

ИНТЕРФЕРЕНЦИОННЫЕ ЯВЛЕНИЯ В АТОМНОМ РАССЕЯНИИ*Е. Е. Никитин, М. Я. Овчинникова***СОДЕРЖАНИЕ**

1. Введение	379
2. Характерные параметры и общая постановка задачи рассеяния атомов при больших энергиях	381
3. Интерференционные явления в упругом рассеянии	386
4. Интерференция в резонансных процессах	394
5. Спектроскопия неупругих процессов	399
Цитированная литература	410

1. ВВЕДЕНИЕ

В течение долгого времени изучение атомных столкновений ограничивалось выяснением принципиальных особенностей и механизмов упругих и неупругих процессов, таких, как явления переноса, перезарядки, возбуждения и ионизации. Задача теории заключалась прежде всего в том, чтобы рассчитать полное сечение по известным (или предполагаемым) потенциалам и вычислить кинетические коэффициенты процессов физической и химической кинетики. Попытки интерпретации макроскопических величин в терминах молекулярных констант всегда сталкивались с той трудностью, что в процессе усреднения сечений стирались многие детали взаимодействия, так что практически оказывалось невозможным, а часто и ненужным, дать микроскопическое описание процесса столкновения.

С развитием техники физического эксперимента выявилась необходимость более точного описания процессов — задания начального и конечного состояний сталкивающихся частиц. Новые экспериментальные методы — кинетическая спектроскопия, скрещенные и догоняющие молекулярные пучки, анализ и разделение сталкивающихся частиц по состояниям в сильных электрических и магнитных полях, селективное возбуждение состояний лазерным лучом — стимулировали развитие теории столкновений в области низких энергий — от долей до тысяч электрон-вольт. Даже в хорошо разработанных областях, таких, например, как упругое рассеяние тяжелых частиц, неожиданно оказалось много нерешенных вопросов. Эти вопросы возникли в основном в связи с появившейся возможностью «развернуть» многие процессы по энергии и углу рассеяния. Эти развертки, представляющие собой дифференциальные сечения неупругого рассеяния при различных кинетических энергиях и заданных квантовых состояниях частиц, напоминают спектрограммы, структура которых содержит массу информации о тонких деталях механизма процесса. Получение такой информации и ее интерпретация уже составляют в настоящее время целую область физики атомных столкновений, которую принято называть столкновительной спектроскопией (collision spectroscopy).

Исследование столкновений электронов с атомами и молекулами (электронная столкновительная спектроскопия) при низких энергиях позволило обнаружить ряд новых резонансных явлений. Энергетические характеристики резонансов, дополненные сведениями об угловом распределении электронов, дают уже такую информацию о квазистационарных состояниях молекул, которая достаточна для построения моделей многоэлектронных систем. В результате вопросы теории рассеяния электронов на молекулах оказались тесно связанными с вопросами теории электронной структуры молекул, которую по традиции относят к квантовой химии.

Еще более тесное слияние физики и химии обнаруживается в области атомной и молекулярной столкновительной спектроскопии и, в частности, при исследовании простейших химических реакций в молекулярных пучках. Значение этих исследований для приложений очевидно, однако трудности, с которыми приходится сталкиваться на этом пути, как в экспериментальном, так и теоретическом отношении очень велики. Из всего круга проблем столкновений лишь одна — атомная столкновительная спектроскопия — находится в таком состоянии, когда громадный экспериментальный материал может быть классифицирован и обсужден с единой точки зрения. Именно поэтому мы ограничимся рассмотрением только атомных столкновений, надеясь, что изложенные методы окажутся полезными и в других областях столкновительной спектроскопии.

В связи с этим задачей теории является интерпретация наблюдаемой в эксперименте сложной структуры сечений и получение количественных характеристик потенциалов взаимодействия частиц из данных по рассеянию. Энергетические термы (потенциалы) сталкивающейся пары можно получить двумя путями. Первый — это не эмпирический расчет (*ab initio*) свойств молекулярных электронных состояний как функций межъядерных расстояний, и последующее решение задачи для сравнения предсказываемых сечений и наблюдаемых. Эти расчеты весьма трудоемки и дорогостоящи, так что пока число доступных такому изучению систем очень ограничено. Поэтому, наряду с первым, очень ценным представляется другое направление теории в данной области, а именно — развитие общих принципов и наиболее общих моделей для характерных типов взаимодействий, на основе которых можно интерпретировать экспериментальные данные и извлекать из них специфические параметры межатомных взаимодействий.

Настоящий обзор касается основных методов именно второго направления, которому в недавно вышедших книгах по столкновениям¹⁻⁶ уделено слишком мало внимания. Следует отметить появившиеся в последнее время обзоры⁷⁻¹² на аналогичные темы. По сравнению с⁷⁻¹² в нашем обзоре больше внимания уделяется теории неупругих процессов, обязанных псевдопересечению, и связанных с ними пороговых явлений.

Изложение начинается с общих методов описания упругих и неупругих процессов при таких энергиях и углах рассеяния, когда потенциал в известном смысле можно считать возмущением (гл. 2). Это так называемое «высокоэнергетическое» приближение оказывается применимым и для сравнительно медленных столкновений. В связи с этим оно положено в основу дальнейшего изложения, поскольку именно в этом случае удается получить наиболее надежные экспериментальные данные и в наиболее простой форме обработать их. Далее рассматриваются интерференционные явления при упругом рассеянии атомов с типичным потенциалом взаимодействия (притяжение на больших расстояниях и отталкивание на малых) (гл. 3). Эти явления обязаны сложению амплитуд волн де Бройля, рассеянных различными участками потенциала на один и тот же угол. Оказывается, здесь можно провести аналогию, во-первых, со многими оптическими

явлениями в атмосфере («сияние», «радуга») и, во-вторых, с некоторыми интерференционными явлениями в неупругих процессах. Первое связано с тем, что соотношение между длиной волны частиц и параметрами потенциала качественно таково, что возможна аналогия с соотношением между длиной волны света и параметрами капелек. Вторая аналогия основана на том, что рассеяние волны различными участками потенциала в известном смысле близко по характеру к рассеянию волны различными потенциалами, между которыми существует более или менее локализованная связь.

Затем обсуждаются резонансные процессы (гл. 4), для которых связь между адиабатическими потенциалами отсутствует и неупругий процесс описывается интерференцией двух независимых волн. Каждая из этих волн в свою очередь уже несет память о структуре соответствующего потенциала.

Наконец, рассматриваются неупругие процессы с локализованной связью между термами (гл. 5), т. е. случай, когда неадиабатическое взаимодействие между различными электронными состояниями оказывается локализованным в сравнительно узких областях изменения межъядерного расстояния. В такой ситуации для нахождения матрицы рассеяния достаточно решить задачу о неадиабатических переходах только в этих областях и сплести это решение с адиабатическим (без переходов) квазиклассическим решением вне этих малых областей. Именно это обстоятельство позволяет обойти во многих случаях решение квантовой задачи многоканального рассеяния.

Конец обзора посвящен теории аномалий дифференциальных сечений вблизи порога неупругого процесса, причем следует оговорить, что под «пороговыми» явлениями мы понимаем явления при энергиях и углах рассеяния, близких к экспериментальному порогу неупругого процесса. В условиях классичности атомных столкновений это означает, что в сечение процесса в интересующей нас области вблизи порога вносят вклад большое число парциальных волн, в отличие от пороговых и резонансных явлений в ядерной физике, которые обычно определяются поведением только одной парциальной волны.

Выполнимость условия квазиклассичности столкновений определила методический стиль изложения: во всех возможных случаях мы старались описать интерференционные явления в терминах величин, ассоциированных с движением по классическим траекториям. Такой подход упрощает сравнение квантовой теории с классической, которая в настоящее время широко используется в молекулярной столкновительной спектроскопии. Цитированные экспериментальные данные привлечены только для иллюстрации общей ситуации и не претендуют на полноту.

2. ХАРАКТЕРНЫЕ ПАРАМЕТРЫ И ОБЩАЯ ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ РАССЕЯНИЯ АТОМОВ ПРИ БОЛЬШИХ ЭНЕРГИЯХ

В классической механике угол χ отклонения траектории частицы в потенциальном поле $U(R)$ как функция прицельного параметра b и энергии системы E определяется известным уравнением

$$\frac{1}{2} [\pi - \chi(b, E)] = \int_{R_0}^{\infty} \frac{b dR}{R^2 \left(1 - \frac{U}{E} - \frac{b^2}{R^2} \right)^{1/2}}, \quad (1)$$

где R_0 — точка поворота радиального движения, являющаяся внешним нулем подкоренного выражения в (1). Типичная форма функции $\chi(b)$

изображена на рис. 1, а. В отличие от угла отклонения $\chi(b)$, принимающего разный знак в зависимости от знака потенциала (положительный для отталкивания, отрицательный для притяжения), наблюдаемый угол рассеяния θ , по определению измеряющийся в интервале $(0, \pi)$, равен

$$\theta = \min |\chi - 2\pi n| \quad (2)$$

и изображен на рис. 1, б. Обратная зависимость $b = b(\theta)$ прицельного параметра от угла рассеяния θ имеет, вообще говоря, многозначный характер. Например, одному углу θ' рассеяния на рис. 1, б соответствуют три

различные траектории с прицельными параметрами b_1, b_2, b_3 . В соответствии с этим классическое сечение равно сумме вкладов всех ветвей в рассеяние на угол θ :

$$\sigma(\theta) = \sum_i \sigma_i(\theta) = \sum_i \frac{1}{\sin \theta} b_i \left| \frac{db_i}{d\theta} \right|. \quad (3)$$

Формула (3) предполагает независимость вкладов от различных ветвей функции $b = b(\theta)$. Однако при более подробном рассмотрении рассеяния уже в чисто упругом рассеянии сразу выявляется возможность квантовой интерференции вкладов от различных траекторий, приводящей к сложной осцилляторной структуре сечений. Задача усложняется тем, что теория неупругого рассеяния, сопровождаемого возбуждением атомов, перезарядкой и т. п., не сводится к теории потенциального рассеяния бесструктурных частиц, а включает в себя также теорию электронных переходов при столкновениях тяжелых (атомных) частиц.

Общая постановка задачи об упругом и неупругом атомном рассеянии хорошо известна¹³.

В простейшей полуклассической постановке задачи волновая

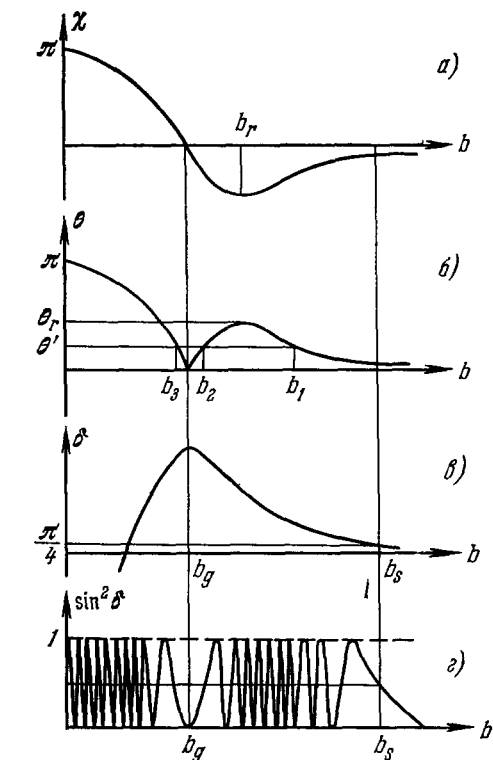


Рис. 1. Типичная зависимость: а) угла отклонения χ ; б) угла рассеяния θ ; в) фазы δ ; г) $\sin^2 \delta$ от прицельного параметра b для межатомного потенциала с минимумом.

Индексы 1, 2, 3 нумеруют различные ветви функции $b(\theta)$.

функция системы разлагается по некоторому полному набору электронных функций φ_n :

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sum_n c_n(t) \varphi_n(\mathbf{r}, R(t)), \quad (4)$$

а движение ядер считается происходящим по единой классической траектории $\mathbf{R} = \mathbf{R}(t)$, отвечающей некоторому среднему по электронным состояниям потенциалу.

Изменение коэффициентов $c_n(t)$ определяется уравнением Шрёдингера

$$i\hbar \frac{dc_n}{dt} = \sum_m [U_{nm}(\mathbf{R}) + \dot{\mathbf{R}} \mathbf{p}_{nm}] c_m(t), \quad (5)$$

где $U_{nm} = \langle \varphi_n | \hat{H}_{эл} | \varphi_m \rangle$ — матрица потенциальной энергии и $P_{nm} = -i\hbar \left\langle \varphi_n \left| \frac{\partial}{\partial R} \right| \varphi_m \right\rangle$ — матрица оператора неадиабатичности. Условия при $t = \pm\infty$ определяют начальное состояние и результат столкновения.

В принципе знание матриц U_{nm} и P_{nm} достаточно для решения задачи в любом базисе φ_n . Однако для получения конкретных результатов приходится ограничиваться конечным, и часто весьма малым, набором функций φ_n . Именно на этой стадии и возникает вопрос о правильности выбора базиса, минимизирующего ошибки, связанные с отбрасыванием бесконечного набора состояний.

Один из важных частных случаев — адиабатический базис, в котором φ_n определяются как собственные функции гамильтониана $\hat{H}_{эл}$ при фиксированном R . Физическая аргументация выбора этого базиса¹³ основана на возможности приближенного разделения ядерного и электронного движения (адиабатическое приближение). Поскольку скорости атомов (даже при энергии $E \approx 10^3$ эв) малы по сравнению со скоростями электронного движения, состояние электронов успевает подстроиться к данному положению ядер.

В этом базисе потенциальная матрица U_{nm} диагональна и среднее значение электронной энергии U_n в состоянии n (электронный терм) играет роль потенциальной энергии для адиабатического движения ядер. Связь между электронными состояниями осуществляется только оператором неадиабатичности (второй член в квадратных скобках в (5)). При этом порядок вероятности перехода между двумя электронными состояниями определяется параметром неадиабатичности или параметром Мессе

$$\xi = \omega\tau = \frac{\Delta U_{\min}}{\hbar} \frac{\Delta R}{v}, \quad (6)$$

равным произведению характерной частоты $\omega = \min(U_{nn} - U_{mm})/\hbar$ перехода на время τ прохождения области неадиабатичности.

При значениях $\xi > 1$ вероятность перехода экспоненциально мала ($\sim \exp(-2\pi\xi)$), так что реально электронные переходы происходят в относительно узких ($\Delta R \ll a_0$) областях сближения адиабатических термов или областях перестройки функций адиабатического базиса (о различных типах и моделях неадиабатических переходов см. в^{14, 15}). Типичная ситуация такого сближения (квазипересечения) осуществляется, когда вычисленные в некотором грубом приближении (в пренебрежении частью взаимодействий) термы $U_{11}^0(R)$ и $U_{22}^0(R)$ пересекаются в точке R_p и лишь при учете упущенного взаимодействия U_{12}^0 адиабатические термы раздвигаются на величину $2|U_{12}^0|$, где U_{12}^0 — матричный элемент взаимодействия между состояниями 1 и 2 выбранного базиса. В этом случае функции истинно адиабатического базиса (собственные функции полного гамильтониана $\hat{H}_{эл}$) в точке пересечения связаны только дифференциальной связью, имеющей в области пересечения максимальное значение $\hbar v/\Delta R$, где v — скорость ядер, и размер ΔR области перехода можно оценить как

$$\Delta R \approx |U_{12}^0(R_p)| \left| \frac{d}{dR} (U_{11}^0 - U_{22}^0)_{R=R_p} \right|. \quad (7)$$

Другим базисом, противоположным адиабатическому, является так называемый «диабатический» базис φ'_n , в котором отсутствует дифференциальная неадиабатическая связь $P'_{nm} = \left\langle \varphi'_m \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial R} \right) \varphi'_n \right\rangle = 0$, а вся связь осуществляется матрицей потенциальной энергии U'_{nm} .

