу, однако их энергетические зависимости оказались подобными. Для полного сечения  $Q$

\*) В работе <sup>6</sup> для сечения  $Q_d$  использовалась формула с коэффициентом, вдвое меньшим, чем в (2,17). Это привело к уменьшению результатов соответствующих численных расчетов. Везде в дальнейшем при сравнении зависимости  $Q_d(v)$  для разных потенциалов взаимодействия мы увеличиваем данные работы <sup>6</sup> для диффузионного сечения в два раза.

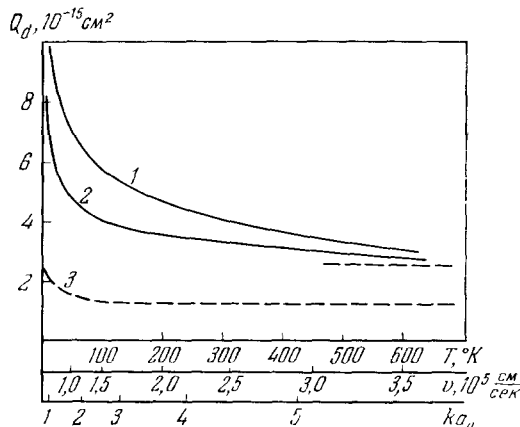


Рис. 5. Диффузионное сечение рассеяния  $Q_d$ . 1 — расчет с потенциалом Б.—Д.; 2 — расчет с эмпирическим потенциалом; 3 — геометрическое сечение самодиффузии (из <sup>26</sup>).

в результате проверки были обнаружены существенные расхождения как в величинах, так и в энергетической зависимости  $Q(\nu)$ . По-видимому, в численных расчетах полного сечения в работе <sup>6</sup> была допущена ошибка. Вероятно, этим объясняется то, что предельные значения сечений по данным <sup>6</sup> не удовлетворяют соотношениям (4,14). На рис. 5 показаны сечения диффузии, вычисленные для потенциала Бэкингема и Далгарно и эмпирического потенциала. Для сравнения на этом же рисунке приведено диффузионное сечение нормальных атомов гелия по данным работы Бендта <sup>23</sup>.

##### 5. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ДИФфуЗИИ МЕТАСТАБИЛЬНЫХ АТОМОВ ГЕЛИЯ-4 и ГЕЛИЯ-3 В ГАЗЕ НОРМАЛЬНЫХ АТОМОВ

Диффузионное сечение можно определить при экспериментальном изучении диффузии. Коэффициент диффузии метастабильных атомов измеряется по кинетике распада метастабильного состояния  $2^3S$  в послесвечении разряда в гелии. При

достаточно низких давлениях и малых плотностях газа разрушение метастабильных атомов в основном происходит в результате их диффузии к стенкам сосуда. Изменение концентрации метастабильных атомов  $M(t)$  описывается диффузионным уравнением с коэффициентом  $D$

$$\frac{\partial M}{\partial t} + D\Delta M = 0. \quad (5.1)$$

Будем считать, что на поверхности разрядного сосуда происходит дезактивация метастабильного состояния, поэтому справедливо граничное условие

$$M_{\text{пов}} = 0. \quad (5.2)$$

Изменение во времени усредненной по объему концентрации следует экспоненциальной зависимости

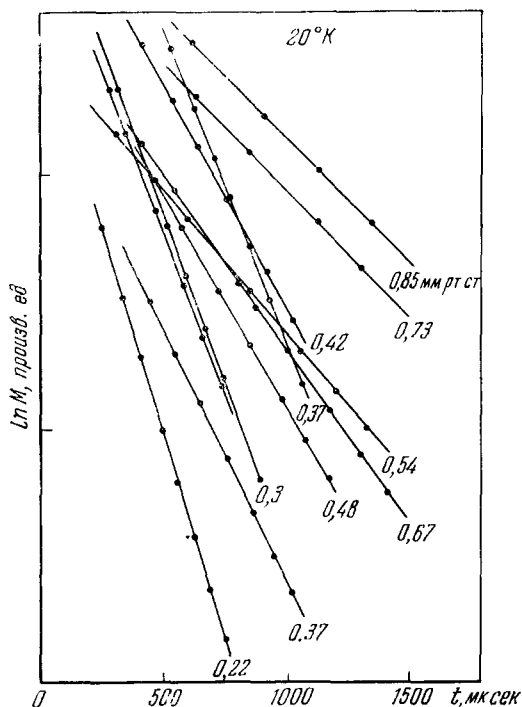
$$M(t) = M_0 \exp\left(-\frac{D}{\lambda^2} t\right), \quad (5.3)$$

где  $M_0$  — начальная концентрация метастабильных атомов,

Рис. 6. Зависимость концентрации метастабильных атомов  $M$  от времени (в послесвечении).  $T = 20^\circ \text{K}$ , давления указаны в приведенных единицах  $P = P_{300} T/300$  мм рт. ст.

$\lambda$  — «диффузионная длина» сосуда. Для цилиндрического сосуда радиуса  $\rho$  и длины  $L$  имеем  $\lambda = [(2,4/\rho)^2 + (\pi/L)^2]^{-1/2}$ , для сферического сосуда  $\lambda = \rho/\pi$ .

Концентрация метастабильных атомов в состоянии  $2^3S$  измеряется по величине резонансного поглощения линии  $3889 \text{ \AA}$  от внешнего источника. При малых оптических плотностях концентрация пропорциональна величине интегрального поглощения резонансной линии;  $M \sim \Delta I/I_0$ , где  $I_0$  — интенсивность в отсутствие поглощения,  $\Delta I = I_0 - I$  — величина поглощения. Схема экспериментальной установки и другие подробности эксперимента описаны в работах <sup>7, 31, 32</sup>.



Точность приводимых ниже экспериментальных результатов определяется погрешностями измерения полного поглощения ( $\pm 5\%$ ) и неопределенностью температуры газа ( $\pm (5 \div 8)\%$  при низких температурах и  $\pm 3\%$  при комнатной температуре). Столь большая неточность в температуре связана с нагревом газа за время импульса возбуждения. Поэтому средняя ошибка в определении  $D$  составляет примерно  $\pm (5 \div 10)\%$ , причем более вероятно несколько меньшее значение коэффициента диффузии.