Построение такого базиса из адиабатического можно осуществить¹⁷, если известна матрица P_{nm} в адиабатическом базисе и если считать, что

$P_{nm} \rightarrow 0$ при $R \rightarrow \infty$. Трудность, однако, заключается в том, что при $R \rightarrow \infty$ матрица P_{nm} не исчезает, а имеет порядок $\hbar v/a_0$ (a_0 — атомный размер) ввиду того, что адиабатические функции не дают правильного асимптотического вида разлетающихся атомов. Поэтому построение диабатического базиса из адиабатического возможно лишь с точностью до членов $\hbar v/a_0$, которые не существенны по сравнению с максимальным значением $\hbar v/\Delta R$ неадиабатической связи в области перехода только при условии малости размера этой области: $\Delta R \ll a_0$. Частичное устранение этой трудности возможно при использовании разложения по неортогональным движущимся атомным орбитам^{18, 19}.

На рис. 2 изображен типичный вид термов в области квазипересечения в диабатическом и адиабатическом базисах. Из исследования точно решаемой модели (см. гл. 5, модель Ландау — Зинера) такого квазипересечения следует, что при малых скоростях система с вероятностью, близкой к единице, следует по адиабатическим термам, в то время как при больших скоростях движение происходит по сглаженным диабатическим термам (см. рис. 2). Именно поэтому в интерпретации явлений рассеяния при больших энергиях большую роль играют диабатические потенциальные кривые

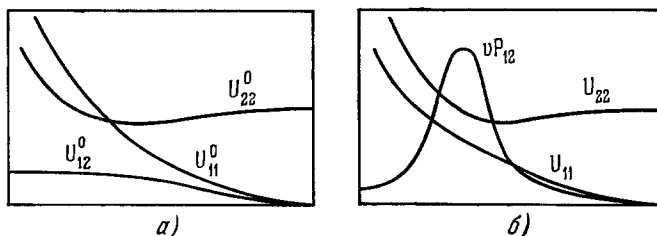


Рис. 2. Связь электронных термов в диабатическом и адиабатическом базисах.

а) Элементы потенциальной матрицы в диабатическом базисе; б) термы и матричный элемент оператора неадиабатичности в адиабатическом базисе.

и функции, полученные в приближении независимых частиц (т. е. в приближении молекулярных орбит) без учета корреляционной энергии электронов^{18, 20}.

Перейдем к обсуждению задачи о столкновении, имея в виду в основном высокоэнергетическое рассеяние на малые углы.

В полуклассическом рассмотрении это означает, что средняя классическая траектория движения атомов близка к прямолинейной:

$$R(t) = [b^2 + v^2 t^2]^{1/2}, \quad (8)$$

где b — прицельный параметр, v — скорость атомов, которая при высоких энергиях ($E \gg U_n - U_m$) не зависит от электронного состояния системы. Вероятность перехода $P_{nm}(b)$, как функция прицельного параметра, находится из решения уравнений (5) с траекторией $R(t)$ из (8). При этом малый угол рассеяния θ , соответствующий данному b , определяется по формуле классического рассеяния в некотором среднем потенциале $\bar{U}(R)$:

$$\theta = \left| \frac{1}{2E} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{b}{R} \frac{d\bar{U}}{dR} dz \right|, \quad R^2 = b^2 + z^2. \quad (9)$$

Формула (9) является частным предельным случаем формулы (1) при больших энергиях E , когда

$$E \gg \bar{U}(R). \quad (10)$$

Используем теперь это условие для квазиклассической формулировки задачи о неупругом рассеянии на малые углы (так называемое высоко-энергетическое приближение^{21, 22}; по поводу общей формулировки см.^{13, 23}). Гамильтониан системы равен сумме кинетической энергии ядер и электронного гамильтониана:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_{\mathbf{R}} + H_{\text{эл}}(\mathbf{r}, \mathbf{R}). \quad (11)$$

При больших энергиях взаимодействие атомов рассматривается как возмущение, медленно модулирующее падающую волну. В соответствии с этим волновую функцию системы можно искать в виде

$$\Psi(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = \sum_n A_n(\mathbf{R}) e^{ik_n z} \varphi_n^0(\mathbf{r}, \mathbf{R}), \quad (12)$$

где $A_n(\mathbf{R})$ — медленно меняющаяся по сравнению с $\exp(ik_n z)$ функция. Подставляя (12) в уравнение Шрёдингера и опуская вторые производные функций A_n по $\mathbf{R}$ (условие медленной модуляции), получим для амплитуд A_n уравнения

$$i \frac{\hbar^2 k_n}{\mu} \frac{\partial A_n}{\partial z} + \sum_m U_{nm} A_m + \sum_m i \frac{\hbar^2 k_m}{\mu} \left\langle \varphi_n^0 \left| \frac{\partial}{\partial z} \right| \varphi_m^0 \right\rangle A_m = 0. \quad (13)$$

Легко видеть, что уравнения (13) совпадают с параметрическими уравнениями (5) с прямолинейной траекторией (8) при замене $z = vt$, где $v = \hbar k / \mu$ — скорость атомов, которая при больших энергиях ($E \gg U_n - U_m$) не зависит от уровня n .

Уравнения (13) должны быть проинтегрированы при граничных условиях, обеспечивающих присутствие только одного электронного состояния $\varphi_{n_0}^0$ в падающей ($z \rightarrow -\infty$) волне: $\lim_{z \rightarrow -\infty} A(x, y, z) = \delta_{nn_0}$. Обозначим определенные при этих условиях амплитуды через $A_{nn_0}(x, y, z)$. В частности, для упругого рассеяния в потенциале $U(R)$ (одноэлектронное состояние) интегрирование (13) дает (индекс n_0 опущен)

$$A(x, y, z) = \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar v} \int_{-\infty}^z U(x, y, z) dz \right\}. \quad (14)$$

Из вида (12) волновой функции легко найти амплитуду $f_n(\theta)$ рассеяния системы на малый угол θ ($\theta \ll 1$) в определенном электронном состоянии φ_n^0 . Для этого достаточно взять соответствующую фурье-компоненту с импульсом $\mathbf{k}' = \mathbf{k} - \mathbf{q}$ ($q = k\theta$) от проекции функции

$$\Psi(\mathbf{r}, \mathbf{R}) - e^{+ikz} \varphi_{n_0}^0(\mathbf{r}, \mathbf{R})$$

на интересующее нас электронное состояние $\varphi_n^0(\mathbf{r}, \mathbf{R})$. В результате получим²² следующее выражение для амплитуды рассеяния:

$$f_n(\theta) = -2\pi i k_n \int_0^\infty b db [A_{nn_0}(b) - \delta_{nn_0}] J_0(k_n b \theta), \quad (15)$$

где J_0 — функция Бесселя, а амплитуды $A_{nn_0}(b)$, равные

$$A_{nn_0}(b) = \lim_{z \rightarrow \infty} A_{nn_0}(x, y, z), \quad b = [x^2 + y^2]^{1/2}, \quad (16)$$

находятся из решения (13) с начальными условиями $A_n(x, y, z \rightarrow -\infty) = \delta_{nn_0}$. Для потенциалов, убывающих быстрее, чем $1/R$, амплитуды A_{nn_0} отличны от нуля и быстро осциллируют (см.¹⁴) при $b \leq b_s$ и быстро убывают

при $b > b_s$, где характерный размер b_s можно оценить из соотношения

$$\frac{1}{\hbar v} \int_{-\infty}^{\infty} U(b_s, z) dz \equiv 2\delta(b_s) \approx 1. \quad (17)$$

Выражение (15) описывает как квантовое рассеяние (дифракцию) на малые углы, когда $kb_s\theta \leq 1$, так и классическое рассеяние при значениях θ таких, что $kb_s\theta \gg 1$. В последнем случае, используя асимптотическое разложение $J_0(x)$ при $x \gg 1$, получим окончательное выражение для амплитуды рассеяния при высоких энергиях на малые ($\theta \ll 1$), но классические ($kb_s\theta \gg 1$) углы рассеяния:

$$f_n(\theta) = \sqrt{\frac{2\pi k}{\theta}} \int_0^{\infty} \sqrt{b} db [A_{nn_0}(b) - \delta_{nn_0}] [e^{ikb\theta + i\frac{\pi}{4}} - e^{-ikb\theta - i\frac{\pi}{4}}]. \quad (18)$$

В простейшем случае чисто упругого рассеяния в потенциале $U(R)$ амплитуда, согласно (14), равна

$$A(b) = \exp[2i\delta(b)],$$

где фаза

$$\delta(b) = -\frac{1}{2\hbar v} \int_{-\infty}^{\infty} U(R) dz. \quad (19)$$

С учетом быстро осциллирующего характера подынтегрального выражения в (18) легко связать амплитуду рассеяния $f_n(\theta)$ с величинами, характеризующими классические траектории движения в потенциале $U(R)$ (см. следующую главу). Однако даже в простом потенциальном рассеянии сечение не всегда может быть сведено к классической форме (3), поскольку в результате интерференции измеримыми оказываются не только модули, но и фазы (19) амплитуд рассеяния. Обсуждению экспериментально наблюдаемых эффектов, обусловленных такой интерференцией, и их интерпретации посвящена остальная часть обзора.

В заключение настоящей главы отметим, что рассмотренное здесь приближение, часто именуемое «приближением прицельного параметра», является простейшим вариантом так называемой «эйкональной аппроксимации» или трехмерного квазиклассического рассмотрения, развиваемого в последнее время в ряде работ²⁴⁻²⁶ в применении к атомным столкновениям.

3. ИНТЕРФЕРЕНЦИОННЫЕ ЯВЛЕНИЯ В УПРУГОМ РАССЕЯНИИ

Явления упругого рассеяния атомов в значительной мере объясняются с помощью классической механики. Однако ряд важных особенностей рассеяния требует квантовомеханической интерпретации. Обсуждение этих явлений, в частности, при больших энергиях, составляет содержание этой главы.

Проследим связь квантового и классического описаний упругого рассеяния.

Квантовомеханическая формула для сечения рассеяния хорошо известна:

$$\sigma(\theta) = |f(\theta)|^2, \\ f(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) (e^{2i\delta_l} - 1) P_l(\cos \theta), \quad (20)$$

где $k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2\mu E}$, δ_l — фаза рассеяния l -й парциальной волны и P_l — полином Лежандра. В условиях атомного рассеяния в амплитуду рассеяния $f(\theta)$ вносит вклад большое число волн ($l \leq l_s \gg 1$), и фаза рассеяния δ_l , для которой можно использовать квазиклассические выражения, является плавной функцией l . Поэтому суммирование в (20) можно заменить интегрированием по l или по прицельному параметру $b = \hbar(l + 1/2)$ и для области не слишком малых углов $\theta > 1/l_s = \hbar/b_s$ (см. обсуждение (17) в гл. 2) заменить полиномы P_l их квазиклассическим выражением:

$$P_l(\cos \theta) = \left[\frac{1}{2} \left(l + \frac{1}{2} \right) \pi \sin \theta \right]^{-1/2} \sin \left[\left(l + \frac{1}{2} \right) \theta + \frac{\pi}{4} \right].$$

В результате получим известную ^{27, 22} формулу для амплитуды квазиклассического рассеяния:

$$f(\theta) = -\sqrt{\frac{2\pi k}{\sin \theta}} \int_0^\infty \sqrt{b} db \{e^{iS^+(b, \theta, E)} - e^{iS^-(b, \theta, E)}\}, \quad (21)$$

где действие $S^\pm(b, \theta, E)$ можно представить как сумму радиальной и угловых частей:

$$S^\pm(b, \theta, E) = 2\delta(b, E) \pm kb\theta \pm \frac{\pi}{4}. \quad (22)$$

Радиальная часть $2\delta(b, E)$ представляет собой квазиклассический предел квантовой фазы $2\delta_l$ при $l \gg 1$ и равна разности радиальных действий для движений в потенциале $U(R)$ и без потенциала:

$$\delta(b, E) = \lim_{R \rightarrow \infty} k \left\{ \int_{R_0}^R \sqrt{1 - \frac{U}{E} - \frac{b^2}{R^2}} dR - \int_b^R \sqrt{1 - \frac{b^2}{R^2}} dR \right\}. \quad (23)$$

Чтобы связать (21) — (23) с формулами классического рассеяния (1) — (3), надо учесть, что подынтегральное выражение в (21) является быстро осциллирующей функцией, так что в амплитуду (21) вносят вклад только окрестности точек b_i стационарной фазы, для которых обращается в нуль скорость изменения фазы

$$\left| \hbar \frac{\partial 2\delta(b, E)}{\partial b} \right|_{b=b_i} = 0, \quad \text{mod } 2\pi. \quad (24)$$

Нетрудно убедиться, что это соотношение совпадает с определением классического угла рассеяния через угол отклонения χ .

Суммирование всех вкладов в амплитуду рассеяния от окрестностей возможных точек b_i дает для сечения рассеяния выражение

$$\sigma(\theta, E) = |f(\theta)|^2 = \left| \sum_k \sigma_k^{1/2}(\theta, E) e^{iS_k[b_k(\theta, E), \theta, E] + i\gamma_k} \right|^2, \quad (25)$$

где $\sigma_i(\theta, E)$ — классические вклады различных ветвей в полное сечение, $S_k(\theta, E)$ — квазиклассические действия по соответствующим классическим траекториям. Постоянные фазы γ_i , возникающие при суммировании амплитуд по малой области Δb_i вблизи $b_i(\theta, E)$, зависят от знака $db_i/d\theta$, причем величины Δb_i — размеры областей, существенных для интегрирования в (21), — имеют порядок: $\Delta b_i \approx (\hbar b)^{1/2}/\theta^{1/2}$. Связь между $\sigma(\theta, E)$ и функциями $\sigma_k(\theta)$, $b_k(\theta)$ и $S_k(\theta)$ показана на рис. 3.

Таким образом, уже в простом потенциальном рассеянии существует возможность квантовой интерференции потоков, происходящих от классических траекторий с различными прицельными параметрами, но рассеиваемых на один и тот же угол θ . При этом действие $S(b, \theta, E)$ не только служит согласно (23), (24) генератором функции отклонения $\theta(b)$ или

обратной ей функции $b_i(\theta)$, но и определяет наблюдаемую тонкую структуру рассеяния при наличии в (25) интерференции.

Квазиклассическое приближение (25) неприменимо в тех случаях, когда действия или разность действий настолько малы, что Δb_i становится

сравнимым с b_i (рассеяние на малые углы) или две области Δb_i начинают перекрываться (рассеяние вблизи экстремального угла отклонения θ_r , или радужное рассеяние). Эти области углов, отмеченные на рис. 3, а, должны быть рассмотрены более подробно с учетом перекрывания различных областей Δb_i , дающих вклад в рассеяние на один и тот же угол θ .

Хорошо известно⁷, что конечная величина полного сечения

$$q(E) = \int |f(\theta)|^2 d\Omega = 2\pi \int_0^\infty b db |e^{2i\delta(b)} - 1|^2 = 8\pi \int_0^\infty b db \sin^2 \delta(b) \quad (26)$$

в конечном счете обязана интерференции волны, рассеянной на малый угол [амплитуда $e^{2i\delta(b)}$ в (26)], с нерассеянной волной [амплитуда 1 в (26)]. Если потенциал убывает достаточно быстро, то грубая оценка $q(E)$ может быть получена в приближении случайных фаз¹³, заменяющем рассеяние на истинном потенциале рассеянием на эквивалентной жесткой сфере радиуса b_s (см. (17)), или в приближении Ландау — Лифшица — Шиффа⁷, правильно учитывающем нерезкий край границы рассеяния. Первое из них соответствует усреднению $\exp(2i\delta(b))$ при $b < b_s$, где эта функция быстро осциллирует, и замене $e^{2i\delta(b)}$ на 1 при $b > b_s$, где фаза мала. Эти приближения качественно правильно описывают интерференционные эффекты в области I на рис. 3, а, где действие S мало. При этом приближенное выражение $\bar{q}(E)$ для сечения является монотонно убывающей функцией скорости, содержащей информацию только о той части потенциала $U(R)$, которая отвечает расстояниям $R \sim b_s$ (оптической аналогией этому служит дифракция от непрозрачного экрана).

Но при наличии притяжения с отталкиванием рассеянию на малые углы, кроме области $b \sim b_s$, отвечает также область конечных прицельных пара-

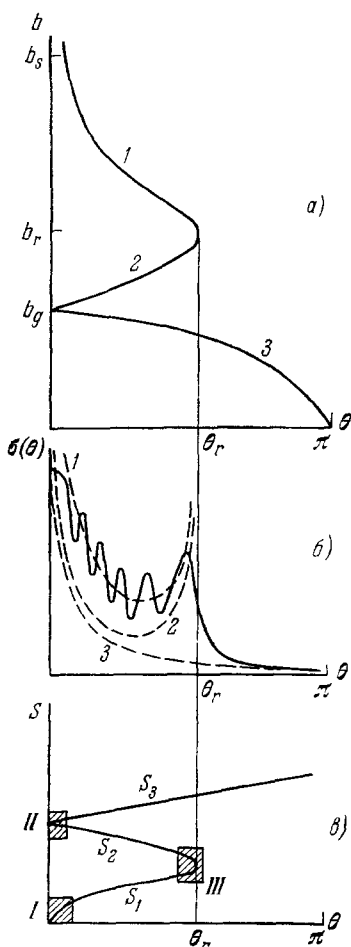


Рис. 3. Функции рассеяния, сечения и квазиклассические действия для потенциала с минимумом.

а) Различные ветви $b_k(\theta)$ ($k = 1, 2, 3$) функции рассеяния, полученной обращением функции $\theta = \theta(b)$, приведенной на рис. 1, б; б) штриховые кривые (1, 2, 3) — вклады различных ветвей в классическое дифференциальное сечение; сплошная кривая — квантовое сечение; в) квазиклассические действия как функция угла рассеяния. Заштрихованные участки указывают области нарушения квазиклассического описания. Рассеяние в области I эквивалентно дифракции от края экрана, в области II — дифракции от круговой щели.

метров (область II на рис. 3, в) вблизи $b = b_g$, при котором $\theta(b_g) = 0$. Поэтому дальнейшее уточнение сечения состоит в учете интерференции, дифрагированной в область тени волны с волной, рассеянной на малый

угол при $b \sim b_g$ и отвечающей дифракции от круговой щели радиуса b_g . Математически это означает, что в интеграле (26) по внутренней области $b < b_g$ следует учитывать вклад от точки b_g стационарной фазы функции $\exp [2i\delta(b)]$, где фаза $\delta(b)$ проходит через максимум (см. рис. 1, 2). Таким путем для $q(E)$ получается следующее сечение, описывающее так называемый эффект сияния:

$$\left. \begin{aligned} q(E) &= \bar{q}(E) - \Delta q, \\ \bar{q} &= 2\pi b_g^2, \end{aligned} \right\} \quad (27)$$

$$\Delta q = -4\pi^{3/2} b_g \left(\frac{d^2\delta}{db^2} \Big|_{b=b_g} \right)^{-1/2} \cos \left[2\delta_g(E) - \frac{\pi}{4} \right],$$

где $\delta_g(E) = \delta(b_g, E)$ — максимальная фаза рассеяния и Δq предполагается малым по сравнению с $\bar{q}$. При монотонном изменении E поправка Δq оказывается осциллирующей функцией энергии.

Подробный обзор по эффекту сияния при атомных столкновениях дан в работах ^{28, 29}. На рис. 4, взятом из работы ³⁰, приведены осцилляции полного сечения рассеяния атомов Cs на Hg. Анализ и интерпретация осцилляций становятся особенно простыми в высокоэнергетическом приближении (см. ниже), когда максимальная фаза оказывается обратно пропорциональной скорости, т. е. $\delta_g = \eta/v$. Отсюда на основании (27) найдем

$$\frac{\Delta q}{\bar{q}} \approx -\cos \left[\frac{2\eta}{v} - \frac{\pi}{4} \right] = -\cos [\pi(2N(E) + 1)], \quad (28)$$

где экспериментально определяемая функция $N(E)$ принимает целые значения в максимумах Δq и полуцелые — в минимумах Δq . Зависимость N от $1/v$ иллюстрируется на рис. 5 для системы Cs — Hg, для которой полное сечение приведено на рис. 4. В полном согласии с (28) N оказывается линейной функцией $1/v$ с ординатой $3/8$ в начале. Измерение полного сечения

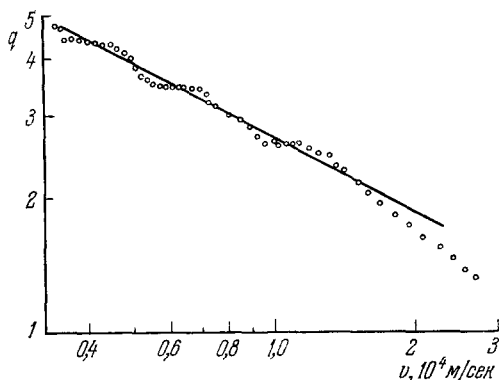


Рис. 4. Зависимость полного сечения рассеяния Cs на Hg от скорости. Сечение — в относительных единицах ³⁰.

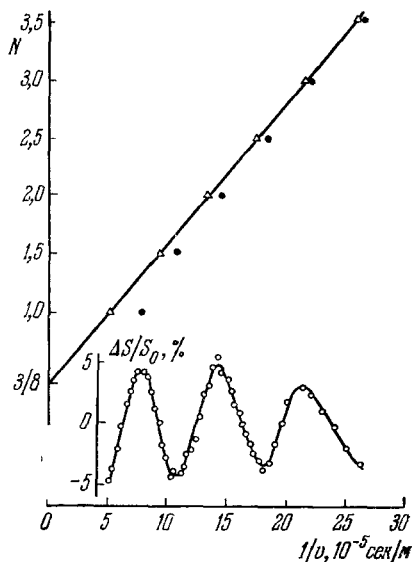


Рис. 5. Анализ осцилляций полного сечения для рассеяния Cs на Hg в высокоэнергетическом приближении. Кружки — экспериментальные результаты без учета конечного углового разрешения, треугольники — результат учета конечного разрешения ³⁰.

позволяет определить параметры дальнедействующей части потенциала (по абсолютной величине $\bar{q}$ и зависимости $\bar{q}$ от E), «объем» потенциальной ямы (по частоте осцилляций Δq) и нижнюю границу числа связанных состояний в этой яме (по числу экстремумов Δq) ²⁹.

Еще больше информации о потенциале содержат дифференциальные сечения рассеяния.

На возможность восстановления потенциала $U(R)$ по классическому дифференциальному сечению было впервые указано Хойтом³¹. Однако этот метод³¹ требовал знания сечения $\sigma(\theta, E)$ при различных энергиях E . Фирсов³² впервые показал, как потенциальная функция может быть получена из данных о дифференциальном сечении при фиксированной энергии. Идеально при абсолютной точности измерения достаточно знания сечения $\sigma(\theta, E)$ при всех углах $0 < \theta < \pi$ и единственном значении энергии E . Реально, однако, сечение известно (и то с ограниченной точностью) лишь в ограниченной области, чаще всего малых углов, из-за резкого падения интенсивности рассеянного потока при увеличении угла. В такой ситуации обработку экспериментальных данных удобно проводить сразу в аппроксимации, соответствующей рассеянию при больших энергиях на малые и средние углы. В этом случае решение обратной задачи принимает особо простой вид³².

В связи с этим обратимся к пределу высоких энергий. Рассмотрим переход от общего квазиклассического описания, даваемого формулами (20) — (25), к высокоэнергетической аппроксимации «прицельного параметра», изложенной в гл. 2. Для этого достаточно сохранить высший член разложения функций рассеяния (22), (24), (25) по параметру $U(R)/E$ (систематическое разложение проведено в работах^{33, 34}). При этом радиальное действие (19) равно

$$2\delta(b, E) = \frac{2}{v} \int_b^\infty \frac{U(R) dR}{\sqrt{1 - b^2/R^2}} + O(U/E) \quad (29)$$

и оказывается совпадающим с фазой (18) амплитуды $A(b)$ в методе прицельного параметра. Для дальнейшего удобно перейти к новым переменным — приведенному углу τ и приведенному сечению ρ — по формулам

$$\tau = E\theta, \quad (30)$$

$$\rho(\tau, E) = \theta \sin \theta \sigma(\theta, E). \quad (31)$$

В новых переменных действие (22) запишется с точностью до членов $O(U/E)$, опускаемых далее, в виде

$$S_\pm^\pm(b, E, \theta) = \frac{1}{v} s_0^\pm(b, \tau), \quad (32)$$

где приведенное действие $s^{\pm 0}(b, \tau)$ равно

$$s_0^\pm(b, \tau) = -2 \int_b^\infty \frac{U(R) dR}{\sqrt{1 - b^2/R^2}} \pm 2b\tau \pm i \frac{\pi}{4}. \quad (33)$$

Уравнение (24), определяющее классический угол рассеяния как функцию прицельного параметра, будет иметь вид

$$\tau(b) = \pm b \int_b^\infty \frac{1}{R} \frac{dU}{dR} \frac{dR}{\sqrt{1 - (b^2/R^2)}}, \quad (34)$$

в точности совпадающий с классической формулой (9) рассеяния на малые углы. Обращая (34), мы получим, что с точностью до высших по U/E членов прицельный параметр b является функцией только τ :

$$b = b(\tau). \quad (35)$$

Поскольку $1/E = \theta/\tau$, разложение по $1/E$ при фиксированном угле можно рассматривать так же, как разложение по малым углам при фиксированной энергии.

Из обычного выражения (3) для сечения легко показать, что соответствующее приведенное сечение имеет вид

$$\rho(\tau, E) = \frac{1}{2} \frac{d(b^2)}{d \ln \tau} = \rho_0(\tau) + O(1/E). \quad (36)$$

Это уравнение выражает весьма важный принцип соответствия, впервые сформулированный в работе ³³, который утверждает, что в пределе малых углов или больших энергий приведенное сечение становится функцией только одной переменной $\tau = E\theta$.

Значит, экспериментальные данные, полученные для различных энергий (от термических до 500 кэв), могут быть в приведенных переменных ρ , τ сведены к одной кривой $\rho_0(\tau)$ или к семейству кривых с общей огибающей $\rho_0(\tau)$. Это существенно повышает точность и надежность экспериментальной кривой $\rho_0(\tau)$, которую можно далее простым образом использовать для решения обратной задачи.

Действительно, если у нас есть данные в достаточно широкой области τ , то, интегрируя (36), найдем

$$b_0^2(\tau) = \int_{\tau}^{\infty} \rho_0(\tau') d \ln \tau'. \quad (37)$$

Но обратная (37) функция $\tau_0(b)$ непосредственно связана с рассеивающим потенциалом $U(R)$ согласно формуле (34), из которой сразу получаем

$$U(R) = \frac{2}{\pi} \int_R^{\infty} \frac{\tau_0(b) db}{(b^2 - R^2)^{1/2}}. \quad (38)$$

Формула (38) представляет собой частный случай формулы Фирсова ²⁹, соответствующий большим энергиям. Таким образом, процедура получения потенциала $U(R)$ из данных о рассеянии при больших энергиях сводится к (37), (38) и оказывается сравнительно простой.

В качестве примера остановимся на анализе данных упругого рассеяния в системе $\text{He}^+ - \text{Ne}$ ³⁵. На рис. 6 даны приведенные сечения упругого, а при высоких энергиях квазиупругого рассеяния He^+ на Ne , полученные различными авторами для различных энергий и углов. На основе этих данных были восстановлены ³⁵ параметры потенциала, описываемого комбинацией кулоновского отталкивания, экранированного электронным облаком Ne , в сочетании с поляризационным притяжением на больших расстояниях. Отметим еще одну характерную черту кривых упругого рассеяния, приписываемую взаимодействию между электронными состояниями. Это — осцилляторная структура, наложенная на плавное изменение сечения, начинающаяся для любых энергий при вполне определенном значении приведенного угла $\tau = 1950 \text{ эв} \cdot \text{град}$ и, следовательно, обусловленная процессом, происходящим при вполне определенном межъядерном расстоянии $b_c = b(\tau_c) \simeq 1,9 a_0$. В работах ^{35, 36} доказано, что эти аномалии вызываются квазипересечением в точке $R \approx b_c$ основного и возбужденного термов, и точка $\tau = \tau_c$ отвечает порогу неупругого канала. К более подробному обсуждению этого явления мы вернемся в гл. 5 при рассмотрении неупругих процессов. Другие примеры восстановления потенциала по данным упругого рассеяния можно найти, например, в ^{9, 37, 38}.

Преимущества и простота приведенной аппроксимации прицельного параметра проявляются и в анализе тонкой интерференционной структуры сечений рассеяния при больших энергиях. Действительно, фаза осцилляций сечения (25) определяется разностью действий ΔS по различным траекториям, или для осцилляций полного сечения (27) величиной действия при $\theta = 0$. Но при больших энергиях зависимость действия от энергии при фиксированном τ определяется согласно (32), (33) множителем $1/v = \mu/\sqrt{2\mu E}$. Следовательно, фаза осцилляций является линейной функцией обратной скорости, или период осцилляций сечения σ ,

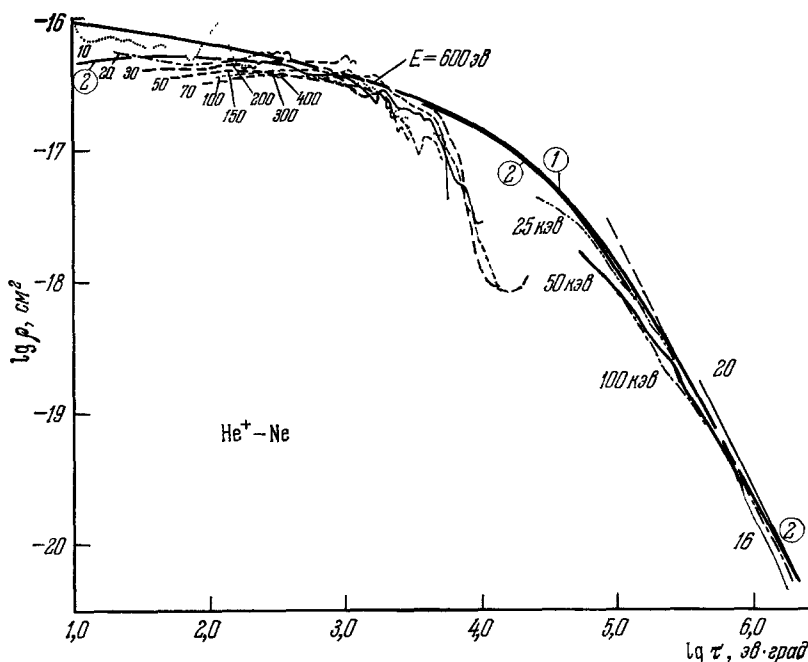


Рис. 6. Сечения упругого и квазиупругого рассеяния He^+ на Ne в приведенных переменных ρ и τ для различных энергий³⁵.
1 и 2 — теоретические кривые для различных аппроксимаций рассеивающего потенциала.