Разрушение метастабильных атомов было изучено в гелии-3 и в гелии-4 для интервала температур

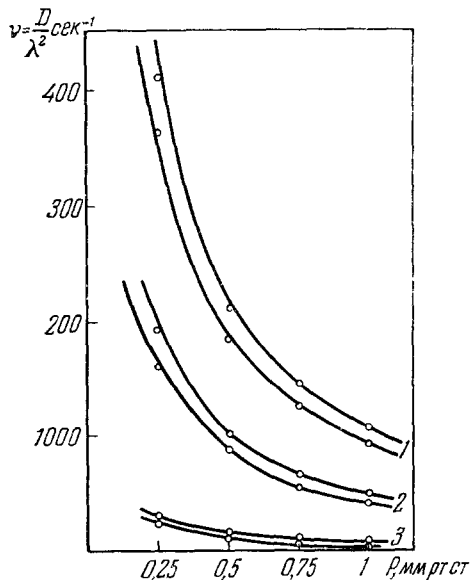


Рис. 7. Зависимость диффузионной частоты столкновений от давления (в приведенных единицах  $P = P_{300}T/300$ ) для гелия-3 (верхние кривые) и гелия-4 (нижние кривые) ( $\lambda^2 = 0,5 \text{ см}^2$ ).

1 —  $T = 300^\circ \text{K}$ ,  $DP = 540$  (He-3),  $DP = 470$  (He-4); 2 —  $T = 77^\circ \text{K}$ ,  $DP = 250$  (He-3),  $DP = 210$  (He-4); 3 —  $T = 4^\circ \text{K}$ ,  $DP = 32,5$  (He-3),  $DP = 28$  (He-4).  $\circ$  — экспериментальные данные, — кривые  $DP = \text{const}$ .

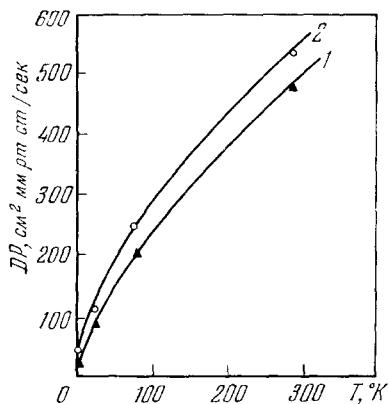


Рис. 8. Зависимость от температуры коэффициента диффузии метастабильных атомов гелия-3 и гелия-4 в собственном газе.

$\circ$ ,  $\triangle$  — экспериментальные данные; — кривые  $D \propto T^{2/3}$ ; 1 — He-4, 2 — He-3.

$300 \div 4^\circ \text{K}$  и интервала давлений  $0,2\text{--}5 \text{ мм рт. ст.}$  (Давления всюду даны в приведенных единицах  $P = P_{300}T/300$ .) Наблюдаемые экспериментально зависимости  $M(t)$  в послесвечении при этих условиях представляют собой экспоненты. Это иллюстрируется рис. 6, на котором в полулогарифмическом масштабе изображены зависимости  $M(t)$  при температуре жидкого водорода и различных давлениях. Наклон прямых имеет смысл диффузионной частоты столкновений  $\nu$ . В соответствии с формулой (5,3) величина  $\nu$  связана с коэффициентом диффузии соотношением

$$\nu = \frac{D}{\lambda^2}. \quad (5,4)$$

Правильность такой интерпретации экспериментальных данных подтверждается также тем, что зависимость показателя экспоненты от давления соответствует зависимости коэффициента диффузии от  $P$ . На рис. 7 показана зависимость частоты столкновений от давления при разных температурах для гелия-3 и гелия-4. Экспериментальные точки укладываются на гиперболы  $\nu P = \text{const}$ , т. е. для каждой температуры находятся  $DP = \text{const}$ . Значения этих констант приведены в подписи к рис. 7. Таким способом была измерена температурная зависимость величины  $DP$  для гелия-3 и гелия-4. На рис. 8 представлена эта зависимость.

Экспериментальные точки укладываются на степенную зависимость вида

$$D \propto T^q, \quad (5,5)$$

$$q = 0,65 \pm 0,06.$$

Коэффициенты диффузии для гелия-3 и гелия-4 во всем исследованном интервале температур отличаются постоянным множителем

$$\frac{D(\text{He-3})}{D(\text{He-4})} = 1,15. \quad (5,6)$$

Этот множитель равен квадратному корню из отношения масс изотопов.

Перейдем к обсуждению экспериментальных данных и сопоставлению их с теоретическими результатами по сечению диффузии. Согласно кинетической теории Чепмена и Энскога (см. <sup>33</sup>) коэффициент диффузии  $D$  выражается через диффузионное сечение следующим образом:

$$D = \frac{3\pi}{32} \left( \frac{16\kappa T}{\pi M} \right)^{1/2} \frac{1}{N \bar{Q}_d(T)}; \quad (5,7)$$

здесь  $N$  — плотность частиц, а  $\bar{Q}_d(T)$  — усредненное сечение диффузии, равное

$$Q_d(T) = \left( \frac{M}{4\kappa T} \right)^3 \int_0^\infty dv v^5 Q_d(v) \exp \left( -\frac{Mv^2}{4\kappa T} \right). \quad (5,8)$$

Как видно из выражения (5,8), подинтегральная функция

$$f(v) = v^5 \exp \left( -\frac{Mv^2}{4\kappa T} \right) \quad (5,9)$$

имеет максимум при значении  $v$ , равном характерной диффузионной скорости

$$v_d = \left( \frac{10\kappa T}{M} \right)^{1/2}. \quad (5,10)$$

Если сечение  $Q_d(v)$  постоянно или слабо зависит от  $v$ , то в выражении (5,8) величину  $Q_d(v)$  можно вынести за знак интеграла в точке  $v = v_d$  (или при энергии  $E_d = 5\kappa T/2$ ). Поэтому диффузионная скорость определяет температурную шкалу при переходе от зависимости  $Q_d(v)$  к  $\bar{Q}_d(T)$  (эта температурная шкала приведена на рис. 2 и 5).

Используя интерполяционную формулу (4,5) для сечения диффузии  $Q_d(v)$ , для  $\bar{Q}_d(T)$  получим

$$\bar{Q}_d(T) = \alpha_d + \frac{3}{4} \beta_d \left( \frac{16\kappa T}{\pi M} \right)^{-1/2}. \quad (5,11)$$

Выражение (5,11) с точностью до нескольких процентов совпадает со значением  $Q_d(v)$  при  $v = v_d$ . Подставляя усредненное значение  $\bar{Q}_d(T)$  в (5,7), запишем формулу

$$DN = \frac{3\pi}{32} \frac{(16\kappa T/\pi M)^{1/2}}{\alpha_d + 0,75\beta_d (16\kappa T/\pi M)^{-1/2}}. \quad (5,12)$$

Если выразить концентрацию  $N$  через приведенное давление  $P$  и подставить значения численных констант, то (5,12) можно представить в форме

$$DP = 0,31 \cdot 10^{-16} DN = \frac{36,5T}{5,75 + T^{1/2}}, \quad (5,13)$$

где  $T$  — в градусах по шкале Кельвина. Выражение (5,13) позволяет рассчитать теоретическую температурную зависимость коэффициента диффузии для эмпирического потенциала. Интерполяционная формула

типа (4,5) для сечения  $Q_d$  с потенциалом Б.—Д. (см. рис. 5) имеет коэффициенты  $\alpha_d = 2,6 \cdot 10^{-15} \text{ см}^2$ ,  $\beta_d = 4 \cdot 10^{-10} \text{ см}^2 \text{сек}^{-1}$ . В этом случае температурная зависимость коэффициента диффузии описывается выражением

$$DP = \frac{36,5T}{11,5 + T^{1/2}}. \quad (5,14)$$

На рис. 9 проведено сопоставление экспериментальных результатов различных авторов с вычисленными зависимостями коэффициента диффузии от температуры. Видно, что наши экспериментальные данные в пределах ошибки эксперимента хорошо совпадают с вычисленными на основе эмпирического потенциала. Величина  $DP = 470 \text{ см}^2 \text{сек}^{-1} \text{ мм рт. ст.}$ , измеренная Фелпсом<sup>16</sup> при комнатной температуре, не отличается от наших данных. В более ранней работе<sup>15</sup> для  $300^\circ \text{K}$  было получено значение  $DP = 410 \text{ см}^2 \text{сек}^{-1} \text{ мм рт. ст.}$ , а для  $77^\circ \text{K}$   $DP = 130 \text{ см}^2 \text{сек}^{-1} \text{ мм рт. ст.}$  Обе последние величины  $DP$  существенно меньше измеренных нами значений. Как указывает Фелпс, значения  $DP$ , полученные позже в работе<sup>16</sup>, являются более надежными. Значения  $DP$  Эббинхауза и Бионди при  $300^\circ \text{K}$  на 10—15% отличаются от наших, что находится в пределах указанных этими же авторами экспериментальных ошибок.

Из рис. 9 с очевидностью следует, что потенциал Бэкингема и Далгарно первого приближения не может объяснить всю совокупность экспериментальных данных по диффузии метастабильных атомов в собственном газе при низких температурах. По существу, именно эти расхождения привели к необходимости построения эмпирического потенциала, который был выбран так, чтобы экспериментальные и теоретические значения  $DP$  совпадали во всем изученном температурном интервале.

Из указанного выше экспериментального факта, что коэффициенты диффузии изотопов гелия-3 и гелия-4 обратно пропорциональны  $M^{1/2}$ , можно сделать заключение о равенстве средних сечений  $\bar{Q}_d(T)$  (см. (5,7)). Это в свою очередь свидетельствует о равенстве сечений  $Q_d(E)$  для обоих изотопов при одних и тех же энергиях (но не одинаковых скоростях). Тем самым подтверждается теоретический вывод (2,15) о равенстве дифференциальных сечений рассеяния  $|f(\theta)|^2$  при столкновении атомов, ядра которых подчиняются различным статистикам. Кроме того, из этого экспериментального факта следует, что потенциалы взаимодействия для обоих изотопов можно считать одинаковыми. Последний вывод представляется довольно естественным, поскольку потенциалы взаимодействия определяются главным образом обменными и ван-дер-ваальсовым взаимодействиями, не зависящими от массы ядра. Таким образом, опыты

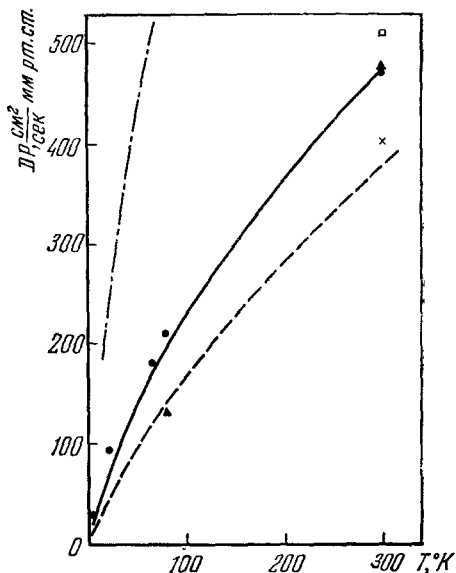


Рис. 9. Сравнение результатов расчета и эксперимента по диффузии метастабильных атомов гелия-4.

— расчет для эмпирического потенциала  $V(R)$  по формуле (5,13); — расчет для потенциала Б.—Д. по формуле (5,14); — для нормальных атомов (из<sup>20</sup>); ● — наши экспериментальные данные<sup>8</sup>; ▲ — данные Фелпса<sup>15</sup>,  $\times$  — эксперимент Эббинхауза<sup>13</sup>; □ — результат Бионди<sup>14</sup>.

с гелием-3 дает дополнительное экспериментальное подтверждение правильности эмпирического потенциала.

В работе Бендта<sup>26</sup> был измерен коэффициент диффузии  $D$  ( $3 \rightarrow 4$ ) изотопа гелия-3 в гелии-4. С помощью формулы

$$D(\text{He-4}) = \left( \frac{2M_3}{M_3 + M_4} \right)^{1/2} D(3 \rightarrow 4) \quad (5,15)$$

Бендт вычислил величины коэффициента самодиффузии  $D$  (He-4). Очевидно, что найденная таким способом величина  $D$  (He-4) не учитывает квантовых эффектов симметрии и при высоких температурах определяется геометрическим сечением самодиффузии:

$$Q_g = \pi d^2 \approx 1,35 \cdot 10^{-15} \text{ см}^2, \quad (5,16)$$

где  $d/2 = 1,04 \text{ \AA}$  — радиус атома гелия. На рис. 8 приведена зависимость  $Q_g$ , а на рис. 9 —  $(DP)_g$ , по данным Бендта. Сечение диффузии метастабильных атомов отличается от геометрического сечения, во-первых, величиной (превосходит геометрическое сечение) и, во-вторых, температурной зависимостью (более сильное возрастание при понижении температуры). При высоких температурах ( $T \sim 600^\circ \text{ K}$ ) сечение  $Q_d$  имеет величину  $2,6 \cdot 10^{-15} \text{ см}^2$ , что почти вдвое превосходит геометрическое сечение нормальных атомов (5,16).