как функция от $1/v$, является постоянной величиной. Высокоэнергетическое приближение позволяет получить также сравнительно простые выражения для сечения рассеяния на малые углы. Приближение непрозрачного экрана со щелью, удовлетворительное для расчета полного сечения в соответствии с (27), оказывается непригодным, вообще говоря, для расчета дифференциального рассеяния на углы $\theta \approx \lambda/b_s$: в этой области важна нерезкость потенциала, которая несущественна в области первого дифракционного максимума при $\theta < \lambda/b_s$. Более подробное рассмотрение показывает⁷, что осцилляционная структура сечения при $\theta \sim \lambda/b_s$, которую можно было бы ожидать по аналогии с дифракцией от экрана, полностью смазывается за счет нерезкости потенциала, и первый пик дифракционного максимума при увеличении θ плавно переходит в функцию $\sigma(\theta)$, описывающую классическое рассеяние на малые углы. Экспериментальное исследование этой области позволяет определить параметры дальнедействующей части потенциала. Один из немногих примеров исследования рассеяния в области малых углов, включающей классическую и квантовую области, приведен на рис. 7.

Остановимся теперь на интерференционных явлениях при рассеянии на большие углы. Из рис. 3 видно, что при $\theta < \theta_r$ существует интерференция между тремя ветвями функции $b_i = b_i(\theta)$. Экспериментально, однако, удастся разрешить только низкочастотные осцилляции, обусловленные интерференцией волн от ветвей 1 и 2*). Эта интерференция аналогична интерференции при образовании радуги, и соответствующая теория является частным случаем теории рассеяния волн на экстремальный угол.

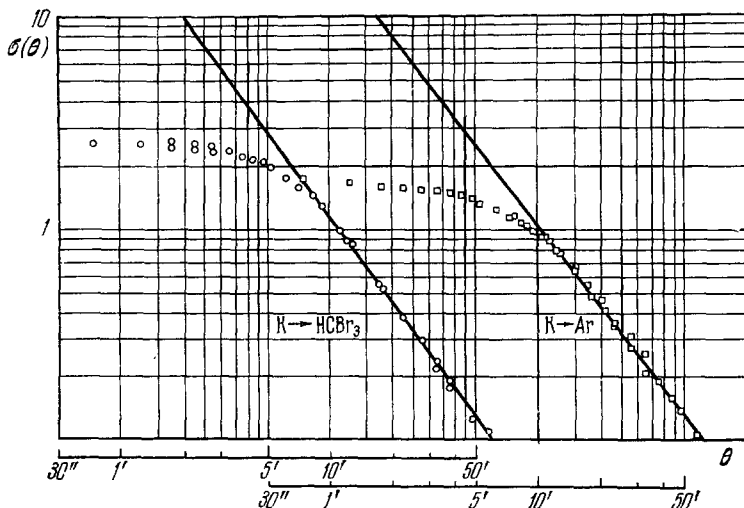


Рис. 7. Сечения рассеяния (в отн. ед.) К на Аг и на НСВг₃ на малые углы.

При $\theta < \theta_r$ (светлая сторона радуги) классическое дифференциальное сечение (3) монотонно возрастает при $\theta \rightarrow \theta_r$ и вблизи θ_r расходится как $(\theta_r - \theta)^{1/2}$. Квазиклассическое описание (25) дает осцилляции на светлой стороне радуги, однако не позволяет проследить переход через угол θ_r , поскольку в этом случае метод стационарной фазы неприменим^{20, 24}. Параболическая аппроксимация функции $\theta = \theta(b)$ вблизи b_r и учет слияния двух точек стационарной фазы (область 1–2, рис. 3, 6) дает следующее выражение для $\sigma(\theta)$ вблизи θ_r через функцию Эйри²⁷:

$$\sigma(\theta) = \frac{2\lambda b_r}{\sin \theta} |y|^{-2/3} \Phi^2(|y|^{-1/3}(\theta - \theta_r)), \quad y = 2\lambda^2 \frac{d^2\theta}{db^2} \Big|_{b=b_r}. \quad (39)$$

Эта формула описывает экспоненциальное затухание интенсивности на темной стороне радуги и первые несколько осцилляций и на светлой стороне. Затем квазиклассическая асимптотика функции Эйри позволяет сшить (39) с общей формулой (25). Переход радужных осцилляций в осцилляции при малых, но классических углах, отвечающих эффекту сияния, разобран в работе³⁹.

Экспериментальное исследование рассеяния в области радуги позволяет получить информацию о глубине потенциальной ямы (по величине угла θ_r) и о межатомном расстоянии R_m , отвечающем минимуму потенциала (по частоте осцилляций $\sigma(\theta)$ со светлой стороны радуги)⁴⁰. Рис. 8 иллюстрирует возможности эксперимента по разрешению радужной структуры⁴¹.

*) Недавно удалось экспериментально детектировать высокочастотные осцилляции (интерференция от трех ветвей функции $b(\theta)$) в дифференциальных сечениях рассеяния атомов инертных газов¹⁰⁸.

Отметим, наконец, еще одну причину осцилляций дифференциального сечения при рассеянии тождественных атомов, предсказанную Моттом ⁴². Поскольку волны, отвечающие налетающей частице и мишени, могут интерферировать, наблюдаемое сечение (очевидно, симметричное относительно угла $\theta = \pi/2$) равно

$$\sigma(\theta) = |f(\theta) \pm f(\pi - \theta)|^2,$$

где знак $\pm$ зависит от типа статистики ядер. На рис. 9 приведено сечение

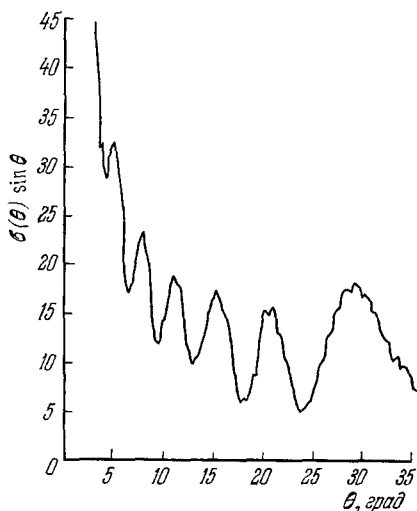


Рис. 8. Радужное рассеяние Na на Hg ⁴¹.

Сечение — в относительных единицах.

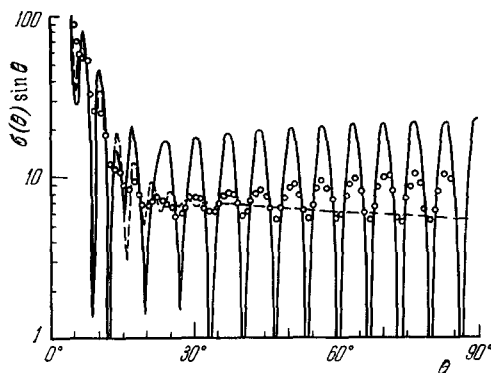


Рис. 9. Осцилляционная структура сечения рассеяния Ne⁺ на Ne, обусловленная тождественностью атомов ⁴³.

рассеяния ²⁰Ne на ²⁰Ne для энергии $E \approx 10^{-13}$ эрг (кружки) ⁴³. Сплошной линией показан результат расчета $\sigma(\theta)$ для потенциала Леннарда-Джонса, а штриховой линией — сечение рассеяния без учета тождественности, когда $\sigma(\theta) = |f(\theta)|^2$.

4. ИНТЕРФЕРЕНЦИЯ В РЕЗОНАНСНЫХ ПРОЦЕССАХ

Экспериментальное исследование рассеяния при наличии нескольких каналов (неупругое рассеяние) дает образцы богатейшей интерференционной картины сечений, гораздо более сложной, чем в обычном потенциальном рассеянии. Особое место в неупругих процессах занимают резонансные симметричные процессы — такие, как спиновый обмен, передача возбуждения и перезарядка. Это связано с тем, что результат столкновения может быть описан в терминах интерференции волн, рассеянных различными потенциалами и отвечающих различным (четному и нечетному) электронным молекулярным состояниям, без каких-либо переходов между этими состояниями. В этом смысле двухуровневая задача симметричного процесса является простейшим обобщением одноуровневой задачи и все результаты предыдущей главы могут быть немедленно использованы для построения соответствующей теории.

Из всех симметричных процессов перезарядка является, по-видимому, наиболее полно исследованной. Она изучалась в следующих атомных системах: H⁺ — H ^{44, 45}, He⁺ — He ⁴⁶⁻⁴⁹, Li⁺ — Li ⁵⁰, Ne⁺ — Ne ⁵¹. Поэтому мы для определенности будем рассматривать именно этот тип процессов.

Физически наблюдаемую ситуацию, когда заряд локализован на одной из частиц в начале и в конце рассеяния, следует описывать в простейшем случае перезарядки s-электрона линейной комбинацией четного g и нечетного u состояний. При этом вероятность $P(b)$ перезарядки для прямо-

линейной траектории с прицельным параметром b определяется разностью фаз (19), набегающих в результате столкновения в потенциалах U_g и U_u соответственно:

$$P(b, E) = \sin^2 \left[\frac{1}{\hbar v} \int_b^\infty (U_g - U_u) \frac{R dR}{\sqrt{R^2 - b^2}} \right] = \sin^2 [\Delta\delta(b, E)]. \quad (40)$$

Это выражение, отвечающее высокоэнергетическому приближению, предсказывает (в полной аналогии с эффектом сияния при упругом рассеянии) осцилляционный характер полного сечения перезарядки, если разность фаз упругого рассеяния в четном и нечетном состояниях проходит через экстремум^{52, 53}. Вычисление полного сечения перезарядки $q_{\text{пер}}$ с учетом области медленных осцилляций вероятности дает

$$q_- = 2\pi \int_0^\infty b db P(b, E) = \bar{q}_- + \Delta q_-,$$

где $\bar{q}_-$ — монотонная составляющая сечения, а Δq_- — осциллирующая добавка:

$$\begin{aligned} \bar{q}_- &= \frac{\pi}{2} b_s^2, \\ \Delta q_- &= -\pi^{3/2} b_m \left(\frac{d^2 \Delta\delta}{db^2} \Big|_{b=b_m} \right)^{-1/2} \times \\ &\quad \times \cos [2\Delta\delta - \pi/4]. \end{aligned} \quad (41)$$

Прицельные параметры b_s и b_m определяются условиями

$$\begin{aligned} \Delta\delta(b_s) &\approx 1, \\ \frac{d\Delta\delta}{db} \Big|_{b=b_m} &= 0, \end{aligned}$$

из которых первое может быть уточнено, если вместо приближения случайных фаз вблизи границы перезарядки выполнить указанное интегрирование по b с учетом правильной асимптотической формы $U_g - U_u$ ^{54, 5}. На рис. 10 показана энергетическая зависимость полного сечения перезарядки щелочных металлов⁵⁵. Эта зависимость использована в работе⁶⁴ для определения параметров предложенного аналитического выражения для $\Delta U(R)$.

Формула (40) для вероятности перезарядки позволяет качественно правильно описать⁴⁸ и осцилляции дифференциального сечения рассеяния с перезарядкой, если прицельному параметру поставить по формуле (9) в соответствие θ — угол рассеяния на среднем потенциале $\bar{U} = \frac{1}{2}(U_g + U_u)$. На рис. 11 из⁴⁸ изображены карта максимумов вероятности перезарядки $P(\theta, E)$ для $\text{He}^+ - \text{He}$, полученная экспериментально и рассчитанная по формуле (40). В той же работе⁴⁸ показано, что, как и следует ожидать из (40), экспериментальные фазы осцилляций $2\pi N(\tau, E)$ при фиксированных значениях приведенного угла $\tau = \theta E$ оказываются^{47, 48} линейными функциями $1/v$ (хотя и не обращаются в нуль при $1/v \rightarrow 0$, как этого требует формула (40)), причем наклоны прямых при достаточно

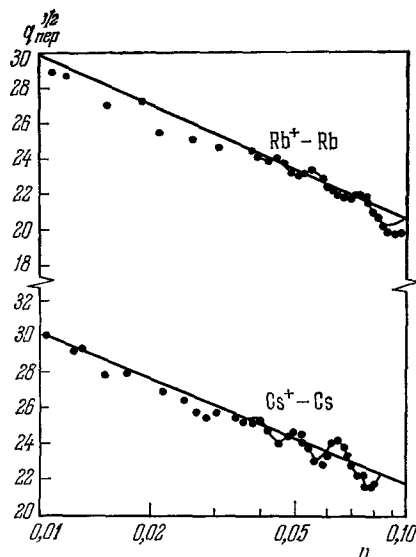


Рис. 10. Зависимость сечения резонансной перезарядки $q_{\text{пер}}$ атомов Rb и Cs от скорости⁵⁵.

Прямые линии описывают монотонную составляющую $q_{\text{пер}}$. Сечения и скорость — в атомных единицах.

больших τ ($b \rightarrow 0$) не зависят от τ и дают значение интеграла при $b = 0$

$$I(0) = 2 \int_0^\infty [U_g - U_u] dR. \quad (42)$$

Например, для перезарядки H^+ на H экспериментальное значение

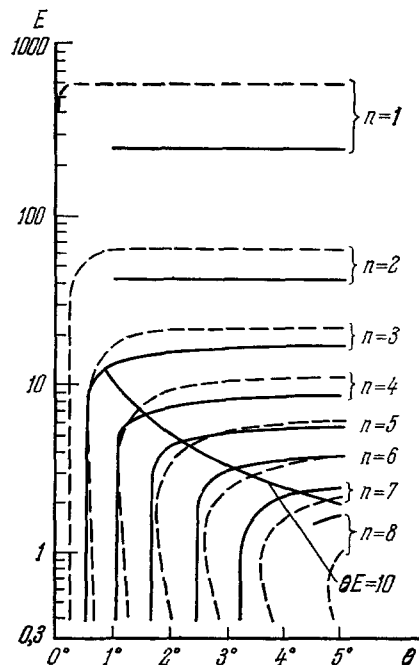


Рис. 11. Карта максимумов вероятности перезарядки He^+ на He как функция угла рассеяния и энергии⁴⁸. Сплошные линии — экспериментальные данные, штриховые — теоретический расчет.

$I(0) = 63,7 \text{ эв} \cdot \text{\AA}^{45}$ оказывается близким к величине $70,2 \text{ эв} \cdot \text{\AA}$, вычисленной на основе известных из⁵⁷ потенциалов H_2^+ . Несколько сложнее обстояло дело с интерпретацией периода осцилляций в системе $He^+ - He$. Для объяснения наблюдаемой величины $I(0)$ Лихтен¹⁶ предположил, что движение в $^2\Sigma_g$ -состоянии происходит не по нижнему адиабатическому терму, для которого независимая оценка $I(0)$ давала сильно заниженное значение, а по адиабатическому $^2\Sigma_g$ -терму, который в одноэлектронном приближении отвечает конфигурации $(1\sigma_g 1\sigma_u)^2$ системы He_2^+ . На рис. 12 из работы¹⁶ изображены термы этой системы. При $R < 2a_0$ адиабатический терм $1\sigma_g 1\sigma_u^2$ пересекает термы той же симметрии, и при $R < 1,3a_0$ состояние становится автоионизационным. Однако прекрасное согласование наблюдаемой интерференционной картины с предсказаниями Лихтена¹⁶ показывает, что при больших скоростях взаимодействием, вызывающим переходы при пересечениях Σ_g -термов, можно пренебречь, и движение действительно происходит по указанному адиабатическому терму.

Однако такое описание не могло объяснить ряд наблюдаемых явлений и прежде всего затухание осцилляций, т. е. тот факт, что экспериментальные осцилляции сечения не доходят до нулевого значения. Поэтому в работах^{58, 59} было предложено более строгое квазиклассическое описание, справедливое и при малых энергиях.