## 6. АНАЛИЗ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ И ТЕОРЕТИЧЕСКИХ РЕЗУЛЬТАТОВ ДЛЯ ПОЛНОГО СЕЧЕНИЯ

Восстановленный из экспериментов по диффузии эмпирический потенциал взаимодействия можно проверить также и по другим опытам: по измерению полного сечения и сечения передачи возбуждения. В этой главе мы обсудим теоретические и экспериментальные результаты для полного сечения рассеяния метастабильных атомов гелия  $2^3S$  с нормальными атомами гелия  $1^1S$ . Сразу следует отметить значительные количественные расхождения экспериментальных данных, полученных разными авторами, — как между собой, так и с результатами расчета.

До последнего времени фактически единственным был расчет, выполненный Бэкингом и Далгарно с использованием их потенциала в первом приближении. Трудно понять почему, но оказалось, что численные значения полного сечения в работе<sup>6</sup> неверны даже для рассчитанного ими потенциала (Б.—Д.). Поэтому неправильной оказалась также приведенная авторами в<sup>6</sup> интерполяционная формула для полного сечения в функции относительной скорости. Это тем более досадно, что впоследствии результатами их вычислений пользовались многие экспериментаторы при сравнении своих данных с теорией. Нами были повторены расчеты полного сечения  $Q(v)$  для потенциала Б.—Д. с использованием фаз рассеяния, приведенных в работе<sup>6</sup>. На рис. 10 показаны результаты всех расчетов и экспериментов. Кривая 3 представляет собой данные Бэкинга и Далгарно, кривая 2 — результаты наших вычислений с тем же потенциалом, а кривая 1 — зависимость полного сечения от скорости для эмпирического потенциала. Из рис. 10 видно, что расхождение между кривыми 2 и 3 весьма значительно, особенно при больших скоростях. Как было указано в гл. 4, в пределе больших скоростей между различными сечениями упругих процессов существуют предельные соотношения (4,14). Полное сечение из кривой 3 при скорости  $4,2 \cdot 10^5 \text{ см/сек}$  не удовлетворяет этим соотношениям. Действительно, по Бэкингу и Далгарно при  $v = 4,2 \cdot 10^5 \text{ см} \cdot \text{сек}^{-1}$  имеем  $Q = 14,5 \cdot 10^{-15} \text{ см}^2$ ,  $Q_d = 2,5 \cdot 10^{-15} \text{ см}^2$  и  $Q_{tr} = 1,3 \cdot 10^{-15} \text{ см}^2$ , т. е. полное сечение отличается от диффузионного



не в два раза, а в шесть раз. Кроме того, зависимость  $Q(v)$  по кривой 3 противоречит закону изменения потенциала Б.—Д. в области дальнего действия отталкивания.

Согласно известной работе Месси и Мора<sup>3</sup> полное сечение рассеяния зависит от скорости по закону

$$Q(v) = \text{const} \cdot v^{-2/(n-1)}, \quad (6,1)$$

если потенциал взаимодействия убывает по степенному закону

$$V(R) \propto R^{-n}. \quad (6,2)$$

Этот вывод получен из квантового рассмотрения и справедлив с хорошей точностью. Как указывалось в гл. 3 (см. формулу (3,3) и рис. 1), потенциал Б.—Д. для  $R \gg 7a_0$  может быть аппроксимирован степенной функцией с  $n = 6$ . Поэтому при скоростях  $v < 5 \cdot 10^5 \text{ см} \cdot \text{сек}^{-1}$  сечение  $Q(v)$  для потенциала Б.—Д. должно убывать как  $v^{-0,4}$ . Этот закон выполняется для кривой 2 и не выполняется для кривой 3.

Расхождение между кривыми 2 и 1 связаны с различиями потенциалов взаимодействия — высотой горба и законом убывания дальнего действия отталкивания. Для кривой 1 в соответствии с аппроксимацией эмпирического потенциала  $(V_{S,A}(R) \propto R^{-12})$  изменение  $Q(v)$  следует закону

$$Q(v) = 8 \cdot 10^{-15} \left( \frac{10^5}{v} \right)^{0,182}. \quad (6,3)$$

Полные сечения упругого рассеяния измерялись с помощью метода молекулярных пучков<sup>18-22</sup>. Подобные эксперименты должны проводиться при достаточно большой угловой разрешающей способности прибора, чтобы зарегистрировать вклад в полное сечение от рассеяния на малые углы. Под разрешающей способностью понимается тот минимальный угол рассеяния  $\theta_0$ , который регистрируется в данном приборе как угол отклонения атома в результате акта столкновения. Месси и Бархоп<sup>5</sup> указывают, что ошибка в определении полного сечения не будет превышать 10%, если  $\theta_0 = 3,6^\circ$  (при комнатной температуре). Непосредственно определяемой величиной является средняя длина свободного пробега метастабильных атомов  $\bar{\lambda}$ , измеряемая по ослаблению пучка. Зная длину пробега  $\bar{\lambda}$ , можно найти усредненное значение

$$\bar{Q} = \frac{1}{N\bar{\lambda}}, \quad (6,4)$$

где  $N$  — плотность рассеивающего газа нормальных атомов. Усредненное значение  $\bar{Q}$  связано с эффективным полным сечением  $Q(v)$  весьма сложным

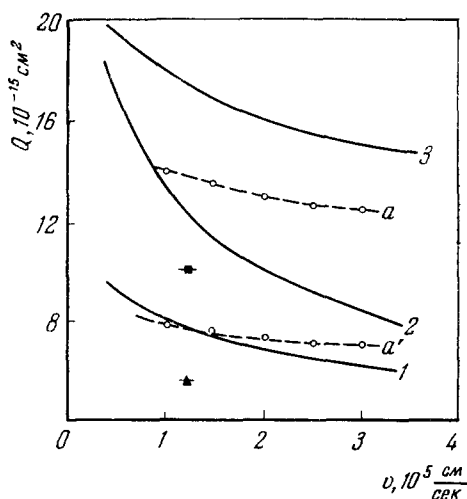


Рис. 10. Сравнение результатов расчетов и экспериментов по полному сечению рассеяния метастабильных атомов гелия-4.

Сплошные линии — расчетные кривые  $Q(v)$ ; 1 — для эмпирического потенциала; 2 — для потенциала Б.—Д. по нашим расчетам; 3 — вычисления Бэкингема и Далгарно.  $\circ$ ,  $\blacksquare$ ,  $\blacktriangle$  — экспериментальные значения;  $a$  —  $\circ$  — данные Роте и др.<sup>21</sup>,  $\blacksquare$  — данные Стеббингса<sup>18</sup> и Хастеда<sup>19</sup>,  $\blacktriangle$  — данные Ричарда и Мушлитца<sup>20</sup>;  $a'$  —  $\circ$  — данные Роте, уменьшенные в  $\sqrt{\pi}$  раз.

образом, поскольку усреднение сечения включает в действительности двойное усреднение — по скоростям частиц в пучке и в рассеивающем газе. Характер усреднения зависит от соотношения между скоростями частиц в пучке и в газе, а также от поведения самого сечения рассеяния как функции скорости. Если сечение не зависит от скорости, то обработка экспериментальных данных может быть проведена по процедуре, изложенной Мессии и Бархопом<sup>5</sup> (см. также<sup>34</sup>). Для степенного потенциала вида (6,2) метод обработки предложен Берклингом и др.<sup>35</sup>. Эта процедура заключается в том, что для получения истинного сечения  $Q(v)$  нужно воспользоваться соотношением

$$Q(v) = \frac{\bar{Q}(u/v)^{2/n-1}}{F(n, x)}, \quad (6,5)$$

где  $u$  — скорость монохроматического пучка,  $x = u/(2\kappa T/M)^{1/2}$  — отношение скорости  $u$  к наиболее вероятной скорости газа; функция  $F(n, x)$  протабулирована в работе<sup>35</sup>; при больших  $n$  и  $x$  ( $x \gg 2$ ) функция  $F(n, x)$  близка к единице.

На рис. 10 точками нанесены экспериментальные величины  $Q(v)$ , обработанные с помощью процедуры (6,5) при  $n = 12$ . Результаты Стеббингса<sup>18</sup> и Хастеда<sup>19</sup> практически совпадают:  $\bar{Q} = 14,9 \cdot 10^{-15} \text{ см}^2$ , а  $Q(v) = 10,5 \cdot 10^{-15} \text{ см}^2$  ( $F(12, 1) = 1,4$ ). Разрешение в экспериментах<sup>18, 19</sup> составляет примерно  $1^\circ$ . Данные Ричарда и Мушлитца<sup>20</sup> получены со средним разрешением  $6,5^\circ$ . Экспериментальное значение  $\bar{Q} = (7,5 \pm 0,5) \cdot 10^{-15} \text{ см}^2$ , а после обработки  $Q(v) = 5,5 \cdot 10^{-15} \text{ см}^2$ . Весьма хорошее разрешение ( $\theta_0 = 1'$ ) было достигнуто в экспериментах Роте и др.<sup>21, 22</sup>. К сожалению, авторы не приводят измеренных величин  $\bar{Q}$ . Насколько можно судить по формулам, приведенным в их статье<sup>22</sup>, эксперименты обрабатывались по формуле, отличающейся множителем  $\sqrt{\pi} = 1,77$  от (6,5). Поэтому на рис. 10 представлены данные указанных экспериментов (кривая  $a$ ), а также уменьшенные в  $\sqrt{\pi}$  раз значения  $Q(v)$  (кривая  $a'$ ). Приведенные в работе Роте и др.<sup>21</sup> значения  $Q(v)$  после обработки можно считать завышенными, исходя также из следующих соображений. Полное сечение рассеяния не должно превосходить удвоенное сечение диффузии. Для комнатной температуры результаты разных авторов дают надежное значение величины  $DP = 470 \text{ см}^2 \text{сек}^{-1} \text{ мм рт. ст.}$ , из которого получается  $\bar{Q}_d = 3,5 \cdot 10^{-15} \text{ см}^2$ . Эти значения соответствуют относительной скорости  $v = v_d = 2,5 \cdot 10^5 \text{ см} \cdot \text{сек}^{-1}$ . Следовательно, полное сечение  $Q$  для этой скорости не может превышать  $7 \cdot 10^{-15} \text{ см}^2$ . Значение полного сечения, приводимое Роте и др.<sup>21</sup>, при этой скорости равно  $Q = (12,7 \pm 0,3) \times 10^{-15} \text{ см}^2$ , что как раз в  $\sqrt{\pi}$  раз превышает максимальную оценку полного сечения для этой скорости.

Из рис. 10 видно, что после исправления в  $\sqrt{\pi}$  раз данные<sup>21</sup> (кривая  $a'$ ) хорошо согласуются с результатами расчета полного сечения на основе эмпирического потенциала (кривая  $I$ ). Следует считать также, что данные работы Ричарда и Мушлитца<sup>20</sup> находятся в удовлетворительном согласии с расчетом для эмпирического потенциала, поскольку угловое разрешение их прибора было недостаточным, чтобы полностью измерить рассеяние на малые углы. Поэтому полученное в этих опытах значение полного сечения является заниженным. Данные Стеббингса<sup>18</sup> и Хастеда<sup>19</sup> несколько отклоняются от расчетных. Причины этих расхождений неясны. Таким образом, за исключением данных<sup>18, 19</sup>, все результаты более поздних экспериментов находятся в хорошем согласии с расчетом полного сечения  $Q(v)$  на основе эмпирического потенциала.

## 7. СРАВНЕНИЕ ТЕОРИИ И ЭКСПЕРИМЕНТА ДЛЯ СЕЧЕНИЯ ПЕРЕДАЧИ ВОЗБУЖДЕНИЯ

Передача возбуждения связана с изменением симметрии состояния сталкивающихся атомов в результате рассеяния. Сечение этого процесса отлично от нуля только в том случае, если потенциалы взаимодействия  $V_S$  и  $V_A$  различны. Величина сечения передачи и его зависимость от скорости определяются видом потенциальных кривых. Согласно О. Б. Фирсову<sup>41</sup> вероятность передачи возбуждения  $W$  пропорциональна  $\sin^2 \Omega t$ , где  $\Omega$  — частота передачи, а  $t \sim a/v$  — характерное время взаимодействия. Частота  $\Omega \sim \Delta V/\hbar$ , где  $\Delta V$  — различие между потенциалами  $V_S$  и  $V_A$ . Вероятность  $W$  следует усреднить по характерной области рассеяния. Поэтому зависимость  $W$  от скорости должна быть такой:

$$W \approx \sin^2 \left( \frac{\Delta V a}{\hbar v} \right). \quad (7,1)$$

Если  $\Delta V$  слабо зависит от скорости, то сечение передачи возрастает при уменьшении энергии частиц и при  $v \rightarrow 0$  имеет максимум. Подобная ситуация имеет место, например, при столкновении атомов водорода или при резонансной перезарядке ионов, когда два потенциала взаимодействия  $V_S$  и  $V_A$  имеют разный знак на больших расстояниях и их разность медленно изменяется.