Квантовые сечения с переносом или без переноса заряда равны⁶⁰

$$\sigma_{\pm}(\theta, E) = |f_g(\theta, E) \pm f_u(\theta, E)|^2, \quad (43)$$

где $f_{g, u}$ — амплитуды рассеяния в потенциалах $U_{g, u}$ соответственно. Используя для амплитуд квазиклассические выражения, получим сечения $\sigma_{\pm}$ в виде (для простоты считаем, что при данных θ, E отсутствует радужное рассеяние на нижнем терме)

$$\sigma_{\pm}(\theta, E) = |\sigma_g^{1/2}(\theta, E) e^{iS_g(bg, \theta, E) + i\gamma_g} \pm \sigma_u^{1/2}(\theta, E) e^{iS_u(bu, \theta, E) + i\gamma_u}|^2. \quad (44)$$

Здесь связь действия S и прицельного параметра b с потенциалом при данных E и θ определяется формулами (22), (23), а σ_g, σ_u — сечения упругого рассеяния в полях U_g и U_u .

Таким образом, в интерференцию при определенном угле θ вносят вклад траектории, соответствующие различным прицельным параметрам b_g и b_u на каждом из двух термов. Поскольку σ_g и σ_u различны,

сечения (44), осциллирующие между огибающими $|\sigma_g^{1/2} \pm \sigma_u^{1/2}|^2$, имеют в минимумах конечное (не нулевое) значение, в отличие от того, что дает формула (40). Максимумы и минимумы осцилляций сечений являются приближенно экстремумами функции

$$\cos(S_g - S_u + \Delta\gamma) = \cos 2\pi N(E, \theta), \quad (45)$$

где $N(E, \theta)$ — обсуждавшаяся ранее экспериментальная функция, принимающая целые значения в максимумах и полуцелые в минимумах

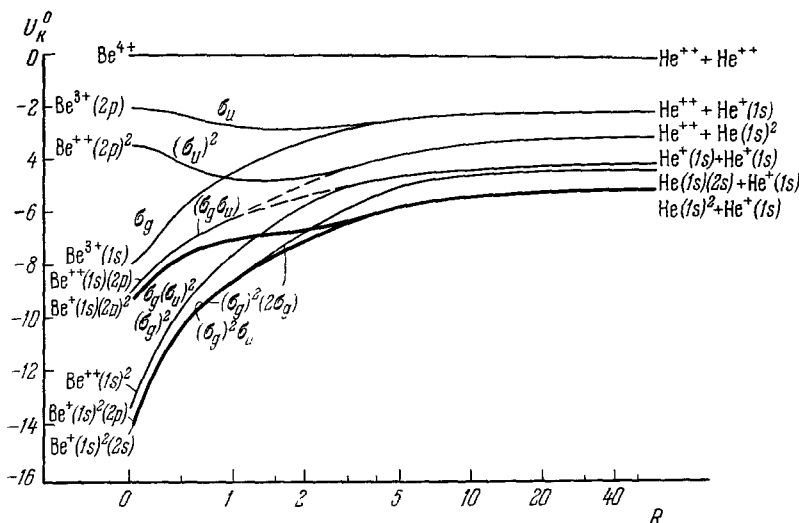


Рис. 12. Корреляционная диаграмма термов системы He_2 при переходе к объединенному иону Be^{+16} .

Энергия и расстояние — в атомных единицах.

сечения. Производная этой функции по θ при фиксированной энергии связана с периодом $\Delta\theta$ осцилляций по углу,

$$1/\Delta\theta = \left(\frac{\partial N}{\partial \theta} \right)_E, \quad (46)$$

и в силу соотношения $b = \lambda \partial S / \partial \theta$ может быть использована для получения важной характеристики — разности $\Delta b = b_g - b_u$ двух прицельных параметров, вносящих вклад в интерференцию:

$$\Delta b = \frac{2\pi\hbar}{v} \frac{\partial N}{\partial \theta} = \frac{mv}{2} \frac{d\Delta S}{d\tau}. \quad (47)$$

При этом при больших энергиях в силу того, что $S \sim s(\tau)/v$, величина (47) зависит только от одной переменной τ или от прицельного параметра и не зависит от энергии при фиксированном τ .

Приведенное квазиклассическое описание существенно улучшает согласие с экспериментом, в особенности для малых энергий^{61, 62}. На рис. 13, взятом из работы⁶³, приведено сравнение теоретической и экспериментальной кривой дифференциального сечения, как функций угла рассеяния, для $\text{He}^+ - \text{He}$ при 300 эВ. Здесь демонстрируются эффекты ядерной симметрии, аналогичные описанным в гл. 2 для Ne_2 (см. рис. 9), приводящие к дополнительным осцилляциям в системе тождественных ядер $^4\text{He}^+ - ^4\text{He}$ по сравнению с системой $^4\text{He}^+ - ^3\text{He}$.

Однако интерпретация экспериментов по симметричной резонансной перезарядке в приближении двух состояний не позволяет объяснить одного эффекта: малое систематическое изменение фазы осцилляций.

Двухуровневое приближение согласно (40) или (45) предсказывает пропорциональность фазы осцилляций обратной скорости и, следовательно, обращение фазы в нуль при

$\frac{1}{v} \rightarrow 0$. Между тем в экспериментах, как для $H^+ - H^{44}$, так и для $He^+ - He^{47, 48}$, экстраполяция фазы при $\frac{1}{v} \rightarrow 0$

дает конечную величину. Подробное исследование этого вопроса для перезарядки $H^+ - H$ показывает ⁶⁴, что при больших скоростях и малых прицельных параметрах очень существенным становится кориолисово взаимодействие электрона с вращающейся молекулярной осью. Для описания этого эффекта необходимо выйти за рамки двухуровневого приближения. Особенно эффективно такое взаимодействие для тех молекулярных состояний разной симметрии, которые коррелируют с одним и тем же атомным состоянием в пределе объединенного атома, что как раз и осуществляется в системе H_2^+ . Один из участвующих в перезарядке молекулярных термов — именно терм $^2\Sigma_u$ и терм $^2\Pi_u$, отвечающие

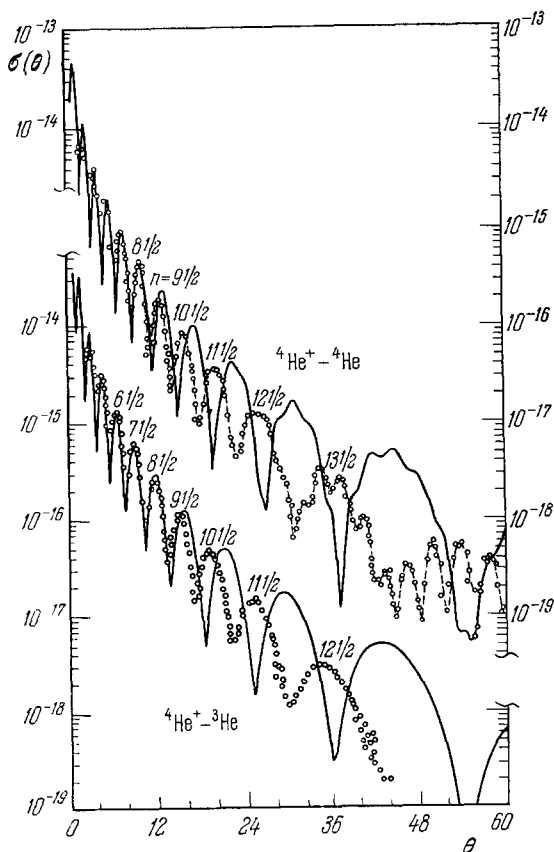


Рис. 13. Дифференциальные сечения перезарядки He^+ на He и He^+ на He^3 .

щий при $R \rightarrow \infty$ возбуждению атома H , оказываются вырожденными в пределе $R \rightarrow 0$, поскольку в этом пределе соответствующие состояния являются двумя компонентами ($p\sigma$ и $p\pi$) $2P$ -состояния объединенного атома (He^+). Общая теория такой $\Sigma - \Pi$ -неадиабатической связи дана в работах ^{65, 66}. Эта связь приводит как к возможности неупругих переходов (и следовательно, также является причиной затухания осцилляций), так и к сдвигу фазы осцилляций в упругом канале. Расчеты рассеяния в $H^+ - H$ -системе ^{67, 68} с учетом большого числа состояний дают полное согласие теоретической кривой с данными Эверхарта (см. ⁴⁵) как по амплитуде, так и по фазе осцилляций (рис. 14). Хотя данные ⁴⁵ не содержали никакой информации о возбужденных состояниях

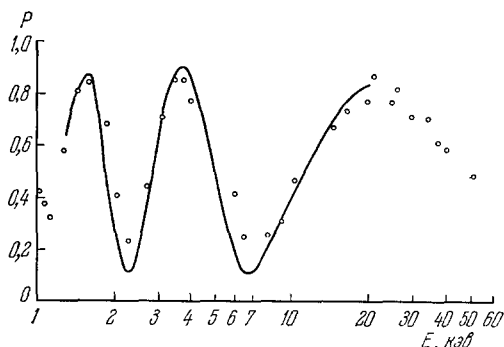


Рис. 14. Сравнение теоретической ⁶⁸ (сплошная линия) и экспериментальной ⁴⁵ (точки) вероятности перезарядки H^+ на H .

продуктов, тем не менее фаза осцилляций оказалась настолько чувствительной, что позволила предсказать значительную вероятность неупругого рассеяния в $2S$ -состояние. Это предсказание получило недавно экспериментальное доказательство⁶⁹ при измерении дифференциального сечения рассеяния возбужденных атомов при столкновении H с H^+ .

5. СПЕКТРОСКОПИЯ НЕУПРУГИХ ПРОЦЕССОВ

В противоположность резонансным процессам, таким, как рассмотренная выше перезарядка, полные сечения неупругих процессов как функции скорости обнаруживают характерный широкий максимум при некоторой скорости v_m . Из описания подобного поведения полных сечений удалось выявить важный параметр, от которого зависят сечения неупругих процессов, — параметр адиабатичности или параметр Мессии $\xi = \omega\tau$, равный произведению характерной частоты ω перехода на характерное время перехода τ . Неупругий процесс идет с заметной вероятностью только при $\xi \leq 1$. Если этот критерий записать в виде

$$\xi = \frac{\Delta E}{\hbar} \frac{a}{v} \leq 1, \quad (48)$$

где ΔE — энергия неупругого перехода и a — характерный атомный размер, то нетрудно убедиться, что большинство неупругих процессов должны были бы идти с заметной вероятностью лишь в килоэлектронвольтовой области энергий. Между тем многочисленные эксперименты показывают, что процессы возбуждения, как правило, имеют большие сечения при гораздо меньших энергиях, чем предсказывается простым критерием (48), — при энергиях, иногда почти примыкающих к энергетическому порогу рассматриваемого процесса. В качестве примера укажем на возможность ионизации при энергии ниже 100 эв даже в такой системе, как Na^+ , Ne^{70} , где атомные оболочки подобны оболочкам инертного газа.

Причина такого кажущегося противоречия состоит в том, что реальные переходы происходят в областях сближения или квазипересечения термов. В силу этого грубый критерий (48) должен быть заменен более тонким критерием с параметром Мессии, определенным по формуле (6). Если при этом энергетические расстояния до других термов достаточно велики (соответствующие параметры Мессии велики), то неупругий процесс можно описывать в базисе двух электронных состояний.

Ограничиваясь приближением двух состояний, предположим, что адиабатические функции $\varphi_i(\mathbf{r}, \mathbf{R})$ заданы. Тогда путем линейного преобразования можно из условия $\langle \varphi_1^0 | \frac{\partial}{\partial R} | \varphi_2^0 \rangle = 0$ однозначно построить две функции диабатического базиса $\varphi_i^0(\mathbf{r})$ при дополнительном условии $\varphi_i^0(\mathbf{r}) = \lim_{R \rightarrow \infty} \varphi_i(\mathbf{r}, \mathbf{R})$. Полная волновая функция сталкивающихся атомов может быть представлена в виде разложения *)

$$\Psi(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = \sum_{l, m} \frac{1}{R} Y_{lm} \left(\frac{\mathbf{R}}{R} \right) [\varphi_1^0(\mathbf{r}) \chi'_{l, l}(R) + \varphi_2^0(\mathbf{r}) \chi_{2, l}(R)]. \quad (49)$$

*) Форма этой записи предполагает, что угловой момент относительного движения атомов сохраняется. Совместно с ограничением связи двух состояний это означает, что разложение (49) применимо, строго говоря, к описанию неупругих процессов с участием только s -электронов. В действительности, однако, двухуровневое приближение может с успехом применяться и к процессам, в которых происходит изменение орбитального углового момента электрона. Для этого необходимо рассматривать отдельные области неадиабатичности и строить полную матрицу рассеяния путем сшивки решений внутри и вне этих областей.

Полное сечение и амплитуда дифференциального сечения рассеяния в то или иное состояние n ($n = 1, 2$) при исходном состоянии n_0 выражаются суммами по моментам l , которые можно, как обычно, заменить интегралами по прицельным параметрам

$$\sigma_{nn_0}(E) = 2\pi \int_0^\infty b db P_{nn_0}(b), \quad P_{nn_0} = |S_{nn_0} - \delta_{nn_0}|^2, \quad (50)$$

$$f_{nn_0}(\theta, E) = -\frac{2\pi k_0}{\sqrt{\sin \theta k}} \int_0^\infty \sqrt{b} db S_{nn_0}(b) \left[e^{ikb\theta - i\frac{\pi}{4}} + e^{-ikb\theta + i\frac{\pi}{4}} \right], \quad (51)$$

где $S_{nn_0}(b)$ — матрица перехода, элементы которой для данной парциальной волны определяются асимптотикой радиальных волновых функций $\chi'_{n,l}$ при больших расстояниях:

$$\chi'_{n,l}(R) \sim \frac{1}{\sqrt{k}} [\delta_{nn_0} e^{-ikR} + S_{nn_0} e^{ikR + i\pi l}], \quad (52)$$

При конечных R эти функции удовлетворяют уравнению Шрёдингера

$$\frac{1}{2\mu} \frac{d^2}{dR^2} \chi'_{n,l}(R) + \sum_{m=1,2} \left[\left(E - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu R^2} \right) \delta_{nm} + U_{nm}(R) \right] \chi'_{m,l}(R) = 0. \quad (53)$$

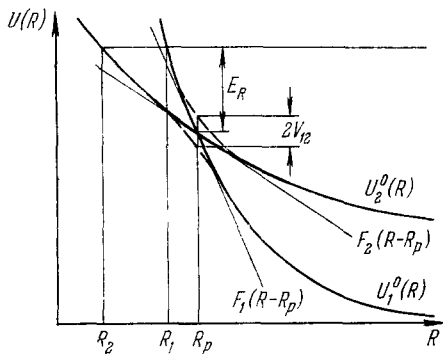
Можно показать (см., например, ⁷¹), что при высоких энергиях и больших значениях l , удовлетворяющих условию

$$E \gg U_{nm}(b), \quad b = \lambda l,$$

амплитуды S_{nn_0} , определенные формулами (52), (53), совпадают с амплитудами A_{nn_0} , найденными из решений высокоэнергетических уравнений (13) первого порядка. Этот предел отвечает рассеянию на малые углы.

Таким образом, в отличие от упругого рассеяния, для нахождения амплитуд переходов требуется решение уравнений (53) или, в частном случае высоких энергий, уравнений (13). Эти решения существенно зависят от природы термов, характеризующих данные два состояния. Во многих случаях неупругие процессы можно с успехом описывать в терминах модели квазипересечения или так называемой модели Ландау — Зинера и ее обобщений.

Рис. 15. Параметры модели Ландау — Зинера.



На рисунке 15 представлена типичная картина термов, иллюстрирующая модель. В окрестности квазипересечения термы системы $U_{11}^0(R)$, $U_{22}^0(R)$, вычисленные в некотором «нулевом» приближении (т. е. в пренебрежении некоторым взаимодействием), пересекаются в точке R_p . Отвечающий им базис нулевого приближения будем считать совпадающим с адиабатическим $\phi'_h(\mathbf{r})$. Учет опущенного в «нулевом» приближении взаимодействия, которое в малой окрестности R_p можно считать постоянным, приводит нас к модельному гамильтониану в адиабатическом базисе

$$U_{nm}^0(R) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu R^2} = U_p + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu R_p^2} + \begin{pmatrix} -F_1(R-R_p) & V_{12} \\ V_{21} & -F_2(R-R_p) \end{pmatrix}, \quad (54)$$

справедливому в малой окрестности квазипересечения. Здесь наклоны термов — F_n включают в себя центробежную силу и $U_p = U_{11}^0(R_p) = U_{22}^0(R_p)$.