Если  $\Delta V$  быстро изменяется как функция скорости, то зависимость сечения передачи от  $v$  может быть иной. При взаимодействии метастабильного и нор-

мального атомов гелия оба потенциала на больших расстояниях имеют одинаковый знак, а их разность резко уменьшается с расстоянием и стремится к нулю. По этой причине интегральная разность энергий по характерной области рассеяния  $\Delta V \cdot a$  уменьшается значительно быстрее, чем первая степень скорости. В этом случае сечение передачи при  $v \rightarrow 0$  также стремится к нулю. В области больших скоростей, которые отвечают малым расстояниям между взаимодействующими атомами, разность потенциальных энергий двух состояний системы сравнительно велика и слабо зависит от скорости. Здесь энергия сталкивающихся частиц превосходит высоту потенциального барьера и последний уже не влияет на характер зависимости сечения передачи от скорости. Величина  $Q_{tr}$  при больших энергиях будет снова уменьшаться. Следовательно, при наличии дальнего отталкивания на потенциале  $V_A(R)$  сечение передачи возбуждения имеет широкий максимум при энергиях порядка высоты «горба» отталкивания. Максимальное значение  $Q_{tr}$  и представляет собой предельное значение этого сечения в соотношениях (4,14).

На рис. 11 приведены расчетные зависимости сечения передачи возбуждения от энергии. Сплошная кривая относится к эмпирическому потенциалу. Пунктирная кривая представляет результаты расчета  $Q_{tr}$ ,

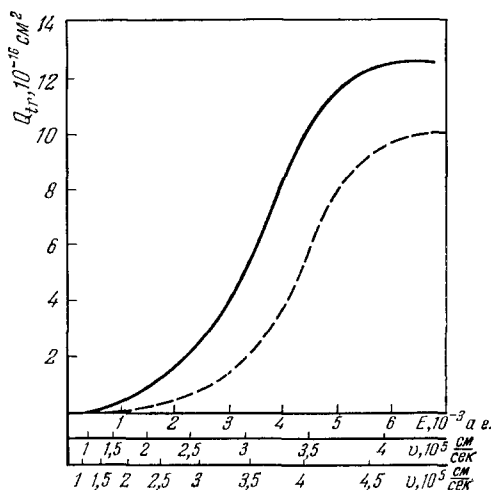


Рис. 11. Расчетные зависимости сечения передачи возбуждения от скорости.

Сплошная кривая — для эмпирического потенциала; пунктирная кривая — для потенциала Б.—Д. с учетом поправки второго приближения —  $20R^{-6}$  а. е. (верхняя шкала скоростей — для He-4, нижняя — для He-3).

выполненные Бэкингом и Далгарно<sup>10</sup> для их потенциала с учетом вандер-ваальсовой поправки  $-20R^{-6}$  а. е. При малых энергиях  $Q_{tr}$  стремится к нулю, так как потенциалы  $V_S$  и  $V_A$  практически совпадают (см. таблицу на стр. 435). При увеличении энергии атомов сечение передачи возрастает из-за расхождения потенциальных кривых. Чем выше максимум на потенциальной кривой  $V_A$ , тем меньше различие между  $V_A$  и  $V_S$  для данной энергии сталкивающихся частиц. Поэтому сечение передачи возбуждения для потенциала Б.—Д., обладающего более высоким максимумом, оказывается меньшим, чем для эмпирического потенциала. Различия сечений  $Q_{tr}$  при меньших энергиях обусловлено различием в асимптотическом поведении потенциалов взаимодействия.

Измерение сечения передачи возбуждения от метастабильного атома к нормальному проведено в работах Коулгрова с сотрудниками<sup>23, 24</sup> и Гринхоу<sup>25</sup>. Используемый ими метод позволяет измерить усредненное сечение передачи возбуждения только для атомов с отличным от нуля ядерным моментом — для гелия-3. Суть метода состоит в следующем. С помощью высокочастотного разряда создаются возбужденные метастабильные атомы. Возбужденный газ находится в магнитном поле и освещается поляризованной резонансной линией излучения  $10\ 830\ \text{\AA}$  от внешнего источника с гелием-4. Благодаря совпадению частот переходов ( $2^3S - 2^3P_{1,2}$ ) в гелии-4 и ( $2^3S_1 - 2^3S_0$ ) в гелии-3 можно осуществить оптическую накачку метастабильных атомов гелия-3 в состояниях с различными проекциями полного момента  $m_j$ . За счет оптической накачки создается неравновесная заселенность на этих подуровнях. В случае правополяризованного света обогащаются, в частности, подуровни с  $m_j = +1/2$ . Время жизни метастабильных неравновесных состояний  $\tau$  определяется столкновениями с нормальными атомами, в результате которых происходит передача возбуждения. При столкновении с нормальными атомами, обладающими проекцией момента  $-1/2$  или  $+1/2$ , имеет место обмен электронным возбуждением без изменения ядерного момента. Таким образом, вместо метастабильного атома с  $m_j = +1/2$  после столкновения с нормальным атомом с  $m_j = -1/2$  появляется метастабильный атом с  $m_j = -1/2$ . Схему этого процесса можно записать в виде



Иными словами, в результате реакции (7,2) происходит переворот спина. Поэтому ширина линии ядерного магнитного резонанса между уровнями с  $m_j = 1/2$  и  $m_j = -1/2$  определяется сечением процесса (7,2), т. е. сечением передачи возбуждения.

В экспериментах<sup>23-25</sup> измерялась ширина линии  $\Delta f$  ядерного магнитного резонанса для подуровней метастабильных атомов. Величина  $\Delta f$  связана с сечением передачи возбуждения  $Q_{tr}$  формулой

$$\Delta f \equiv \frac{1}{\pi\tau} = \frac{N\bar{v}Q_{tr}}{\pi}, \quad (7,3)$$

где  $N$  — плотность нормальных атомов, а черта означает усреднение по скоростям. Вообще говоря, в ширину линии дают вклад и другие неупругие столкновения, вызывающие разрушение метастабильных состояний, а также неоднородность магнитного поля. Оценки показывают, что другие неупругие процессы в условиях экспериментов<sup>23-25</sup> не играют заметной роли, а неоднородность магнитного поля может привести к завышенным значениям сечений  $Q_{tr}$ . Благодаря использованию модуляционной техники Коулгрову и др.<sup>23, 24</sup> удалось исключить уширение резонансной линии за счет неоднородности поля. В работе<sup>24</sup> измерены

величины  $\overline{vQ_{tr}}$  в широком интервале температур от  $4^\circ$  до  $500^\circ$  К. Эти данные с указанием погрешности приведены на рис. 12. Для комнатной температуры значение  $\overline{vQ_{tr}}$  получено также в работе Гринхоу<sup>25</sup>. Его данные в 1,5 раза превосходят значение  $\overline{vQ_{tr}}$ , измеренное в<sup>24</sup>. Эти расхождения, возможно, связаны с влиянием неоднородности магнитного поля.

Для сопоставления эксперимента с теорией была вычислена величина  $\overline{vQ_{tr}}$  для сечений  $Q_{tr}(v)$ , приведенных на рис. 11. Численный расчет проводился по формуле

$$\frac{\overline{vQ_{tr}}}{\pi} = \frac{1}{2} \left( \frac{M}{\pi kT} \right)^{3/2} \int_0^\infty dv v^3 Q_{tr}(v) \exp \left( -\frac{Mv^2}{4kT} \right). \quad (7,4)$$

Результаты сравнения представлены на рис. 12. Видно, что экспериментальные значения удовлетворительно согласуются с расчетом на основе эмпирического потенциала. Использование даже исправленного потенциала Бэкингема и Далгарно приводит к более значительному расхождению с экспериментом. Таким образом, эксперименты по сечению передачи возбуждения убедительно подтверждают правильность выбранного эмпирического потенциала.

## 8. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Подведем итоги экспериментальных и теоретических исследований процессов упругого рассеяния метастабильных атомов гелия в собственном газе. Измерение коэффициента диффузии  $D$  в интервале температур  $300 \div 4^\circ$  К дает существенно меньшую величину для метастабильных атомов, чем для нормальных атомов гелия. Температурная зависимость  $D(T)$  примерно следует закону  $T^{2/3}$ , показывая тем самым, что диффузионное сечение изменяется с температурой приблизительно как  $T^{-1/6}$ . Благодаря тому, что среди всех упругих процессов диффузия наименее чувствительна к квантовым эффектам (к рассеянию на малые углы), можно применить классические соображения подобия для установления связи с потенциалом взаимодействия. Отсюда получается, что асимптотика потенциала должна быть близкой к  $R^{-12}$ , а сам потенциал имеет отталкивательный характер. Сравнение экспериментов по диффузии гелия-3 и гелия-4 позволяет сделать важный вывод о том, что потенциалы взаимодействия и дифференциальные сечения рассеяния изотопов, обладающих разной статистикой, одинаковы. Это согласуется с теоретическим предсказанием о равенстве дифференциальных сечений для обоих изотопов. Экспериментальное изучение полного сечения упругого рассеяния также обнаруживает высокие значения сечения. Экспериментально обнаружены особенности и сечения передачи возбуждения. Вместо обычно наблюдающегося максимума при малых скоростях и монотонного уменьшения  $Q_{tr}$

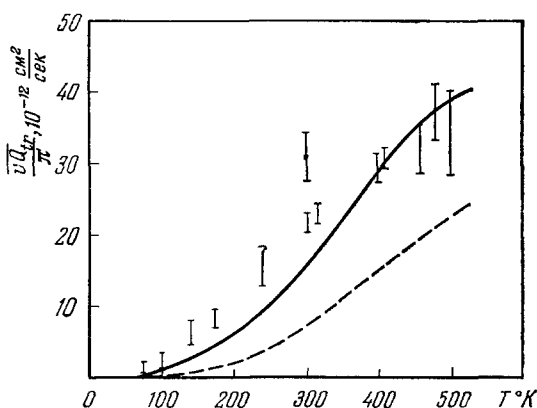


Рис. 12. Сравнение экспериментальных и вычисленных значений усредненной величины  $\overline{vQ_{tr}}/\pi$ .

Сплошная кривая — расчет для эмпирического потенциала; пунктирная кривая — расчет для потенциала Б.—Д. Вертикальные отрезки — экспериментальные данные с учетом погрешности (из<sup>24</sup>), ● — данные<sup>25</sup>.

со скоростью, сечение передачи возбуждения в гелии при низких температурах чрезвычайно мало и только в области высоких температур оно возрастает и достигает максимума при  $T \sim 700\text{--}800^\circ \text{K}$ . Иными словами, квантовые эффекты симметрии при низких энергиях ( $E \lesssim 300^\circ \text{K}$ ) аномально малы.

Всю совокупность экспериментальных данных удается объяснить не только качественно, но и количественно на основе квантовой теории рассеяния и правильного выбора потенциала взаимодействия. Обычный потенциал с притяжением на больших расстояниях не позволяет даже качественно описать процесс диффузии и передачи возбуждения. Отмеченные выше особенности упругого рассеяния метастабильных атомов гелия согласуются с наличием максимума дальнегодействующего отталкивания на потенциале  $V_A(R)$ . Существование подобного необычного потенциала было предсказано Бэкингом и Далгарно на основе теоретических расчетов по методу Гайтлера — Лондона. Однако результаты этого расчета являются весьма приближенными, особенно на больших расстояниях. Как было отмечено в работе Горькова и Питаевского<sup>36</sup>, асимптотика потенциалов для молекулы водорода, полученная по методу Гайтлера — Лондона, имеет более медленную зависимость от  $R$ , чем точная. Результаты работы<sup>36</sup> можно рассматривать как теоретическое указание на то, что и в случае молекулы гелия истинная асимптотика взаимодействия является более крутой, чем вычисленная по методу Гайтлера — Лондона<sup>10</sup>. С этой точки зрения результаты расчета Пошусты и Матсена<sup>12</sup>, проведенные с помощью вариационного метода, являются более надежными. Однако последние не проведены в асимптотической области  $R > 6a_0$ . В то же время процессы упругого рассеяния в интервале температур  $500 \div 4^\circ \text{K}$  определяются потенциалом на больших расстояниях  $R \sim (5\text{--}10)a_0$ . Используя теоретические расчеты, на основе экспериментальных данных по диффузии был восстановлен потенциал взаимодействия в асимптотической области. Восстановленный эмпирический потенциал в области максимума дальнегодействующего отталкивания совпадает с потенциалом Пошусты и Матсена и приближенно согласуется с асимптотическим расчетом Б. М. Смирнова и др.<sup>9</sup> при  $R > 6a_0$ . Высота максимума на кривой  $V_A(R)$  составляет  $5,4 \cdot 10^{-3}$  а. е., расположен он при  $R = 4,5a_0$ . На расстояниях  $R > 6a_0$  потенциал убывает по закону  $V_A(R) \approx 75 R^{-12}$  а. е. Потенциал  $V_S(R)$  выбран так, что при  $R < 6a_0$  он совпадает с потенциалом  $V_S(R)$ , рассчитанным Бэкингом и Далгарно с учетом ван-дер-ваальсовой поправки, а при  $R > 7a_0$  потенциал  $V_S(R)$  совпадает с асимптотикой эмпирического потенциала  $V_A(R)$ . Если использовать эти потенциалы для расчета сечений, то все без исключения экспериментальные данные о величине и температурной зависимости диффузионных сечений гелия-3 и гелия-4, полного сечения и сечения передачи возбуждения количественно хорошо согласуются с теоретическим расчетом.