Адиабатические потенциалы

$$U_{1,2}(R) = U_p - \frac{F_1 + F_2}{2} (R - R_p) \pm \left[\frac{\Delta F^2}{4} (R - R_p)^2 + V_{12}^2 \right]^{1/2} \quad (55)$$

естественно подчиняются правилу непересечения термов одинаковой симметрии.

Решение системы уравнений (53) или (13) с потенциальной матрицей (54) было получено Ландау⁷², Зинером⁷³ и Штюкельбергом²³ для случая, когда энергия радиального движения E_R в области пересечения существенно больше минимального расщепления термов:

$$E_R = E - U_p - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu R_p^2}, \quad (56)$$

и мало меняется на протяжении всей области перехода $\Delta R \approx \frac{2V_{12}}{\Delta F}$:

$$E_R \gg \Delta R \frac{dU_R^0}{dR}. \quad (57)$$

Эти условия эквивалентны возможности введения в области перехода единой для обоих термов траектории $R(t) = R_p - v_R(t - t_0)$ с постоянной скоростью $v_R = \sqrt{2E_R/\mu}$, что при гамильтониане (54) дает точно решаемую модель. Из исследования этой модели была найдена^{72, 73, 23} вероятность

$$P = e^{-\pi\delta} \quad (58)$$

перехода с одного адиабатического терма на другой при однократном прохождении области неадиабатичности. Параметр

$$\delta = \frac{2V_{12}^2}{\hbar v_R \Delta F} \quad (59)$$

представляет собой параметр Мессии данной модели ($\omega \approx \frac{2V_{12}}{\hbar}$, $\tau \approx \frac{\Delta R}{v_R} = \frac{V_{12}}{\Delta F v_R}$). Из (58) видно, что при малой скорости ($\delta \gg 1$) движение происходит в основном по адиабатическим термам, а при большой скорости ($\delta \ll 1$) — по диабатическим термам.

Полная вероятность перехода (при двукратном прохождении точки R_p) равна

$$\mathcal{P}_{12}(b, E) = 2P(1 - P)(1 - \cos \varphi). \quad (60)$$

Фаза осцилляций φ вероятности равна приближенно разности квазиклассических действий для двух путей перехода при двукратном прохождении области квазипересечения

$$\varphi = 2 \int_{R_1}^{R_p} k_1 dR - 2 \int_{R_2}^{R_p} k_2 dR + \gamma_I - \gamma_{II}, \quad k_i = \frac{\sqrt{2\mu}}{\hbar} \left[E \left(1 - \frac{b^2}{R^2} \right) - U_i^0 \right]^{1/2}. \quad (61)$$

Смысл точек R_i пояснен на рис. 15. Угловые сдвиги γ_I , γ_{II} , представляющие собой добавочные изменения фазы в области перехода, исследованы в работах^{74, 75}, где найдена также полная матрица переходов $A_{nn'}$. Отраженная в (60) возможность независимого рассмотрения переходов при сближении и разлете атомов, требует условия большой величины фазы φ :

$$\varphi \gg 2\pi. \quad (62)$$

При вычислении полного неупругого сечения (50) в выражении (60) для вероятности перехода следует выполнить усреднение по большой

фазе ϕ . В результате зависимость неупругого сечения от энергии атомов обнаруживает характерный максимум при скорости $v \sim 2,34 \cdot 2\pi V_{12}^2 / \Delta F^5$. Такое поведение характерно для многих сечений нерезонансной перезарядки, возбуждения и др.

Однако даже в рамках той же системы пересекающихся термов формула Ландау — Зинера (60) оказывается неприменимой при малых энергиях ($E < U_p$) либо при больших прицельных параметрах ($b \gg R_p$). Действительно, в этом случае точка пересечения оказывается близкой

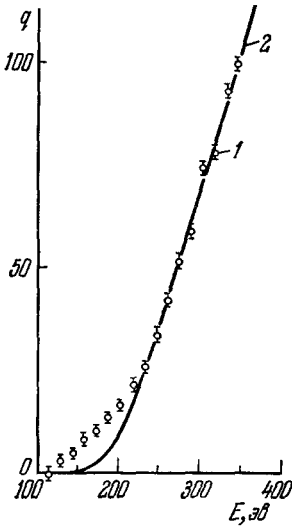


Рис. 16. Пороговое поведение полного сечения возбуждения Cs^+ при столкновениях с He.

Точки — экспериментальные данные ⁸², сплошная линия — расчет по формуле Ландау — Зинера с параметрами, обеспечивающими согласие теории с экспериментом при больших энергиях.

к точкам поворота радиального движения и нарушаются условия (56), (57) равномерности и классичности движения в области перехода и условие (62) независимости переходов при прямом и обратном пролете области перехода. В результате полное неупругое сечение процесса с большим энергетическим порогом, т. е. с большим значением потенциала U_p в точке пересечения, при энергиях E , близких к U_p , начинает отклоняться от предсказываемого теорией Ландау — Зинера. Повидимому, такое отклонение было обнаружено в работе ⁷⁴ для процессов возбуждения в системе $\text{Cs}^+ - \text{He}$ и показано на рис. 16 *). Точно так же теория Ландау — Зинера неприменима и при описании дифференциальных сечений рассеяния при углах, близких к пороговым углам рассеяния.

Все сказанное говорит о необходимости расширения теории на случай малых энергий E_R в области перехода, когда точка пересечения близка к точкам поворота радиального движения и, следовательно, для радиального движения требуется квантовое описание. Изложим коротко результаты такого исследования, выполненного в работах ⁷⁶⁻⁸⁰. В работе ⁷⁸ исследовались квантовые уравнения (55) для функций $\chi_n(R)$ радиального движения в модели (56) линейных термов при произвольной энергии $E_R = E - U_p - [\hbar^2(l + 1/2)^2/R_p^2]$ радиального движения в точке пересечения. Оказывается, что при $F_1 F_2 > 0$ (наклоны термов одного знака) задача о квантовых переходах в системе (56) точно эквивалентна задаче ⁷⁶ о переходах в полуклассической постановке при определенном выборе траектории $R = R(t)$. А именно, вероятности и амплитуды переходов можно рассчитывать для системы уравнений

$$i \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -F_1 [R(t) - R_p] & V_{12} \\ V_{21} & -F_2 [R(t) - R_p] \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}, \quad (63)$$

если траекторию определить как траекторию движения в однородном потенциальном поле с силой $= (F_1 F_2)^{1/2}$, т. е.

$$R(t) = R_p + \frac{F}{2\mu} t^2 + \frac{E_R}{F}. \quad (64)$$

*) В работе ⁷⁵ подчеркивается, что, помимо влияния близости точек поворота и точек пересечения, другой причиной отклонения наблюдаемых зависимостей от предсказываемых по теории Ландау — Зинера может оказаться наличие нескольких (более двух) каналов процесса, если пороги этих процессов близки.

Из (64), (63) легко показать, что вероятность перехода $\mathcal{P}(b)$ является функцией только двух безразмерных параметров

$$\epsilon = \frac{E_R \Delta F}{2V_{12} F}, \quad \eta = \frac{4V_{12}}{\hbar} \left(\frac{\mu V_{12}}{|\Delta F F|} \right)^{1/2} \quad (65)$$

и может быть исследована аналитически в предельных случаях большого ($\eta \gg 1$) и малого ($\eta \ll 1$) расщепления адиабатических термов при любых энергиях E_R (или при любых значениях безразмерного параметра ϵ). В первом случае, когда $\eta \gg 1$, вероятность перехода является экспоненциально малой величиной (см. также ⁷⁹):

$$\mathcal{P} = B(\epsilon) e^{-\eta \Delta(\epsilon)}. \quad (66)$$

Функция $\Delta(\epsilon)$ изображена на рис. 17. Расчет неупругого сечения ¹⁰⁷ с учетом отклонения вероятности (66) от (60) объясняет изображенное

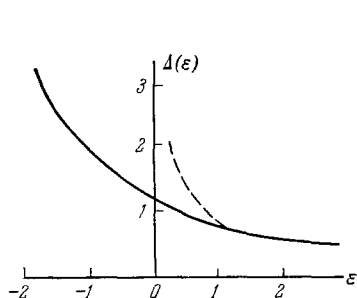


Рис. 17. График функции $\Delta(\epsilon)$, определяющей величину экспоненциального множителя вероятности перехода в адиабатической области ($\eta > 1$) (сплошная кривая).

Штриховая кривая — приближение Ландау — Зинера.

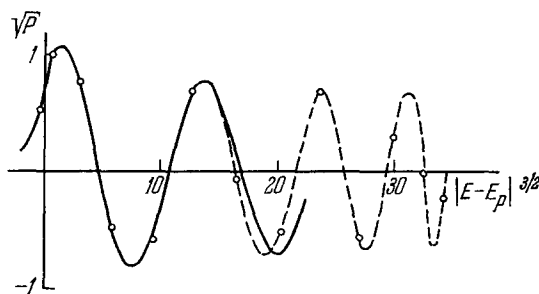


Рис. 18. Квадратный корень из вероятности преддиссоциации молекулы O_2 ⁸⁹.

Кружки — экспериментальные данные для различных колебательных уровней, энергия которых отсчитывается от точки квазипересечения. Сплошная кривая — теоретический расчет.

на рис. 16 отклонение экспериментального сечения от предсказываемого по теории Ландау — Зинера при энергиях, близких к порогу неупругого процесса в системе $Cs^+ - He$.

При произвольных расщеплениях термов (η — любое) такая же форма (66) описывает экспоненциально малую вероятность туннельного перехода, когда $\epsilon < 0$. В этом случае изменяется только вид предэкспоненциального множителя $B(\epsilon)$.

В случае малого расщепления термов ($\eta < 1$) вероятность перехода может быть найдена по теории возмущения по взаимодействию V_{12} между адиабатическими состояниями (см. также ²², стр. 390) и определяется формулой

$$\mathcal{P} = \pi \eta^4 f^3 \Phi^2(-\epsilon \eta^{2/3}), \quad (67)$$

где Φ — функция Эйри. При больших по модулю значениях аргумента формула (67) переходит в формулу (60) Ландау — Зинера при $\epsilon > 0$ и в формулу (66) туннельного перехода при $\epsilon < 0$.

Интересно привести экспериментальное доказательство такой картины переходов, полученное методами молекулярной (не столкновительной) спектроскопии. На рис. 18 из работы ⁸¹ показана зависимость вероятности $\mathcal{P}(E)$ преддиссоциации, т. е. развала молекулы O_2 под влиянием неадиабатического перехода на отталкивательный терм $U_1(R)$, как функция от колебательной энергии E на исходном стабильном терме $U_2(R)$

(точки — из ⁸²). Сплошная кривая — расчет по формуле (67) с подгонкой трех параметров (масштаб по η , масштаб по ε и начало отсчета E). Штриховой кривой показано квазиклассическое продолжение (67) путем сшивки с правильной асимптотикой, учитывающей искривление термов вдали от области квазипересечения. Хорошее согласие теории с экспериментом позволяет восстановить часть нестабильного терма ⁸¹.

До сих пор речь шла о вероятности перехода $\mathcal{P}(b)$. Однако для предсказания формы дифференциальных сечений по формуле (53) необходимо знание амплитуд переходов $A_{nn_0}(b)$ не только по модулю, но и по фазе. В приближении Ландау — Зинера, когда переходы при прямом и обратном пролете R_p независимы, а полная вероятность дается формулой (60), амплитуды переходов $A_{nn_0}(b)$ запишутся в таком виде:

$$A_{12} = \sqrt{P(1-P)} [\exp \{i(2\bar{\delta} + \varphi + \gamma_1)\} + \exp \{i(2\bar{\delta} - \varphi + \gamma_2)\}], \quad (68)$$

$$A_{11} = P \exp \{i(2\delta_1 + \gamma_3)\} + (1-P) \exp \{i(2\delta_1 - 2\varphi + \gamma_4)\};$$

здесь φ определяется формулой (61), $\delta_i(b)$ ($i=1,2$) и $\bar{\delta}(b)$ равны

$$\delta_i(b) = \int_{R_i}^{\infty} k_i dR, \quad k_i = \frac{\sqrt{2\mu}}{\hbar} \left[E \left(1 - \frac{b^2}{R^2} \right) - U_i^0(R) \right]^{1/2},$$

$$\bar{\delta} = \frac{1}{2} (\delta_1 + \delta_2), \quad (69)$$

а малые фазы γ_k — добавочные изменения фазы в области перехода, которые присутствуют в формуле (61) Ландау — Зинера.

Каждый член в (68) соответствует определенному пути перехода. Из (68) следует, что дифференциальные сечения будут представлять собой

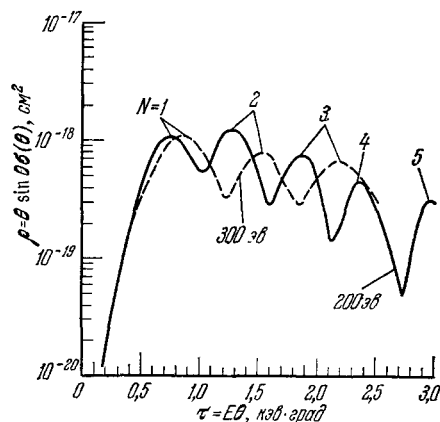


Рис. 19. Сечение неупругого рассеяния He^+ на He с образованием $\text{He}(2^3s)$. Сечение и угол — в приведенных переменных.

результат интерференции вкладов от различных траекторий процесса, отвечающих различным значениям b , но одному углу рассеяния θ ⁸³⁻⁸⁷. При этом фазы этих вкладов определяются классическими действиями по соответствующим траекториям со сменой термов в точке перехода R_p . Таким образом, в определенной области углов сечения неупругих и упругих процессов должны иметь осциллирующий характер, причем свойства этих осцилляций при больших энергиях (зависимость периода от энергии и др.) должны быть подобны свойствам перезарядочных осцилляций (см. гл. 3).

Подобные осцилляции сечений неупругих процессов (называемые часто штюкельберговскими) были действительно обнаружены в эксперименте для многих систем ($\text{He}^+ - \text{He}^{88}$, $\text{He}^+ - \text{Ne}^{36}$, $\text{Li}^+ - \text{Li}^{50}$, $\text{O}^{++} + \text{Ne}^{89}$, $\text{He}^+ + \text{Ar}^{90}$, $\text{Na}^+ + \text{Ne}$, $\text{K}^+ + \text{Ne}^{91}$). Еще раньше указание на наличие в рассеянии неупругого процесса было получено из аномалий, наблюдаемых в упругом рассеянии $\text{He}^+ - \text{He}^{92}$ или $\text{He}^+ - \text{Ne}$, Ar^{35} . На рис. 19 и 20 показаны типичные структуры дифференциальных сечений неупругих процессов в случае псевдопересечения термов. Наиболее полно

изученный ³⁶ процесс неупругого рассеяния He^+ на Ne будет подробно обсуждаться ниже.