Существование барьера отталкивания на больших расстояниях позволяет установить простые приближенные предельные соотношения (4,14) между различными сечениями, которые подтверждаются экспериментом. Предельные соотношения между полным и диффузионным сечениями удовлетворяются уже при скоростях  $2,5 \cdot 10^5 \text{ см} \cdot \text{сек}^{-1}$ , что соответствует взаимодействию на расстояниях, меньших  $6a_0$ . Предельная величина сечения передачи возбуждения достигается в области максимума отталкивания.

Следует отметить, что факт существования «горба» подтверждается также и экспериментами по неупругому рассеянию метастабильных атомов в собственном газе<sup>15, 16, 37</sup>. Максимум дальнегодействующего отталкивания

помимо рассмотренного здесь взаимодействия триплетных метастабильных  $2^3S$ -атомов с нормальными, был теоретически предсказан<sup>10</sup> для потенциалов синглетной метастабильной молекулы гелия. В работе<sup>38</sup> получено косвенное экспериментальное подтверждение существования подобного максимума для синглетных метастабильных атомов. Теоретически предсказано аналогичное дальнотействующее отталкивание для некоторых других возбужденных состояний молекулы гелия, молекулы водорода<sup>28, 29</sup>, а также, по-видимому, неона. Максимумы отталкивания могут существовать и на кривых энергии взаимодействия метастабильных атомов гелия с невозбужденными атомами других благородных газов. Это может относиться, например, к реакции атомов гелия в состояниях  $2^3S$  или  $2^1S$  с неоном (этот процесс играет существенную роль в газовом лазере на смеси гелия с неоном), а также к ряду процессов Пеннинга. Предложенный здесь метод восстановления потенциала взаимодействия по экспериментальным данным может быть применен ко всем подобным системам с дальнотействующим отталкиванием.

Физико-технический институт низких температур  
АН УССР, Харьков

#### ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. H. S. W. Massey, C. B. O. Mohr, Proc. Roy. Soc. **A141**, 434 (1933).
2. H. S. W. Massey, R. A. Smith, Proc. Roy. Soc. **A142**, 142 (1933).
3. C. B. O. Mohr, H. S. W. Massey, Proc. Roy. Soc. **A144**, 188 (1934).
4. Н. Мотт, Г. Месси, Теория атомных столкновений, М., ИЛ, 1951.
5. Г. Месси, Е. Бархот, Электронные и ионные столкновения, М., ИЛ, 1958.
6. R. A. Buckingham, A. Dalgarno, Proc. Roy. Soc. **A213**, 506 (1952).
7. И. Я. Фуголь, П. Л. Пахомов, ЖЭТФ **53**, 866 (1967).
8. П. Л. Пахомов, И. Я. Фуголь, ДАН СССР **179**, 813 (1968).
9. Л. А. Палкина, Б. М. Смирнов, М. И. Чибисов, ЖЭТФ (1969).
10. R. A. Buckingham, A. Dalgarno, Proc. Roy. Soc. **A213**, 327 (1952).
11. G. H. Brigman, S. A. Brient, F. A. Matsen, J. Chem. Phys. **34**, 958 (1961).
12. R. D. Poshusta, F. A. Matsen, Phys. Rev. **132**, 307 (1963).
13. E. Ebbinghaus, Ann. d. Phys. **7**, 267 (1930).
14. M. A. Biondi, Phys. Rev. **83**, 653 (1951).
15. A. V. Phelps, J. P. Molnar, Phys. Rev. **89**, 1203 (1953).
16. A. V. Phelps, Phys. Rev. **99**, 1307 (1955).
17. П. Л. Пахомов, И. Я. Фуголь, Ю. Ф. Шевченко, ЖТФ **36**, 1312 (1966).
18. R. F. Stebbings, Proc. Roy. Soc., **A241**, 270 (1957).
19. J. B. Hasted, P. Mahadevan, Proc. Roy. Soc. **A249**, 42 (1958).
20. H. L. Richard, E. E. Muschlitz, J. Chem. Phys. **41**, 559 (1964).
21. E. W. Rothe, R. H. Neynaber, J. Chem. Phys. **42**, 3306, 3310 (1965).
22. E. W. Rothe, P. K. Rol, S. W. Trujillo, R. H. Neynaber, Phys. Rev. **128**, 659 (1952).
23. F. D. Golegrove, L. D. Schearer, G. K. Walters, Phys. Rev. **132**, 2561 (1963).
24. F. D. Colegrove, L. D. Schearer, G. K. Walters, Phys. Rev. **135**, 352 (1964).
25. R. C. Greenhow, Phys. Rev. **136**, 660 (1964).
26. P. J. Bendt, Phys. Rev. **110**, 85 (1958).
27. Б. М. Смирнов, ЖЭТФ **51**, 466 (1966).
28. J. C. Browne, Phys. Rev. **138**, 9 (1965).
29. D. R. Scott, E. U. Greenwall, J. C. Browne, F. A. Matsen, J. Chem. Phys. **44**, 2981 (1966).
30. A. V. Phelps, Phys. Rev. **114**, 1011 (1959).
31. И. Я. Фуголь, П. Л. Пахомов, Ю. Ф. Шевченко, Оптика и спектроскопия **21**, 741 (1966).
32. П. Л. Пахомов, Г. П. Резников, И. Я. Фуголь, Оптика и спектроскопия **20**, 10 (1966).

33. С. Чепмен, Т. Каулинг, Математическая теория неоднородных газов, М., ИЛ., 1960.
  34. R. C. Shoemaker, J. Phys. Chem. **65**, 892 (1961).
  35. K. Berkling, R. Helbling, K. Kramer, H. Pauly, Ch. Schli-  
er, P. Toschek, Zs. Phys. **166**, 406 (1962).
  36. Л. П. Горьков, Л. П. Питаевский, ДАН **151**, 822 (1963).
  37. K. H. Ludlum, L. P. Larson, J. M. Caffrey, J. Chem. Phys. **46**, 127  
(1967).
  38. Y. Tanaka, K. Yoshino, J. Chem. Phys. **39**, 3081 (1963).
  39. G. A. Victor, A. Dalgarno, A. J. Taylor, Proc. Phys. Soc., ser. 2, **B1**,  
13 (1968).
  40. Б. М. Смирнов, Атомные столкновения и элементарные процессы в плазме,  
М., Атомиздат, 1968.
  41. О. Б. Фирсов, ЖЭТФ **21**, 1001 (1951).
-