Важной особенностью сечений подобных процессов является их пороговый характер. А именно, сечение, осциллирующее при значениях $\tau > \tau_{\text{п}}$, бóльших некоторого порогового $\tau_{\text{п}}$, довольно резко обрывается при углах $\tau < \tau_{\text{п}}$, причем измерения сечения при различных энергиях дают постоянное значение $\tau_{\text{п}} = E\theta$ приведенного порогового угла рассеяния. Точно также осцилляции упругого рассеяния, например, He^+

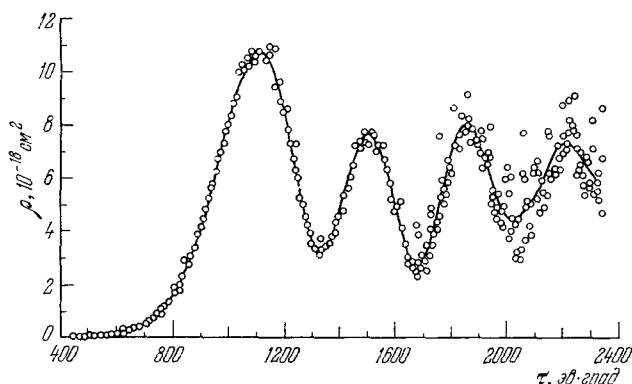


Рис. 20. Сечения неупругого рассеяния He^+ на Ne при энергии 71 эв с возбуждением Ne в состояние $2p^53s$.

Сечение и угол — в приведенных переменных.

на Ne , вызванные неупругим процессом, начинаются независимо от энергии при определенном значении $\tau = \tau_{\text{п}}^{\text{упр}}$ (значения $\tau_{\text{п}}$ и $\tau_{\text{п}}^{\text{упр}}$ не совпадают, поскольку, грубо говоря, отвечают рассеянию в разных потенциалах $U_1(R)$ и $|U_1(R) + U_2(R)|/2$).

Таким образом, при больших энергиях началу неупругого процесса отвечают вполне определенные значения ($\tau_{\text{п}}$ или $\tau_{\text{п}}^{\text{упр}}$) приведенного угла или, в силу принципа соответствия, вполне определенные значения прицельного параметра b . Так, по функции рассеяния $b_1^0(\tau)$ на первом терме, известной из данных об упругом рассеянии, можно найти значение $b_c = b_1^0|_{\tau = \tau_0^{\text{упр}}}$. При этом для отталкивательного потенциала U_1 функция $b_1^0(\tau)$ монотонна, так что бóльшим b соответствуют меньшие углы. На основании этого считалось ^{35, 36}, что угол $\tau_{\text{п}}^{\text{упр}}$, характеризующий начало (со стороны малых τ) осцилляций в упругом канале, отвечает на кривой $b_1^0(\tau)$ максимальному прицельному параметру, для которого траектория затрагивает область пересечения и который, следовательно, совпадает с радиусом R_p пересечения термов. Ниже показано, однако, что это не так, поскольку функции рассеяния под влиянием комбинации двух потенциалов не обладают такой монотонностью, как $b_1^0(\tau)$. Поэтому значение $b_c = b_1^0(\tau_{\text{п}}^{\text{упр}})$ не совпадает с R_p , хотя и тесно с ним связано.

В таблице, взятой из работы ¹⁰, приведены найденные указанным образом значения b_c и теоретически предсказанные расстояния пересечения R_p , а также предполагаемая симметрия пересекающихся термов для различных систем.

Следуя работам ⁹³⁻⁹⁵, рассмотрим подробнее дифференциальные сечения рассеяния при наличии неупругого процесса. Для простоты ограничимся высокоэнергетическим приближением, когда описание удобно вести в терминах приведенных углов τ и сечений $\rho_{ij}(\tau, E)$.

Система	$\tau_{\text{п}}^{\text{упр.}}, \text{ эв. град}$	$b_c, \text{ ат. ед.}$	Признаки обнаружения	Вероятная симметрия	$R_p, \text{ ат. ед.}$
He ⁺ — He	1600	1,7	Осцилляции	$2\Sigma_g^+ - 2\Sigma_g^+$	1,5
He ⁺ — Ne {	1950 2500—9500	1,9 1,4÷1,1	Потери в упругом канале	$2\Sigma^+ - 2\Sigma^+ *$ $2\Sigma - 2\Sigma$ и др.	1,75
He ⁺ — Ar {	870 1000—3000	2,9 2,4—1,9	Осцилляции Потери в упругом канале	$2\Sigma - 2\Sigma^+ *$ $2\Sigma - 2\Sigma$ и др.	

*) По выводам новой работы 36.

Амплитуды рассеяния на угол τ выражаются через амплитуды переходов $A_{nn_0}(b)$ с помощью (51). Каждому члену в выражениях (68) для A_{nn_0} отвечают определенные радиальные действия $\Delta_v(b)$: $\Delta^\pm = 2\delta \pm \varphi$ — для неупругого и $2\delta_1$, $2\delta_1 - 2\varphi$ — для упругого рассеяния. Следовательно, в амплитуды рассеяния на данный угол τ внесут вклад те прицельные параметры $b_v(\tau)$, для которых полные действия $S_v(b) = \Delta_v + 2b\tau/v$ *) стационарны по переменной b . В результате функции отклонения $b_v(\tau)$ или $\tau_v(b)$, вносящие вклад в процесс, равны

$$\tau^\pm(b) = \bar{\tau}(b) \pm t(b), \quad (70)$$

$$\tau_1^0(b), \tau_2^0(b) = \tau_1^0(b) - 2t(b) \quad (71)$$

для неупругого и упругого рассеяния соответственно. Здесь $\tau_1^0(b)$, $\bar{\tau}(b)$ — функции отклонения в потенциалах $U_1^0(R)$ и $\bar{U}(R) = (U_1^0 + U_2^0)/2$, а функция $t(b)$ в высокоэнергетическом приближении определяется выражением

$$t(b) = b \int_0^{\sqrt{R_0^2 - b^2}} \frac{1}{R} \frac{d\Delta U^0}{dR} dz, \\ \Delta U^0 = U_1^0 - U_2^0.$$

С учетом корневого поведения $t(b)$ вблизи R_p :

$$t(b) = \Delta F \sqrt{2R_p(R_p - b)}, \quad b \rightarrow R_p,$$

можно изобразить вид функций отклонения, вносящих вклад в упругий и неупругий процессы, по отношению к функциям $\tau_1^0(b)$, $\tau_2^0(b)$ и $\bar{\tau}(b)$ отклонения в потенциалах U_1^0 , U_2^0 и $\bar{U}$ (рис. 21). Из рисунка 21 видно, что при углах τ , больших неко-

Рис. 21. Рассеяние в системе двух пересекающихся термов.

а) Вид функций отклонения $\tau^\pm(b)$ (жирные линии), вносящих вклад в неупругий процесс при углах, больших порогового значения $\tau_{\text{п}}$. Функции $\tau_1^0(b)$, $\tau_2^0(b)$ и $\bar{\tau}(b)$ отвечают рассеянию в потенциалах U_1 , U_2 и $\frac{1}{2}(U_1 + U_2)$; б) вид функций отклонения $\tau^y(b)$ и $\tau_1^0(b)$, вносящих вклад в упругое рассеяние. Выделенные на оси участки указывают области нарушения квазиклассического описания.

торого порогового значения $\tau_{\text{п}}$, при котором функция $\tau(b)$ проходит через минимум, в сечении ρ_{12} интерферируют вклады от двух прицельных парамет-

*) Знак второго члена отвечает отталкиванию.

ров. Аналогичным образом, в упругом рассеянии в интерференцию в сечении дают вклады либо два прицельных параметра при $\tau > \tau_p = \tau_1^0(R_p)$, либо три прицельных параметра при $\tau_p < \tau < \tau_{\pi}^{\text{упр}}$. Здесь $\tau_{\pi}^{\text{упр}}$ порог аномалий в упругом сечении, отличный от порога τ_{π} неупругого рассеяния, определяется минимумом на кривой $\tau^{\text{упр}}(b)$. При $\tau < \tau_{\pi}^{\text{упр}}$ имеем невозможное рассеяние на первом терме.

Таким образом, функции отклонения при наличии неупругого процесса носят немонотонный характер. Такая же немонотонность, как было показано ранее в работе ⁹⁶, имеет место при любом изломе потенциала и при отсутствии реального неупругого процесса (например, в случае сглаженного излома адиабатических термов). Но при немонотонной функции отклонения должны проявляться интерференционные эффекты типа радужного рассеяния ²⁷, которые приведут к особенностям дифференциальных сечений. Связь наблюдаемых сечений с радужным рассеянием была отмечена уже в работе ⁹⁷ и подтверждена подробным анализом в работе ⁹³. Там показано, что аномалии (пики) будут характерны и для суммарного (упругого и неупругого) дифференциальных сечений.

Наиболее простые выражения для сечений удастся получить при больших энергиях, когда вероятность неупругого перехода мала. А именно, если энергия превышает значение $E_{\text{мах}}$, при котором неупругое сечение имеет максимальную амплитуду, то движение системы происходит в основном по адиабатическим термам. Поэтому сечение можно рассчитывать в низшем порядке теории возмущения по взаимодействию. Такое вычисление дает для неупругого сечения при $\tau > \tau_{\pi}$ следующее квазиклассическое выражение:

$$\rho_{12} = \left| \sqrt{\rho_1(1-P(b_1))} e^{iS_1} + \sqrt{\rho_2(1-P(b_2))} e^{iS_2 - i\pi/2} \right|^2, \quad (72)$$

где приведенные сечения

$$\rho_h(\tau) = \frac{1}{2} \frac{db_h^2}{d \ln \tau}$$

отвечают ветвям $b_1(\tau)$ и $b_2(\tau)$ ($\tau > \tau_{\pi}$), являющимися обратными функциями $\tau^{\pm}(b)$; $P(b)$ — обычная вероятность (58) перехода при малых V_{12} ;

$$1 - P(b) = \frac{2\pi V_{12}^2}{\hbar \Delta F v_R}, \quad v_R = v \sqrt{1 - \frac{b^2}{R^2}}.$$

Разность фаз двух членов (72), определяющая экспериментальную фазу $2\pi N(\tau, E)$ осцилляций сечения ρ_{12} , равна

$$2\pi N(\tau, E) = S_2 - S_1 - \frac{\pi}{2} = \frac{2}{v} \int_{\tau_{\pi}}^{\tau} \Delta b(\tau) d\tau, \quad \Delta b = b_1 - b_2, \quad (73)$$

т. е. определяется площадью заштрихованного на рисунке участка. При углах, близких к пороговому, квазиклассическое выражение (72) неприменимо и его следует заменить квантовым. В полной аналогии с явлением радуги (см. ³⁹) сечение ρ_{12} в окрестности τ_{π} следующим образом выражается через функцию Эйри ^{93, 94, 98}:

$$\rho(\tau, E) = \frac{8\pi V_{12}^2 \tau b_{\pi} R_p}{\Delta F \sqrt{R_p^2 - b_{\pi}^2}} v^{-4/3} \chi^{-2} \Phi^2(-2\Delta \tau v^{-2/3} \chi), \quad (74)$$

$$\Delta \tau = \tau - \tau_{\pi}, \quad \chi = \left(\frac{d^2 \tau}{db^2} \Big|_{b_{\pi}} \right)^{-1/3}.$$

Для упругого рассеяния квазиклассические выражения сечения, отвечающие ветвям τ_1^0 , τ^y рис. 21, приведены в работах ^{93, 94}.

В окрестностях углов τ_n^y и τ_p (см. рис. 21), где происходит слияние различных ветвей функции рассеяния, квазиклассическое описание неприменимо. В этих областях вычисление приводит к квантовым формулам для сечения (они выражают ρ_{11} через функцию Эйри при $\tau \sim \tau_n^y$ и через функцию параболического цилиндра при $\tau \sim \tau_p$), правильно сливающимися с квазиклассическими выражениями вне этих областей.

Отметим одно важное обстоятельство. Со стороны малых углов начало аномалий в упругом канале, обусловленных неупругим процессом, имеет место при $\tau \sim \tau_n^y$ (см. рис. 21, б). При этом соответствующее этому τ значение $b_c = b_1^0(\tau_n^y)$, которое в грубом приближении^{35, 36} отождествляют с радиусом пересечения R_p , в действительности не совпадает с ним: $b_c > R_p$. Возможно, это объясняет причину того, что экспериментальные значения b_c , найденные по началу аномалий в упругом канале, завышены по сравнению с теоретическими значениями R_p (см. таблицу на стр. 406).

Таким образом, из осцилляций неупругого и упругого сечений можно извлечь сведения о соответствующих функциях рассеяния $\tau^\pm(b)$ и $\tau^y(b)$, определяемых уравнениями (70), (71), и далее найти параметры основного $U_1^0(R)$ и возбужденного $U_2^0(R)$ термов системы.

Остановимся теперь на анализе неупругого рассеяния в системе $\text{He}^+ - \text{Ne}$, наиболее полно изученного экспериментально. Неупругое сечение возбуждения $2p^53s$ конфигурации атома Ne при столкновениях с ионами He^+ , измеренное в работе³⁶, приведено на рис. 20. Помимо быстрых штюкельберговских осцилляций, видных на рис. 20, сечение $\rho_{12}(\tau, E)$ (как в амплитуде первого пика, так и в других характеристиках) обнаруживает медленную модуляцию. Авторы работы³⁶ приписывают ее наличию второго канала диссоциации ($\text{Ne}^+ - \text{Ne}(1s2s)$) возбужденного состояния, возникающего в области квазипересечения. Однако мы ограничимся здесь обсуждением только свойств быстрых (штюкельберговских) осцилляций и, в частности, квантовых эффектов в неупругом рассеянии.

Начиная примерно со второго периода осцилляций и дальше, в согласии с квазиклассическими формулами (72), (73), экспериментальная фаза осцилляций $2\pi N(\tau, E)$ ($N = 1, 2 \dots$ в пиках и $N = 3/2, 5/2 \dots$ в минимумах $\rho_{12}(\tau)$) оказывается пропорциональной $E^{-1/2}$, так что величина

$$\Delta b = \pi v \frac{\partial N(\tau, E)}{\partial \tau} \approx E^{1/2} \frac{\partial N}{\partial \tau} = \text{const} \quad (75)$$

не зависит от E и равна примерно 0,36 ат. ед. Однако при $\tau \rightarrow \tau_n$ величина

$$E^{1/2} \frac{\partial N}{\partial \tau} \Big|_{\tau=\tau_N} \approx \frac{E^{1/2}}{\tau_2 - \tau_1} \approx E^{1/6} \quad (76)$$

(τ_N — положение N -го пика) зависит от энергии. Действительно, если при больших τ ($N \geq 2$) период осцилляций по τ , равный $(dN/d\tau)_{\tau_N}^{-1}$, пропорционален $E^{1/2}$, то период ($\tau_2 - \tau_1$) и полупериод ($\tau_{3/2} - \tau_1$), первый от порога осцилляции сечения, должны согласно (74) быть линейными функциями $E^{1/3}$ с отношением наклонов, равным 1,69, что и наблюдается экспериментально (рис. 22). Аналогичным образом величина (76), как функция энергии, должна быть пропорциональна $E^{1/6}$, в то время как квазиклассическая теория дает независимость этой величины от энергии. Согласно теоретической зависимости с экспериментом подтверждает необходимость квантового, в отличие от квазиклассического, анализа рассеяния вблизи порога неупругого процесса.

Аналогичное применение аналитических выражений⁹⁴ для обработки экспериментальных данных по упругому рассеянию He^+ на Ne вблизи

порога аномалий затрудняется тем, что для этой системы области $\tau_p \sim \tau_n^y$ и $\tau \sim \tau_n^y$, где необходимо квантовое описание, оказываются очень близкими. В таком случае необходимо численное нахождение сечений. На рис. 23 приведен результат такого расчета ⁹⁵ упругого сечения для системы $\text{He}^+ + \text{Ne}$. Теоретические и экспериментальные кривые находятся в прекрасном согласии.

До сих пор речь шла о неупругих процессах, обязанных квазипересечению термов. Однако существует большое количество неупругих процессов, не описываемых моделью квазипересечения. Сюда относятся, например, неупругие переходы с малым дефектом резонанса. Мы не имеем

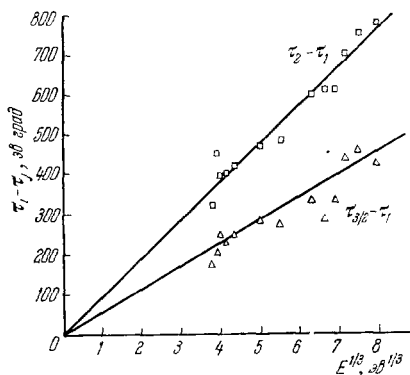


Рис. 22. Зависимость величины первого периода $\tau_2 - \tau_1$ и полупериода $\tau_{3/2} - \tau_1$ в осцилляциях неупругого сечения рассеяния He^+ на Ne от энергии в степени $1/3$.

Отношение наклонов 1,69 прямых, аппроксимирующих экспериментальные точки, отвечает теоретической величине.

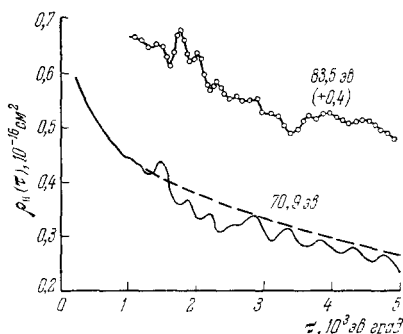


Рис. 23. Теоретическое и экспериментальное упругое сечение рассеяния He^+ на Ne ⁹⁵.

возможности подробно остановиться на других типах неадиабатических переходов и моделях их описания ^{14, 15}, а также на многочисленных экспериментах, касающихся этих процессов.

Аналогичным образом мы не можем осветить целую область явлений, связанных с высоковозбужденными атомными состояниями. Дело в том, что до сих пор в обсуждении мы ограничивались примерами неупругих процессов со сравнительно низким уровнем возбуждения, охватывающего только внешнюю оболочку атомов. Однако громадный интерес представляют также высокие возбуждения атомов, затрагивающие и внутренние оболочки. Такие процессы широко изучаются главным образом в работах Афросимова, Федоренко и др. ^{99, 97} и Эверхарта с сотрудниками ¹⁰⁰, где, с применением техники совпадений измеряются как энергетические потери, так и зарядовые состояния частиц, претерпевших близкие соударения. При этом как потери энергии, так и число испущенных электронов резко возрастают при вполне определенных критических расстояниях ($R \approx 0,5, 0,2$ ат. ед.), отвечающих перекрыванию внутренних оболочек атомов. Оказывается, что эти результаты можно понять ^{101, 20} с помощью тех же методов, что и процессы возбуждения внешних оболочек, — в терминах квазипересечений молекулярных уровней внутренних электронов. Такая возможность осуществляется благодаря тому, что размер областей переходов ΔR остается по-прежнему меньше характерных размеров R_1 данной атомной оболочки, несмотря на возрастание как взаимодействий, так и характерных энергетических интервалов. Наблюдаемые при этом

явления сопровождаются испусканием внутреннего электрона и последующим оже-переходом с испусканием нескольких электронов внешней оболочки. Подробное обсуждение данной области явлений, несомненно, заслуживает самостоятельного обзора.

В заключение остановимся еще на одном эффекте фазовой интерференции, проявляющемся в том, что полные (а не только дифференциальные) сечения возбуждения и перезарядки обнаруживают сложную осцилляторную структуру для многих систем $\text{He}^+ - \text{He}^{102}$, $\text{Na}^+ - \text{Ne}^{103}$, $\text{Zn}^+ - \text{Cd}^{104}$. Одна из возможных моделей $^{105, 106}$ такого эффекта предполагает, что возбужденный терм расщеплен (например, по спиновым состояниям). Тогда, помимо области (R_p) перехода с основного терма на возбужденный мультиплет, существует область (R_1), в которой происходят переходы внутри группы близких возбужденных уровней. При этом полное сечение возбуждения каждой отдельной линии мультиплета будет осциллировать с фазой, зависящей от расщепления термов и положения областей R_p и R_1 . Детальная интерпретация наблюдаемых осцилляций сечений позволит в будущем выяснить структуру термов ион-атомных систем и понять механизмы различных процессов возбуждения.

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. В. Альфаро, Т. Редже, Потенциальное рассеяние, М., «Мир», 1966.
2. А. И. Базь, Я. Б. Зельдович, А. М. Переломов, Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике, М., «Наука», 1966.
3. М. Гольдбергер, К. Ватсон, Теория столкновений, М., «Мир», 1967.
4. Т. Ю. Ву, Т. Омура, Квантовая теория рассеяния, М., «Наука», 1969.
5. Б. М. Смирнов, Атомные столкновения и элементарные процессы в плазме, М., Атомиздат, 1968.
6. Р. Ньютон, Теория рассеяния волн и частиц, М., «Мир», 1969.
7. H. Pauly, J. P. Toennies, Adv. Mol. Phys. **1**, 195 (1965).
8. D. Allab, M. Barat, I. Boudon, J. de Phys. **29**, 111 (1968).
9. В. Б. Леонас, УФН **82**, 287 (1964).
10. F. T. Smith, Proceedings of the International Conference on Atomic Physics, New York, 1968.
11. F. T. Smith, Proceedings of the International Symposium on Physics of one- and two-electron Atoms, North-Holland, 1969.
12. Ю. Н. Демков, Сборник лекций 1-й Всесоюзной школы по электронным и атомным столкновениям, Харьков, 1969.
13. Н. Мотт, Г. Месси, Теория атомных столкновений, М., «Мир», 1969.
14. Е. Е. Nikitin, Adv. Quant. Chem. **5**, 321 (1970).
15. Е. Е. Nikitin, Chemische Elementarprozesse, Springer-Verlag, 1968.
16. W. Lichten, Phys. Rev. **131**, 229 (1963).
17. F. T. Smith, Phys. Rev. **179**, 111 (1969).
18. D. R. Bates, R. McCarroll, Proc. Roy. Soc. **A245**, 175 (1958).
19. D. R. Bates, Proc. Roy. Soc. **A245**, 299 (1958).
20. W. Lichten, Phys. Rev. **164**, 131 (1967).
21. D. R. Bates, Atomic and Molecular Processes, Academic Press, 1962 (см. перевод: Атомные и молекулярные процессы, М., «Мир», 1964).
22. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, Квантовая механика, М., Физматгиз, 1963.
23. E. C. G. Stueckelberg, Helv. Phys. Acta **5**, 369 (1932).
24. D. R. Bates, A. R. Holt, Proc. Roy. Soc. **A292**, 168 (1966).
25. L. Wilets, S. J. Wallace, Phys. Rev. **169**, 84 (1968).
26. J. C. Y. Chen, K. M. Watson, Phys. Rev. **174**, 152 (1968).
27. K. W. Ford, I. A. Wheeler, Ann. Phys. **7**, 259 (1959).
28. R. B. Bernstein, Atomic Collision Processes, North — Holland, 1964, p. 895.
29. Р. Б. Бернштейн, Исследования с молекулярными пучками, М., «Мир», 1969, стр. 88.
30. W. Neumann, H. Pauly, J. Chem. Phys. **52**, 2548 (1970).
31. F. C. Hoyt, Phys. Rev. **55**, 664 (1939).
32. О. Б. Фирсов, ЖЭТФ **24**, 279 (1953).
33. C. Lehmann, G. Leibfried, Zs. Phys. **172**, 465 (1962).
34. F. T. Smith, R. P. Marchi, K. G. Dedrick, Phys. Rev. **150**, 79 (1966).

35. F. T. Smith, R. P. Marchi, D. C. Lorents, W. Aberth, O. Heinz, *Phys. Rev.* **161**, 31 (1967).
36. D. Coffey, D. C. Lorents, F. T. Smith, *Phys. Rev.* **187**, 201 (1969).
37. F. I. Zehr, H. W. Berry, *Phys. Rev.* **159**, 13 (1967).
38. R. E. Olson, F. T. Smith, C. R. Muller, *Phys. Rev.* **A1**, 27 (1970).
39. H. W. Berry, *Proc. Phys. Soc.* **89**, 479 (1966).
40. R. B. Bernstein, *J. Chem. Phys.* **38**, 2599 (1963).
41. U. Buck, H. Pauly, *Zs. Naturforsch* **23A**, 475 (1968).
42. F. M. Mott, *Proc. Roy. Soc.* **A126**, 259 (1930).
43. P. E. Siska, J. M. Parson, T. P. Schafer, F. P. Tully, Y. C. Wong, Y. T. Lee, *Phys. Rev. Lett* **25**, 271 (1970).
44. G. I. Lockwood, E. Everhart, *Phys. Rev.* **125**, 567 (1962).
45. H. F. Hellig, E. Everhart, *Phys. Rev.* **140**, 715 (1965).
46. F. P. Ziemba, E. Everhart, *Phys. Rev. Lett* **2**, 229 (1959).
47. G. I. Lockwood, H. Hellig, E. Everhart, *Phys. Rev.* **132**, 2078 (1963).
48. E. Everhart, *Phys. Rev.* **132**, 2083 (1963).
49. D. C. Lorents, W. Aberth, *Phys. Rev.* **139A**, 715 (1965).
50. W. Aberth, O. Bernardini, D. Coffey, D. C. Lorents, R. Olson, *Phys. Rev. Lett.* **24**, 345 (1970).
51. R. P. Jones, T. L. Batra, H. A. Ranga, *Phys. Rev. Lett.* **17**, 281 (1966).
52. F. T. Smith, *Phys. Lett.* **20**, 271 (1966).
53. J. Peek, T. A. Green, J. Perel, H. H. Michels, *Phys. Rev. Lett.* **20**, 1419 (1968).
54. Б. М. Смирнов, *ЖЭТФ* **47**, 518 (1964).
55. J. Perel, R. H. Vernon, H. L. Daley, *Phys. Rev.* **138A**, 937 (1965).
56. R. E. Olson, *Phys. Rev.* **187**, 153 (1969).
57. D. R. Bates, K. Ledsham, A. L. Stewart, *Phil. Trans, Roy. Soc.* **A246**, 215 (1953).
58. F. J. Smith, *Proc. Roy. Soc.* **84**, 889 (1964); *Phys. Lett* **10**, 290 (1964).
59. F. T. Smith, *Bull. Amer. Chem. Soc.* **9**, 411 (1963).
60. H. S. W. Massey, R. A. Smith, *Proc. Roy. Soc.* **A142**, 142 (1933).
61. R. P. Marchi, F. T. Smith, *Phys. Rev.* **139A**, 1025 (1965).
62. Ю. Н. Демков, Ю. Е. Мурахвер, *ЖЭТФ* **49**, 635 (1965).
63. W. Aberth, D. C. Lorents, R. P. Marchi, F. T. Smith, *Phys. Rev. Lett* **14**, 776 (1965).
64. D. R. Bates, D. A. Williams, *Proc. Phys. Soc.* **83**, 425 (1964).
65. Б. М. Смирнов, *Оптика и спектроскопия* **17**, 504 (1964).
66. Ю. Н. Демков, Г. В. Дубровский, А. М. Ермолаев, *Abstracts of Papers to 5th International Conference on the Physics of Electronic and Atomic Collisions, Leningrad, 1967*, стр. 186.
67. L. Wilets, D. F. Gallaher, *Phys. Rev.* **147**, 13 (1966).
68. D. F. Gallaher, L. Wilets, *Phys. Rev.* **169**, 139 (1968).
69. J. F. Bayfield, *Phys. Rev. Lett.* **25**, 1 (1970).
70. R. N. Varney, *Phys. Rev.* **47**, 483 (1935).
71. D. R. Bates, D. F. Grothers, *Proc. Roy. Soc.* **A315**, 465 (1970).
72. L. Landau, *Phys. Zs. Sowjetunion* **1**, 88 (1932); **2**, 46 (1932).
73. C. Zener, *Proc. Roy. Soc.* **A137**, 696 (1932).
74. С. В. Бобашев, В. Б. Матвеев, В. А. Анкудинов, *Письма ЖЭТФ* **9**, 344 (1969).
75. В. Б. Матвеев, *Кандидатская диссертация (ФТИ, Ленинград, 1970)*.
76. Е. Е. Никитин, *Оптика и спектроскопия* **11**, 452 (1961).
77. М. Я. Овчинникова, *Оптика и спектроскопия* **17**, 922, 447 (1964).
78. В. К. Быховский, Е. Е. Никитин, М. Я. Овчинникова, *ЖЭТФ* **47**, 750 (1964).
79. Ю. С. Саясов, *ЖЭТФ* **47**, 750 (1964).
80. Г. В. Дубровский, *ЖЭТФ* **46**, 863 (1964).
81. M. S. Child, *J. Mol. Spectr.* **33**, 487 (1964).
82. I. N. Murrel, I. M. Taylor, *Mol. Phys.* **16**, 609 (1969).
83. Л. П. Котова, *ЖЭТФ* **55**, 1375 (1968).
84. T. A. Green, R. Johnson, *Phys. Rev.* **152**, 9 (1966).
85. T. A. Green, *Phys. Rev.* **152**, 18 (1966).
86. M. Matsusawa, *J. Phys. Soc. Japan* **25**, 1153 (1968).
87. F. T. Smith, in *Atomic Collision Processes, Lectures in Theoretical Physics, Vol. XI — C* (Ed. by S. Geltman), NY., 1969.
88. D. C. Lorents, W. Aberth, V. W. Hesterman, *Phys. Rev. Lett.* **17**, 849 (1966).
89. G. D. Alaim, D. K. Bohme, J. B. Haster, P. P. Ong, in *V International Conference of the Physics of Electronic and Atomic Collisions (Abstract of Papers), Leningrad, 1967*.

90. F. T. Smith, H. H. Fleischmann, R. A. Young, Phys. Rev. **2A**, 379 (1970).
 91. В. В. Афросимов, Ю. С. Гордеев, В. М. Лавров, В. К. Никулин, Abstract of Paper VII ICPEAC.
 92. F. T. Smith, D. C. Lorents, W. Aberth, R. P. Marchi, Phys. Rev. Lett. **15**, 742 (1965).
 93. В. В. Афросимов, Ю. С. Гордеев, В. К. Никулин, А. М. Полянский, А. П. Щергин, Abstract of Paper VII ICPEAC.
 94. Л. П. Котова, М. Я. Овчинникова, ЖЭТФ **60**, 2026 (1971).
 95. R. E. Olson, F. T. Smith, Phys. Rev. (1971).
 96. R. P. Marchi, Phys. Rev. **183**, 185 (1969).
 97. V. V. Afrosimov, in A Survey of Phenomena in Ionized Gases, Vienna, 1961, стр. 91.
 98. М. Я. Овчинникова, ЖЭТФ **59**, 1796 (1970).
 99. В. В. Афросимов, Ю. С. Гордеев, М. Н. Панов, Н. В. Федоренко, ЖТФ **34**, 1613, 1637 (1964).
 100. Q. C. Kessel, E. Everhart, Phys. Rev. **146**, 16 (1966).
 101. U. Fano, W. Lichten, Phys. Rev. Lett **14**, 627 (1965).
 102. S. Dworetzky, R. Novick, Phys. Rev. Lett. **23**, 1484 (1969).
 103. С. В. Бобашев, Письма ЖЭТФ **11**, 389 (1970).
 104. О. Б. Шпенник, И. П. Запесочный, А. Н. Завилопуло, ЖЭТФ **60**, 513 (1970).
 105. H. Rosental, H. Folley, Phys. Rev. Lett. **23**, 1480 (1969).
 106. В. А. Анкудинов, С. В. Бобашев, В. И. Перель, ЖЭТФ **60**, 907 (1971).
 107. А. З. Девдариани, С. В. Бобашев, ЖЭТФ, **60**, 485 (1971).
 108. J. M. Parson, T. P. Schafer, F. P. Tully, P. E. Siska, Y. C. Wong, Y. T. Lee, J. Chem. Phys. **53**, 2123 (1970).
-